



Job ID: #JOB 51/2020

Job Description

Job Title: PostDoc specialised in advanced computational methods concerning molecular potentials with strong anharmonicity

Job Summary:

The employed winner of the competition will carry out scientific research in support of experimental measurements of molecules and intermolecular complexes performed with rotational spectroscopy. The very precise experimental results obtained from experiment are often difficult to interpret due to large vibration-rotation contributions to the determined spectroscopic parameters and require advanced computational methods for their analysis and reliable determination of molecular and cluster properties.

Job Description:

The foreseen tasks will concern molecules and intermolecular complexes characterised by complex potential energy surfaces comprising of many minima separated by low barriers. Computation of multidimensional potential energy surfaces will be required, by using contemporary advanced quantum chemistry methods, such as coupled cluster methods (CCSD(T)) and symmetry adapted perturbation theory (SAPT). The next step will be construction of multiparameter analytical potentials describing the raw computed values. These will then be used to determine structures and topology of the studied species. Finally, the positions of vibration-rotation levels will be determined by solving the nuclear Schrödinger equation by means of the variational method, and used in the analysis of spectroscopic results.

Desired abilities:

- Experience (preferably documented with scientific publications) in carrying out advanced computations with the use of various computational packages, in particular CFOUR, Gaussian i Molpro.
- Experience in installation and running of computing packages in multithreaded and multiprocessor environments (especially under Linux)
- Proficiency in the programming languages Fortran and C++
- Independence in carrying out research tasks and proficiency in writing scientific texts (preferably in LaTeX).

Main research field: Physics

Sub Research Field: Rotational spectroscopy

Experience: PhD

Research Profile ([details](#)): Recognised Researcher (R2)

Type of Contract: Initially for 2 years with possible extension

Salary: 4300 PLN per month (before taxes).

Contact

More information can be obtained from prof. dr hab. Zbigniew Kisiel (e-mail: kisiel@ifpan.edu.pl).

Application details

Application deadline: 21st November 2020 Applications after deadline are not considered.

Required materials:

- **Curriculum Vitae**
- **List of publications**
- **Motivation letter**
- **At least two letters of reference**
- **Consent to process your personal data (expressed on the form attached to this announcement)**

All materials should be submitted in electronic form to the address: jobs@ifpan.edu.pl with Job ID in the subject.

DATA PROCESSING UNDER CONSENT FOR THE PURPOSES OF RECRUITMENT

Under Art. 13 sections 1 and 2 of the Regulation of the European Parliament and of the Council (EU) 2016/679 of 27 April 2016 on the protection of natural persons with regard to the processing of personal data and on the free movement of such data, and repealing Directive 95/46/EC (General Data Protection Resolution), EU OJ L 119 of 04.05.2016, page 1, as amended, hereinafter referred to as "GDPR", we hereby inform as follows:

1. The Data Controller of the provided personal data is the Institute of Physics of the Polish Academy of Sciences, Al. Lotników 32/46, 02-668 Warsaw, phone (22) 116-2111, e-mail director@ifpan.edu.pl.
2. Contact details to the Data Protection Officer are as follows: e-mail iodo@ifpan.edu.pl
3. Your personal data shall be processed for the purpose of carrying out the recruitment process for the position of PostDoc.
4. Processing of your personal data in scope of: full name, date of birth, correspondence address, information about education and course of past employment shall take place under Art. 22¹ § 1 of the Act of 26 June 1974 - Labour Code. In the scope in which you sent to us more personal data than indicated above, we process your data under the consent granted by you.
5. Your personal data shall be stored for 1 month from completion of the recruitment process. If you grant consent for processing of personal data for future recruitments, we shall process your data until withdrawal of the consent by you, however, no longer than for the period of 6 months from the day of submittal of the application by you.
6. Provision of the abovementioned data in the scope indicated above is a statutory requirement resulting from Art. 22¹ § 1 of the Act of 26 June 1974 - Labour Code, in the remaining scope it is voluntary. Failure to provide the data referred to in Art. 22¹ § 1 of the Act of 26 June 1974 - Labour Code precludes consideration of your candidacy for the offered position.
7. You have the right to access your personal data, to rectify them, erase them, restrict their processing.
8. You may submit a complaint to the Inspector General for the Protection of Personal Data.
9. You have the right to withdraw the consent to process your personal data in the scope in which they were provided at any time. Withdrawing the consent does not affect the lawfulness of processing carried out on the basis of consent before its withdrawal.

