



Università degli Studi di Cagliari

DIPARTIMENTO DI FISICA

Direttore: prof. Giovanni Bongiovanni

BANDO N. 8/2019

SELEZIONE PER L'ATTRIBUZIONE DI N. 1 BORSA DI RICERCA DAL TITOLO "Development of new computational protocols to improve the predictive power of molecular docking" – Responsabile scientifico prof. Paolo Ruggerone

IL DIRETTORE

- VISTO** lo Statuto dell'Università degli Studi di Cagliari, emanato con D.R. n° 339 del 27.03.2012, e successive modifiche ed integrazioni;
- VISTA** la Legge n. 476 del 13/08/1984 contenete norme in materia di borse di studio e dottorato di ricerca nelle Università e, in particolare, norme in materia di agevolazioni fiscali per le borse di studio;
- VISTA** la legge n. 398 del 30.11.1989, e ss.mm.ii. contenente norme in materia di borse di studio universitarie, ed in particolare l'art. 6;
- VISTA** la Legge n° 240 del 30.12.2010, , recante "norme in materia di organizzazione delle università, di personale accademico e reclutamento, nonché delega del Governo per incentivare la qualità e l'efficienza del sistema universitario", ed in particolare l'art. 18, co.5, lett. f);
- VISTA** la legge n° 35 del 04.04.2012, di "Conversione in legge, con modificazioni, del decreto legge 9 febbraio 2012, n° 5, recante disposizioni urgenti in materia di semplificazione e di sviluppo" ed in particolare l'art. 49, comma 1, lett. h), che modifica l'art. 18, comma 5, lett. f) della suddetta legge 240/2010;
- VISTO** *il Regolamento per la disciplina delle borse di ricerca* di cui al D.R. n° 432 del 13/06/2018;
- VISTO** il progetto di ricerca "Optimization of efflux avoidance and inhibition for antibiotic development" – CUP F35D18000160007, finanziato dal National Institutes of Health (NIH) - annualità 2018, responsabile scientifico prof. Paolo Ruggerone;
- VISTA** la richiesta del prof. Paolo Ruggerone, con la quale chiede l'avvio delle procedure di selezione per il conferimento di n. 1 borsa di ricerca, della durata di mesi 12 (dodici) e dell'importo lordo di € 16.800,00 (sedecimilaottocento) al lordo degli eventuali oneri a carico dell'Ateneo, dal titolo "*Development of new computational protocols to improve the predictive power of molecular docking*"- responsabile scientifico prof. Paolo Ruggerone;
- VISTO** la delibera del 19/09/2019 di cui al verbale n. 15, con la quale il Consiglio di Dipartimento approva la proposta avanzata dal prof. Ruggerone;
- ACCERTATA** la copertura finanziaria dell'importo della borsa sul progetto: ASSEGNI_E_BORSE_NIH_2018_RUGGERONE, CUP F35D18000160007;

DISPONE

ARTICOLO UNO

(Caratteristiche)

E' indetta la selezione pubblica, per titoli e colloquio, per il conferimento di **n. 1** borsa di ricerca con le seguenti caratteristiche:

Provenienza fondi: National Institutes of Health (NIH)

Data di scadenza del progetto: 30/04/2023

Struttura presso la quale si svolgerà l'attività: Dipartimento di Fisica dell'Università degli Studi di Cagliari

Responsabile Scientifico: Prof. Paolo Ruggerone

Durata: 12 mesi

Importo (al lordo degli eventuali oneri a carico dell'Ateneo): € 16.800,00

Titolo (Italiano): "Development of new computational protocols to improve the predictive power of molecular docking"

Oggetto del programma e/o della specifica ricerca (Italiano):

Questo progetto mira a sviluppare un protocollo computazionale, proposto di recente all'interno del nostro laboratorio, volto a riprodurre *in silico* le strutture (holo) di proteine interagenti con composti di interesse farmacologico (ligandi) a partire dalla sola conformazione della proteina non interagente con altre molecole (apo). La capacità di generare tali conformazioni consente di riprodurre al computer le strutture sperimentali di complessi proteina-ligando (ottenute con tecniche differenti, quali cryo-EM, X-ray, NMR), e quindi apre una prospettiva interessante per il "computer-aided drug design". Il candidato dovrà I) effettuare simulazioni di dinamica molecolare classica di decine di proteine di interesse farmacologico, II) estrarre le conformazioni rilevanti tramite analisi a cluster, III) effettuare calcoli di docking molecolare utilizzando l'ensemble di conformazioni precedentemente ottenute. Infine, dovrà contribuire alla realizzazione di un database online contenente le strutture generate per ogni proteina, corredate da informazioni di vario tipo, utili agli studi di interazione proteina-ligando.

