

Recruitment for the Doctoral School of Molecular Biology and Biological Chemistry at the Institute of Biochemistry and Biophysics Polish Academy of Sciences

Rekrutacja do Szkoły Doktorskiej Biologii Molekularnej i Chemii Biologicznej Instytut Biochemii i Biofizyki Polskiej Akademii Nauk

Procedure no. DSMBBC/2024/16

1. Supervisor (Promotor): prof. Piotr Zielenkiewicz

2. Supervisor (email): piotr@ibb.waw.pl

3. Auxiliary Supervisor (if applicable) (Promotor pomocniczy): dr Norbert Odolczyk

4. Research Unit: Department of Bioinformatics

Jednostka organizacyjna: Zakład Bioinformatyki

- 5. Research Unit (www): https://ibb.edu.pl/pracowania-badawcza/piotr-zielenkiewicz/
- **6.** Programme Title (English): Development of methods for designing peptide inhibitors of protein-protein interactions and their application to selected therapeutic targets.
- **7.** Programme Title (Polish):Rozwój metod projektowania peptydowych inhibitorów oddziaływań białko-białko i ich zastosowanie do wybranych celów terapeutycznych.
- **8.** The discipline of science (dyscyplina naukowa):
 - biological sciences (nauki biologiczne)
- 9. Description of proposed PhD programme (opis planowanych badań):

The predicted number of human PPIs (human interactome) has been estimated to range from 130,000 to 650,000. This not only underscores the complexity of human PPIs but also suggests that a significant portion of them could be druggable. In particular, alterations in the physiological functions of PPIs are implicated in numerous human diseases, such as cancers (e.g., p53/MDM2, Bcl-2 family, and MLL1/WDR5), neurodegenerative disorders like Alzheimer's (β -amyloid) and Parkinson's disease (α -synuclein), autoimmune diseases (e.g., LFA-1/ICAM), and genetically inherited diseases, such as Huntington's disease (polyQ-Htt aggregates) and cystic fibrosis (Δ F508-CFTR/K8). Moreover, specific protein-protein interactions play critical roles in many biosynthetic pathways of bacteria, parasites, and viruses, making them crucial for pathogenesis. Some of these PPIs facilitate the formation of fully functional complexes of pathogenic proteins (intra-species interactions), while others involve competitive binding between pathogen and host proteins (cross-species interactions). Both types of PPIs hold considerable potential as novel drug targets, particularly in the context of rising microbial antibiotic resistance. However, designing and discovering efficient drugs capable of disrupting unwanted protein-protein interactions requires a comprehensive understanding of the structural nature of protein-protein complexes. Unfortunately, the availability of experimentally resolved structures of biomolecular complexes remains limited due to their inherent characteristics.

Recent Al-based methods applied to structural bioinformatics have revolutionized the modeling of protein structures, providing crucial data for downstream analyses and applications such as protein structure classification and structure-based drug design. A significant breakthrough in the field has been the development of AlphaFold3, which not only predicts protein structures but also their biomolecular complexes with other proteins, peptides, nucleic acids, and low molecular weight compounds.

Peptides derived from native protein–protein interaction (PPI) sites are valuable tools for probing protein–protein interfaces and serve as excellent starting points for designing effective PPI modulators. These fragments (a) may function as potent PPI inhibitors and (b) serve as binding regions for low-molecular-weight, drug-like molecules that can efficiently block undesired PPIs by binding to the predicted regions. Building on this foundation, the PhD program participant will focus on developing in silico structure-based methods, with a particular emphasis on machine learning algorithms, to support the development and optimization of peptide-based modulators of PPIs and to predict potential binding regions of such modulators. The proposed methods will then be applied by the selected candidate to design and develop novel inhibitors targeting critical PPIs associated with human disorders that currently have unmet medical needs.

