



UNIwersytet
Warszawski

Wydział Chemii



Warszawa, dnia 5.07.2022 r.

WCH.1210-12/2022

Ogłoszenie o konkursie

na stanowisko **Asystenta** (Post-doc, grupa pracowników badawczych) w ramach projektu CELSA: „Merging Excited State Decay Rate Theories with Semi-Classical Non-adiabatic Excited State Dynamics (PhotoSynergy)”. Kierownik projektu: dr Joanna Jankowska

Osoba zatrudniona będzie prowadziła badania w zakresie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne. Liczba dostępnych etatów: 1;

Tematyka badawcza:

Projekt „Merging Excited State Decay Rate Theories with Semi-Classical Non-adiabatic Excited State Dynamics (PhotoSynergy)” poświęcony jest rozszerzeniu istniejącego protokołu symulacji molekularnej dynamiki nieadiabaticznej (NAMD) w ujęciu Tully’ego o opis deaktywacji cząsteczek przez emisję fluorescencji. Głównym jego celem jest **opracowanie, implementacja** oraz szeroko zakrojone **przetestowanie** zmodyfikowanego algorytmu ‘surface-hopping’, w którym oprócz prawdopodobieństwa nieadiabaticznego skoku między stanami elektronowymi uwzględnione zostanie w analogiczny sposób prawdopodobieństwo przejścia emisyjnego. Z uwagi na typową skalę czasową przejść promienistych, punktem wyjścia do opracowania nowej metody symulacji będzie jedna ze znanych, efektywnych implementacji NAMD oparta na wysokojakościowym pół-empirycznym opisie struktury elektronowej cząsteczek (np. w ramach kodu MNDO99) i/lub wykorzystująca elementy uczenia maszynowego do przewidywania przebiegu trajektorii dynamicznych.

Projekt jest realizowany w bezpośredniej współpracy z zespołem prof. Danielem Escudero z KU Leuven (Belgia).

Kwalifikacje kandydata/teki:

- stopień doktora nauk w zakresie chemii lub fizyki, uzyskany nie wcześniej niż 7 lat przed rokiem zatrudnienia w projekcie (może być również doktorant/doktorantka z otwartym przewodem doktorskim),
- dobra znajomość języka angielskiego,
- zaawansowana wiedza z zakresu chemii teoretycznej oraz molekularnej spektroskopii optycznej,
- doświadczenie w prowadzeniu obliczeń kwantowo-chemicznych, udokumentowane publikacjami naukowymi w czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej (Thomson Scientific Master Journal List),
- atutem będzie doświadczenie w stosowaniu technik symulacji nieadiabaticznej dynamiki molekularnej (NAMD) i/lub doświadczenie w rozwoju i implementacji metod chemii kwantowej.

Kandydat/ka musi spełniać wymagania zawarte w art. 113 ustawy - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dn. 20.07.2018 (t.j.: Dz. U. z 2022 r., poz. 574).

Podstawowe obowiązki:

- prowadzenie działalności naukowej, w tym badań teoretycznych związanych z realizacją projektu, w szczególności modelowanie teoretyczne właściwości i dynamiki procesów fotofizycznych w układach molekularnych,
- monitorowanie literatury naukowej z zakresu projektu,



UNIwersytet
Warszawski

Wydział Chemii



- udział w przygotowaniu publikacji naukowych.

Zgłoszenie powinno zawierać:

- życiorys (CV),
- list motywacyjny (do 300 słów, w języku angielskim),
- informacja o przetwarzaniu danych osobowych (do pobrania: <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/>),
- oświadczenie o zapoznaniu się i akceptacji zasad przeprowadzenia konkursów na UW (do pobrania: <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/>)
- przynajmniej jedna opinia o Kandydacie / Kandydatce wystawiona przez samodzielnego pracownika naukowego i przesłana bezpośrednio mailem na adres dr. Jankowskiej (jjankowska@chem.uw.edu.pl).

