

FORMULARZ DLA OGŁOSZENIODAWCÓW

INSTYTUCJA: WYDZIAŁ CHEMII UJ

MIASTO: KRAKÓW

STANOWISKO: DOKTORANT STYPENDYSTA

DYSCYPLINA NAUKOWA: CHEMIA (TEORETYCZNA I OBLICZENIOWA)

DATA OGŁOSZENIA: 14.01.2019

TERMIN SKŁADANIA OFERT: 31.01.2019

OPIS (tematyka, oczekiwania, uwagi): Konkursy na dwa stanowiska doktorantów w projekcie NCN (Sonata Bis 7) UMO-2017/26/E/ST4/00104 "pt. Od struktury do reakcji odwodornienia - teoretyczna charakterystyka homopolarnych wiązań dwuwodorowych w układach o potencjalnym znaczeniu dla magazynowania wodoru oraz w innych nanomateriałach."

Projekt dotyczy badań podstawowych n/t charakterystyki czynników determinujących stabilność i reaktywność wybranych nanomateriałów oraz układów stanowiących potencjalne źródło wodoru cząsteczkowego. Szczególny nacisk położony jest na opis natury tzw. homopolarnych oddziaływań dwuwodorowych (HOMO-DHI) oraz innych potencjalnie istotnych wiązań i oddziaływań w oparciu szereg metod i deskryptorów wiązania chemicznego. Uzyskane wyniki dostarczą nie tylko nowej wiedzy o charakterze podstawowym na temat roli HOMO-DHI i innych wiązań dla stabilności układów o różnym poziomie złożoności, ale także wniosą wkład w lepsze zrozumienie mechanizmu odwodornienia rozważanych układów molekularnych, fałdowania się protein lub tworzenia się wodoru w materii międzygwiazdnej.

Wymagania:

- status doktoranta.
- zaliczony rozszerzony kurs chemii kwantowej lub mechaniki kwantowej.
- magisterium z chemii teoretycznej (obliczeniowej) mile widziane.
- umiejętności programistyczne (np.: Fortran, Python) mile widziane.