

Projekt 4.2. Symulacje komputerowe białek częściowo nieustrukturyzowanych (teoretyczne)

Promotor: dr hab. Bartosz Różycki

Instytut: IFPAN

Jednostka organizacyjna: ON5

WWW: <https://sites.google.com/view/bartosz-rozycki-biomembranes>

Opis:

Jednym z obecnych wyzwań stojących przed biofizyką molekularną jest badanie konformacji i mechanizmów działania białek częściowo nieustrukturyzowanych (PDP od ang. *partially disordered proteins*), tj. takich makrocząsteczek, które zawierają zarówno dobrze określone domeny białkowe jak i inherentnie nieustrukturyzowane segmenty łańcucha polipeptydowego. Wyznaczenie konformacji białek typu PDP wymaga zwykle połączenia danych z kilku uzupełniających się eksperymentów. Ważnym przykładem białka częściowo nieustrukturyzowanego jest białko ORP8 (od ang. *oxysterol-binding protein (OSBP)-related protein 8*). Funkcją biologiczną białka ORP8 jest transport lipidów z miejsca ich syntezy (tj. z retikulum endoplazmatycznego) do błony komórkowej, co przyczynia się do utrzymania prawidłowego składu lipidowego błony komórkowej. Natomiast mechanizmy molekularne, które pozwalają białku ORP8 pełnić jego funkcje biologiczne, pozostają niewyjaśnione.

Cel projektu:

Doktorant/ka będzie używać metod numerycznych do badania konformacji białek częściowo nieustrukturyzowanych – zarówno w roztworach wodnych jak i w otoczeniu błon lipidowych. Zastosuje w szczególności symulacje Monte Carlo oraz metody udoskonalania zespołu konformacyjnego do integracji danych doświadczalnych otrzymanych metodami rentgenografii strukturalnej, rozpraszania promieni rentgenowskich pod małymi kątami (SAXS) i przeniesienia energii w wyniku rezonansu Förstera (FRET) w celu określenia konformacji białka ORP8. Zasadniczym celem projektu jest wyjaśnienie molekularnych mechanizmów transportu lipidów pomiędzy błonami przez białko ORP8. Projekt będzie realizowany w ścisłej współpracy z Instytutem Chemii Organicznej i Biochemii Czeskiej Akademii Nauk w Pradze.

Wymagania:

- Tytuł zawodowy magistra fizyki lub chemii lub pokrewnej dyscypliny nauk ścisłych, lub równoważny tytuł/stopień pozwalający na rozpoczęcie studiów doktoranckich w zakresie fizyki w kraju wydania,
- Dobra znajomość mechaniki statystycznej i metod numerycznych w fizyce lub chemii,
- Zainteresowanie biofizyką molekularną,
- Komunikatywność i dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie,
- Staranność w pracy i konsekwencja w dążeniu do osiągnięcia wyników,
- Dodatkowo jako mocne strony kandydata uznane będą umiejętność programowania w środowisku Linux (w tym znajomość języków skryptowych) oraz doświadczenie w zastosowaniu metod numerycznych (np. symulacji dynamiki molekularnej) w fizyce lub chemii.

Finansowanie:

Stypendium 5000 PLN miesięcznie, przed odjęciem obowiązkowych składek ZUS (~15%), przez pierwsze 30 miesięcy (fundusze z projektu). Następnie (w miesiącach 31-48) ustawowe stypendium doktoranckie (obecnie około 3240 PLN miesięcznie).

Kontakt: rozycki@ifpan.edu.pl