



CeNT-53-2023

Director of Centre of New Technologies of the University of Warsaw, with the approval from the Rector of the University of Warsaw, announces opening of the position of *Postdoc (Senior Assistant) in the group of researchers in the Chemical and Biological Systems Simulation Lab Centre of New Technologies of the University of Warsaw.*

JOB OFFER

Position in the project:	Postdoc (Senior Assistant)
Laboratory:	Chemical and Biological Systems Simulation Lab
Scientific discipline:	Chemical sciences
Keywords:	quantum chemistry, multiscale quantum chemistry calculations, molecular response properties, heavy elements, relativistic effects, theoretical spectroscopy, non-covalent interactions
Job type:	Employment contract
Part-time/full-time:	full-time
Number of job offers:	1
Remuneration amount/month	7 300 – 9 200 PLN gross/ month, according to qualifications and experience, plus thirteenth salary bonus
Position starts on:	1/02/2024 or as soon as possible afterwards
Maximum period of contract/stipend agreement:	12 months
Institution:	Centre of New Technologies, University of Warsaw
Project leader:	Małgorzata Olejniczak
Project title:	Embedding methods in quantum chemistry - pushing the boundaries of modeling molecular properties of complex systems with heavy elements.
Competition type:	SONATA BIS 10
Financing institution:	NCN
Project description:	The project involves interdisciplinary research on the boundary of computational quantum chemistry, applied mathematics, and data science, aimed at understanding of properties and behaviors of complex systems. The project aims to develop the methodology to calculate and analyze such systems, taking into account the presence of heavy elements and interactions with the environment. This methodology will be tested on various molecular complexes crucial for modern world applications (e.g., environmental and pharmaceutical research). The project involves interdisciplinary research on the boundary of computational quantum chemistry, applied mathematics, and data science, aimed at understanding of properties and behaviors of complex systems, taking into account the presence of heavy elements and interactions with the environment. The



	<p>project involves methodology development, software engineering, high-throughput calculations, and data analysis. Tests of these newly developed strategies on various molecular complexes crucial for modern world applications (e.g., environmental and pharmaceutical research) are also an invaluable project goal.</p>
Key responsibilities include:	<p>The candidate will be involved in the following tasks:</p> <ul style="list-style-type: none">(i) quantum chemistry calculations of molecular properties of various orders in complex molecular systems with heavy elements using embedding methods (subsystem-DFT),(ii) optimization of computational workflows on HPC clusters,(iii) analysis of results with advanced data analysis tools,(iv) participation in the preparation of scientific publications and (depending on the candidate's interest) public outreach material,(v) active participation in team activities (seminars, tutorials – participation can be online) and helping students. <p>Depending on the candidate's interests, tasks (i)-(iii) are up for negotiation.</p>
Profile of candidates/requirements:	<p>The competition is open to persons who meet the conditions specified in:</p> <ul style="list-style-type: none">- Act of 20 July 2018 Law on higher education and science (Journal of Laws of 2023, item 742 with later amendments) and the Statutes of the University of Warsaw;- Regulations on the allocation of resources for the implementation of tasks financed by the National Centre of Science for SONATA BIS-10 grant; <p><u>Requirements:</u></p> <ul style="list-style-type: none">- Ph.D. degree in physical chemistry,- theoretical background in quantum chemistry and experience with calculations using quantum chemistry methods,- experience with working in HPC environments,- ability and willingness to collaborate, also with foreign researchers,- openness to new challenges, curiosity, willingness to learn new things,- fluency in written and spoken English. <p>Moreover, general interests in mathematics, data science, and quantum chemistry are welcome.</p> <p><u>How we work in practice:</u></p> <ul style="list-style-type: none">- we use quantum chemistry software – mainly DIRAC and ADF,- we do calculations on HPC clusters (Unix, Linux environments),- we write our scripts and software (mainly in Python, Rust, and Fortran),- we use Git,- we incorporate good practices in science (FAIR), good practices in creating and modifying software ('extreme programming' mindset),- we learn a lot from data scientists and software developer communities (e.g., by regular participation in online courses),- we use tools to make our work easier (monitoring tasks and projects, enabling online work). <p>The candidate should hold a Ph.D. degree for no longer than seven years before signing an employment agreement in the project.</p> <p>The Ph.D. degree should be obtained in a country of the EU, EFTA, OECD, or nostrified on the date of employment at the latest.</p>
Required documents:	<ol style="list-style-type: none">1. Cover letter2. Current curriculum vitae3. A copy of PhD certificate or a document confirming that the Candidate