Consent content:

I grant my consent to the Institute of Physics of the Polish Academy of Sciences to process my personal data contained in the sent recruitment documents for the purpose of carrying out the recruitment process for the position of PostDoc .

If you want us to consider your candidacy also in the future recruitment processes, please grant the additional consent:

I grant my consent to the Institute of Physics of the Polish Academy of Sciences to process my personal data contained in the sent recruitment documents in future recruitment processes taking place during 6 months from the day of appearance of this job advertisement.



ID Oferty: (numer będzie wpisany przez administrację)

Opis stanowiska

Stanowisko: asystent o specjalności zaawansowanych metod obliczeniowych dotyczących potencjałów molekularnych o silnej anharmoniczności

Krótką informacją o stanowisku:

Zatrudniony zwycięzca konkursu będzie prowadził badania naukowe wspierające pomiary eksperymentalne cząsteczek i kompleksów międzycząsteczkowych wykonywane metodą spektroskopii rotacyjnej. Bardzo precyzyjne wyniki otrzymane z eksperymentu są często trudne w interpretacji z powodu dużych wkładów oscylacyjno-rotacyjnych do wyznaczonych stałych spektroskopowych i wymagają zaawansowanych metod obliczeniowych do ich analizy i wiarygodnego wyznaczenia własności molekularnych i klasterowych.

Szczegółowy opis stanowiska pracy:

Przewidywane prace będą dotyczyły cząsteczek i kompleksów międzymolekularnych charakteryzujących się złożonymi powierzchniami energii potencjalnej o szeregu minimów oddzielonych niskimi barierami. Wymagane będzie obliczenie wielowymiarowych powierzchni energii potencjalnej za pomocą współczesnych metod chemii obliczeniowej, takich jak metoda sprzężonych klastrów (CCSD(T)) oraz metoda zwana rachunkiem zaburzeń o adaptowanej symetrii (SAPT). Następnie, na podstawie obliczonych wartości energii potencjalnej zostaną skonstruowane wieloparametrowe potencjały analityczne. Na podstawie tych potencjałów zostanie zbadana struktura kompleksów i topologia powierzchni. Na końcowym etapie, poziomy rotacyjno-oscylacyjne zostaną obliczone poprzez rozwiązanie jądrowego równania Schrödingera metodą wariacyjną, i wykorzystane w analizie danych eksperymentalnych.

Pożądane umiejętności:

- doświadczenie (najlepiej udokumentowane publikacjami naukowymi) w wykonywaniu zaawansowanych obliczeń z wykorzystaniem różnych pakietów obliczeniowych, w szczególności CFOUR, Gaussian i Molpro.
- doświadczenie w instalowaniu pakietów obliczeniowych, w środowisku wielowątkowym i wieloprocesorowym (w szczególności pod systemem Linux)
- dobra znajomość języków programowania Fortran i C++
- samodzielność w realizacji powierzonych zadań i umiejętność pisanie tekstów naukowych (szczególnie w systemie LaTeX).

Dyscyplina naukowa: Fizyka

Specjalność: Spektroskopia molekularna

Doświadczenie: Posiadanie stopnia doktora

Profil naukowy wg EURAXESS ([szczegóły](#)): Uczony drugiego stopnia (R2)

Tryb zatrudnienia: Dwa lata z możliwością przedłużenia

Wymiar etatu: Pełny etat

Wynagrodzenie: 4300 PLN miesięcznie (brutto).

Kontakt

Dodatkowych informacji o stanowisku udziela prof. dr hab. Zbigniew Kisiel (e-mail: kisiel@ifpan.edu.pl).

Składanie dokumentów

Termin składania: 21 listopada 2020 **Zgłoszenia po terminie nie będą rozpatrywane.**

Wymagane dokumenty:

- Curriculum Vitae
- Lista publikacji
- List motywacyjny
- Zgoda na przetwarzanie danych osobowych
- Przynajmniej dwa listy referencyjne

Wszystkie materiały należy przesłać w formie elektronicznej na adres: jobs@ifpan.edu.pl podając w temacie ID Oferty.

