

Am Interdisziplinären Zentrum für wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg sind für das Fachgebiet Computergestützte und theoretische Chemie in der ab September 2024 neu gegründeten Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. Saeed Amirjalayer (www.samirjalayer.de) ab dem 01.11.2024 zwei Stellen in Teilzeit (66%) zunächst befristet auf 2 Jahre als

Akademische*r Mitarbeiter*in (PhD) (w/m/d) Promotionsstelle

zu besetzen.

Ihre Aufgaben:

- Multiskalen Simulationen von Stimuli-responsiven Funktionsmaterialien
- Untersuchung von strukturellen und dynamischen Eigenschaften von molekularen Schaltern und Maschinen
- Entwicklung und Anwendung von evolutionären Algorithmen, neuronalen Netzwerken und maschinellem Lernen zur Modellierung, Auswertung und Visualisierung von dynamischen Phänomenen
- Wissenschaftliche Zusammenarbeit und Austausch mit experimentellen Gruppen

Ihr Profil:

- Erfolgreich abgeschlossenes Grundstudium (M.Sc. oder gleichwertig) in Chemie, Physik oder einem verwandten Fachgebiet
- Hohe Motivation, neue theoretische Methoden zu erlernen, weiterzuentwickeln und anzuwenden
- Teamfähigkeit, Kommunikationsstärke und Lernbereitschaft im Team
- Idealerweise Erfahrungen im Umgang mit quantenchemischen und/oder molekülmechanischen Softwarepaketen sowie in der Programmierung
- Gute Kommunikationsfähigkeit in Englisch, sowohl mündlich als auch schriftlich

Wir bieten:

- Exzellentes, innovatives Forschungsmilieu
- Aktive Unterstützung bei der akademischen Karriereentwicklung
- Kollegiales, interdisziplinäres, internationales und diversitätsfreundliches Arbeitsumfeld
- Auf Bedürfnisse angepasste Weiterbildungsangebote
- Auf Bedürfnisse angepasste Maßnahmen zur Förderung von Diversität sowie Vereinbarkeit von Beruf und Familie
- Bezuschusstes Deutschlandticket

Die Vergütung erfolgt nach Entgeltgruppe 13 TV-L.

Bitte senden Sie Ihren Lebenslauf, ein aussagekräftiges Motivationsschreiben, in dem Sie Ihr Interesse an der computergestützten und theoretischen Chemie im Bereich der Materialwissenschaften darlegen, sowie Empfehlungsschreiben und relevante Abschluss- oder Arbeitszeugnisse in einer einzigen PDF-Datei per E-Mail mit Betreff "Phd/HD" an untenstehende Kontaktadresse. Bitte beachten Sie, dass nur vollständige Bewerbungen berücksichtigt werden. Die Bewerbungsfrist endet am **16. September 2024**, jedoch bleibt die Stelle ausgeschrieben, bis ein*e geeignete*r Kandidat*in gefunden ist.

Universität Heidelberg
Interdisziplinäres Zentrum für wissenschaftliches Rechnen
zu Händen Frau Felicitas Hirsch
Im Neuenheimer Feld 205A
69120 Heidelberg
felicitas.hirsch@iwr.uni-heidelberg.de

Die Universität Heidelberg steht für Chancengleichheit und Diversität. Wir bitten qualifizierte Frauen nachdrücklich um ihre Bewerbung. Menschen mit Schwerbehinderung werden bei gleicher Eignung vorrangig berücksichtigt. Informationen zu Stellenausschreibungen und zum Datenschutz finden Sie unter www.uni-heidelberg.de/stellenmarkt.

English version

At the Interdisciplinary Center for Scientific Computing of the Heidelberg University the new working group of Prof. Dr. Saeed Amirjalayer (www.samirjalayer.de), established in September 2024, is seeking to fill two part-time positions in the field of computational and theoretical Chemistry, starting from 01.11.2024 and initially limited for a period of 2 years, as

Research Associate / PhD Candidate (f/m/d)

Your tasks:

- Multiscale simulations of stimuli-responsive functional materials
- Investigation of structural and dynamic properties of molecular switches and machines
- Development and application of evolutionary algorithms, neural networks and machine learning for modeling, evaluation and visualization of dynamic phenomena
- Scientific collaboration and exchange with experimental groups

Your profile:

- Successfully completed undergraduate studies (M.Sc. or equivalent) in chemistry, physics or a related field
- High motivation to learn, develop and apply new theoretical methods
- Ability to work in a team, strong communication skills and willingness to learn in a team
- Ideally experience in working with quantum chemistry and/or molecular mechanics software packages and programming
- Good communication skills in English, both oral and written

We offer:

- Excellent and innovative research environment
- Strong support for academic career development
- Collegial, interdisciplinary, and diversity-friendly international working environment
- Customized continuing education programs
- Tailored initiatives to promote diversity and work-life balance
- Subsidized "Deutschlandticket"

Remuneration is in accordance with pay group 13 TV-L.

Please submit your CV, a compelling letter of motivation detailing your interest in computational and theoretical chemistry within the field of materials science, along with letters of recommendation and relevant degree or job references, in one collated PDF file with the subject "Phd/HD" to the contact address provided below. Only complete applications will be considered. The application deadline is **16 September 2024**; however, the position will remain open until a suitable candidate is selected.

Heidelberg University
Interdisciplinary Center for Scientific Computing
zu Händen Frau Felicitas Hirsch
Im Neuenheimer Feld 205A
69120 Heidelberg
felicitas.hirsch@iwr.uni-heidelberg.de

Heidelberg University stands for equal opportunities and diversity. Qualified female candidates are especially invited to apply. Persons with severe disabilities will be given preference if they are equally qualified. Information on job advertisements and the collection of personal data is available at www.uni-heidelberg.de/en/job-market.