



Encontra-se aberto concurso para a atribuição de uma Bolsa de Investigação (**Referência REQUIMTE 2023-63**) no Laboratório Associado para a Química Verde – UIDP/50006/2020, com o apoio financeiro da FCT/MCTES através de fundos nacionais, na instituição REQUIMTE, nas seguintes condições:

Área Científica: Química Computacional

Requisitos de admissão: Mestre na área de Química, Bioquímica ou áreas afins e a frequentar um programa doutoral na área 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 aplicação de ferramentas de química/bioquímica computacional para entender o mecanismo de transferência de electrões em filamentos de proteínas de *G. sulfurreducens* e para desenhar racionalmente filamentos mutantes com maior eficiência e funcionalidade.

O trabalho envolverá:

- (1) Identificação de todas as estruturas experimentais disponíveis para filamentos de proteínas de *G. sulfurreducens*;
- (2) Criação de modelos 3D em nível atômico de diferentes comprimentos para os diferentes filamentos de proteínas;

- 3) Posicionamento dos modelos em bicamadas lipídicas;
- (4) Refinamento da estrutura dos modelos por meio de simulações de dinâmica molecular;
- (5) Criação de modelos QM/MM dos diferentes filamentos e otimização de protocolos computacionais para o estudo da transferência electrónica ao longo da estrutura do filamento.

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://former.fct.pt/apoios/bolsas/regulamentos.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 6 meses, eventualmente renovável por iguais períodos, com início previsto para Janeiro de 2024.

Valor do subsídio de manutenção mensal: O montante da bolsa corresponde a 1.199,64 Euros, conforme tabela de valores das bolsas atribuídas directamente pela FCT, I.P. no País (https://www.fct.pt/wp-content/uploads/2023/02/Tabela-de-Valores-SMM_2023.pdf), 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 em métodos de modelação molecular, como docking, virtual screening e mecânica quântica;
- 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 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.

Candidatura:

O concurso encontra-se aberto no período de **09/11/2023 a 22/11/2023**.

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 2023-63**), 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/>

