



Encontra-se aberto concurso para a atribuição de uma Bolsa de investigação pós doutoral (**Referência REQUIMTE 2023-12**), 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).

A entidade de acolhimento onde foram desenvolvidos os trabalhos de investigação que conduziram à atribuição do grau de doutor do candidato tem de ser distinta da Unidade de Ciências Biomoleculares Aplicadas.

Caso o grau de doutor tenha sido conferido por instituição de ensino superior estrangeira, o mesmo tem de obedecer ao disposto no Decreto-Lei n.º 66/2018, de 16 de Agosto, devendo quaisquer formalidades aí estabelecidas estar cumpridas até à data da assinatura do contrato de bolsa.

**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 realizado na Faculdade de Medicina da Universidade do Porto no Laboratório de Investigação em Simulações Biomoleculares (BioSIM), sob orientação de Sérgio Filipe Sousa. O BioSIM é um grupo de investigação que trabalha na interface entre os métodos teóricos e experimentais, aplicando e desenvolvendo ferramentas computacionais na Descoberta de novos fármacos, Catálise Enzimática e Reconhecimento Molecular. Combina Métodos QM/MM, Mecânica Quântica, Dinâmica Molecular, Docking, Rastreamento Virtual e métodos de Perturbação de Energia Livre, sempre em estreita ligação com a componente experimental. Tem também estado envolvido no desenvolvimento de diversas aplicações informáticas e bases de dados científicas que têm vindo a ser disponibilizadas à comunidade científica. Mais informações podem ser encontradas no site do grupo ([www.biosim.pt](http://www.biosim.pt)).

**Duração da(s) bolsa(s):** A bolsa terá a duração de 6 meses, com início previsto para Março de 2023. 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 Selecção:** Dr. Sérgio Filipe Sousa (presidente do júri de selecção), 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 **07/02/2023 a 20/02/2023**.

**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](mailto:bolsas@iceta.up.pt), contendo obrigatoriamente em assunto a referência a que se candidata (**Referência REQUIMTE 2023-12**), sob pena de exclusão da candidatura.