Titolo (Inglese): "Development of new computational protocols to improve the predictive power of molecular docking"

Oggetto del programma e/o della specifica ricerca (Inglese):

This project aims to develop a computational protocol, recently proposed in our laboratory, aiming at reproducing *in silico* the structures (holo) of proteins interacting with compounds of pharmacological interest (ligands), using only the information on the structure of the protein free of interactions with any ligand (apo). The ability to generate such conformations allows to reproduce *in silico* the experimental structures of protein-ligand complexes (obtained with different techniques, such as cryo-EM, X-ray, NMR), thus opening an interesting perspective for "computer-aided drug design". The candidate I) will perform classical molecular dynamics simulations of several dozen proteins of pharmacological interest, II) will extract the relevant conformations by means of customized cluster analysis, III) will perform molecular docking calculations using the ensemble of conformations previously obtained. Finally, (s)he will be involved in setting up an online database containing the structures generated for each protein, together with additional information helpful to drug design.

ARTICOLO DUE

(Requisiti per l'accesso, incompatibilità)

Possono partecipare alla selezione i candidati che alla data di scadenza del termine utile per la presentazione della domanda di partecipazione, sono in possesso dei seguenti requisiti:

- A) Laurea triennale o diploma di laurea (ante D.M. 509/99) o equivalente se conseguito all'estero in Fisica, Chimica, Biologia, Chimica Farmaceutica, Biotecnologie, Bioinformatica, Farmacoinformatica

- B) Laurea specialistica/magistrale laurea (ante D.M. 509/99) o equivalente se conseguito all'estero in Fisica, Chimica, Biologia, Chimica Farmaceutica, Biotecnologie, Bioinformatica, Farmacoinformatica

Sono titoli valutabili:

- A) Dottorato di Ricerca o triennio di dottorato concluso in Fisica, Chimica, Biologia, Chimica Farmaceutica, Biotecnologie, Bioinformatica (20 pts)
- B) Esperienze di ricerca post-lauream o post-dottorato (30 pts)
- C) Pubblicazioni scientifiche nel settore della biofisica computazionale (10 pts)

La partecipazione alla selezione è libera, senza limitazioni in relazione alla cittadinanza.

- 1 - La borsa di ricerca non è compatibile con:
 - a) Altre borse a qualsiasi titolo conferite, ad eccezione di quelle concesse da Istituzioni nazionali o straniere utili ad integrare, con soggiorni all'estero, l'attività di ricerca del borsista
 - b) La frequenza di corsi di dottorato di ricerca con borsa e di specializzazione medica, in Italia e all'estero
 - c) Assegni di ricerca
 - d) Rapporti di lavoro subordinato, fatta salva la possibilità che il borsista venga collocato in aspettativa senza assegni
 - e) Attività di lavoro autonomo, anche parasubordinato, fatta salva l'ipotesi di cui al comma seguente;

- 2 - I borsisti possono svolgere attività di lavoro autonomo occasionale anche parasubordinato, previa comunicazione scritta al Responsabile scientifico e a condizione che:
 - a) Tale attività sia dichiarata dal responsabile stesso compatibile con l'esercizio dell'attività di formazione di cui alla Borsa di ricerca,
 - b) Non comporti conflitto d'interessi con la specifica attività di formazione svolta dal borsista
 - c) Non rechi pregiudizio all'Università, in relazione alle attività svolte.

- 3 - La durata complessiva dei rapporti instaurati con i titolari di borsa, assegno di ricerca di cui all'art. 22 della L. 240/2010 e contratti di cui all'art. 24, L. 240/2010 non può superare i dodici anni, anche non continuativi. Ai fini della durata dei predetti rapporti non rilevano i periodi trascorsi in aspettativa per maternità o per motivi di salute secondo la normativa vigente. L'accertamento di tali limiti temporali viene effettuata dalla Direzione per la Ricerca preventivamente al conferimento della borsa.

