

**Freie Universität Berlin - Fachbereich Mathematik und Informatik -  
Institut für Mathematik Workgroup Theoretical and Mathematical  
Physics in Molecular Simulation Project Leader: Prof. Dr. Luigi Delle Site**



**Research assistant (postdoc) (m/f/d)**

full-time job limited to 2 years salary grade (Entgeltgruppe) 13 TV-L FU reference code:  
DFG-DE 1140/15-1

City: Berlin; Starting Date: At the earliest possible; Duration: Befristet auf 2 Jahre;  
Remuneration: Entgeltgruppe 13 TV-L FU; Reference number: DFG-DE 1140/15-1; Closing  
date: 18/11/24

**Working field**

Mitarbeit im Projekt „Mathematisches Modell und rechnerische Implementierung offener Quantensysteme für molekulare Simulationen“. Ab-initio-Modelle atomarer und molekularer Systeme, die in der Sprache der Mathematik formalisiert und in effiziente Simulationscodes implementiert sind, stellen leistungsfähige Vorhersagewerkzeuge dar. Gleichzeitig erfordern die Anforderungen an die Genauigkeit und Reproduzierbarkeit der modernen experimentellen und technologischen Forschung die systematische Umsetzung komplexer mathematischer Modelle in die entsprechenden Rechenverfahren und Simulationscodes.

Dieses Projekt soll dazu beitragen, die Lücke durch die Entwicklung eines strengen mathematischen Modells offener molekularer Systeme mit quantenelektronischen Freiheitsgraden zu verringern und es systematisch in den bewährten Simulationscode mit adaptiver Auflösung zu implementieren. Der daraus resultierende Code für offene Systeme wird für quantenelektronische Berechnungen anwendbar sein, die mit den derzeitigen Simulationswerkzeugen nicht effizient durchgeführt werden können.

Die Arbeit erfordert die Implementierung eines mathematischen Modells eines offenen Systems in einen Code für molekulare Dynamik/elektronische Struktur. Dieser Code sollte offen zugänglich und benutzerfreundlich für Nutzer\*innen und potenzielle künftige Mitwirkende der angewandten und theoretischen Gemeinschaft sein.

**Requirements**

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

Abgeschlossenes wiss. Hochschulstudium in der Mathematik, Physik oder Chemie;

Promotionsabschluss in Computergestützte Physik, Computergestützte Chemie oder Angewandte Mathematik/Scientific Computing.

**\*\*Berufserfahrung:\*\***

Wir suchen einen Postdoc mit einem starken Hintergrund in angewandter Mathematik für theoretische Physik und Chemie und mit Erfahrung im Umgang mit ab-initio molekulardynamischen Codes.

### **Application**

Bewerbungen sind mit aussagekräftigen Unterlagen unter Angabe der **\*\*Kennung bis zum 18.11.2024\*\*** im Format PDF (vorzugsweise als ein Dokument) elektronisch per E-Mail zu richten an Herrn Prof. Dr. Luigi Delle Site: **luigi.dellesite@fu-berlin.de** oder per Post an die

Freie Universität Berlin  
Fachbereich Mathematik und Informatik  
Herrn Prof. Dr. Luigi Delle Site  
Arnimallee 6  
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/187334/>  
Offer visible until 11/10/24

