

**Aviso de Abertura de Concurso Internacional
para Contratação de Investigador(a) Doutorado(a) /
*Notice for International Call to hire a PhD Researcher***

Por decisão da Direcção da NOVA.id.FCT - Associação para a Inovação e Desenvolvimento da FCT (“NOVA.id.FCT”) procede-se à abertura de um concurso internacional para a contratação, na modalidade de contrato a termo incerto, de um(a) Investigador(a) Doutorado(a), com a referência interna “#NOVAID05”, para o exercício de actividades de investigação na área Química/Engenharia Química/Informática e áreas afins, no âmbito do projeto “*Inteligência Artificial Aplicada à Previsão de Equilíbrio de Fases*”, “PTDC/EQU-EQU/30060/2017”, financiado através de fundos nacionais pela Fundação para a Ciência e Tecnologia.

By decision of the Board of Directors, NOVA.id.FCT - Associação para a Inovação e Desenvolvimento da FCT (“NOVA.id.FCT”) opens an international call to hire a PhD Researcher, with the internal reference “#NOVAID05”, under an unfixed term employment contract to conduct research activities in the field of Chemistry/Chemical Engineering/Informatics and related areas in the scope of the project “ARTificial INTElligence applied in PHASe EQUilibrium composition (ARTINTELPHASEQ), “PTDC/EQU-EQU/30060/2017”, financed by by “Fundação para a Ciência e Tecnologia, I.P.”.

1. Modalidade de contratação e legislação aplicável/ *Type of contract and applicable legislation*

A contratação do(a) Investigador(a) Doutorado(a) realizar-se-á através de Contrato de Trabalho a Termo Incerto, a celebrar nos termos do Código do Trabalho, aprovado pela Lei n.º 7/2009, de 12 de Fevereiro, na sua redação atual. O contrato terá uma duração previsível de 36 meses, a qual não deverá exceder a duração do Projecto acima identificado. O contrato tem início previsto em Dezembro de 2018.

São ainda aplicáveis ao presente processo de contratação, designadamente, o Decreto-Lei n.º 57/2016, de 19 de Julho, alterado pela Lei nº 57/2017, de 29 de Agosto (RJEC) e o Decreto Regulamentar n.º 11-A /2017, de 29 de Dezembro.

The hiring of the PhD Researcher shall be made by means of an Unfixed Term Employment Contract entered into in accordance with the Portuguese Labour Code approved by the Law no. 7/2009 of February 12th, as amended. The contract should have a forecasted duration of 36 months, and should not be extended further than the project duration. The contract should begin in December of 2018.

The present hiring procedure is further governed inter alia by Decree-law no. 57/2016 of July 19th, as amended by the Law no. 57/2017 of August 29th and Regulatory decree no. 11-A/2017 of November 29th.

2. Principais funções e actividades e exclusividade / Main attributions and activities and exclusivity

O(a) Investigador(a) Doutorado(a) irá proceder construção de uma base de dados de líquidos iónicos e suas misturas com outros sais e moléculas. A base de dados terá informação estrutural, composições, temperatura, pressão e caracterização do perfil de equilíbrio de fases. Para a sua concretização será usado o editor de base de dados Chemfinder e usados dados recolhidos de referências bibliográficas para obter informação útil através do programa Mathematica.

Noutra fase do procedimento é necessário codificar os sistemas através do uso de metodologia MOLMAP concebida para a comparação de sistemas de diferente natureza e número de componentes, tal como incorporação de informação sobre a composição global de mistura. A metodologia MOLMAP permite a obtenção do padrão estrutural/mapeamento em rede de *Kohonen*, de sistemas, centrado em átomos/componentes de mistura tendo em conta o perfil de propriedades genéricas que descrevem determinado elemento estrutural. Esta forma de descrição permite agrupar e distinguir elementos estruturais em rede de *Kohonen* de forma não óbvia sendo condição *sine qua non* para encontrar relações úteis entre características de sistema e perfil de equilíbrio de fases, através de método de inteligência artificial.

Outra vertente, consiste na utilização de métodos computacionais para a caracterização ao nível supra-molecular de sistemas e assim ter uma forma de

descrever numericamente sistemas de forma a serem obtidos modelos baseados em métodos de aprendizagem automática.

