

Fundação para a Ciência e Tecnologia, I.P  
Rede Nacional de Computação Avançada

Concurso para Projetos de Computação Avançada

**FCT/CPCA/2023/01 (4ª Ed.) - A2 Acesso Regular**

Listagem de resultados preliminares (por painel científico)

**P1 - Physics and Mathematics**

Posição	Referência FCT	Plataforma	Nota final	Título do Projeto	Afiliação
1	2023.10981.CPCA.A2	LCA_Navigator	9,10	Quantum tunneling and transient switching dynamics in molecular rotor architectures	Universidade de Coimbra
2	2023.10947.CPCA.A2	LCA_Navigator	9,03	Towards High statistical lattice computation of QCD Green functions in Landau gauge	Universidade de Coimbra
3	2023.10412.CPCA.A2	LCA_Navigator	8,83	Lattice Boltzmann modelling of active nematics in heterogeneous activity fields	Universidade de Lisboa
4	2023.10526.CPCA.A2	INCD_Cirrus	8,79	Fundamental physics with neutron stars and their mergers	Universidade de Coimbra
5	2023.10530.CPCA.A2	LCA_Navigator	8,52	SuperGraCOF - Superconducting Graphene/Covalent Organic frameworks bilayers studied by large scale atomistic methods	Universidade de Aveiro
6	2023.11003.CPCA.A2	LCA_Navigator	8,28	High-throughput search for efficient thermoelectrics	Universidade de Coimbra
7	2023.11029.CPCA.A2	INCD_Cirrus	8,28 <sup>1</sup>	Effective string theory of flux tubes	Universidade do Minho
8	2023.10800.CPCA.A2	INCD_Cirrus	7,43	Hydrogen-Induced Degradation of Next-Generation Silicon Photovoltaics	Universidade de Aveiro
9	2023.10857.CPCA.A2	INCD_Cirrus	7,17	Optical excitation of spin waves in 2D ferromagnets	Universidade de Coimbra
10	2023.10885.CPCA.A2	INCD_Cirrus	6,95	Lattice Thermal-Conductivity of Sn2S3 at high-pressure	Universidade do Porto

**P2 – Chemistry and Materials**

Posição	Referência FCT	Plataforma	Nota final	Título do Projeto	Afiliação
1	2023.10449.CPCA.A2	LCA_Navigator	9,11	Multidimensional Tunneling Calculations: Exploring New Reactivity Paradigms to Drive Chemical Transformations	Universidade de Coimbra

<sup>1</sup> Aplicado critério de desempate previsto em [Aviso de Abertura](#) – página 8.

3	2023.10904.CPCA.A2	HPCUE_Oblivion	8,59	Atomistic and thermodynamic characterization of the capabilities of bacterial sulfide:quinone reductase on the conversion of pollutant sulfide to elemental sulfur	Universidade Nova de Lisboa
4	2023.10598.CPCA.A2	HPCUE_Vision	8,24	A computationally assisted drug development pipeline for challenging cancers with very few effective therapeutic options	COFAC - Centro de Investigação em Biociências e Tecnologias da Saúde
5	2023.10643.CPCA.A2	HPCUE_Oblivion	8,16	Coarse-grain computer model to unravel key aspects in phospholipid-based biological membranes-drug nanocarriers interactions	Universidade de Aveiro
6	2023.10746.CPCA.A2	HPCUE_Oblivion	8,14	Eutectic hydrogels as electrolytes for batteries	Universidade de Évora
7	2023.10437.CPCA.A2	INCD_Cirrus	7,75	Computational Toolbox for Discovery of new Affinity Ligands	NOVA FCT
8	2023.10649.CPCA.A2	INCD_Cirrus	7,64	ConfCof - How conformation and stacking influence electronic properties of Covalent Organic Frameworks. An ab-initio investigation.	Universidade de Aveiro
9	2023.10740.CPCA.A2	INCD_Cirrus	7,53	ComputReactors: Advanced computational design of novel chemical reactors	Universidade do Porto
10	2023.10823.CPCA.A2	INCD_Cirrus	7,47	In silico design and optimization of peptides as biotechnological tools in the development of new cosmetic and pharmaceutical solutions	Universidade do Minho
11	2023.10584.CPCA.A2	INCD_Cirrus	7,36	Unveiling imidacloprid-aminoacids interactions by electronic-structure calculations - towards a pesticide adsorbing material	Universidade de Coimbra
12	2023.10811.CPCA.A2	INCD_Cirrus	7,12	Solvent-in-salt electrolytes for safe and efficient energy storage: Multiscale Theoretical Approach	NOVA FCT
13	2023.10916.CPCA.A2	INCD_Cirrus	6,30	RePo-EfluxPump – Repurposing drugs to inhibit antibiotic efflux pumps.	Instituto Politécnico da Guarda
14	2023.10506.CPCA.A2	INCD_Cirrus	5,91	Simulation of gas-liquid and liquid-liquid flows in stirred systems	Universidade de Coimbra
N1 <sup>2</sup>	2023.10404.CPCA	DEUCALION	8,71	Hydrogen production via formic acid decomposition using MXenes	Universidade de Aveiro
N2 <sup>3</sup>	2023.10475.CPCA.A1	INCD_Cirrus	-	Expanding “toolbox” of medicinal chemists: the role of halogen bonds in membrane permeability	FCiências.ID

<sup>2</sup> N1: Candidato aprovado no acesso A3, conforme Aviso de Abertura, considera a nota mais alta para alocação.

