INSTITUTE OF BIOCHEMISTRY AND BIOPHYSICS
POLISH ACADEMY OF SCIENCES

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/2027/11

1. Prospective Supervisor : dr hab. Paweł Siedlecki

   (email): pawel@ibb.waw.pl
2. Auxiliary Supervisor (if applicable) (Promotor pomocniczy):

   (email):
3. Research Unit: Laboratory of Cheminformatics and Molecular Modeling (PN44)

   Jednostka organizacyjna: Pracownia Cheminformatyki i Modelowania Molekularnego
4. Research Unit (www): https://ibb.edu.pl/en/laboratory/pawel-siedlecki-phd-dsc/
5. Programme Title (English): Establishing a benchmarking platform for AI/ML predictive models for bioactivity and toxicity in agrochemistry.
6. Programme Title (Polish): Ustanowienie platformy referencyjnej do benchmarkingu modeli predykcyjnych AI/ML w zakresie bioaktywności i toksyczności w agrochemii
7. The discipline of science: chemical sciences
8. Description of proposed PhD programme (English; up to 500 words)::

Modern crop protection faces unprecedented challenges, mainly in the form of pests and weeds evolving resistance, and the lack of new modes of action (MoA) reaching the market. Further, climate change shifts pest pressure and geographical distribution, while regulators and society increase the demand from regulators and society for rapid reductions in both chemical load and off-target toxicity

Fair evaluation of machine learning (ML) models is a necessary task of basic research in artificial intelligence. It consists of designing high-quality datasets, challenging train-test splits, and appropriate evaluation metrics and procedures, in order to obtain a good estimation of generalization capabilities of ML models. Despite AI/ML advances in pharmaceutical chemistry, comparable progress hasn't reached agrochemistry. Scarcity of QSAR models are calibrated on pesticide-relevant chemical space, while non-expert researchers cannot determine whether sophisticated graph neural networks outperform classical random-forest baselines for agrochemical discovery, nor gauge how much experimental data are required to reach regulatory accuracy thresholds. By systematically assembling high-quality experimental records and constructing rigorously validated benchmark tasks mirroring real-world regulatory questions, this programme addresses principal bottlenecks in digital agrochemical innovation. It integrates data engineering, algorithm development, together with domain knowledge and experimental validation forming a feedback loop in order to deliver its results.

This programme will deliver a task-oriented benchmark analogous to ImageNet, MoleculeNet, or TDC for crop-protection chemistry. Coupled with transparent baseline models and public leaderboard, we will catalyse

comparable, trustworthy AI in agrochemistry. A mature benchmarking ecosystem will impact: (i) algorithmic research focusing on realistic agrochemical challenges, (ii) reduced redundant wet-lab screening by prioritizing promising scaffolds, and (iii) evidence-based regulation by quantifying *in silico* prediction uncertainty. Our goal is to drive impactful and reliable advances in machine-learning research, unlocking ML's potential and impacting allied domains like veterinary parasitology and environmental toxicology, enhancing academic and societal benefits.

The proposed programme builds on substantial prior experience considering generating data assets, modeling protocols, predictive ML architectures and experimental validations in agrochemical research. CheMM Lab has recently developed ApisTox, the largest dataset on small-molecule pesticide toxicity toward honey bees. They have comprehensively evaluated diverse machine learning approaches for predicting pesticide toxicity to honey bees, including molecular fingerprints, graph kernels, graph neural networks, pretrained transformers, and explainable ML approaches.

The programme is structured with two main research questions:

1) How does the ranking performance of state-of-the-art molecular AI/ML models change when they are evaluated on agrochemical rather than pharmaceutical features and endpoints?

2) Can a chemically diverse, less pharma-biased pre-training corpus improve the generalization of neural models across distinct agrochemical tasks?

9. Literature references related to conducted/planned researcU+0068 [maximum 3][please, include DOI]:

- Adamczyk J, Poziemski J, Siedlecki P. Evaluating machine learning models for predicting pesticide toxicity to honey bees. Ecotoxicol Environ Saf. 2026 Mar 1;312:119869.
- Adamczyk J, Poziemski J, Siedlecki P. ApisTox: a new benchmark dataset for the classification of small molecules toxicity on honey bees. Sci Data. 2025 Jan 2;12(1):5.
- Poziemski J, Siedlecki P. Assessment of molecular dynamics time series descriptors in protein–ligand affinity prediction. RCS Digital Discovery 2026 5 (4): 1888–1899.

