

**Freie Universität Berlin - Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie -  
Institut für Chemie und Biochemie - AG Keller „Theoretical Chemistry“-  
VW Momentum “Molecules move!”**



**Freie  
Universität  
Berlin**

Die Arbeitsgruppe Keller beschäftigt sich mit der Modellierung und Simulation von Molekulardynamiken, wobei der Schwerpunkt auf multiskaligen Systemen und Prozessen liegt, deren Dynamik durch seltene Ereignisse bestimmt wird. Diese Fragestellungen erfordern eine interdisziplinäre Herangehensweise, bei der Methoden aus Mathematik und Physik auf chemische Probleme angewandt werden. Ein zentrales Forschungsthema ist die Modellierung des Einflusses der Umgebung auf den Mechanismus und die Geschwindigkeit chemischer Reaktionen. Besonders herausfordernd ist dabei die Simulation solcher Reaktionen in komplexen Lösungsmitteln oder auf Oberflächen, wobei maschinengelernte Kraftfelder die Simulation von chemischen Reaktionen im Prinzip erlauben. Allerdings liegen die Zeitskalen von chemischen Reaktionen weit jenseits der Zeitskalen, die mit Simulationen erreicht werden können. Im Projekt „Molecules move!“ setzt die AG Keller ihre Expertise in der Simulation seltener Ereignisse und dynamischer Umgewichtungsmethoden ein, um diese Forschungsfrage zu bearbeiten. Konkret planen wir, die Pfad-Umgewichtungstechnik (Girsanov-Neugewichtung) mit maschinengelernten Kraftfeldern zu kombinieren, um eine Simulationsmethode für chemische Reaktionen zu entwickeln. <https://www.bcp.fu-berlin.de/en/chemie/chemie/forschung/PhysTheoChem/agkeller/index.html> [https://www.fu-berlin.de/en/presse/informationen/fup/2024/fup\\_24\\_126-volkswagenstiftung-bettina-keller-momentum/index.html](https://www.fu-berlin.de/en/presse/informationen/fup/2024/fup_24_126-volkswagenstiftung-bettina-keller-momentum/index.html) <https://portal.volkswagenstiftung.de/search/projectDetails.do?ref=9D387>

**Wiss. Mitarbeiter\*in (Postdoc) (m/w/d)**

Vollzeitbeschäftigung befristet auf 4 Jahre Entgeltgruppe 13 TV-L FU Kennung:  
AGKeller\_VWMomentum\_2025

Stadt: Berlin; Beginn: Frühestmöglich; Dauer: befristet auf 4 Jahre;

Vergütung: Entgeltgruppe 13 TV-L FU; Kennziffer: AGKeller\_VWMomentum\_2025;

Bewerbungsfrist: 25.11.2024

**Aufgaben**

Sie werden im Projekt „Molecules move!“ mitarbeiten. Ihre Aufgaben sind Training von neuronalen Netzwerkpotentials auf Basis von DFT-Daten, Implementierung der Girsanov-Umgewichtung in Molekulardynamik-Pakete und Simulation von chemischen Reaktionen in Lösungsmitteln und an Oberflächen, sowie Veröffentlichung der Ergebnisse.

**Voraussetzungen**

**\*\*Einstellungsvoraussetzungen:\*\***

Abgeschlossenes wissenschaftliches Hochschulstudium (M.Sc. oder Diplom) und Promotion (abgeschlossen oder kurz vor dem Abschluss) in rechnergestützter oder theoretischer Chemie, rechnergestützter Physik oder einem verwandten Fach.

**\*\*Erwünscht:\*\***

- Sehr gute Promotion und eine starke Publikationsleistung

- Erfahrung auf einem oder mehreren der folgenden Gebiete
- Parametrisierung von neuronalen Netzwerkpotentials
- Machine-Learning-Techniken, insbesondere neuronale Netzwerke
- Simulation molekularer Systeme, insbesondere Enhanced-Sampling- und Umgewichtungsmethoden
- Quantenmechanischen Rechnungen, insbesondere DFT
- Programmierkenntnisse, vorzugsweise Python- LaTeX-Kenntnisse
- sehr gute Englischkenntnisse in Wort und Schrift

Bewerbungsunterlagen:

- Motivationsschreiben mit Angaben zur bisherigen Forschungsprojekten und zukünftigen Zielen
- Lebenslauf
- Publikationsliste
- Kontaktdaten von zwei Gutachtern/früheren Betreuern

Weitere Informationen erteilt Frau Prof. Dr. Bettina Keller ([bettina.keller@fu-berlin.de](mailto:bettina.keller@fu-berlin.de) / 838 50614).

### **Bewerbung**

Bewerbungen sind mit aussagekräftigen Unterlagen unter Angabe der **\*\*Kennung bis zum 25.11.2024\*\*** im Format PDF (vorzugsweise als ein Dokument) elektronisch per E-Mail zu richten an Frau Prof. Dr. Bettina Keller: **[bettina.keller@fu-berlin.de](mailto:bettina.keller@fu-berlin.de)** oder per Post an die

Freie Universität Berlin  
 Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie  
 Institut für Chemie und Biochemie  
 AG Keller - VW Momentum "Molecules move!"  
 Frau Prof. Dr. Bettina Keller  
 Arniimallee 22  
 14195 Berlin (Dahlem)

Mit der Abgabe einer Onlinebewerbung geben Sie als Bewerber\*in Ihr Einverständnis, dass Ihre Daten elektronisch verarbeitet und gespeichert werden.

Wir weisen darauf hin, dass bei ungeschützter Übersendung Ihrer Bewerbung auf elektronischem Wege von Seiten der Freien Universität Berlin keine Gewähr für die Sicherheit übermittelter persönlicher Daten übernommen werden kann.

Schwerbehinderte werden bei gleicher Qualifikation bevorzugt berücksichtigt.

Die Freie Universität Berlin fordert Frauen sowie Personen mit Migrationsgeschichte ausdrücklich zur Bewerbung auf.

Vorstellungskosten können von der Freien Universität Berlin leider nicht übernommen werden.

Bewerbungsunterlagen werden nicht zurückgesandt. Bitte reichen Sie Ihre Unterlagen nur in Kopie ein.

More information at <https://stellenticket.de/188382/>  
 Offer visible until 13/11/24

