



Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk

Stypendium doktoranckie



ID Oferty: #JOB31/2021

Opis stanowiska

Stanowisko: Stypendysta-Doktorant

Krótką informacją o stanowisku:

Badania ab initio łamiących Regułę Hunda cząsteczek organicznych

Szczegółowy opis stanowiska pracy:

Główny cel naukowy projektu opiera się na badaniach typu ab initio nowych, dotychczas praktycznie nieznanymi, cząsteczek organicznych wykazujących inwersję S_1/T_1 w celu zrozumienia podstawowych mechanizmów oraz wyznaczenia czynników elektronowych i jądrowych odpowiedzialnych za to nieoczekiwane i rzadkie zjawisko. Jest to praktycznie dotychczas niezbadana dziedzina wymagająca intuicji chemicznej w projektowaniu tego typu cząsteczek oraz obliczania ich własności fotofizycznych. Badania te będą prowadzone przy wykorzystaniu szeregu metod teorii struktur elektronowych tak opartych na funkcji falowej jak i na teorii funkcjonałów gęstości elektronowej (DFT) takich jak: MP2, CC2, CASSCF, UDFT oraz TD-DFT.

Cel techniczny projektu odnosi się do przyszłych zastosowań tego typu cząsteczek w organicznych diodach luminescencyjnych (OLED) i będzie wymagał obliczeniowej optymalizacji natężenia i zakresu spektralnego fluorescencji $S_1 \rightarrow S_0$ teoretycznie zaprojektowanych cząsteczek z ograniczeniem do ujemnej przerwy energetycznej S_1-T_1 .

Wymagania:

- podstawowa znajomość metod teorii struktur elektronowych opartych na funkcji falowej I teorii funkcjonałów gęstości elektronowej takich jak: MP2, CC2, CASSCF I TDDFT.
- posiadanie pewnego doświadczenia w operowaniu takimi pakietami programów kwantowochemicznych jak Gaussian, Turbomole, czy Molpro.
- Stopień Magistra w fizyce (lub równoważnik który pozwala na rozpoczęcie studiów doktoranckich w fizyce w kraju wydania).
- Aby być zatrudnionym, kandydat musi zostać przyjęty do Szkoły Doktorskiej w której uczestniczy Instytut Fizyki. Wnioski o zatrudnienie składane są poprzez rekrutacje do Szkoły Doktorskiej, która odbywa się online na warsaw4phd.eu.

Dyscyplina naukowa: Fizyka

Specjalność: fotofizyka molekularna

Doświadczenie: Początkujący lub 0-4 lata (Post-graduate)

Profil naukowy wg EURAXESS ([szczegóły](#)): First Stage Researcher (R1)

Tryb zatrudnienia: Czas określony (36 miesięcy)

Wymiar etatu: Pełny wymiar czasu

Wynagrodzenie: fundusze z projektu 5000 PLN miesięcznie, przed odjęciem obowiązkowych składek ZUS (~15%).

Kontakt

Dodatkowe informacje o stanowisku udziela

Prof. Andrzej Sobolewski (e-mail: sobola@ifpan.edu.pl)

<http://www.ifpan.edu.pl/ON-2/on21.html>

Prosimy się skontaktować.

Składanie dokumentów

Termin składania: 18.08.2021 Zgłoszenia nadesłane po terminie nie będą rozpatrywane.

Wymagane dokumenty:

- Naukowy Curriculum Vitae
- List motywacyjny
- Dyplom Magisterski czy równoważnik (lub wyjaśnienie o tym kiedy dyplom Mgr jest spodziewany)
- Przebieg studiów (obecnie zaliczonych semestrów)
- Zalecane: List rekomendacyjny od pracownika naukowego, lub podanie emaila do nich.

Wszystkie materiały należy przesłać w formie elektronicznej poprzez złożenie wniosku w rekrutacji do Szkoły Doktorskiej warsaw4phd.eu, wybierając projekt "*Badania ab initio łamiących Regułę Hunda cząsteczek organicznych*". System składania wniosków będzie aktywny od 4 sierpnia 2021 r. Wyniki konkursu o stanowisko zostaną ogłoszone do 18 września 2021 r.