



CeNT-9-2022

Director of Centre of New Technologies of the University of Warsaw, with the approval from the Rector of the University of Warsaw, announces opening of the position of Postdoc (Senior Assistant) in the group of researchers in Biomolecular Modelling Laboratory– Centre of New Technologies of the University of Warsaw.

JOB OFFER

Position in the project:	Postdoc (Senior Assistant)
Laboratory:	Biomolecular Modelling Laboratory
Scientific discipline:	Physical sciences/ chemical sciences/ biological sciences
Keywords:	hydration effects, molecular docking, protein-protein interactions, machine learning
Job type:	Employment contract
Part-time/full-time:	full-time
Number of job offers:	1
Remuneration amount/month	~ 7500 PLN gross per month + 13 th salary annual bonus
Position starts on:	01.06.2022 or later
Maximum period of contract/stipend agreement:	initially 6 months, with possible extension up to total 48 months
Institution:	Centre of New Technologies, University of Warsaw
Project leader:	Dr. Piotr Setny
Project title:	<i>The influence of environment on biomolecular function, structure and interactions</i>
Competition type;	Sonata Bis 10
Financing institution:	National Science Centre
Project description:	Biological molecules function in a dense aqueous environment, whose presence contributes to a number of diverse physical effects. The ability to describe them on theoretical ground is essential for the development of computational approaches that would be practically applicable to structural biology problems or drug design efforts. In this project, benefitting from recently introduced semi explicit solvent model allowing for fast characterisation of biomolecular hydration shells [1, 2], we will focus on two problems: A) the inclusion of water-mediated interactions to receptor-ligand scoring, B) the prediction of protein-protein interaction sites based on local surface solvation patterns.



	<p>A) Binding of a drug into protein receptor pocket, on the one hand, involves their partial dehydration and, on the other hand, leads to the formation of specific interactions bridged by solitary water molecules trapped at the binding interface. Both these effects have significant contribution to the overall binding free energy, but at the same time are difficult to assess, posing a major obstacle in computer aided drug design. In order to tackle this problem, we will develop a computationally efficient method of assessing these contributions based on our hydration model, which combines mean-field description of bulk solvent interactions with atomistic treatment of individual water molecules. We will merge its predictions with scoring functions that represent direct protein-ligand interactions, in order to optimise ranking of true receptor-ligand geometries among false solutions obtained in docking experiments.</p> <p>B) Most proteins interact with other macromolecular binding partners, forming larger functional assemblies or participating in cellular signalling networks. Given vast array of such interactions, their often transient character, and the fact that most protein structures are obtained in isolation, computational prediction of protein-protein binding is of high practical value for cellular biology. One of important characteristics of surface interaction sites is their relatively small desolvation penalty. This can be assessed by our hydration model based on combined contributions of electrostatic, hydrophobic and topography related effects. We will leverage this capability to develop a machine learning approach trained for classification of protein surface into interface and non-interface areas based on their underlying hydration propensity.</p> <p>[1] P. Setny, <i>J. Chem. Theory Comput.</i>, 2015, 11: 5961. [2] P. Setny, <i>J. Phys. Chem. B</i>, 2015, 119:5970.</p>
Key responsibilities include:	<ul style="list-style-type: none">• development of methods addressing project tasks in collaboration with the project leader• preparation of training and test data• validation of the proposed approaches• implementation of methods in computer programs• presentation of results at seminars and conferences, preparation of manuscripts• supporting collaborating students
Profile of candidates/requirements:	<ul style="list-style-type: none">• PhD degree in physics, chemistry, biology, mathematics or related discipline• good knowledge of programming and ability to work in Linux operating system• good knowledge of English• experience in biomolecular modelling is highly welcome <p>The competition is open to persons who meet the conditions specified in:</p> <ul style="list-style-type: none">• Act of 20 July 2018 Law on higher education and science (Journal of Laws of 2021, item 478) and the Statutes of the University of Warsaw;• Regulations on the allocation of resources for the implementation of tasks financed by the National Centre of Science for Sonata Bis grant;