	<p>will obtain the PhD degree prior to the date of employment in the project</p> <p>4. List of publications</p> <p>5. Signed information on the processing of personal data</p> <p>6. Signed declaration confirming that the candidate has read and accepted the rules of conducting competitions, covered in the following documents: Order of the Rector of UW No. 106 Par. 126 of the UW Statutes Resolution No. 443 of 26 June 2019</p>
We offer:	<ul style="list-style-type: none">- the possibility of working in a newly established research group and shaping the group's activities- the possibility to work in international and interdisciplinary teams in collaboration with the top researchers in the field of relativistic quantum chemistry and multiscale quantum chemistry methods- the possibility of working online- the possibility to participate in numerous excellent online courses on programming and data analysis- the opportunity to actively shape one's career in academia and outside
Please submit the following documents to:	E-mail: careers@cent.uw.edu.pl with 'CeNT-53-2023' as the email title
Application deadline:	22/12/2023
Date of announcing the results:	15/01/2023
Method of notification about the results:	Email, websites: UW, Ministry of Education and Science, CeNT UW

The competition is the first stage of the recruitment procedure for the position of academic teacher specified in the Statutes of the University of Warsaw, and its positive result is the basis for further proceedings. Following an initial screening of the applications, selected candidates will be contacted by e-mail for further recruitment steps.



CeNT-53-2023

Dyrektor Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego za zgodą Rektora Uniwersytetu Warszawskiego, ogłasza konkurs na stanowisko stażysty podoktorskiego (starszego asystenta) w grupie pracowników badawczych w Laboratorium Symulacji Systemów Chemicznych i Biologicznych Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego.

OGŁOSZENIE O KONKURSIE

Stanowisko:	Stażysta podoktorski (starszy asystent)
Laboratorium:	Laboratorium Symulacji Systemów Chemicznych i Biologicznych
Dyscyplina naukowa:	Nauki chemiczne
Słowa kluczowe:	chemia kwantowa, metody typu „multi-scale/embedding”, właściwości molekularne, ciężkie atomy, efekty relatywistyczne, teoretyczna spektroskopia molekularna, oddziaływania niekowalencyjne
Forma zatrudnienia:	Umowa o pracę
Wymiar etatu:	Pełny etat
Liczba stanowisk:	1
Wynagrodzenie miesięczne:	7 300 - 9 200 PLN/miesiąc w zależności od kwalifikacji i doświadczenia, plus „trzynastka”
Termin rozpoczęcia pracy:	1/02/2024 lub najszybciej jak to możliwe po tym terminie
Maksymalny okres zatrudnienia/umowy stypendialnej:	12 miesięcy
Jednostka UW:	Centrum Nowych Technologii
Kierownik projektu:	Małgorzata Olejniczak
Tytuł projektu:	Metody typu „embedding” w chemii kwantowej – przesuwając granice modelowania właściwości molekularnych złożonych układów zawierających ciężkie atomy
Typ konkursu:	SONATA BIS 10
Instytucja finansująca:	NCN
Opis projektu:	Projekt opiera się na interdyscyplinarnych badaniach prowadzonych na pograniczu obliczeniowej chemii kwantowej, matematyki stosowanej i nauki o danych, których celem jest zrozumienie właściwości złożonych układów molekularnych. Celem projektu jest opracowanie metodologii do obliczeń i analizy takich układów,