- **10.** Literature references related to conducted/planned research (literatura związana z planowanymi badaniami) [maximum 3]:
 - Ravatin M, Odolczyk N, Servel N, Guijarro JI, Tagat E, Chevalier B, Baatallah N, Corringer PJ, Lukács GL, Edelman A, Zielenkiewicz P, Chambard JM, Hinzpeter A, Faure G. Design of Crotoxin-Based Peptides with Potentiator Activity Targeting the ΔF508NBD1 Cystic Fibrosis Transmembrane Conductance Regulator. J Mol Biol. 2023 Feb 1;435(3):167929. doi: 10.1016/j.jmb.2022.167929.
 - Odolczyk N, Klim J, Podsiadła-Białoskórska M, Winiewska-Szajewska M, Szolajska E, Zielenkiewicz U, Poznański J, Zielenkiewicz P. Improvement of native structure-based peptides as efficient inhibitors of protein-protein interactions of SARS-CoV-2 spike protein and human ACE2. Front Mol Biosci. 2022 Sep 28;9:983014. doi: 10.3389/fmolb.2022.983014.
 - Odolczyk N, Marzec E, Winiewska-Szajewska M, Poznański J, Zielenkiewicz P. Native Structure-Based Peptides as Potential Protein-Protein Interaction Inhibitors of SARS-CoV-2 Spike Protein and Human ACE2 Receptor. Molecules. 2021 Apr 9;26(8):2157. doi: 10.3390/molecules26082157.
- **11.** Requirements for the candidate (wymagania):
- a) hold a degree of Master of Science [Magister], Master of Engineering [Magister Inżynier], medical doctor or equivalent in the field of: exact sciences, natural sciences, medical sciences or related disciplines, granted by a Polish or foreign university; a person who does not possess the qualifications described above may take part in the competition, but must obtain the qualifications in question and provide the relevant documents before the start of the programme at the Doctoral School (i.e., 1st March 2025) Education at the Doctoral School begins on 1st March 2025;

posiadanie tytułu zawodowego magistra, magistra inżyniera, lekarza lub innego równorzędnego na polskiej lub zagranicznej uczelni w dziedzinie: nauk ścisłych, przyrodniczych, medycznych lub pokrewnych; w naborze może wziąć udział osoba nieposiadająca kwalifikacji opisanych w zdaniu poprzedzającym, jednak musi je uzyskać i stosowne dokumenty dostarczyć przed rozpoczęciem kształcenia w Szkole Doktorskiej (tj. przed 1 marca 2025 r.). Kształcenie w szkole Doktorskiej rozpoczyna się 1 marca 2025 r.

b) Software Development and Coding Skills: Advanced in Python, with a strong focus on expertise in algorithms and data structures.

Experience with Deep Learning/Machine Learning Libraries: Skilled in using libraries such as scikit-learn, Keras, PyTorch, TensorFlow, and others.

Umiejętności programistyczne i kodowania: Biegłość w Pythonie, z naciskiem na znajomość algorytmów i struktur danych.

Doświadczenie z bibliotekami deep learning/machine learning: Znajomość bibliotek takich jak scikit-learn, Keras, PyTorch, TensorFlow i inne.

12. Scholarship amount (net, monthly, PLN):

1st year: 4000; 2nd year: 4000; 3rd year: 4739,51; 4th year: 4739,51;

Wysokość stypendium (netto, miesięcznie, PLN):

Pierwszy rok: 4000; Drugi rok: 4000; Trzeci rok: 4739,51; Czwarty rok: 4739,51;

13. Number of positions available: 1

Liczba dostępnych miejsc: 1

14. Deadline for submission of documents: 12.01.2025

Termin zakończenia przyjmowania dokumentów: 12.01.2025

15. Selected candidates will be invited for **the interview** that **will take place from 13.01.2025 to 24.01.2025** (the exact date will be given in the invitation).

Wybrani kandydaci zostaną zaproszeni na rozmowę kwalifikacyjną, która odbędzie się w terminie od 13.01.2025 do 24.01.2025 (dokładny termin zostanie przekazany w zaproszeniu na rozmowę).

16. The recruitment procedure will be completed until **31.01.2025**.

Termin rozstrzygnięcia konkursu 31.01.2025

17. Required documents:

a) an application for admission to the Doctoral School, together with consent to the processing of personal data for the recruitment procedure and a statement on familiarising oneself with recruitment rules and conditions; (link to the application form) (Information on the processing of personal data)

podanie o przyjęcie do Szkoły Doktorskiej wraz ze zgodą na przetwarzanie danych osobowych na potrzeby postępowania rekrutacyjnego oraz oświadczeniem o zapoznaniu się z zasadami i warunkami rekrutacji; (odnośnik do podania o przyjęcie). (Informacja nt. przetwarzania danych osobowych)

b) a copy of the diploma from a university or the candidate's statement on the estimated graduation date;

odpis dyplomu ukończenia uczelni wyższej lub oświadczenie kandydata o przewidywanym zakończeniu studiów;

c) a scientific curriculum vitae including information on the candidate's participation in scientific projects and other related activities, such as publications, involvement in science club, participation in academic conferences with an oral or poster presentation, national and international internships, prizes and awards, participation in grants, popularization of science, voluntary work;