PRZETWARZANIE DANYCH NA PODSTAWIE ZGODY W CELU REKRUTACJI

Na podstawie art. 13 ust. 1 i 2 rozporządzenia Parlamentu Europejskiego i Rady (UE) 2016/679 z dnia 27 kwietnia 2016 r. w sprawie ochrony osób fizycznych w związku z przetwarzaniem danych osobowych i w sprawie swobodnego przepływu takich danych oraz uchylenia dyrektywy 95/46/WE (ogólne rozporządzenie o ochronie danych), Dz. Urz. UE L 119 z 04.05.2016, str. 1, ze zm., zwanego dalej „RODO”, informuje się, że:

10. Administratorem podanych danych osobowych jest Instytut Fizyki PAN, Al. Lotników 32/46, 02-668 Warszawa, tel. (22) 116-2111, e-mail director@ifpan.edu.pl.
11. Dane kontaktowe do inspektora ochrony danych osobowych są następujące: e-mail: iodo@ifpan.edu.pl
12. Pana/Pani dane osobowe będą przetwarzane w celu przeprowadzenia procesu rekrutacyjnego na stanowisko:
13. Przetwarzanie Pana/Pani danych osobowych w zakresie : imienia i nazwiska, daty urodzenia, adresu korespondencyjnego, informacji o wykształceniu oraz przebiegu dotychczasowego zatrudnienia odbywać się będzie na podstawie art. 22¹ § 1 Ustawy z dnia 26 czerwca 1974 r. Kodeks pracy. W zakresie, w jakim wysyła Pan/Pani do nas więcej danych osobowych niż wskazany powyżej, przetwarzamy Pana/Pani dane na podstawie wyrażonej przez Pana/Panią zgody.
14. Pana/Pani dane osobowe będą przechowywane przez 1 miesiąc od momentu zakończenia rekrutacji. W przypadku wyrażenia przez Pana/Panią zgody na przetwarzanie danych osobowych na poczet przyszłych rekrutacji będziemy przetwarzać Pana/Pani dane do momentu cofnięcia przez Pana/Panią zgody, nie dłużej jednak niż przez okres 6 miesięcy od dnia złożenia przez Pana/Panią aplikacji.
15. Podanie ww danych w zakresie wskazanym powyżej jest wymogiem ustawowym wynikającym z art. 22¹ § 1 Ustawy z dnia 26 czerwca 1974 r. Kodeks pracy, w pozostałym zakresie podanie danych jest dobrowolne. Nie podanie danych, o których mowa w art. 22¹ § 1 Ustawy z dnia 26 czerwca 1974 r. Kodeks pracy, spowoduje niemożność rozpatrywania Pana/Pani kandydatury na oferowane stanowisko.
16. Ma Pan/Pani prawo żądać od nas dostępu do swoich danych osobowych, ich sprostowania, usunięcia, ograniczenia przetwarzania.
17. Przysługuje Panu/Pani skarga do Prezesa Urzędu Ochrony Danych Osobowych.
18. W każdej chwili ma Pan/Pani prawo wycofać zgodę na przetwarzanie swoich danych osobowych w zakresie w jakim zostały udzielone. Cofnięcie zgody nie będzie miało wpływu na przetwarzanie, którego dokonano na podstawie Pana/Pani zgody przed jej cofnięciem.

Treść zgody:

Wyrażam zgodę na przetwarzanie przez Instytut Fizyki PAN w celu przeprowadzenia procesu rekrutacyjnego na stanowisko: moich danych osobowych zawartych w przesłanych dokumentach rekrutacyjnych.

Jeżeli chcesz abyśmy rozpatrywali Pana/Pani kandydaturę także w późniejszych procesach rekrutacyjnych prosimy o wyrażenie dodatkowej zgody:

Wyrażam zgodę na przetwarzanie przez Instytut Fizyki PAN moich danych osobowych zawartych w przesłanych dokumentach rekrutacyjnych w kolejnych procesach rekrutacyjnych mających miejsce w ciągu 6 miesięcy od dnia ukazania się niniejszego ogłoszenia o pracy.