



Encontra-se aberto concurso para a atribuição de uma Bolsa de Investigação (**Referência REQUIMTE 2023-28**), 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: Mestre na área de Química, Bioquímica ou áreas afins e a frequentar um programa doutoral ou inscrição/frequência de um curso não conferente a grau ministrado por uma instituição de ensino superior em articulação com uma unidade de I&D na mesma área. Experiência em modelação molecular, virtual screening estrutural e dinâmica molecular de sistemas biológicos.

Caso o grau de mestre 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 a otimização de protocolos de virtual screening a identificação de inibidores de alvos proteicos associados com inibição de formação de biofilmes em bactérias. O trabalho irá envolver:

- (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 de alvos implicados na formação de biofilmes;

(6) 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;

(7) seleção de top hits, parametrização de campo de força dos compostos e simulações de dinâmica molecular dos complexos alvo-ligando correspondentes;

(8) 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, Rastreio 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).

Duração da(s) bolsa(s): A bolsa terá a duração de 3 meses, eventualmente renovável por iguais períodos, com início previsto para Maio de 2023.

Valor do subsídio de manutenção mensal: O montante da bolsa corresponde a 1.144,64 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 seleção: A seleção dos candidatos será efetuada de acordo com os seguintes critérios:

- i) 50%, 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 comprovada na criação de bases de dados 3D, aplicações de quimioinformática e docking/virtual screening;
- iv) 25%, experiência comprovada em simulações de dinâmica molecular de sistemas biomoleculares com campos de força clássicos (AMBER, CHARMM, GROMACS, etc);

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)
Dr. Nuno Manuel Ferreira de Sousa de Azevedo Cerqueira (vogal suplente).

Forma de publicação/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.

Candidatura:

O concurso encontra-se aberto no período de **06/04/2023 a 20/04/2023**

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 2023-28**), acompanhada dos seguintes documentos em formato PDF: Curriculum Vitae, carta de motivação, certificado de habilitações e outros documentos considerados relevantes.

More information: <https://www.requimte.com/>