ARTICOLO TRE

(Domanda di partecipazione)

Le domande di ammissione alla selezione, redatte in carta libera secondo lo schema in Allegato A, potranno essere inviate a mezzo servizio postale, con avviso di ricevimento, al Direttore del

Dipartimento di Fisica, Cittadella Universitaria di Monserrato – S.P. Monserrato-Sestu km. 0,700 CAP 09042 Monserrato, o presentate a mano alla Segreteria amministrativa del Dipartimento, (dal lunedì al venerdì dalle ore 9:00 alle ore 13:00) **improrogabilmente entro il 20° giorno** a partire dal giorno successivo alla data di pubblicazione sul sito UNICA “Laureati” e “Dipartimento di Fisica”.

I candidati domiciliati o residenti fuori del territorio regionale potranno fornire l'intera documentazione via mail inviandola (entro il termine indicato) al seguente indirizzo di posta elettronica: amm.fisica@dsf.unica.it. Il vincitore del presente bando dovrà fornire la stessa documentazione in forma cartacea entro e non oltre quindici giorni dalla pubblicazione dell'esito della selezione nella pagina web https://www.unica.it/unica/it/laureati_s07_ss01.page

Non si terrà conto delle domande pervenute oltre il termine di scadenza, anche se spedite a mezzo servizio postale entro il termine.

L'Amministrazione precedente non assume alcuna responsabilità nel caso di dispersione di comunicazioni dipendente da inesatta indicazione della residenza e del recapito da parte del candidato o da mancata o tardiva comunicazione relativi a variazioni dei sopra citati, né per eventuali disguidi postali non imputabili a questa amministrazione.

Alla domanda il candidato dovrà allegare:

- a) **dichiarazione sostitutiva di certificazioni**, rilasciata ai sensi del D.P.R. 28.12.2000, n° 445, relativamente al curriculum formativo, didattico, scientifico, e professionale del candidato (All. B)
- b) **dichiarazione sostitutiva di certificazioni**, rilasciata ai sensi del D.P.R. 28.12.2000, n° 445, relativamente al possesso dei titoli valutabili, redatta secondo lo schema in All. C, con tutti gli elementi richiesti o dichiarazione sostitutiva di atto di notorietà (All. D.) se si presenta copia dei titoli ;
- d) **pubblicazioni**, allegate in originale o in copia con allegata dichiarazione sostitutiva di atto di notorietà attestante la conformità all'originale (All. D), rilasciata ai sensi del D.P.R. 28.12.2000, n. 445;
- e) se i titoli di studio richiesti per l'accesso sono stati conseguiti all'estero, **copia del provvedimento di riconoscimento** che ne attesta la validità in Italia. Nel caso in cui detto riconoscimento non sia ancora stato effettuato, l'equivalenza verrà valutata, unicamente ai fini dell'ammissione del candidato alla selezione, dalla Commissione Giudicatrice;
- f) **per i soli candidati residenti o domiciliati al di fuori del territorio sardo che desiderino sostenere la prova in modalità telematica, modulo di richiesta colloquio a distanza (All. E) completo delle indicazioni richieste;**
- g) **fotocopia fronte/retro di un documento di identità in corso di validità, a colori;**
- h) **elenco** in carta libera dei documenti e dei titoli presentati in allegato alla domanda.

Sulla busta il candidato dovrà riportare:

Cognome e nome, recapito;

Selezione borsa di ricerca: Bando 8/2019 - “Development of new computational protocols to improve the predictive power of molecular docking”

Responsabile scientifico: prof. Paolo Ruggerone

Dipartimento di Fisica - Cittadella Universitaria di Monserrato – S.P. Monserrato-Sestu km. 0,700 CAP 09042 Monserrato.

Non verranno presi in considerazione i titoli presentati a questa Amministrazione oltre il termine utile per la presentazione delle domande di partecipazione alla selezione.

ARTICOLO QUATTRO

(Commissioni giudicatrici e selezione dei candidati)

La Commissione giudicatrice è nominata, ai sensi dell'art. 5, comma 1 del Regolamento d'Ateneo, con Disposizione Direttoriale, ed è composta di norma, da tre docenti di ruolo afferenti a settori scientifico disciplinari affini alla tematica della ricerca. La Commissione giudicatrice può altresì essere integrata da uno o più componenti designati dal soggetto finanziatore in qualità di esperti.

La Commissione giudicatrice, verificati i requisiti di ammissione, definisce preliminarmente le modalità e i criteri di valutazione dei titoli previsti nel bando ed il punteggio minimo per l'ammissione al colloquio, disponendo di 100 punti, di cui 60 punti per la valutazione dei titoli e 40 per la valutazione del colloquio.

La selezione avviene mediante la valutazione preliminare dei titoli presentati da ciascun candidato con l'attribuzione del relativo punteggio, ed in un successivo colloquio volto ad accertare l'idoneità dei candidati ammessi.

