

**Zgłoszenie zagadnienia badawczego realizowanego
w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej
w dyscyplinie nauki chemiczne
w Jednostce: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN**

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	<p>Prof. dr hab. Barbara Jachimska Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk, barbara.jachimska@ikifp.edu.pl</p>
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	<p>Prof. Izabella Brand Carl von Ossietzky University of Oldenburg Department of Chemistry e-mail: izabella.brand@uni-oldeburg.de</p>
3	Temat zagadnienia badawczego+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	<p>Molekularne aspekty stabilności konformacyjnej białek w kontekście tworzenia superstruktur amyloidowych</p> <p>Agregacja białek ma zasadnicze znaczenie w etiologii chorób neurodegeneracyjnych. Zrozumienie, w jaki sposób rozpuszczalne białka tworzą amyloidy i uruchamiają szlak toksyczności komórkowej, stanowi podstawę opracowania skutecznych terapii w chorobie Alzheimera, Parkinsona czy Creutzfeldta-Jakoba. Należy podkreślić, że mechanizm, kinetyka zmian strukturalnych oraz siła napędowa procesu nieprawidłowego fałdowania białek jest nadal niewystarczająco poznana. W celu zidentyfikowania zmian strukturalnych na złożonej ścieżce procesu niewłaściwego zwijania białka zastosowane zostaną uzupełniające się metody bioanalityczne <i>in situ</i> oraz symulacje dynamiki molekularnej (MD). Pozwoli to na kontrolę zmian w obrębie struktury białka na poziomie molekularnym, a tym samym identyfikację kluczowych elementów inicjalizujących kaskadę zmian prowadzących finalnie do powstawania chiralnych superstruktur.</p> <p>Ze względu na interdyscyplinarny charakter projektu będzie on realizowany we współpracy prof. I. Brand z Uniwersytetu w Oldenburgu w ramach umowy o wspólnym promotorstwie – cotutelle (podwójny doktorat w jednostce polskiej i</p>

		niemieckiej).
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	Magisterium z chemii, biochemii, biofizyki lub inżynierii materiałowej. Plusem będzie wcześniejsza znajomość zaawansowanych metod analitycznych lub doświadczenie w technikach obliczeniowych.
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	(dodatkowe finansowane NCN, NAWA, Erasmus +)

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Prof. Barbara Jachimska Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences, barbara.jachimska@ikifp.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	Prof. Izabella Brand Carl von Ossietzky University of Oldenburg Department of Chemistry e-mail: izabella.brand@uni-oldeburg.de
3	Research subject Title Short description, up to 250 words	Molecular aspects of protein conformational stability in the context of the formation of amyloid superstructures Protein aggregation is essential in the etiology of neurodegenerative diseases. Understanding how soluble proteins form amyloids and trigger the cellular toxicity pathway is the basis for developing effective therapies for Alzheimer's, Parkinson's, and Creutzfeldt-Jakob diseases. It should be emphasized that the mechanism, kinetics of structural changes, and the driving force of the protein misfolding process are still insufficiently understood. Complementary in situ bioanalytical methods and molecular dynamics (MD) simulations will be used to identify structural changes in the complex pathway of protein misfolding. This will allow for the control of changes within the protein structure at the molecular level, and thus the identification of critical elements that initiate the cascade of changes that ultimately lead to the formation of chiral superstructures. Due to the interdisciplinary character of the project will be implemented in cooperation with prof. I. Brand University of Oldenburg under the agreement on joint supervision - cotutelle (double doctorate in the Polish and German unit).

4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	Master's degree in chemistry, biochemistry, biophysics, or materials engineering. Prior knowledge of advanced analytical methods or experience in computation or theoretical modeling will be an advantage.
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	(additional funded NCN, NAWA, Erasmus +)