



NARODOWE CENTRUM NAUKI

Oferta pracy: doktorant - stypendysta w projekcie badawczym OPUS 13 finansowanym przez NARODOWE CENTRUM NAUKI

„Teoretyczna spektroskopia molekularna wysokiej rozdzielczości dla stanu podstawowego i stanów wzbudzonych cząsteczek metodami jawnie skorelowanej teorii sprzężonych klasterów”

NCN OPUS 13, nr UMO- 2017/25/B/ST4/02698,

kierownik prof. dr hab. Robert Moszyński,

Wymagania dla kandydata:

- jest doktorantem, uczestnikiem studiów doktoranckich prowadzonych przez uprawnioną jednostkę organizacyjną uczelni, instytut naukowy Polskiej Akademii Nauk, instytut badawczy lub międzynarodowy instytut naukowy działający na terytorium Rzeczypospolitej Polskiej utworzony na podstawie odrębnych przepisów,
- jest uczestnikiem seminarium doktorskiego i pracuje nad przygotowaniem rozprawy doktorskiej,
- dobra znajomość języka angielskiego,
- dobra znajomość metod ab initio chemii teoretycznej, w szczególności podstaw metod jawnie skorelowanych,
- dobra znajomość języków programowania np. C++, Fortran,
- silna motywacja do pracy naukowej i zdolność uczenia się.

Zadania:

Celem proponowanych badań jest opracowanie, implementacja i zastosowanie metod jawnie skorelowanych chemii teoretycznej dla obliczeń stanów wzbudzonych układów molekularnych, a także szeregu własności molekularnych. Głównie prace koncentrować się będą na metodach coupled cluster z użyciem orbitali Slatera jako bazy jednoelektronowej. Konieczne jest znalezienie optymalnego schematu przybliżeń pozwalającego na uzyskanie spektroskopowej dokładności obliczeń (np. z użyciem rozwinięcia operatora jedyńki), a także zaproponowanie praktycznej postaci tzw. czynnika korelacyjnego.

Warunki zatrudnienia:

- miejsce realizacji zadań badawczych: Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego,
- stypendium naukowe 3000 PLN przez 36 miesięcy,
- finansowanie wyjazdów na konferencje naukowe.

Wymagane dokumenty:

- list motywacyjny (z opisem wcześniej prowadzonych badań),
- opinia promotora pracy magisterskiej,
- wykaz ocen ze studiów I i II stopnia lub jednolitych studiów magisterskich,
- odpis dyplomu ukończenia studiów magisterskich (lub inny dokument potwierdzający ich ukończenie),
- CV.

Termin przyjmowania zgłoszeń drogą elektroniczną (preferowana forma) lub tradycyjną: 27 maja 2018

Termin rozstrzygnięcia konkursu: 4 czerwca 2018 roku.

Kontakt: prof. dr hab. Robert Moszyński, Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego (pok. F- 402), ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa,
Tel.: 22 55 26 389

e-mail: rmoszyns@tiger.chem.uw.edu.pl