



Gesucht wird zur Verstärkung unseres Teams in der Abteilung „Materialchemie“ in Berlin-Adlershof zum nächstmöglichen Termin ein*e

Doktorand*in (m/w/d) -Schwingungsabstimmung von molekularen Festkörpern- der Fachrichtung Physik, Chemie oder einer vergleichbaren Fachrichtung

Entgeltgruppe 13 TVöD
Zeitvertrag für 36 Monate
65 % der tariflichen Arbeitszeit

Die Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) ist eine wissenschaftlich-technische Bundesoberbehörde mit Sitz in Berlin. Als Ressortforschungseinrichtung des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie forschen, prüfen und beraten wir zum Schutz von Menschen, Umwelt und Sachgütern. Im Fokus unserer Tätigkeiten in der Materialwissenschaft, der Werkstofftechnik und der Chemie steht dabei die technische Sicherheit von Produkten und Prozessen.

Werden Sie Teil unseres Teams von engagierten Mitarbeitenden!

Ihre Aufgaben: Die Schwingungsbewegung von Atomen und Molekülen bestimmt viele der physikalischen und chemischen Eigenschaften von Festkörpern, einschließlich ihrer thermischen und mechanischen Reaktionen. Wir haben vor kurzem gezeigt, wie Materialschwingungen auch die Chemie von molekularen Festkörpern untermauern, die einer dynamischen mechanischen Belastung ausgesetzt sind, d. h. ihre mechano-chemische Reaktivität (1. AAL, Michalchuk *et al* (2021) *J.Chem.Phys.* 2. AAL Michalchuk *et al* (2019) *J.Mater.Chem.A.*, 3. AAL Michalchuk *et al* (2018) *PhysChemPhys.*). Die Fähigkeit, Materialschwingungen selektiv abzustimmen, verspricht daher eine neue Richtung für die Steuerung sowohl der funktionellen Eigenschaften von Materialien als auch ihrer chemischen Reaktivität. In diesem Projekt werden ab initio-Simulationen eingesetzt, um besser zu verstehen, wie Kristallschwingungen abgestimmt werden können, um die mechanisch-chemische Reaktivität zu verstehen und zu kontrollieren. Zu den spezifischen Aufgaben gehören:

- Entwurf und Umsetzung von Strategien zur Simulation der Schwingungseigenschaften molekularer Festkörper
- Erforschung von Strategien des maschinellen Lernens zur Erleichterung und Verbesserung von Simulationen
- Simulationen mit experimentellen Ergebnissen abgleichen
- Dokumentation, Auswertung und Interpretation von Daten
- Veröffentlichung, Präsentation und Dokumentation der Ergebnisse in wissenschaftlichen Artikeln, Berichten und auf nationalen und internationalen Konferenzen
- Fachliche Anleitung von wissenschaftlichen Nachwuchskräften (z. B. BSc/MSc-Studenten)

Ihre Qualifikationen:

- Erfolgreich abgeschlossenes wissenschaftliches Hochschulstudium (Master oder gleichwertiger Abschluss) der Fachrichtung Physik, Chemie oder einer vergleichbaren Fachrichtung
Bei ausländischen Bildungsabschlüssen bitten wir um Übersendung entsprechender Nachweise über die Gleichwertigkeit mit einem deutschen Abschluss. Weitere Informationen entnehmen Sie bitte der Internetseite der Zentralstelle für ausländisches Bildungswesen (ZAB) unter <http://www.kmk.org/themen/anerkennung-auslaendischer-abschluesse.html>

- Programmierkenntnisse in einer höheren Programmiersprache (Python oder ähnlich)
- Kenntnisse von Methoden der Werkstoffsimulation sind von Vorteil
- Kenntnisse von Methoden des maschinellen Lernens sind von Vorteil
- Sehr gute Englischkenntnisse in Wort und Schrift sind Voraussetzung
- Gute Fähigkeiten im wissenschaftlichen Schreiben und Präsentieren vor Publikum
- Gutes Kommunikations- und Informationsverhalten, Initiative/Einsatzbereitschaft und -fähigkeit, Entscheidungsbereitschaft und -fähigkeit, Teamfähigkeit und Kooperationsbereitschaft sowie Lernbereitschaft

Unsere Leistungen:

- Interdisziplinäre Forschung an der Schnittstelle zu Politik, Wirtschaft und Gesellschaft
- Arbeit in nationalen und internationalen Netzwerken mit Universitäten, Forschungseinrichtungen und Industrieunternehmen
- Hervorragende Ausstattung und Infrastruktur
- Flexible Arbeitszeiten, mobiles Arbeiten

Ihre Bewerbung: Wir freuen uns auf Ihre Bewerbung über unser **Bewerbungsmanagementsystem** bis zum 04.10.2021. Alternativ können Sie Ihre Bewerbung zur Kennziffer 261/21-6.0 auch per Post an folgende Anschrift senden:

Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
Referat Z.3 - Personal
Unter den Eichen 87
12205 Berlin
www.bam.de

Fachliche Fragen zu dieser Position beantwortet Ihnen gerne Herr Adam Michalchuk, Ph.D. per E-Mail unter Adam.Michalchuk@bam.de.