10. 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 2027). Education at the Doctoral School begins on 1st March 2027 ;

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 2027 r.). Kształcenie w szkole Doktorskiej rozpoczyna się: 1 marca 2027 r.

b) Preferably, candidates have experience in programming, knowledge of computational chemistry and possess cheminformatics together with machine learning skills.

Kandydaci powinni posiadać doświadczenie w programowaniu, wiedzę z zakresu chemii obliczeniowej oraz umiejętności w dziedzinie chemoinformatyki i uczenia maszynowego.

11. Scholarship amount (net, monthly, PLN):
1st year: 4437,00; 2nd year: 4437,00 ; 3rd year: 4932,95; 4th year: 4932,95;

Wysokość stypendium (netto, miesięcznie, PLN):

Pierwszy rok: 4437,00; Drugi rok: 4437,00; Trzeci rok: 4932,95; Czwarty rok: 4932,95;

12. Number of positions available: 1

Liczba dostępnych miejsc: 1

13. Deadline for submission of documents: **30.11.2026**

Termin zakończenia przyjmowania dokumentów: **30.11.2026**

14. Selected candidates will be invited for **the interview** that **will take place from 08.12.2026 to 15.12.2026** (the exact date will be given in the invitation).

Wybrani kandydaci zostaną zaproszeni na rozmowę kwalifikacyjną, która odbędzie się w terminie **od 08.12.2026 do 15.12.2026** (dokładny termin zostanie przekazany w zaproszeniu na rozmowę).

15. The recruitment procedure will be completed until **17.12.2026**.

Termin rozstrzygnięcia konkursu **17.12.2026**

16. 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; (link do podania o przyjęcie) (Informacja nt. przetwarzania danych osobowych)

b) a diploma confirming completion of higher education or a statement of the expected date of the master's thesis defense;

dyplom ukończenia uczelni wyższej lub zaświadczenie o przewidywanym terminie obrony pracy dyplomowej;

c) a scientific curriculum vitae including information on the candidate's participation in scientific projects and other related activities, such as publications, work in academic clubs, participation in academic conferences with a paper, poster, national and international internships, prizes and awards, participation in grants;

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;

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.;

17. Language of documents (język dokumentów):

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

18. How to apply (jak złożyć aplikację):

- Use the Application form for admission to the Doctoral School (link to the application form) (Information on the processing of personal data)
- Użyj formularza Podania o przyjęcie do Szkoły Doktorskiej (odnośnik do podania o przyjęcie). (Informacja nt. 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 phdschoolrecruitment@ibb.waw.pl **or** post documents to

  Doctoral School (Building D, Room No. 6)
  Institute of Biochemistry and Biophysics
  Polish Academy of Sciences
  Pawinskiego 5a
  02-106 Warszawa
  Poland

  Wyślij plik pdf na adres phdschoolrecruitment@ibb.waw.pl lub prześlij dokumenty na adres:

  Szkoła Doktorska „(Budynek D, pokój nr 6)
  Instytut Biochemii i Biofizyki
  Polska Akademia Nauk
  ul. Pawińskiego 5a
  02-106 Warszawa
  Polska
- Include "**Procedure no. DSMBBC/2027/11**" and your first and last name as the subject of the e-mail

  W tytule wiadomości e-mail umieść „**Procedure no. DSMBBC/2027/11”** oraz Twoje imię i nazwisko.
- The application must contain all documents described in section 16

  Aplikacja musi zawierać wszystkie dokumenty opisane w punkcie 16

19. The recruitment process consists of three stages:

a) selection of candidates by the Committee based on the alignment of the candidate’s competencies with the requirements specified in the recruitment program;

b) selection of candidates by the Committee based on their previous achievements and academic results presented in the submitted documents;

c) 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 trzech etapów:

a) selekcja kandydatów przez Komisję na podstawie zgodności kompetencji kandydata z wymaganiami określonymi w programie rekrutacyjnym;

b) selekcji kandydatów przez Komisję na podstawie dotychczasowych osiągnięć i wyników w nauce przedstawionych w złożonych dokumentach;

c) 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.