Outra fase consiste em validar os modelos para sistemas não usados no treino sendo alguns desses sistemas inovadores. Vão ser usados outros métodos de validação e também vão ser procurados padrões que relacionem propriedades de sistema e características de equilíbrio de fases.

O(a) Investigador(a) Doutorado(a) dedicará plenamente a totalidade da sua actividade profissional à NOVA.id.FCT, com carácter de exclusividade.

The PhD Researcher shall be responsible for:

The construction of a phase behaviour database of ionic liquids and their mixtures using Chemfinder editor, and based on the collection of information from the literature/conversion of part of this information using Mathematica environment.

Codification of systems based on MOLMAP method, conceived to permit a straightforward comparison between systems of different nature/number of components with the incorporation of information on global composition. This method is based on mapping/grouping the structural elements of a system on a *Kohonen* neural network according the generical properties profile of such element. This generical form of grouping permit to find non-obvious relationships between the properties of a system and composition of the phases in equilibrium. Other form of codification consists on the use of computational methods to characterize a system at supra-molecular level.

The following step comprises the establishment of a relationship between the properties of the system and the composition of the phases in equilibrium. Artificial intelligence methodologies will be used for that purpose
The model will be validated with external systems collected from bibliographic references and innovative systems prepared in the laboratory.

Search for a pattern that establishes a straightforward relationship between the properties of a generical system and the compositions of the phases in equilibrium.

The PhD Researcher shall fully devote the whole of his/her professional activity to NOVA.id.FCT, on an exclusive basis.

3. Local de trabalho / Place of work

O(a) Investigador(a) Doutorado(a) prestará o seu trabalho nas instalações da Faculdade de Ciências e Tecnologia/Universidade Nova de Lisboa situadas na Quinta da Torre e efectuará todas as deslocações, em Portugal ou no estrangeiro, inerentes às suas funções ou necessárias ao exercício da sua actividade.

The PhD Researcher's working place shall be at the premises of Faculty of Sciences and Technology/Nova University located in Quinta da Torre and he/she shall travel, in Portugal or abroad, as required by his/her attributions or as necessary for his/her activity.

4. Remuneração mensal / Monthly remuneration

O(a) Investigador(a) Doutorado(a) auferirá uma remuneração mensal ilíquida de € 2.128,34 que tem por referência o 1º escalão do nível remuneratório inicial, nos termos do nº 2 do Artigo 15º do DL nº 57/2016 de 19 de Julho, na redacção da Lei nº 57/2017 de 29 de Agosto, e do Decreto Regulamentar nº 11-A/2017, de 29 de Dezembro.

The PhD Researcher shall earn a monthly remuneration in the gross amount of € 2.128,34 by reference to the 1st grade of the salary scale,, pursuant to number 2 of Article 15 of Decree-Law no. 57/2016 of 19 July, as amended by Law no. 57/2017 of 29 August, and Regulatory Decree no. 11-A / 2017, of December 29.

5. Requisitos de admissão / Admission Requirements

Podem apresentar-se ao presente concurso candidatos nacionais, estrangeiros e apátridas, titulares do grau de doutor em Química/Engenharia Química ou Informática e áreas afins e que possuam os seguintes requisitos preferenciais:

- a. Experiência de investigação em Termodinâmica;
- b. Experiência de investigação em Químio-Informática;
- c. Experiência de investigação em Informática;
- d. Experiência de investigação em Química Computacional;

Applicants to this call may be national, foreign or stateless candidates holding a PhD degree in the field of Chemistry/Chemical Engineering and complying with the following preferential requirements:

- a. *Research experience in Thermodynamics;*
- b. *Research experience in Chemoinformatics;*
- c. *Research experience in Informatics;*
- d. *Research experience in Computational Chemistry;*

6. Avaliação das Candidaturas e Composição do Júri / Evaluation of the Applications and Composition of the Jury

A avaliação das candidaturas será efectuada por um júri e seguirá a tramitação prevista nos artigos 13º e 14º aplicáveis por remissão do artigo 19º todos do DL nº 57/2016 de 19 de Julho, na redação da Lei nº 57/2017 de 29 de Agosto.