	<p>uwzględniającej obecność ciężkich atomów i innych molekuł w środowisku. Metodologia ta będzie testowana na wielu różnych układach molekularnych, również ważnych z perspektywy współczesnych zastosowań (np. nawiązujące do badań w dziedzinie środowiska czy farmacji).</p>
<p>Zakres obowiązków:</p>	<p>Kandydat będzie zaangażowany w następujące działania:</p> <ul style="list-style-type: none">(i) obliczenia właściwości molekularnych różnego rzędu w złożonych układach molekularnych z ciężkimi atomami, przy wykorzystaniu metod typu „embedding” w chemii kwantowej (subsystem-DFT),(ii) optymalizacja i tworzenie skryptów do wielostopniowych obliczeń na klastrach HPC,(iii) analiza wyników z użyciem metod nowoczesnej analizy danych,(iv) aktywny udział w przygotowywaniu publikacji,(v) aktywny udział w działaniach grupy (spotkaniach, seminariach – możliwość uczestniczenia on-line) i pomoc studentom zaangażowanym w projekt. <p>W zależności od zainteresowań kandydata, zakres zadań (i) – (iii) jest do negocjacji.</p>
<p>Profil kandydata/ wymagania:</p>	<p>Do konkursu mogą przystąpić osoby, które spełniają warunki określone w:</p> <ul style="list-style-type: none">- ustawie z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2023 r., poz. 574 z późn. zm.) i Statucie UW;- Regulaminie przyznawania środków na realizację zadań finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki w zakresie projektów badawczych, dla konkursu SONATA BIS-10 <p><u>Wymagania:</u></p> <ul style="list-style-type: none">- stopień doktora w dziedzinie chemii fizycznej- znajomość podstaw chemii kwantowej i doświadczenie w obliczeniach wykorzystujących metody chemii kwantowej,- znajomość pracy na klastrach HPC,- umiejętność i chęć współpracy, także w grupach z zagranicznymi partnerami, komunikatywność,- otwartość na nowe wyzwania, ciekawość, chęć uczenia się,- bardzo dobra znajomość języka angielskiego (w mowie i w piśmie). <p>Dodatkowo, mile widziane są zainteresowania na pograniczu matematyki, analizy danych i chemii teoretycznej.</p>



Informacje praktyczne:

- korzystamy z programów obliczeniowych chemii kwantowej (głównie DIRAC i AD),,
- liczymy na klastrach HPC (Unix, Linux),
- sami piszemy programy i skrypty (m.in. w języku Python, Rust, Fortran),
- korzystamy z Gita,
- korzystamy z dobrych praktyk w nauce (FAIR), dobrych praktyk przy tworzeniu programów i skryptów („extreme programming”),
- uczymy się od innych, m.in. od programistów i analityków danych,
- stosujemy rozwiązania ułatwiające pracę (monitorowanie projektów i zadań) i umożliwiające pracę zdalną.

Kandydat powinien posiadać stopień doktora nie dłużej niż 7 lat przed dniem podpisania umowy o pracę w projekcie. Stopień doktora powinien być uzyskany w państwach UE, EFTA, OECD lub nostryfikowany najpóźniej na dzień zatrudnienia w projekcie.

Wymagane dokumenty:

1. List motywacyjny
2. Aktualny Życiorys
3. Kopia dyplomu doktorskiego lub innego dokumentu potwierdzającego, że kandydat uzyska stopień doktora najpóźniej na dzień zatrudnienia w projekcie
4. Lista publikacji
5. Podpisana [informacja o przetwarzaniu danych osobowych](#)
6. [Podpisane oświadczenie](#), w którym kandydat potwierdza, że zapoznał się i akceptuje zasady przeprowadzania konkursów, zawarte w następujących dokumentach:
[Zarządzenie nr 106 Rektora UW z dnia 27 września 2019](#)
Par. 126 Statutu UW [Uchwała nr 443 z 26 czerwca 2019](#)

Oferujemy:

- możliwość pracy w nowopowstającej grupie badawczej
- możliwość współpracy z naukowcami na pograniczu dziedzin (chemia kwantowa: relatywistyczna, obliczenia typu „embedding”)
- możliwość pracy zdalnej
- możliwość doszkalania się w pokrewnych dziedzinach (programowanie, analiza danych)
- środowisko sprzyjające kreowaniu własnej kariery naukowej



Forma nadsyłania zgłoszeń:	Mailowo na adres: careers@cent.uw.edu.pl z numerem konkursu 'CeNT-53-2023' w tytule maila
Termin nadsyłania zgłoszeń:	22/12/2023
Termin ogłoszenia wyników konkursu:	15/01/2023
Sposób informowania o wynikach konkursu:	Email, strony www: UW, CeNT, BIP MEiN

Konkurs jest pierwszym etapem określonej w Statucie UW procedury zatrudniania na stanowisku nauczyciela akademickiego, a jego pozytywne rozstrzygnięcie stanowi podstawę do dalszego postępowania. Po dokonaniu wstępnej analizy nadesłanych zgłoszeń, skontaktujemy się z wybranymi kandydatami celem przeprowadzenia dalszych etapów procedury rekrutacyjnej.