życiorys naukowy zawierający informacje o udziale kandydata w projektach naukowych i innych aktywnościach związanych z działalnością naukową taką jak: publikacje, prace w kołach naukowych, udział w konferencjach naukowych z referatem, posterem, staże krajowe i zagraniczne, nagrody i wyróżnienia, udział w grantach, popularyzacji nauki, wolontariacie;

d) a list of completed university courses with marks;

wykaz ukończonych kursów uniwersyteckich wraz z ocenami;

e) a motivation letter;

list motywacyjny;

f) contact details to at least one academic adviser or academic staff member holding at least a doctor's degree, who has agreed to give an opinion on the applicant. The opinion should not be attached to the application;

dane kontaktowe do co najmniej jednego dotychczasowego opiekuna naukowego lub innego pracownika naukowego ze stopniem co najmniej doktora, który zgodził się wcześniej wydać opinię na temat kandydata. Opinii nie należy załączać do aplikacji;

g) in the case of having a disability certificate or a certificate on the level of disability, or a certificate referred to in Article 5 and Article 62 of the Act of 27 August 1997 on Vocational and Social Rehabilitation and Employment of Persons with Disabilities – a statement of holding such certificate;

w przypadku posiadania orzeczenia o niepełnosprawności lub orzeczenia o stopniu niepełnosprawności albo orzeczenia, o którym mowa w art. 5 oraz art. 62 ustawy z dnia 27 sierpnia 1997 r. o rehabilitacji zawodowej i społecznej oraz zatrudnianiu osób niepełnosprawnych – oświadczenie o jego posiadaniu;

h) candidates holding a diploma of completing studies abroad shall additionally attach a certified translation of the diploma, including the supplement, into Polish or English, unless the diploma or an official copy thereof, including the supplement, has been issued in English. A diploma issued abroad must be legalised or certified with an apostille clause.

kandydat legitymujący się dyplomem ukończenia studiów za granicą składa dodatkowo poświadczone tłumaczenie dyplomu, wraz z suplementem, na język polski lub angielski, chyba, że dyplom lub jego oficjalny odpis, wraz z suplementem, został wydany w języku angielskim. Dyplom wydany za granicą należy poddać legalizacji lub uzyskać na nim klauzulę apostille.;

- 18. Language of documents (język dokumentów):
 - either English or Polish up to the candidate's choice (angielski lub polski do wyboru przez kandydata)
- 19. How to apply (jak złożyć aplikację):
 - Use the Application form for admission to the Doctoral School (<u>link to the application form</u>) (<u>Information on the processing of personal data</u>)

Użyj formularza Podania o przyjęcie do Szkoły Doktorskiej (<u>odnośnik do podania o przyjęcie</u>). (<u>Informacja nt.</u> przetwarzania danych osobowych)

• Merge all required documents as a single pdf file

Połącz wszystkie dokumenty w jeden plik formatu pdf

• Send this file as an attachment to PhDschool-recruitment@ibb.waw.pl or post documents to

Doctoral School Institute of Biochemistry and Biophysics Polish Academy of Sciences Pawinskiego 5a 02-106 Warszawa Poland

Wyślij plik pdf na adres PhDschool-recruitment@ibb.waw.pl lub prześlij dokumenty na adres:

Szkoła Doktorska Instytut Biochemii i Biofizyki Polska Akademia Nauk ul. Pawińskiego 5a 02-106 Warszawa Polska

• Include "Procedure no. DSMBBC/2024/16" and your first and last name as the subject of the e-mail

W tytule wiadomości e-mail umieść "Procedure no. DSMBBC/2024/16" oraz Twoje imię i nazwisko.

The application must contain all documents described in section 17

Aplikacja musi zawierać wszystkie dokumenty opisane w punkcie 17

- **20.** The recruitment process consists of two stages:
- a) selection of candidates by the Committee based on their previous achievements and academic performance presented in the documents submitted; for each position no more than 5 applicants who have achieved the highest scores, but no less than 60% of the maximum points, shall be qualified for the next stage;
- **b)** an interview conducted by the Committee including in particular:
 - a presentation delivered by the candidate containing the outcomes of his/her research (a Master's thesis
 or other research work carried out by the candidate); the presentation must not last longer than 10
 minutes;

- questions asked by the members of the Committee related to the presented project, the methods used and interpretation of the results obtained;
- questions asked by the members of the Committee related to the proposed PhD programme described in the recruitment announcement;
- questions related to the candidate's motivation for scientific work.