Applications shall be subject to evaluation by a jury that shall follow the procedure established in articles 13 and 14 (by virtue of article 19) of Decree-Law no. 57/2016 of 19 July, as amended by Law no. 57/2017 of 29 August.

Nos termos do disposto no Artigo 13º do DL nº 57/2016, o júri tem a seguinte composição: Presidente do júri: Doutor Gonçalo Valente Carrera; Vogais efectivos Professor Manuel Nunes da Ponte e Professor João Aires de Sousa. Vogais suplentes Professor Luís Paulo Nieto Rebelo e Professor José Nuno Canongia Lopes.

Pursuant to Article 13 of Decree-Law no. 57/2016 the jury is composed of the following members:

- Presidente/President: Gonçalo Valente Carrera, PhD.
- Vogal/Member: Professor Manuel Nunes da Ponte;
- Vogal/Member: Professor João Aires de Sousa;
- Vogal Suplente/Substitute Member: Professor Luís Paulo Nieto Rebelo;
- Vogal Suplente/Substitute Member: Professor José Nuno Canongia Lopes.

7. Critérios de selecção / Selection criteria

A selecção do(a) Investigador(a) Doutorado(a) a contratar será realizada através da avaliação do seu percurso científico e curricular, nos termos do DL nº 57/2016 de 19 de Julho, na redacção da Lei nº 57/2017 de 29 de Agosto, sendo os seguintes os critérios de selecção e a respectiva ponderação:

- a) Percurso Curricular: CV e Certificados de habilitação (50%);
- b) Carta de Motivação (40%);
- c) Qualidade da Entrevista (10%).

A entrevista será feita apenas para os candidatos com classificação superior a 75% nos dois primeiros critérios.

The selection of the successful candidate will be carried out through the evaluation of the scientific and curricular achievements as established by Decree-Law no. 57/2016 of 19 July, as amended by Law no. 57/2017 of 29 August and the selection criteria and their respective weighting shall be as follows:

- a) *Curricular Path: CV and academic certificates (50%);*

- b) Motivation Letter (40%);
- c) *Quality of the Interview* (10%).

The interview will be done only to the candidates with classification higher than 75% in the first two criteria.

8. Decisão Final /Final Decision

A deliberação final do júri será homologada pelo dirigente máximo da NOVA.id.FCT a quem compete ainda decidir sobre a contratação.

The final deliberation of the jury shall be homologated by the ultimate governing body of NOVA.id.FCT that is also responsible for the decision of hiring.

A lista dos candidatos admitidos e excluídos e a lista de classificação final são publicitadas no sítio na Internet da NOVA.id.FCT (www.novaidfct.pt) e enviadas por correio eletrónico, com recibo de entrega, a todos os candidatos.

The list of admitted and excluded candidates and the final list of classification will be publicised on the website of NOVA.id.FCT (www.novaidfct.pt) and sent by electronic mail with receipt of delivery to all candidates.

9. Apresentação de Candidaturas / Submission of Applications

As candidaturas devem ser apresentadas no período de 29/10/2018 a 12/11/2018, através do envio, por correio electrónico para goncalo.carrera@fct.unl.pt, de um único ficheiro PDF contendo os seguintes documentos, redigidos em Português ou Inglês: Carta de Motivação, *Curriculum Vitae* e Certificados de Habilitação.

Applications must be submitted between 29/10/2018 to 12/11/2018, by email addressed to goncalo.carrera@fct.unl.pt containing a single PDF file with the following documents in Portuguese or English languages: Motivation letter, Curriculum Vitae and Academic Certificates.

10. Política de não discriminação e de igualdade de acesso / Non-discrimination and equal access policy

A NOVA.id.FCT promove activamente uma política de não discriminação e de igualdade de acesso, pelo que nenhum candidato pode ser beneficiado, prejudicado ou privado de qualquer dever em razão, nomeadamente de ascendência, idade, sexo, deficiência, orientação sexual, doença crónica, nacionalidade, origem étnica ou raça, religião ou convicções políticas.

NOVA.id.FCT actively promotes a non-discrimination and equal access policy, reason for which no candidate can be benefited, prejudiced or deprived of any duty, namely age, sex, disability, sexual orientation, chronic illness, nationality, ethnic origin or race, religion or political beliefs.