



Encontra-se aberto concurso para a atribuição de uma Bolsa de investigação pós doutoral (**Referência REQUIMTE 2022-51**), na Unidade de Ciências Biomoleculares Aplicadas - UIDB/04378/2020, com o apoio financeiro da FCT/MCTES através de fundos nacionais, na instituição REQUIMTE, nas seguintes condições:

Área Científica: Química

Requisitos de admissão: Doutorados em Química, Bioquímica, Química Medicinal, Bioinformática, Cheminformática ou áreas afins, que tenham obtido este grau há menos de três anos. Será dada preferência a candidatos com experiência comprovada em Descoberta de Drogas Assistida por Computador e em Simulações de Dinâmica Molecular. Experiência em programação (ex. Python) e experiência no desenvolvimento pipeline workflows integrando diferentes métodos *in silico* em projetos de descoberta de medicamentos auxiliados por computador é altamente desejável (RDKit, KNIME, etc), bem como um bom conhecimento de Computação de Alto Desempenho (HPC).

Plano de trabalhos: O objetivo principal é desenvolver e otimizar fluxos de trabalho para integrar diferentes métodos *in silico* para aplicação em projetos de descoberta de medicamentos auxiliados por computador, incluindo:

- (1) aquisição de dados de moléculas de bancos de dados públicos;
- (2) filtrar conjuntos de moléculas por ADME e outras propriedades;
- (3) criação e otimização das suas estruturas 3D;
- (4) preparação de bibliotecas 3D apropriadas para triagem virtual baseada em estrutura;
- (5) seleção e preparação de estruturas 3D do alvo ou de alvos múltiplos;
- (6) incorporação de diferentes ferramentas de docking independentes e funções de scoring no workflow;
- (7) criação de conjuntos de validação específicos de alvos e otimização automatizada de protocolos específicos para alvos e sua aplicação para as bibliotecas de compostos 3D desejados;

(8) seleção de top hits, parametrização de campo de força dos compostos e simulações de dinâmica molecular dos complexos alvo-ligando correspondentes (com AMBER, CHARMM ou GROMACS);

(9) análise de propriedades de simulação de dinâmica molecular e cálculos de energia livre (FEP, TI, MM-PBSA).

Legislação e regulamentação aplicável:

Estatuto do Bolseiro de Investigação Científica, aprovado pela Lei nº 40/2004, de 18 de agosto e republicado pelo DL 123/2019, de 28 de agosto e Regulamento de Bolsas e Investigação da Fundação para a Ciência e a Tecnologia em vigor (<https://www.fct.pt/apoios/bolsas/regulamento.phtml.pt>).

Local de trabalho: O trabalho será desenvolvido na Faculdade de Medicina da Universidade do Porto, sob a orientação científica de Sérgio Filipe Sousa.

Duração da(s) bolsa(s): A bolsa terá a duração de 6 meses, com início previsto para Dezembro de 2022. O contrato de bolsa poderá ser renovado por iguais períodos até à duração máxima de 3 anos.

Valor do subsídio de manutenção mensal: O montante da bolsa corresponde a 1.686 Euros, conforme tabela de valores das bolsas atribuídas directamente pela FCT, I.P. no País (<http://www.fct.pt/apoios/bolsas/valores>), sendo o respetivo pagamento efetuado mensalmente por transferência bancária.

Métodos de selecção: A selecção dos candidatos será efetuada de acordo com os seguintes critérios:

- i) 20%, coerência científica global do CV, incluindo diversidade e qualidade dos indicadores científicos, incluindo artigos relevantes publicados e publicados nas áreas específicas do edital;
- ii) 25%, experiência na criação de fluxos de dados ou pipelines em descoberta de medicamentos assistida por computador com softwares como o KNIME ou alternativas similares;
- iii) 25%, experiência comprovada na criação de bases de dados 3D, aplicações de quimioinformática e docking/virtual screening;
- iv) 20%, experiência comprovada em simulações de dinâmica molecular de sistemas biomoleculares com campos de força clássicos (AMBER, CHARMM, GROMACS, etc);
- v) 10%, experiência em computação de alto desempenho, gerenciamento de cluster e otimização de código.

No caso de candidatos admitidos cuja avaliação não difira em mais de 10% da classificação obtida pelo candidato mais bem posicionado, o júri entrevistará esses candidatos, sendo a entrevista responsável por 50% da classificação final.

Note-se que o júri se reserva o direito de não atribuir a bolsa atual caso os resultados da avaliação dos candidatos e a sua adequação aos objetivos do projeto não sejam satisfatórios, ou seja, candidatos com classificação final inferior a 50%.

Composição do Júri de Seleção: Dr. Sérgio Filipe Sousa (presidente do júri de seleção), Professor Dr. Pedro Jorge Araújo Alves da Silva (vogal), Professor Dr. André Melo (vogal) e Dr. Nuno Manuel Ferreira de Sousa de Azevedo Cerqueira (vogal suplente).

Forma de publicitação/notificação dos resultados: Os resultados finais da avaliação serão publicitados, através de afixação nas instalações da Instituição, sendo o candidato(a) aprovado(a) notificado através de email.

Prazo de candidatura: O concurso encontra-se aberto no período de **21/10/2022 a 21/11/2022**.

Forma de apresentação das candidaturas: As candidaturas devem ser formalizadas, obrigatoriamente, através do envio de carta de candidatura acompanhada dos seguintes documentos: Curriculum Vitae, certificado de habilitações e outros documentos comprovativos considerados relevantes.

As candidaturas devem ser formalizadas através de email enviado para *bolsas@iceta.up.pt*, contendo obrigatoriamente em assunto a referência a que se candidata (**Referência REQUIMTE 2022-51**), sob pena de exclusão da candidatura.