

Zgłoszenie tematu badawczego realizowanego w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, dyscyplina nauki chemiczne

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	<p>Prof. dr hab. Barbara Jachimska</p> <p>Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk, e-mail: barbara.jachimska@ikifp.edu.pl</p>
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	
3	Temat pracy badawczej + 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 z ośrodkiem zagranicznym w ramach</p>

		umowy o wspólnym promotorstwie – cotutelle (podwójny doktorat).
4	Wymagania w stosunku do kandydata	Magisterium z chemii, biochemii, biofizyki lub inżynierii materiałowej. Plusem będzie wcześniejsza znajomość zaawansowanych metod analitycznych lub doświadczenie w technikach obliczeniowych.
5	Wskazanie źródeł finansowania	IKiFP PAN (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, e-mail: barbara.jachimska@ikifp.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	
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 project's interdisciplinary nature, it will be carried out in cooperation with a foreign centre under a joint supervisory agreement—cotutelle (double doctorate).
4	Additional requirements to the candidate	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.



K R A K O W S K A
INTERDYSCYPLINARNA
SZKOŁA DOKTORSKA