Rekrutacja składa się z dwóch etapów:

- a) selekcji kandydatów przez Komisję na podstawie dotychczasowych osiągnięć i wyników w nauce przedstawionych w złożonych dokumentach; dla każdego oferowanego miejsca do kolejnego etapu zakwalifikowane zostaną nie więcej niż 5 osób, które uzyskały najlepszą ocenę, nie mniejszą jednak niż 60% maksymalnej liczby punktów.
- **b)** rozmowy kwalifikacyjnej z Komisją, która obejmuje:
 - prezentację podczas której kandydat przedstawia wyniki swoich badań (pracy magisterskiej lub innej pracy badawczej wykonanej przez kandydata); prezentacja może trwać nie dłużej niż 10 minut;
 - zadanie pytań przez członków Komisji sprawdzających znajomości tematyki przedstawionej przez kandydata, stosowanych przez niego metod oraz umiejętności interpretacji uzyskanych wyników;
 - zadanie pytań przez członków Komisji sprawdzających znajomość tematyki wymienionej w ogłoszeniu o rekrutacji (proponowanym programie badawczym);
 - poznanie motywacji kandydata do pracy naukowej.

21. Language of interview (język rozmowy kwalifikacyjnej):

either English or Polish up to the candidate's choice (angielski lub polski - do wyboru przez kandydata)

22. Criteria for evaluation of candidates:

a) Stage One

- learning outcomes (a scale of the evaluation: 0.0 6.0 points);
- participation in a scientific project or an academic conference (a poster or oral presentation) (a scale of the evaluation: 0.0 – 1.0 points);
- co-authorship of a research paper (depending on the role in the publication) (a scale of the evaluation: 0.0 1.0 points);
- involvement in science club (a scale of the evaluation: 0.0 or 0.5 points);
- other achievements, e.g., awards, honors, scholarships, domestic and foreign internships, voluntary work, popularization of science (a scale of the evaluation: 0.0 1.5 points).

b) Stage Two

- understanding of the project performed and methods used; the ability to interpret the results obtained; knowledge in the field related to the presented project (a scale of the evaluation: 0-10 points);
- knowledge in the field related to the proposed PhD programme described in the recruitment announcement (a scale of the evaluation: 0-10 points);
- form of presentation of the candidate's results (a scale of the evaluation: 0-3 points).

Kryteria oceny:

a) Etap pierwszy

- wyniki uzyskane w trakcie kształcenia (skala oceny 0,0 6,0 pkt.)
- udział w projekcie naukowym lub konferencji naukowej (plakat lub prezentacja ustna) (skala oceny 0,0 -1,0 pkt.)
- współautorstwo publikacji naukowej (w zależności od roli w publikacji) (skala oceny 0,0 1,0 pkt.)

- praca w kole naukowym (skala oceny 0,0 lub 0,5 pkt.)
- inne osiągnięcia, np: nagrody, wyróżnienia, stypendia, staże krajowe i zagraniczne, wolontariat, popularyzacja nauki (skala oceny 0,0 1,5 pkt.)

b) Etap drugi:

- stopień zrozumienia własnej pracy; umiejętność interpretacji otrzymanych wyników; zrozumienie stosowanych metod, wiedzę w obszarze związanym z tematem przedstawionej pracy (skala oceny 0-10 pkt.),
- wiedzę w tematyce wymienionej w ogłoszeniu o rekrutacji (skala oceny 0-10 pkt.),
- formę prezentacji własnych wyników (skala oceny 0-3 pkt.).

23. For additional information please contact:

- formal issues: PhDschool-recruitment@ibb.waw.pl (Research Management Unit IBB PAS);
- PhD programme-related issues: the supervisor at IBB PAS (we encourage you to contact the supervisor to learn more about the project before submitting your application)

Kontakt:

- sprawy formalne: PhDschool-recruitment@ibb.waw.pl (Dział Badań i Projektów Naukowych IBB PAN);
- pytania dotyczące planowanych badań: promotor (przed złożeniem dokumentów zachęcamy do kontaktu z promotorem w celu uzyskania dodatkowych informacji na temat planowanych badań)
- **24.** Legal basis: https://ibbpan.bip.gov.pl/fobjects/download/1394759/uchwala-rn-120-2022-zasady-i-warunki-rekrutacji-sd-ibb-pan.html

Podstawa prawna: https://ibbpan.bip.gov.pl/fobjects/download/1394759/uchwala-rn-120-2022-zasady-i-warunki-rekrutacji-sd-ibb-pan.html

25. Source of Scholarship: IBB PAS Scholarship Fund

Źródło finansowania stypendium: Fundusz Stypendialny IBB PAN