	<p>The candidate should hold a PhD degree for no longer than 7 years before the date of signing an employment agreement in the project. The PhD degree should be obtained in a country of the EU, EFTA, OECD or nostrified on the date of employment at the latest.</p>
Enquiries related to the position may be sent to:	p.setny@cent.uw.edu.pl
Required documents:	<ol style="list-style-type: none">1. Cover letter2. Current curriculum vitae and the list of publications3. Contact data of two former collaborators who will be able to issue recommendation letters4. Copy of PhD certificate or a document confirming that the Candidate will obtain the PhD degree prior to the date of employment in the project5. Signed information on the processing of personal data6. Signed declaration confirming that the candidate has read and accepted the rules of conducting competitions, covered in the following documents: Order of the Rector of UW No. 106 Par. 126 of the UW Statutes Resolution No. 443 of 26 June 2019
We offer:	<p>interesting, creative work in friendly team and good atmosphere stable employment possibility of scientific development</p>
Please submit the following documents to:	E-mail: careers@cent.uw.edu.pl with 'CeNT-9-2022' as the email title
Application deadline:	01.05.2022
Date of announcing the results:	13.05.2022
Method of notification about the results:	Email, strona www CeNT, UW, BIP MEiN

The competition is the first stage of the recruitment procedure for the position of academic teacher specified in the Statutes of the University of Warsaw, and its positive result is the basis for further proceedings. Following an initial screening of the applications, selected candidates will be contacted by e-mail for further recruitment steps.



CeNT-9-2022

Dyrektor Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego za zgodą Rektora Uniwersytetu Warszawskiego, ogłasza konkurs na stanowisko stażysty podoktorskiego (starszego asystenta) w grupie pracowników badawczych w Laboratorium Modelowania Biomolekularnego, Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego.

OGŁOSZENIE O KONKURSIE

Stanowisko:	Stażysta podoktorski (starszy asystent)
Laboratorium:	Modelowania Biomolekularnego
Dyscyplina naukowa:	nauki fizyczne/ nauki chemiczne/ nauki biologiczne
Słowa kluczowe:	efekty hydratacyjne, dokowanie molekularne, oddziaływania białko-białko, uczenie maszynowe
Forma zatrudnienia:	Umowa o pracę
Wymiar etatu:	pełny
Liczba stanowisk:	1
Wynagrodzenie miesięczne:	~ 7500 PLN brutto / miesiąc + 13 pensja w każdym roku
Termin rozpoczęcia pracy:	01.06.2022 lub później
Maksymalny okres zatrudnienia/umowy stypendialnej:	wstępnie 6 miesięcy, z możliwością przedłużenia do łącznie 48 miesięcy
Jednostka UW:	Centrum Nowych Technologii
Kierownik projektu:	dr hab. Piotr Setny
Tytuł projektu:	<i>Wpływ otoczenia molekularnego na strukturę, funkcję i oddziaływania makrocząsteczek biologicznych</i>
Typ konkursu:	Sonata Bis 10
Instytucja finansująca:	Narodowe Centrum Nauki
Opis projektu:	Cząsteczki biologiczne funkcjonują w środowisku wodnym. Jego obecność powoduje szereg efektów fizycznych, których uwzględnienie jest konieczne w metodach teoretycznych mających zastosowanie w problemach biologii strukturalnej lub komputerowo wspomaganym projektowaniu leków. Wykorzystując niedawno opracowany model pozwalający na szybki opis właściwości warstw hydratacyjnych biomolekuł[1,2], skupimy się na dwóch problemach: A) włączeniu efektów wynikających z obecności wody do oceny oddziaływań pomiędzy receptorami białkowymi i ligandami, B) przewidywaniu obszarów powierzchni białek biorących udział w oddziaływaniu z innymi makromolekułami.



A) Asocjacja molekuł prowadzi, z jednej strony, do ich częściowej dehydratacji, a z drugiej, do powstania specyficznych oddziaływań, w których pośredniczą pojedyncze cząsteczki wody uwięzione w miejscu wiążącym. Oba te efekty mają znaczący wkład do energii swobodnej wiązania, lecz ich ilościowa ocena na gruncie teoretycznym jest wyjątkowo trudna, stanowiąc jeden z istotniejszych, nierozwiązanych problemów komputerowo wspomaganego projektowania leków. W ramach projektu opracujemy efektywną obliczeniową metodę oceny wielkości wkładów hydratacyjnych opartą na wcześniej wprowadzonym modelu teoretycznym, który uwzględnia zarówno oddziaływania realizowane przez indywidualne cząsteczki wody jak i, za pośrednictwem teorii pola średniego, wpływ całego środowiska. Przewidywania modelu zostaną połączone z wynikami funkcji oceniających bezpośrednie oddziaływania receptor-ligand w celu zoptymalizowania oceny wyników dostarczanych przez metody dokowania molekularnego.