Gli esiti della valutazione dei titoli e l'elenco dei candidati ammessi al colloquio sono pubblicati nel sito web del Dipartimento di Fisica e nel sito dell'Ateneo.

Ai candidati ammessi verrà comunicata tramite posta elettronica e/o pubblicazione sul medesimo sito web, la data, l'ora e la sede di svolgimento del colloquio, con un preavviso di almeno 15 giorni.

I candidati, per sostenere la prova, dovranno esibire un valido documento di riconoscimento.

Per i soli candidati residenti o domiciliati al di fuori del territorio sardo, il colloquio potrà essere sostenuto per via telematica, con l'esibizione contestuale del documento a colori già allegato in domanda.

Al termine dei lavori valutativi, la commissione compilerà la relativa graduatoria di merito sulla base della somma dei punteggi riportati da ciascun candidato rispettivamente nella valutazione dei titoli e nel colloquio. A parità di punteggio prevale il candidato più giovane.

ARTICOLO CINQUE

(Conferimento della borsa di ricerca, avvio e conclusione dell'attività)

Gli atti sono approvati con Disposizione Direttoriale, previo accertamento dei requisiti richiesti, e pubblicati sul sito web del Dipartimento e dell'Ateneo.

La data di inizio e le modalità di svolgimento dell'attività di ricerca presso la struttura universitaria di riferimento, alla quale il borsista ha diritto di accedere con l'obbligo di osservarne le norme regolamentari e di sicurezza, devono essere concordate con il Responsabile scientifico in accordo con il Direttore del Dipartimento.

Il titolare della borsa è tenuto a stipulare adeguata polizza assicurativa personale obbligatoria sia contro il rischio di infortuni verificatisi durante il periodo di presenza presso le strutture universitarie, ovvero presso strutture esterne presso le quali il borsista è stato previamente autorizzato dal Responsabile Scientifico a svolgere la propria attività, sia per la responsabilità civile verso terzi, eventualmente derivanti dai danni a persone o cose provocati dal medesimo, copia della quale dovrà essere consegnata all'amministrazione alla data di inizio delle attività di ricerca presso questa università.

Il pagamento della borsa di ricerca è effettuato in rate mensili posticipate.

L'attività del borsista deve concludersi entro e non oltre il 30/04/2023

Al termine del periodo previsto per l'esecuzione della ricerca, il borsista, è tenuto a presentare al Direttore del Dipartimento, una dettagliata relazione sull'attività svolta e sui risultati conseguiti, preventivamente approvata dal Responsabile Scientifico.

Il godimento della presente borsa di ricerca non determina l'instaurazione di un rapporto di lavoro, non dà luogo a trattamenti previdenziali, a valutazioni ai fini di carriere giuridiche ed economiche, né a riconoscimenti automatici ai fini previdenziali.

ARTICOLO SEI

(Trattamento dei dati personali)

L'Università degli Studi di Cagliari è titolare del trattamento dei dati personali ai sensi delle norme del regolamento (UE) 2016/679 del Parlamento europeo e del Consiglio, del 27 aprile 2016, e del Codice in materia di protezione dei dati personali D. Lgs. 196/2003, nel rispetto della dignità umana, dei diritti e delle libertà fondamentali della persona. L'informativa sul trattamento dati per la categoria di interessato "Cittadini" è pubblicata sul sito https://www.unica.it/unica/it/utility_privacy.page

Ai sensi di quanto disposto dall'art. 5 della legge 7 agosto 1990, n.- 241, il responsabile della procedura selettiva di cui al presente bando è la dott.ssa Fernanda Marongiu, Segretario Amministrativo del Dipartimento di Fisica.

I candidati hanno facoltà di esercitare il diritto di accesso agli atti del procedimento concorsuale secondo le modalità previste dal D.P.R. 184 del 12.4.2006 (Regolamento recante disciplina in materia di accesso ai documenti amministrativi).

ARTICOLO SETTE

(Pubblicità e norme di salvaguardia)

Il presente bando verrà pubblicato sul sito internet dell'Ateneo, (https://www.unica.it/unica/it/laureati_s07_ss01.page) Dipartimento di Fisica.

Per quanto non specificato nel presente bando, si fa riferimento alle norme contenute nella L. 240/2010 e nel vigente Regolamento per la disciplina delle Borse di Ricerca di questa Università.

F.to IL DIRETTORE
Prof. Giovanni Bongiovanni