

OFERTA:  
**CONTRATO DOCTOR FCI (4 AÑOS)**  
[51.807,13 € / año]

PROYECTO:  
**Aprendizaje Automático para la Aceleración y Optimización de Farmacóforos para el Diseño de Nuevos Medicamentos por Espectroscopía STD NMR**



**Programa Momentum CSIC: Desarrolla tu Talento Digital**

Código Proyecto: MMT24-IIQ-01

IP-proyecto: Dr Jesús Angulo (IIQ-CSIC, Sevilla)

Co-IP proyecto: Dr Gonzalo Jiménez Osés (CIC bioGUNE, Bilbao)

**RESUMEN DEL PROYECTO:** Se combinarán técnicas de IA, espectroscopía STD NMR, y química computacional para acelerar el diseño de fármacos basados en fragmentos. La baja afinidad de los fragmentos de cribado de quimiotecas supone un gran desafío para obtener estructuras 3D y presenta la RMN como la técnica para obtenerlas en dichas condiciones. Los datos de RMN se interpretan mediante modelos 3D y requieren una evaluación precisa del acuerdo del modelo con los experimentos (validación de modelos), y es aquí donde este proyecto desarrollará protocolos de IA y química computacional para aportar soluciones más eficaces. Recientes aportaciones de nuestro grupo de investigación en metodologías digitales para el análisis de interacciones débiles por RMN son: *Anal. Chem.*, 2024, 96, 615 y *J. Med. Chem.*, 2024, en prensa. Ambos trabajos han generado nuevas herramientas digitales para acelerar la caracterización de interacciones débiles: RedMat(<http://redmat.iiq.us-csic.es>) y RedDat(<https://stdrdweb.streamlit.app/>).

**Requisitos:**

1. Doctorado en Química
2. Experiencia pre- y/o posdoctoral en RMN y técnicas de modelización molecular.
3. Experiencia especializada en espectroscopía de RMN de interacciones.
4. Formación/experiencia en programación en python, análisis de datos, y algoritmos de aprendizaje automático supervisado y no supervisado.

**Méritos valorables:**

1. Experiencia en técnicas MD avanzadas.
2. Experiencia en análisis avanzado de STD NMR (CORCEMA-ST, RedMat)
3. Estancia/s postdoctoral/es en el extranjero.
4. Nivel avanzado de inglés (C1 o superior).

**QUÉ SE OFRECE:** El candidato se integrará en el IIQ-CSIC, en Sevilla, en un grupo de investigación reconocido internacionalmente por sus aportaciones al estudio de interacciones ligando-proteína débiles mediante técnicas de STD NMR, y que posee una sólida trayectoria en desarrollo de metodologías híbridas RMN/computación para estudios biomoleculares. El candidato recibirá **una formación equivalente a 270 ECTS**, que incluye formación en herramientas de aprendizaje automático, **3 estancias formativas** en los centros CIC bioGUNE (Bilbao), y Universidad de la Rioja (Logroño), así como la participación en un número de escuelas avanzadas de química computacional y de espectroscopía RMN.

**CONTACTO:** contactar (informalmente), **ANTES DEL 7 DE AGOSTO DE 2024**, con Jesús Angulo:

E-mail: [j.angulo@iiq.csic.es](mailto:j.angulo@iiq.csic.es) (ASUNTO: Momentum MMT24-IIQ-01)

Teléfono: +34 954489566