



UNIwersytet  
WARSAWski

Wydział Chemii



Warszawa, dnia 15/07/2019 r.

### Oferta pracy dla doktoranta stypendysty

na stanowisko **doktoranta stypendysty** w ramach projektu: „**Rozwijając krystalografię kwantową w celu lepszego wejścia w strukturę i właściwości kryształów**”.

Kierownik projektu: **Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak**

Osoby zatrudniona w ramach niniejszego konkursu będzie odpowiedzialna za realizację zadań w ramach w/w grantu naukowego przyznanego przez NCN decyzją:

**NR DEC-2018/31/B/ST4/02142**

Liczba dostępnych stanowisk: **1**

#### Kwalifikacje kandydata/teki:

##### 1. Doktorant

- **tytuł magistra nauk w zakresie chemii lub fizyki**
- **praktyczna znajomość zaawansowanej krystalografii na poziomie magisterskim najlepiej potwierdzona publikacjami (włącznie ze znajomością symetrii, rentgenowskiej analizy strukturalnej)**
- **doświadczenie w udokładnieniu krystalograficznym**
- **doświadczenie w samodzielnym prowadzeniu pomiarów krystalograficznych**
- **umiejętność statystycznego analizowania wyników udokładnienia krystalograficznego**
- **doświadczenie w krystalizacji**
- **bardzo dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie**
- **umiejętność pracy zespołowej**

##### Mile widziane:

- **doświadczenie w zastosowaniu metody HAR (preferowane) lub innych metodach krystalografii kwantowej**
- **umiejętność programowania w językach C++ i Python**
- **doświadczenie w metodach ab-initio obliczeniowej chemii kwantowej i w metodach ab initio dla ciała stałego**
- **doświadczenie w pisaniu skryptów**

Kandydat/ka musi spełniać wymagania zawarte w art. 113 ustawy - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dn. 20.07.2018 (Dz.U. z 2018 r., poz. 1668 z późn. zm.).

#### Zgłoszenie powinno zawierać:

- **list motywacyjny**
- **życiorys (CV),**
- **informacja o przetwarzaniu danych osobowych (wzór do pobrania - <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/>),**
- **spis publikacji (i/lub wykonanych programów) z podkreśleniem 2 najważniejszych prac**
- **krótki opis 2 najważniejszych osiągnięć**

- **kopię dyplomu magisterskiego**
- **Opinia poprzedniego promotora - lub szefa - z naciskiem na opis samodzielności i kwalifikacji kandydata/ki**

**Warunki zatrudnienia:**

Stypendium naukowe. Praca od **2/10/2019** do **30/09/2022**, na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego.

**Termin składania dokumentów** upływa z dniem: **20/08/2019r.**

Zgłoszenia należy przesyłać na adres: **[qc@chem.uw.edu.pl](mailto:qc@chem.uw.edu.pl)**

Dokumentacja złożona przez kandydatów zostanie oceniona przez komisję Komisje Rekrutacyjną, której przewodniczy kierownik projektu **Prof. Krzysztof Woźniak**. Decyzja komisji będzie przedstawiona kandydatom za pomocą poczty elektronicznej/telefonicznie do **15/09/2019 r.**

**Procedura rekrutacji jest 2-stopniowa. W pierwszym etapie oceniane są przez Komisję Rekrutacyjną dokumenty złożone przez aplikantów i na ich podstawie wybranych będzie do 6 osób, które zaproszone będą na rozmowę kwalifikacyjną. W uzasadnionych przypadkach rozmowa ta może także odbyć się drogą internetową. Tylko osoby które złożą kompletną dokumentację będą rozważane w procedurze rekrutacyjnej.**

**Stypendium naukowe wynosi 4 500PLN**

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

## **Abstrakt projektu: „Rozwijając krystalografię kwantową w celu lepszego wejrzenia w strukturę i właściwości kryształów”.**

**Research project objectives/Research hypothesis.** This project aims at creation and validation of new methods of extraction of more accurate and precise structural information (geometrical, electronic and thermal parameters) from single crystal X-ray diffraction (XRD) experiments than this is possible by using presently available methods of refinement of X-ray data. This will be achieved by advancing quantum crystallography methods (in particular Hirshfeld Atom Refinement – HAR) well beyond the present state-of-the-art. The current implementation of HAR is, in practice, limited to a certain class of small molecules because for larger molecules computation are by far too long. Our application aims at a significant extension of capabilities of the HAR approach to cover large molecules with the help of quantum chemical methods especially designed for such systems (significantly reducing computing time) and disordered structures so common in crystallographic studies.

As the stockholder(Hirshfeld) method of partitioning of electron density into atomic contributions, which is used in HAR, can be extended and there exist more approaches rooted in this partitioning and showing certain advantages over the original method, we plan to test the alternative approaches in HAR like refinement and compare their performance to the original HAR method and other classical methods of refinement.

We also plan to create a databank of a Hirshfeld atomic electron densities derived directly from quantum chemical calculations. Such ready bricks of electron density can be used to reconstruct electron density in proteins, and small molecules, and they should preserve some advantages of the quantum chemical model of electron density at drastically reduced computational costs of refinement particularly in the case of macromolecules.

**Research project methodology.** Realization of the proposed advancements requires:

- development of a new software platform for testing novel approaches for crystal structure refinement. This would involve basic and flexible refinement program as well as tools for integration of the new developments with mature commonly used crystallographic refinement codes. Availability of this kind of tools is essential for rapid testing of new ideas and methodologies.

-verification of the true precision and accuracy of the proposed new methods by statistical analysis of results of multiple X-ray measurements and refinements of the collected data performed for a series of model crystals of increasing complexity to prove broad applicability of new solutions. Our results will be compared to the precision and accuracy of IAM structural results (+multipolar refinement and original HAR methods). The series consists of single crystals of the following compounds: a few simple model organic compounds such as, for example, oxalic acid, glycine, carboxylic acid salts and complexes, more complex metalorganic compounds with different metal ions and hydrogen atoms and small and larger proteins such as lysozyme, crambin etc. As original HAR seems to work correctly even for small resolution, we also want to test its applicability in high pressure structural studies.

**Expected impact of the research project on the development of science.** Proposed enhancements are intended to effectively replace a 100-years old and too much simplified, spherical Independent Atom Model (IAM) of atomic electron density in the refinement of structural/electronic models of crystals against intensities of scattered X-ray beams (these are ca. 99.7% of all refinements performed so far for ca. 1.4mln of crystal structures) and to replace more modern methods of refinement based on aspherical scattering factors such as multipole refinement or refinements based on databanks of pseudatoms or original HAR (ca. 0.3% of all refinements). By improving HAR we will improve quality of structural information extracted from measured intensities of X-ray reflections. This will help in solutions of different structural and electronic problems in different fields of science particularly on the biol/chem/phys interface.

**Pioneering nature of the research project.** Recent introduction of Hirshfeld Atom Refinement (HAR) has already led to a paradigm shift in the precise determination of hydrogen atom positions now possible with HAR against single crystal X-ray data. HAR is an excellent example of Quantum Crystallography (QC) - a new emerging field of science that aims at extracting information from different experiments (including X-ray experiments) by adopting a quantum mechanical approaches. Advancing HAR beyond the present state-of-the-art means broadening borders of modern crystallography and through a better quality of structural information creating new chances for solving problems in other fields of science such as medicine, pharmacy, materials science, physics, biology, chemistry, etc.