

CHAMADA PÚBLICA PARA BOLSAS PCI/CNPq PROGRAMA DE CAPACITAÇÃO INSTITUCIONAL DO LNCC

O Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) disponibiliza, através da Chamada Pública Número 02/2025, uma bolsa do Programa de Capacitação Institucional (PCI) no valor de R\$5.200 (PCI-DA), para início a partir de Junho de 2025 e vigência de até 60 meses (5 anos), visando a pesquisa científica na área de **Busca de Novas Substâncias Ativas contra Alvos Terapêuticos de Relevância Clínica por Modelagem Molecular**.

Formação necessária: O(a) candidato(a) deve ter doutorado, com um mínimo de dois anos de experiência após a obtenção do doutorado, nas áreas de Farmácia, Química, Física e áreas afins, com experiência em Modelagem Molecular, que esteja interessado(a) em realizar atividades em pesquisa científica na descoberta de substâncias ativas contra alvos terapêuticos de relevância clínica, devendo possuir conhecimentos nas seguintes áreas:

- Conhecimento de técnicas computacionais de Modelagem Molecular para planejamento de substâncias ativas baseadas na estrutura do receptor
- Conhecimento de Química Medicinal e Farmacêutica
- Experiência em técnicas de modelagem molecular de receptores não-proteicos (e.g., ácidos nucleicos)
- Experiência em ancoramento molecular com metodologias estado-da-arte (e.g., DockThor, Glide, GOLD, GNINA)
- Experiência na construção e preparação de complexos receptor-ligante
- Experiência em desenvolvimento de scripts nas linguagens Python e Shell
- Experiência com ambiente Linux
- Desejável experiência com metodologias de desenho de fármacos de novo usando modelos generativos
- Desejável familiaridade com linguagem de programação C++

Objetivo: O objetivo do trabalho envolve a modelagem computacional dos receptores considerados como alvos terapêuticos utilizando técnicas como modelagem comparativa e livres de molde, e a identificação de compostos ativos utilizando as técnicas de ancoramento molecular e triagem virtual em larga escala. Dentre as atividades previstas, está a construção e preparação de conjuntos de complexos receptor-ligante para serem utilizados na validação das metodologias e a construção de modelos de aprendizagem de máquina para predição de afinidade de ligação em alvos específicos. O projeto será desenvolvido presencialmente no Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), localizado em Petrópolis - RJ.

O(A) candidato(a) deve atender a todas as normas do Programa PCI (Bolsa nível PCI-DA) do MCTI, conforme descrito na RN-026/2018 do CNPq (e suas atualizações), disponível em:

http://www.cnpq.br/web/guest/view/-/journal_content/56_INSTANCE_0oED/10157/6305216

Regime de trabalho: 40 horas semanais (dedicação exclusiva).

Admissão e Nota de corte: Os(as) candidatos(as) receberão notas em a) curriculum vitae, b) plano de trabalho e c) adequação do perfil do(a) candidato(a) à descrição deste edital. Tais notas serão agregadas em uma nota final usando a expressão $ax0,35+bx0,3+cx0,35$. Serão desclassificados os(as) candidatos(as) cuja nota final esteja abaixo da nota 7,0 (sete).

Critério de desempate: Casos de empate não resolvidos pela Comissão de Avaliação serão desempatados pela idade dos candidatos, estando o(a) mais jovem à frente do(a) mais idoso.

Interessados(as) devem enviar e-mail até 23:59h do dia 17/04/2024 para: pci@lncc.br, contendo:

- No título da mensagem, o termo “Chamada 02/2025 – PCI – Nome do(a) Candidato(a) – Busca de Novas Substâncias Ativas contra Alvos Terapêuticos de Relevância Clínica por Modelagem Molecular;
- Currículo Lattes atualizado em formato PDF;
- Uma breve descrição do tema de pesquisa, principais resultados obtidos e indicação dos 5 principais artigos;
- Um projeto sucinto (2 páginas).
- Formulário de inscrição para bolsa PCI/LNCC preenchido, em arquivo formato Word ou PDF, disponível em:
<https://www.gov.br/lncc/pt-br/aceso-a-informacao/acoes-e-programas/programa-de-capacitacao-institucional/pci-programa-de-capacitacao-institucional-lncc-mcti/formulario-de-inscricaooci2023-2.pdf>