

Tutor: Carlos Óscar Sorzano Sánchez

Contacto: coss@cnb.csic.es, 915854510

Grupo de investigación: Unidad de Biocomputación del Centro Nac. de Biotecnología, CSIC

Centro: Centro Nac. de Biotecnología, CSIC

Título: Desarrollo de algoritmos de cribado virtual de fármacos

Descripción: La determinación estructural de macromoléculas ha alcanzado un grado de madurez que permite, no solo conocer su arquitectura tridimensional, sino utilizar dicha información para explorar su potencial terapéutico mediante cribado computacional y diseño racional de fármacos. En este contexto, Scipion-Chem surge como un entorno integrado dentro de Scipion que facilita el análisis químico-estructural de proteínas, la identificación de bolsillos druggable, la evaluación de interacciones ligando-receptor y la priorización de compuestos bioactivos de forma reproducible, transparente y orientada a grandes volúmenes de datos. La Unidad de Biocomputación del Centro Nacional de Biotecnología (CSIC), dirigida por los Dres. Carazo y Sorzano, lidera el desarrollo metodológico y software asociado, combinando biología estructural, bioinformática y aprendizaje automático. El equipo está compuesto por especialistas en matemáticas, inteligencia artificial, e ingeniería, permitiendo una interacción directa con datos experimentales, modelos atómicos y bibliotecas químicas. Los candidatos a esta plaza deben dominar la programación en Python y poseer formación en química computacional, bioinformática, biología estructural, estadística o análisis de datos. El software desarrollado se integrará en Scipion-Chem y contribuirá a una plataforma de software libre utilizada por una comunidad internacional.