20. Language of interview (język rozmowy kwalifikacyjnej):

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

21. Criteria for evaluation of candidates:

a) Stage One

The Committee analyses the application documents in terms of the candidate's competencies and their alignment with the requirements specified in the recruitment program. Candidates who obtain at least 40% of the maximum number of points in the first stage qualify for the second stage.

Evaluation criteria:

- education in the subject areas listed in the application guidelines; (scoring scale: 0.0 – 2.0 points);
- experience in the subject areas listed in the recruitment program (scoring scale: 0.0 – 2.0 points);
- other competencies specified in the recruitment program (scoring scale: 0.0 – 1.0 points).

b) Stage Two

The Committee evaluates the candidates' previous achievements and their academic performance based on the submitted documents. Candidates with the 5 best scores, not lower than 60% of the maximum number of points, will qualify for the third stage;

- results obtained during studies (scoring scale: 0.0 – 4.0 points)
- competencies specified in the recruitment programme (scoring scale: 0.0 – 3.0 points)
- co-authorship of a scientific publication (depending on the role in the publication) (scoring scale: 0.0 – 1.0 point)
- other achievements, e.g., awards, active conference attendance, honourable mentions, scholarships, domestic and foreign internships, voluntary work, popularisation of science (scoring scale: 0.0 – 2.0 points)

c) Stage Three:

When determining the results of the interview, the Committee takes into account:

- the degree of understanding of one's own work; the ability to interpret the results obtained; the understanding of the methods used, knowledge in the field related
- to the topic of the submitted work (a scale of the evaluation: 0 - 10 points);

- knowledge in the subject matter listed 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

Komisja dokonuje, analizy dokumentów aplikacyjnych pod względem dopasowania kompetencji kandydata do wymagań określonych w programie rekrutacyjnym. Do drugiego etapu kwalifikują się kandydaci, którzy w etapie pierwszym zdobyli co najmniej 40% maksymalnej liczby punktów.

Kryteria oceny:

- wykształcenie w tematyce wymienionej w programie rekrutacyjnym; (skala oceny 0,0 - 2,0 pkt.)
- doświadczenie w tematyce wymienionej w programie rekrutacyjnym (skala oceny 0,0 - 2,0 pkt.)
- inne kompetencje określone w programie rekrutacyjnym (skala oceny 0,0 - 1,0 pkt.)

b) Etap drugi

Komisja ocenia dotychczasowe osiągnięcia kandydatów oraz ich wyniki w nauce na podstawie złożonych dokumentów. Do trzeciego etapu zakwalifikowane zostaną osoby, które uzyskały 5 najlepszych wyników, nie mniejszych niż 60% maksymalnej liczby punktów.

Kryteria oceny:

- wyniki uzyskane w trakcie kształcenia (skala oceny 0,0 - 4,0 pkt.)
- kompetencje określone w programie rekrutacyjnym (skala oceny 0,0 - 3,0 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, aktywny udział w konferencji, wyróżnienia, stypendia, staże krajowe i zagraniczne, wolontariat, popularyzacja nauki (skala oceny 0,0 – 2,0 pkt.)

b) Etap trzeci:

Przy ustalaniu wyników rozmowy kwalifikacyjnej Komisja bierze pod uwagę:

- 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.).

22. For additional information please contact:

- formal issues: phdschoolrecruitment@ibb.waw.pl (Doctoral School Secretariat);
- 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: phdschoolrecruitment@ibb.waw.pl (Biuro ds. doktoranckich);
- pytania dotyczące planowanych badań: promotor (przed złożeniem dokumentów **zachęcamy do kontaktu z promotorem** w celu uzyskania dodatkowych informacji na temat planowanych badań)

23. Legal basis: https://ibbpan.bip.gov.pl/rekrutacja/zasady-i-warunki-rekrutacji-w-szkoly-doktorskiej-ibb-pan-od-2026-2027.html

Podstawa prawna: https://ibbpan.bip.gov.pl/rekrutacja/zasady-i-warunki-rekrutacji-w-szkoly-doktorskiej-ibb-pan-od-2026-2027.html

24. Source of Scholarship:

Źródło finansowania stypendium:

- **Grant number** G-359 (assigned by the Research Management Unit), e.g., NCN, NCBR contract number, etc. (Nr grantu (nadany przez Dział Wsparcia Badań Naukowy) nr umowy NCN, NCBiR itp.)

25. Tagi (Tags): (English; up to 5)