Zgłoszenie tematu badawczego realizowanego w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej w dyscyplinie nauki farmaceutyczne

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	Dr hab. Rafał Kurczab, Instytut Farmakologii im. Jerzego Maja Polskiej Akademii Nauk, kurczab@if-pan.krakow.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	–
3	Temat pracy badawczej + krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	**Opracowanie nowej funkcji oceniającej wyniki dokowania molekularnego bazującej na eksperymentalnej gęstości elektronowej** Celem projektu jest opracowanie nowej funkcji oceniającej kompleksy ligand-receptor otrzymane przy użyciu dostępnych algorytmów do dokowania molekularnego. Nowa funkcja oceniająca będzie wykorzystywać informacje jakie zostaną wyekstrahowane z eksperymentalnie wyznaczonej gęstości elektronowej ligandów i białek (otrzymanych metodami wysokorozdzielczymi X-ray). Dane eksperymentalne będą dostarczane przez współpracowników z Francji (grupa BioMod z laboratorium CRM2, Université de Lorraine), którzy tworzą jeden z najbardziej zaawansowanych na świecie zespołów zajmujących się badaniem struktury elektronowej różnego rodzaju materiałów. Z grupą francuską oraz Zakładem Krystalografii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza otrzymałem grant Polonium 2020 na zaplanowane w ramach doktoratu działania (wizyty w ośrodkach we Francji i Poznaniu). Otrzymany rozkład gęstości elektronowej zostanie wykorzystany do wyprowadzenia odpowiednio dobranego zbioru deskryptorów oddziaływań międzycząsteczkowych, takich jak energie elektrostatyczne, indukowane momenty elektryczne, potencjał elektrostatyczny lub wielkości związane z topologią gęstości elektronów lub potencjału elektrostatycznego. Na tej podstawie zbudowana zostanie nowa reprezentacja (model predykcyjny z użyciem uczenia maszynowego) lub funkcja (MLR, lub regresja SVM). Nowo utworzona funkcja oceniająca będzie testowana na wszystkich wykrystalizowanych receptorach z rodziny GPCR.
4	Wymagania w stosunku do kandydata	Dyplom ukończenia studiów wyższych w dziedzinie chemii, bioinformatyki. Znajomość języka angielskiego na poziomie umożliwiającym swobodną komunikację tak w mowie jak i w piśmie, znajomość metod modelowania molekularnego, chemoinformatycznych. Dodatkowym atutem będzie– podstawowa wiedza w zakresie uczenia maszynowego oraz podstaw programowania w języku R i/lub python.
5	Wskazanie źródeł finansowania	Działalność Statutowa Zakładu Chemii Leków IF PAN, planowany grant OPUS NCN (zespołowy) oraz PRELUDIUM NCN (własny dla doktoranta), środki zaplanowane w ramach projektu POLONIUM 2020 na wizyty studyjne

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Dr hab. Rafał Kurczab, Maj Institute of Pharmacology Polish Academy of Sciences, kurczab@if-pan.krakow.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	–
3	Research subject Title Short description, up to 250 words	**New experimental electron density-based scoring functions for molecular docking** The aim of the project is to develop a new scoring function to evaluate ligand-receptor complexes obtained using available molecular docking algorithms. The new scoring function will use the information that will be extracted from the experimentally determined electron density of ligands and proteins (obtained by high resolution X-ray methods). The experimental data will be provided by French collaborators (BioMod group

		from CRM2 laboratory, Université de Lorraine), who form one of the most advanced teams in the world for the study of the electron structure of various materials. With the French group and the Department of Crystallography at the Adam Mickiewicz University, I received a Polonium 2020 grant for the planned PhD activities (visits to centers in France and Poland). The obtained distribution of electron density will be used to derive an appropriately selected set of descriptors of intermolecular interactions, such as electrostatic energies, induced electrical moments, electrostatic potential or quantities related to electron density topology or electrostatic potential. On this basis, a new representation (prediction model using machine learning) or function (MLR, or SVM regression) will be built. The newly created evaluation function will be tested on various targets, among others all crystallized receptors of the GPCR family.
4	Additional requirements to the candidate	MSc in chemistry, bioinformatics. English language at a level enabling free communication both in speech and writing, knowledge of molecular modeling methods, cheminformatics. Additional advantage will be basic knowledge of machine learning and programming in R and/or Python.
5	Sources of financing	Statutory funds of the Department of Medicinal Chemistry, Maj Institute of Pharmacology Polish Academy of Sciences, NCN grants (planed: OPUS, PRELUDIUM; and obtained: POLONIUM 2020).