B) Znaczna część białek w komórce tworzy większe zespoły funkcjonalne lub uczestniczy w sieciach sygnałowych. Zważywszy na powszechność takich relacji, ich często chwilowy charakter oraz fakt, że większość eksperymentalnie uzyskiwanych struktur odpowiada stanom niezwiązanym, komputerowe przewidywanie oddziaływań pomiędzy białkami ma duże praktyczne znaczenie. Jedną z cech obszarów powierzchni białek, które biorą udział w tworzeniu kompleksów, jest ich stosunkowo słabsze oddziaływanie z wodą. Ocena takiego oddziaływania, przy jednoczesnym uwzględnieniu oddziaływań elektrostatycznych, efektów hydrofobowych i lokalnej topografii, jest możliwa przy wykorzystaniu rozwijanego przez nas modelu hydratacyjnego. Mając to na uwadze, w tej części projektu opracujemy metodę opartą na uczeniu maszynowym, pozwalającą na klasyfikację powierzchni białka na obszary o dużym i małym prawdopodobieństwie udziału w interakcjach międzybiałkowych.

[1] P. Setny, *J. Chem. Theory Comput.*, 2015, 11: 5961.

[2] P. Setny, *J. Phys. Chem. B*, 2015, 119:5970.

Zakres obowiązków:

- współpraca z kierownikiem projektu w opracowaniu metod realizujących cele projektu
- przygotowanie danych treningowych i testowych
- walidacja opracowanych metod
- implementacja metod w postaci programów komputerowych
- prezentacja wyników na seminariach i konferencjach, przygotowanie wstępnych wersji manuskryptów publikacji,
- udział w opiece merytorycznej nad studentami współpracującymi z Laboratorium

Profil kandydata/ wymagania:

- stopień doktora nauk fizycznych, chemicznych, biologicznych, matematycznych lub pokrewnych
- dobra znajomość programowania i pracy w systemie operacyjnym Linux
- dobra znajomość języka angielskiego
- pożądane doświadczenie w zakresie modelowania molekularnego



	<p>Do konkursu mogą przystąpić osoby, które spełniają warunki określone w:</p> <ul style="list-style-type: none">• ustawie z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r., poz. 478) i Statucie UW;• regulaminie przyznawania środków na realizację zadań finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki w zakresie projektów badawczych, dla konkursu Sonata Bis <p>Kandydat powinien posiadać stopień doktora nie dłużej niż 7 lat przed dniem podpisania umowy o pracę w projekcie. Stopień doktora powinien być uzyskany w państwach UE, EFTA, OECD lub nostryfikowany najpóźniej na dzień zatrudnienia w projekcie.</p>
Zapytania związane ze stanowiskiem prosimy kierować na adres:	p.setny@cent.uw.edu.pl
Wymagane dokumenty:	<ol style="list-style-type: none">1. List motywacyjny2. Aktualny życiorys wraz z listą publikacji3. Dane kontaktowe dwóch współpracowników mogących sporządzić listy rekomendacyjne4. Kopia dyplomu doktorskiego lub innego dokumentu potwierdzającego, że kandydat uzyska stopień doktora najpóźniej na dzień zatrudnienia w projekcie5. Podpisana informacja o przetwarzaniu danych osobowych6. Podpisane oświadczenie, w którym kandydat potwierdza, że zapoznał się i akceptuje zasady przeprowadzania konkursów, zawarte w następujących dokumentach: Zarządzenie nr 106 Rektora UW z dnia 27 września 2019 Par. 126 Statutu UW Uchwała nr 443 z 26 czerwca 2019
Oferujemy:	ciekawą, koncepcyjną pracę w zgranym zespole i dobrej atmosferze stabilne warunki zatrudnienia możliwość rozwoju naukowego
Forma nadsyłania zgłoszeń:	Mailowo na adres: careers@cent.uw.edu.pl z tytułem maila „CeNT-9-2022”
Termin nadsyłania zgłoszeń:	01.05.2022
Termin ogłoszenia wyników konkursu:	13.05.2022
Sposób informowania o wynikach konkursu:	Email, strona internetowa CeNT, UW, BIP MEiN

Konkurs jest pierwszym etapem określonej w Statucie UW procedury zatrudniania na stanowisku nauczyciela akademickiego, a jego pozytywne rozstrzygnięcie stanowi podstawę do dalszego postępowania. Po dokonaniu wstępnej analizy nadesłanych zgłoszeń, skontaktujemy się z wybranymi kandydatami celem przeprowadzenia dalszych etapów procedury rekrutacyjnej.