<sup>3</sup> N2: Candidato não aprovado na validação técnica para tipologia A2, conforme critérios do Aviso de Abertura. Assim, o mesmo será convertido para uma tipologia A1.

### P3 – Engineering and Technology

<i>Posição</i>	<i>Referência FCT</i>	<i>Plataforma</i>	<i>Nota final</i>	<i>Título do Projeto</i>	<i>Afiliação</i>
1	2023.10452.CPCA.A2	INCD_Cirrus	8,74	Simulation of component dispersion in water - waterscd	Universidade de Coimbra
2	2023.10892.CPCA.A2	LCA_Navigator	8,56	Quantifying radiative heat flux and firebrand attack from wildfires at the Wildland-Urban Interface using physics-based models	Universidade de Coimbra
3	2023.10968.CPCA.A2	LCA_Navigator	8,29	Advanced design and optimization of steel portal frames using machine learning models	Universidade de Aveiro
4	2023.10680.CPCA.A2	INCD_Cirrus	8,05	Investigations on Electrohydrodynamic Atomization: High-Fidelity Simulations of Taylor Cone Jet Atomization for Optimized Electrospray Processes	Universidade da Beira Interior
5	2023.10867.CPCA.A2	INCD_Cirrus <sup>4</sup>	7,27	Journal of Data Science, Statistics, and Visualisation	INESC ID
N3 <sup>5</sup>	2023.10865.CPCA.A1	INCD_Cirrus	-	Secure Horizons: Transforming Healthcare with Federated Learning and Cloud Computing	Instituto de Telecomunicações

### P4 – Life and Health Sciences

<i>Posição</i>	<i>Referência FCT</i>	<i>Plataforma</i>	<i>Nota final</i>	<i>Título do Projeto</i>	<i>Afiliação</i>
1	2023.10828.CPCA.A2	HPCUE_Oblivion	9,08	Harnessing Genomic Data Towards the Implementation of Global Surveillance for Tuberculosis: Enabling CPLP-TB Genomics Across Portuguese Speaking Countries	Universidade de Lisboa
2	2023.10973.CPCA.A2	INCD_Stratus	8,88	CaCau: Cancer Causality for Precision Oncology   Phase 2	Universidade do Algarve
3	2023.10492.CPCA.A2	INCD_Stratus <sup>6</sup>	8,13	Capacity building in genomic epidemiology of viral threats through expansion of INSaFLU and training provision	Instituto Nacional de Saúde Dr. Ricardo Jorge
4	2023.10920.CPCA.A2	INCD_Stratus	7,78	The HIV membrane – An exceptional lipid raft	Universidade de Evora
5	2023.10710.CPCA.A2	INCD_Stratus	7,39	Optimizing MDR-Evading Drugs: Unveiling P-gp Transport Dynamics	FCiências.ID

<sup>4</sup> Projeto VRE – Virtual Research Environment

<sup>5</sup> N3: Candidato não aprovado na validação técnica para tipologia A2, conforme critérios do Aviso de Abertura. Assim, o mesmo será convertido para uma tipologia A1.

<sup>6</sup> Projeto VRE – Virtual Research Environment

N4 <sup>7</sup>	2023.10894.CPCA.A1	INCD_Stratus	-	Genome sequencing on Eurasian ancient and modern Human	Universidade do Minho
-----------------	--------------------	--------------	---	--	-----------------------

## P5 – Earth and Environmental Sciences

<i>Posição</i>	<i>Referência FCT</i>	<i>Plataforma</i>	<i>Nota final</i>	<i>Título do Projeto</i>	<i>Afiliação</i>
1	2023.10674.CPCA.A2	HPCUE_Oblivion	8,51	Time-quasiperiodic magnetic dynamos	Universidade do Porto
2	2023.11050.CPCA.A2	HPCUE_Oblivion	8,22	Unveiling CALF20 polymorphic transformation upon CO2 adsorption using a combination of computational and NMR methods	Universidade de Aveiro

## P6 – Social and Economic Sciences

Sem candidaturas recebidas.

Legenda:

- *Posição* = posição da candidatura no painel.
- *Referência FCT* = referência FCT da candidatura
- *Plataforma* = plataforma atribuída à candidatura.
- *Nota final* = nota final atribuída após as avaliações
- *Título do projeto*: Título indicado na candidatura
- *Afiliação*: Afiliação do IR do projeto

<sup>7</sup> N4: Candidato não aprovado em avaliação científica e validação técnica, conforme critérios do Aviso de Abertura. Assim, o mesmo será convertido para uma tipologia A1.