

## 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 02/2026, uma bolsa do Programa de Capacitação Institucional (PCI) no valor de R\$ 4.160,00 (PCI-DB), para início a partir de junho de 2026 e vigência de até 60 meses (5 anos), visando a pesquisa científica na área de **Química Computacional, Modelagem Molecular e Bioinorgânica**.

**Formação necessária:** O(a) candidato(a) deve ter Mestrado ou Doutorado em química ou áreas afins àquela do edital, bem como experiência em projetos de pesquisa e desenvolvimento nas seguintes áreas:

- Cálculos de Estrutura Eletrônica: Domínio do software ORCA para otimização de geometria, cálculos de frequências vibracionais e análises populacionais;
- Métodos de Teoria do Funcional da Densidade (DFT): Experiência sólida na aplicação de funcionais de densidade e correções relativísticas para metais de transição;
- Parametrização de Campos de Força: Experiência técnica na derivação de parâmetros intra e intermoleculares (constantes de força e cargas atômicas) para o campo de força MMFF94 e/ou AMBER;
- Desejável conhecimento de simulação por Dinâmica Molecular;
- Química de Sistemas Complexos: Conhecimento no tratamento computacional de compostos de Platina (Pt), Boro (B), Cobre (Cu) e complexos organometálicos;

**Objetivo:** O objetivo deste projeto de pesquisa é expandir a capacidade preditiva de ferramentas de modelagem molecular e simulação clássica para o desenho racional de novos fármacos antineoplásicos, por meio dos seguintes tópicos:

- Desenvolvimento de Parâmetros: Obtenção de parâmetros acurados para moléculas contendo Pt e B, integrando cálculos ab initio (HF, MP2) e DFT para superar a ausência de parâmetros nativos em campos de força convencionais;
- Aprimoramento do Docking Molecular: Implementação e validação de novos parâmetros na plataforma DockThor, permitindo a triagem virtual em larga escala de compostos metalo-fármacos e contendo átomos de boro;
- Uso de simulações de Dinâmica Molecular (DM) para testes e validação dos parâmetros de carga em sistemas de interesse biológico;
- Uso de métodos de machine learning para o treinamento dos dados de cálculos de estrutura eletrônica e dinâmica molecular.

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-DB) 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](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  $a \times 0,35 + b \times 0,3 + c \times 0,35$ . 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 17/04/2026 para:** [pci@lncc.br](mailto:pci@lncc.br), contendo:

- No título da mensagem, o termo “Chamada 02/2026 – PCI – Nome do(a) Candidato(a) – Química Computacional, Modelagem Molecular e Bioinorgânica;
- 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-inscricaoopci2023-2.pdf>