Warunki zatrudnienia:

Zatrudnienie na pełnym etacie. Praca od 1 października 2022 do 30 września 2023 r., na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Wynagrodzenie w kwocie 22 000 euro/rok (kwota brutto brutto),

Termin składania dokumentów upływa z dniem 15.08.2022 r.

Zgłoszenia należy przysyłać na adres: jjankowska@chem.uw.edu.pl dopiskiem w tytule: Post-Doc Nazwisko Imię.

Decyzja komisji konkursowej będzie przedstawiona kandydatom za pomocą poczty elektronicznej do 6.09.2022 r.

Konkurs jest pierwszym etapem procedury zatrudnienia na stanowisku nauczyciela akademickiego, a jego pozytywne rozstrzygnięcie stanowi podstawę do dalszego postępowania.



UNIwersytet
Warszawski

Wydział Chemii



Warsaw, 5.07.2022

WCH.1210-12/2022

An announcement for assistant position

Position of a **Postdoctoral researcher** (research assistant in a group of science positions) in the CELSA project entitled 'Merging Excited State Decay Rate Theories with Semi-Classical Non-adiabatic Excited State Dynamics (PhotoSynergy)' financed by the University of Warsaw is open for application. Project leader: Dr. Joanna Jankowska.

The post-doc will run research in exact and natural sciences, in discipline of chemical sciences. Available positions: 1.

Research scope:

The research project, titled 'Merging Excited State Decay Rate Theories with Semi-Classical Nonadiabatic Excited State Dynamics (PhotoSynergy)', is situated in the field of computational photochemistry. Specifically, it focuses on developing and applying methodologies that will allow modeling of Time-Correlated Single Photon Counting (TCSPC) spectra with *on-the-fly* molecular dynamics techniques, such as Tully fewest-switches surface hopping (TSH) algorithm. The main research goal is to **design**, to **implement** and to **test** the new, modified NAMD protocol, which will treat nonadiabatic and radiative (fluorescence) transitions on equal footing. Considering the relatively long timescale of radiative deactivation processes, to achieve our goal, we will take advantage of existing most efficient semi-empirical electronic-structure methods (e.g., as implemented in the MNDO99 code), and/or employ machine learning (ML) solutions to enhance predictions for long dynamic trajectory runs.

The project is performed in direct cooperation with the research team of Prof. Daniel Escudero at KU Leuven (Belgium).

We are looking for motivated candidates:

- with a PhD degree in chemistry or physics, defended no earlier than 7 years before the year of employment in the project (or thesis close to being defended),
- good command of English,
- advanced knowledge in the field of theoretical chemistry and optical molecular spectroscopy,
- experience in performing quantum-chemical calculations, confirmed by scientific publications in high-rank journals (cited in Thomson Scientific Master Journal List)
- experience in conducting nonadiabatic molecular dynamics (NAMD) simulations and/or theoretical chemistry methods development will be an asset.

The candidate must meet the requirements of art. 113 of the Act - Law on Higher Education and Science dated July 20, 2018 (Journal of Laws of 2021, item 574).

Main duties:

- conducting scientific activities, including theoretical modeling of photophysical and photo-dynamic properties of molecular systems, as described in the project,

- monitoring scientific literature in the field of the project,
- participation in the preparation of scientific publications.

We offer:

A temporary contract with the University of Warsaw (full time position from 1 October 2022 till 30 September 2023), with a salary of 22 000 euro per year (before taxes and social security deduction).

Required documents:

- Curriculum Vitae (CV),
- Motivation letter (up to 300 words, in English),
- information on the processing of personal data (the template available at: <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/>),
- declaration of reading and acceptance of the rules for conducting competitions at the University of Warsaw (a template available at: <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/>),
- at least one reference letter provided by a PI, sent by email directly to Dr. Jankowska (jjankowska@chem.uw.edu.pl).

Please submit the documents **no later than 15 August 2022** to:

jjankowska@chem.uw.edu.pl (PDF is the preferred format). E-mail should be entitled: "Post-Doc Last-name First-name".

The results of the competition will be given by e-mail till 6 September 2022.

The competition is the first stage of the employment procedure as an academic teacher, and its positive outcome is the basis for further proceedings.