Die BAM verfolgt das Ziel der beruflichen Gleichstellung von Frauen und Männern. Bewerbungen von Frauen begrüßen wir daher besonders. Darüber hinaus unterstützt die BAM die Eingliederung schwerbehinderter Menschen und begrüßt daher ausdrücklich auch deren Bewerbungen. Hinsichtlich der Erfüllung der Ausschreibungsvoraussetzungen erfolgt eine individuelle Betrachtung der Bewerbungsunterlagen. Anerkannt schwerbehinderte Menschen werden bei gleicher Eignung bevorzugt berücksichtigt.

Die ausgeschriebene Stelle setzt ein geringes Maß an körperlicher Eignung voraus.

Bleiben Sie mit uns in Kontakt:

150 Jahre BAM – Wissenschaft mit Wirkung. Feiern Sie mit uns: <https://150.bam.de>

Abonnieren Sie unseren Newsletter: <https://150.bam.de/newsletter>

Folgen Sie uns auf Twitter: <https://twitter.com/BAMResearch>

Ich bin interessiert und möchte mich bewerben

Zurück

Die BAM ist seit 2015 als familien- und lebensphasenbewusste Arbeitgeberin durch das „audit berufundfamilie“ zertifiziert und unterstützt aktiv die Vereinbarkeit von Beruf und Familie.





To strengthen our team in the department "Materials Chemistry" in Berlin-Adlershof, starting as soon as possible, we are looking for a

Doctoral student (m/f/d) - vibrational tuning of molecular solids- in the field of physics, Chemistry or a cognate discipline

Salary group 13 TVöD

Temporary contract for 36 months

65 % of regular number of working hours

The Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) is a materials research organization in Germany. Our mission is to ensure safety in technology and chemistry. We perform research and testing in materials science, materials engineering and chemistry to improve the safety of products and processes. At BAM we do research that matters. Our work covers a broad array of topics in the focus areas of energy, infrastructure, environment, materials, and analytical sciences.

We are looking for talented people to join us.

Your responsibilities include: The vibrational motion of atoms and molecules dictate many of the physical and chemical properties of solids, including their thermal and mechanical responses. We have recently demonstrated how material vibrations also underpin the chemistry of molecular solids exposed to dynamic mechanical stress: *i.e.* their mechano-chemical reactivity (1. AAL, Michalchuk *et al* (2021) *J.Chem.Phys.* 2. AAL Michalchuk *et al* (2019) *J.Mater.Chem.A.*, 3. AAL Michalchuk *et al* (2018) *PhysChemPhys.*). The ability to selectively tune material vibrations therefore promises a new direction for guiding both material functional properties and their chemical reactivity. This project uses *ab initio* simulation and aims to better understand how crystal vibrations can be tuned towards understanding and controlling mechano-chemical reactivity.

Specific tasks include:

- Design and implement strategies to simulate the vibrational properties of molecular solids
- Explore machine learning strategies to facilitate and enhance simulations
- Correlate simulations with experimental results
- Documentation, evaluation and interpretation of data
- Publication, presentation and documentation of the results in scientific articles, reports and at national and international conferences
- Supervision of junior academic staff (e.g. BSc/MSc students)

Your qualifications:

- Successfully completed scientific university studies (Master's degree or equivalent) in the field of physics, chemistry or a cognate discipline
In the case of foreign educational qualifications, please send us the relevant proof of equivalence with a German qualification.
For further information, please visit the website of the Central Office for Foreign Education (ZAB) at <http://www.kmk.org/themen/anerkennung-auslaendischer-abschluesse.html>.
- Programming knowledge in a higher programming language (Python or similar)
- Knowledge of materials simulation methodologies is beneficial
- Knowledge of machine learning methodologies is beneficial
- Excellent knowledge of written and spoken English is a prerequisite
- Good skills in scientific writing and presenting in front of an audience

- Good communication and Information behaviour, initiative/commitment, willingness and ability to make decisions, ability to work in a Team/willingness to cooperate and willingness to learn

We offer:

- Interdisciplinary research at the interface of politics, economics and society
- Work in national and international networks with universities, research institutes and industrial companies
- Outstanding facilities and infrastructure
- Flexible working hours and mobile working

Your application: We welcome applications via the [online application form](#) by 04.10.2021. Alternatively, you can also send your application by post, quoting the reference number 261/21-6.0 to:

Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
Referat Z.3 - Personal
Unter den Eichen 87
12205 Berlin
GERMANY
www.bam.de

Adam Michalchuk, Ph.D. will be glad to answer any specific questions you may have. Please get in touch via by email to Adam.Michalchuk@bam.de.

BAM pursues the goal of professional equality between women and men. We therefore particularly welcome applications from women. In addition, BAM supports the integration of severely disabled persons and therefore especially welcomes their applications. With regard to the fulfilment of the job advertisement requirements, the application documents are examined individually. Recognised severely disabled persons will be given preferential consideration if they are equally suitable.

The advertised position requires a low level of physical aptitude.

Stay in touch with us:

150 Years BAM – Science with Impact. Celebrate with us: <https://150.bam.de>

Subscribe to our newsletter: <https://150.bam.de/newsletter>

Follow us on Twitter: <https://twitter.com/BAMResearch>

I am interested and would like to apply

Back

BAM actively supports the compatibility of work and family and has been certified as a family- and life-phase-conscious employer by the "audit berufundfamilie" since 2015.

