

Chamada para Bolsa de Pós-Doutorado - Faperj

Supervisores:

Isabella Alvim Guedes (LNCC)
Eduardo Krempser da Silva (Fiocruz)
Laurent Emmanuel Dardenne (LNCC)

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

Carga horária semanal: 40 horas

Período: 1 ano

Data limite para envio da candidatura: 15/06/2022

Estamos selecionando pesquisadores nas áreas de Ciência da Computação, Aprendizagem de Máquina, Modelagem Computacional, Modelagem Molecular e afins que estejam interessados em realizar atividades em pesquisa científica para atuar como bolsista de Pós-doutorado Recém-Doutor 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 o desenvolvimento e implementação de metodologias *de novo* utilizando técnicas de aprendizagem de máquina no programa de triagem virtual DockThor-VS. A disponibilidade de tempo é um dos requisitos mínimos obrigatórios com horário flexível. O projeto será desenvolvido presencialmente no Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), localizado em Petrópolis - RJ.

Requisitos técnicos obrigatórios:

Conhecimento avançado em programação de computadores (C++ e Python);
Experiência com técnicas de aprendizagem de máquina;
Conhecimento básico de química orgânica;
Familiaridade com ambiente Linux.

Requisitos técnicos desejáveis:

Experiência com modelagem molecular (principalmente docking e dinâmica molecular);
Conhecimento em química medicinal.

Contato:

Os candidatos devem atentar para os requisitos de disponibilidade de tempo e técnicos obrigatórios. Os interessados devem enviar um e-mail para isabella@lncc.br (com cópia para isabella@posgrad.lncc.br) utilizando o identificador **[Chamada Faperj - Posdoc]** 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 com 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). Atuamos em colaboração com grupos que realizam experimentos de bancada em diversas instituições, como Fiocruz, UFRJ, UFRGS e Unifal.