

## **Chamada para Bolsa de Iniciação Científica - IC Faperj**

**Orientadoras:** Isabella Alvim Guedes (LNCC)

Camila Silva de Magalhães (UFRJ - Campus Caxias)

**Título do Projeto:** Desenvolvimento e Aplicação de Métodos de Inteligência Artificial para o Planejamento de Novos Fármacos e de Nanocompostos

**Carga horária semanal:** 20 horas

**Período:** 1 ano

**Data limite para envio da candidatura:** 20/05/2022

Estamos selecionando alunos de graduação nas áreas de biotecnologia, farmácia, biomedicina, química e afins interessados em realizar atividades em pesquisa científica para trabalhar como bolsista PIBIC em um de nossos projetos, recentemente financiado pela Faperj (Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro). O objetivo do trabalho será possibilitar o reconhecimento de moléculas alvo não-proteicas (DNA/RNA, ciclodextrinas, MOFs, dendrímeros) no programa DockThor-VS. A disponibilidade de tempo é um dos requisitos mínimos obrigatórios com horário flexível.

### Requisitos técnicos obrigatórios:

Conhecimento básico de química orgânica.

Conhecimento de programação de computadores (Python ou C++ ou Shell Script)

### Requisitos técnicos desejáveis:

Familiaridade com ambiente Linux;

Conhecimento de banco de dados;

Modelagem molecular (principalmente docking e dinâmica molecular);

Química medicinal;

Inteligência artificial (aprendizado de máquina).

**Contato:**

Os candidatos devem atentar para os requisitos de disponibilidade de tempo e técnicos obrigatórios. Aos interessados favor enviar um e-mail para [isabella@lncc.br](mailto:isabella@lncc.br) (com cópia para [isabella@posgrad.lncc.br](mailto:isabella@posgrad.lncc.br)) utilizando o identificador **[Chamada Faperj]** no campo Assunto e informando o link do seu currículo lattes atualizado no corpo do texto. Está prevista entrevista com a(o) candidata(o) como parte do processo seletivo.

### **Sobre o GMMSB/LNCC:**

O GMMSB (Grupo de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos) é um grupo de pesquisa multidisciplinar do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), unidade de pesquisa vinculada ao Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações (MCTI). Estamos localizados na cidade de Petrópolis, cidade serrana do estado do Rio de Janeiro. Desde 2002, atuamos em projetos relacionados temas em biologia, física, matemática aplicada e computação de alto desempenho. Os principais objetivos do GMMSB são o desenvolvimento e aplicação de métodos, técnicas e algoritmos computacionais no planejamento de fármacos, predição da estrutura de proteínas de interesse terapêutico e cálculos quânticos de propriedades eletrostáticas de macromoléculas biológicas. Somos os desenvolvedores do portal de triagem virtual DockThor-VS (disponível gratuitamente em [www.dockthor.lncc.br](http://www.dockthor.lncc.br)). Atuamos em colaboração com grupos que realizam experimentos de bancada em diversas instituições, como Fiocruz, UFRJ, UFRGS e Unifal.