



Doktorand/-in (d) (7087)

Institut für Wirkstoffentwicklung

in Teilzeit 20 Std./Woche, befristet auf 3 Jahre (mit Möglichkeit der Verlängerung)

Haustarifvertrag des UKL EG 13

Eintrittstermin: zum nächstmöglichen Zeitpunkt

Die Medizinische Fakultät der Universität Leipzig gehört mit ihrer über 600jährigen Tradition zu den größten Forschungseinrichtungen der Region Leipzig. Mit über 1.200 Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern ist sie die größte von insgesamt 14 Fakultäten der Universität Leipzig und dient als Ausbildungsstätte für ca. 3.200 Studierende der Human- und Zahnmedizin sowie der Pharmazie.

Das Institut für Wirkstoffentwicklung an der Universität Leipzig integriert innovative, computergestützte Ansätze des Wirkstoffdesigns mit experimentellen Validierungs- und Optimierungsstrategien. Unsere Wissenschaftler entwickeln und verwenden Algorithmen der ROSETTA-Software (<https://www.rosettacommons.org>) und weitere bioinformatische Methoden, um niedermolekulare Medikamente sowie biologische Therapeutika wie Impfstoffe und Antikörper zu entwickeln und ihre Funktionsweise zu charakterisieren. Um computergestütztes, strukturbasiertes Wirkstoffdesign zu ermöglichen, bestimmen wir auch die Strukturen von wichtigen humanen und pathogenen Proteinen, oft mit Hilfe von spektroskopischen Methoden wie NMR- und EPR-Spektroskopie. Das Institut für Wirkstoffentwicklung ist nicht nur ein Zentrum für wissenschaftliches Hochleistungsrechnen, sondern auch in der Lage, Wirkstoffkandidaten selbst herzustellen, zu charakterisieren und zu testen. Zu diesem Zweck ist das Institut mit chemischen Syntheselaboren ausgestattet und hat Zugang zu modernen Geräten für EPR, NMR und Röntgenkristallstrukturanalyse, um die Interaktionen von Wirkstoffen mit ihren biologischen Zielmolekülen zu charakterisieren. Das Institut für Wirkstoffentwicklung kollaboriert mit Wissenschaftlern in Leipzig und weltweit, um Wirkstoffdesign und biomolekulare Strukturaufklärung auf dringende Herausforderungen der menschlichen Gesundheit anzuwenden, darunter Krebs, Infektionskrankheiten wie Influenza oder COVID-19, Erkrankungen des Gehirns wie Schizophrenie oder Suchtleiden, Herzrhythmusstörungen und Fettleibigkeit.

Die Aufgaben

Projektbeschreibung:

Ionenkanäle sind eine Hauptklasse von Membranproteinen und wichtige Wirkstofftargets. Sie spielen eine essentielle Rolle für viele biologische Prozesse, wie die Erregungsleitung in Neuronen oder die Kontraktion von Muskelzellen. Moleküldynamik (MD)-Simulationen, die die Wechselwirkung zwischen Atomen und die räumliche Bewegung von Molekülen berechnen, sind zu einem unverzichtbaren Werkzeug geworden, um die Dynamik und strukturellen Eigenschaften von Ionenkanälen ??und die Wirkung von Modulatoren wie Lipiden, Medikamenten oder Aminosäuremutationen darauf zu untersuchen. Das Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung und Anwendung von fortgeschrittenen MD-Simulationsprotokollen auf Kanäle der KV7-Familie. KV7-Kanäle erfüllen kritische Funktionen im Herzen und im Nervensystem und haben eine hohe Relevanz als Targets für die pharmazeutische Therapie von Herzrhythmusstörungen und Epilepsie.

Geplante Projektinhalte:

- Simulation des Übergangspfades zwischen geschlossenen und offenen Kanalzuständen durch die Swarm-of-Trajectories-Methode
- Berechnung von freien Energieänderungen infolge von Aminosäuremutationen
- Identifizierung allosterischer Signalwege und deren Modulation durch Cofaktoren mittels Netzwerkanalyse
- Coarse-Grained-Simulationen zur Untersuchung von Ionenkanal-Protein-Interaktionen

Ihr Profil

- Master oder gleichwertiger Hochschulabschluss in Bioinformatik, Biochemie, Chemie, Physik oder einer verwandten Disziplin
- großes Interesse an Strukturbiologie, bioinformatischen Algorithmen und Programmierung
- Erfahrung im wissenschaftlichen Rechnen mit Python, R, oder einer anderen Programmiersprache
- Kenntnisse von bioinformatischen Algorithmen und computerchemischen Programmen (z.B. Rosetta, Amber oder Gromacs) oder Methoden des maschinellen Lernens sind von Vorteil.
- Bereitschaft in einem interdisziplinären Team und an Kollaborationen mit internationalen Wissenschaftlern mitzuarbeiten

Über uns - die Medizinische Fakultät

Die Medizinische Fakultät der Universität Leipzig gehört mit ihrer über 600jährigen Tradition zu den größten Forschungseinrichtungen der Region Leipzig. Mit über 1.200 Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern ist sie die größte von insgesamt 14 Fakultäten der Universität Leipzig und dient als Ausbildungsstätte für ca. 3.200 Studierende der Human- und Zahnmedizin sowie der Pharmazie.

Alle Bewerbungen sind unter Angabe der Ausschreibungsnummer bis spätestens **08.10.2021** schriftlich einzureichen und an den Bereich Personal der Medizinischen Fakultät der Universität Leipzig, Liebigstraße 27, Haus E, 04103 Leipzig, zu richten. Wir bitten darum, keine Bewerbungsmappen zu verwenden, sondern ausschließlich Kopien einzureichen, da Ihre Unterlagen nach Abschluss des Bewerbungsverfahrens datenschutzgerecht vernichtet werden.

Mit dem Absenden Ihrer Bewerbung willigen Sie ein, dass Ihre im Rahmen der Bewerbung bereitgestellten personenbezogenen Daten zum Zweck der Bewerbung verarbeitet werden. Die Informationen zur Erhebung und Verarbeitung personenbezogener Daten für Bewerber finden Sie [hier](#).

Ihr Ansprechpartner

Auskünfte zum Bewerbungsverfahren erteilt **Dr. Georg Künze** unter 0341/ 97-25726 bzw. georg.kuenze@uni-leipzig.de.

Schwerbehinderte Bewerber/-innen werden bei gleicher Eignung bevorzugt berücksichtigt. Bitte fügen Sie Ihrer Bewerbung entsprechende Nachweise bei.