



Ogłoszenie o konkursie na stanowisko doktoranta/doktorantki

Projekt	True Bioisosteres – Structural and Thermodynamic Classification of Molecular Fragments for Ligand Design
Jednostka	Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski
Miejsce realizacji	Warszawa, Polska
Kierownik projektu	dr hab. Maura Malińska
Finansowanie	Projekt SONATA BIS-11 finansowany przez Narodowe Centrum Nauki

Grupa naukowa dr hab. Maury Malińskiej, działająca na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, poszukuje osoby posiadającej status doktoranta/doktorantki w Szkole Doktorskiej do realizacji projektu doktorskiego prowadzonego w ramach projektu SONATA BIS „True Bioisosteres – Structural and Thermodynamic Classification of Molecular Fragments for Ligand Design”.

Projekt SONATA BIS-11 dotyczy strukturalnego i termodynamicznego opisu zmian bioizosterycznych oraz zrozumienia, kiedy różne fragmenty molekularne mogą zachowywać się podobnie w tym samym środowisku wiążącym. W ramach doktoratu nacisk zostanie położony na walidację metod obliczeniowych służących do opisu termodynamiki wiązania oraz na mechanistyczne zrozumienie źródeł ich sukcesów i niepowodzeń.

Punktem wyjścia będzie zestaw dobrze scharakteryzowanych układów gospodarz–gość, obejmujący również serie umożliwiające analizę zamian bioizosterycznych, dla których dostępne są wysokiej jakości struktury krystalograficzne oraz dane termodynamiczne z pomiarów izotermicznej kalorymetrii miareczkowej.

Projekt daje możliwość pracy na styku chemii obliczeniowej, chemii supramolekularnej, termodynamiki wiązania i chemii strukturalnej.

Zakres obowiązków

Do zadań doktoranta/doktorantki będzie należało:

- przygotowanie i analiza zestawu układów referencyjnych o znanej strukturze i eksperymentalnej termodynamice wiązania;
- prowadzenie obliczeń dockingowych oraz analiza alternatywnych modów wiązania;
- wykonywanie i analiza symulacji dynamiki molekularnej;
- zastosowanie metod MM/GBSA i/lub MM/PBSA oraz analiza ich czułości na stosowany protokół;
- obliczenia swobodnej energii wiązania, w szczególności z wykorzystaniem metod APR;
- analiza wpływu protonacji, hydratacji, konformacji oraz elektrostatyki na wyniki obliczeń;
- porównywanie wyników obliczeniowych z danymi strukturalnymi i termodynamicznymi;
- aktywny udział w całym procesie badawczym i publikacyjnym — od tworzenia koncepcji badań i projektowania obliczeń po analizę wyników i przygotowanie manuskryptów;
- współpraca i skuteczna komunikacja z członkami zespołu oraz zewnętrznymi grupami badawczymi;
- udział w planowaniu strategii badawczych i rozwijaniu nowych kierunków projektu.

Wymagania

Kandydat/kandydatka powinien/powinna posiadać:

- tytuł magistra chemii, fizyki, biofizyki lub pokrewnej dyscypliny;
- status doktoranta/doktorantki w Szkole Doktorskiej;
- zainteresowanie chemią obliczeniową, modelowaniem molekularnym oraz fizycznymi podstawami rozpoznania molekularnego;
- samodzielność, aktywność i inicjatywę w pracy naukowej;
- dobrą znajomość języka angielskiego;
- bardzo dobrą organizację pracy, rzetelność i dokładność;
- umiejętność pracy zespołowej oraz krytycznej analizy wyników.

Mile widziane

- doświadczenie w programowaniu, w szczególności w Pythonie, lub gotowość do rozwijania kompetencji programistycznych;
- doświadczenie z systemami Linux i pracą na klastrach obliczeniowych;
- wcześniejszy kontakt z dynamiką molekularną, dockingiem, metodami obliczania swobodnej energii lub chemią kwantową;
- zainteresowanie termodynamiką wiązania, chemią supramolekularną lub krystalografią.

Brak wcześniejszego doświadczenia ze wszystkimi wymienionymi metodami nie jest wymagany — istotna jest gotowość do ich poznania i rozwijania kompetencji w trakcie doktoratu.

Oferujemy

- stypendium naukowe w wysokości 5000 zł finansowane w ramach projektu SONATA BIS-11 na minimum 21 miesięcy;
- możliwość współautorstwa publikacji w uznanych czasopismach naukowych;
- wsparcie w rozwijaniu kompetencji z zakresu modelowania molekularnego, analizy danych i metod obliczania swobodnej energii;
- dostęp do danych eksperymentalnych i strukturalnych umożliwiających bezpośrednią walidację metod obliczeniowych;
- udział w konferencjach krajowych i międzynarodowych;
- pracę w interdyscyplinarnym zespole łączącym eksperyment, chemię strukturalną i metody obliczeniowe.

Wymagane dokumenty

Zainteresowane osoby proszone są o przesłanie:

- CV; w przypadku współautorstwa publikacji prosimy o krótki opis wkładu kandydata/kandydatki w ich powstanie;
- listu motywacyjnego;
- informacji o przetwarzaniu danych osobowych — wzór dostępny na stronie Wydziału Chemii UW: www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/;
- referencji lub danych kontaktowych do osób mogących udzielić referencji.

Dokumenty należy przesłać do dnia **18 września 2026 r.** na adres mmalinska@chem.uw.edu.pl, wpisując w tytule wiadomości: **PhD position**.