



CeNT-64-2022

**Director of Centre of New Technologies of the University of Warsaw, with the approval from the Rector of the University of Warsaw, announces opening of the position of Postdoc (Visiting Researcher) in the group of researchers in the Centre of New Technologies of the University of Warsaw.**

## JOB OFFER

|   |  |
|---|--|
| Position in the project:                                    | Postdoc (Visiting Researcher)  |
| Scientific discipline:                                      | chemical sciences  |
| Keywords:   | Ab initio calculations, electronic structure, coupled-clusters methods, autoionization, quantum chemistry, scattering theory   |
| Job type:   | Employment contract  |
| Part-time/full-time:  | Full-time  |
| Number of job offers:                                       | 2  |
| Remuneration amount   | aprox. 11400 PLN gross gross monthly + 13 <sup>th</sup> salary   |
| Position starts on:   | March 1 <sup>st</sup> 2023, or as soon as possible after that date   |
| Maximum period of contract/stipend agreement:               | 12 months (with possible extension for another 12 months)  |
| Institution:  | Centre of New Technologies, University of Warsaw   |
| Project leader:   | Wojciech Skomorowski   |
| Project title:  | <i>New methods for calculations of complex potential energy surfaces and spectroscopic characteristics of electronic resonances</i>  |
| NAWA programme:   | Polish Returns   |
| Financing institution:                                      | NAWA   |
| Project description: (max 800 characters, including spaces) | Project is concerned with studying metastable (autoionizing) states in electronic structure theory using ab initio methods. We aim to develop and benchmark novel methodologies for efficient computation of complex-valued potential energy surfaces, based on coupled-cluster and equation-of-motion (EOM-CC) methods, combined with Fano-Feshbach projection technique. Computed complex-valued potential energy surfaces will be applied to investigate quantum dynamics of processes such as Penning ionization, Auger decay, or photo-fragmentation triggered by X-ray pulses. Project may include both computational and development components. For more details, or with any inquiries, please contact directly the project manager (w.skomorowski@cent.uw.edu.pl). |
| Key responsibilities include:                               | Running ab initio quantum-chemical calculations using Q-Chem software package, testing and benchmarking novel electronic   |





|   |  |
|---|--|
|   | structure methods, deriving equations and implementing necessary calculations, writing reports and manuscripts   |
| Profile of candidates/requirements:       | <p>The competition is open to persons who meet the conditions specified in:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Act of 20 July 2018 Law on higher education and science (Journal of Laws of 2022, item 574) and the Statutes of the University of Warsaw;</li></ul> <p>Applicants should have a Ph.D. degree in theoretical/computational chemistry, physics, or related field. They should have a very good knowledge of electronic structure theory or/and quantum scattering theory, experience in ab initio calculations for small molecules, and some programming knowledge.</p>  |
| Required documents:                       | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Cover letter</li><li>2. CV</li><li>3. Copy of PhD certificate (or a statement from a Ph.D. advisor about the expected date of completion of Ph.D. degree)</li><li>4. List of publications together with contact details to one or two senior scientists who may be asked for a reference letter at a later time (<b>Important:</b> this attachment send directly to the project PI: <a href="mailto:w.skomorowski@cent.uw.edu.pl">w.skomorowski@cent.uw.edu.pl</a>)</li><li>5. Signed <a href="#">information on the processing of personal data</a></li><li>6. Signed <a href="#">declaration</a> confirming that the candidate has read and accepted the rules of conducting competitions, covered in the following documents:<br/><a href="#">Order of the Rector of UW No. 106</a><br/>Par. 126 of the UW Statutes <a href="#">Resolution No. 443 of 26 June 2019</a></li></ol> |
| We offer:                                 | Employment in Centre of New Technologies, which is a highly international and multidisciplinary research-focused unit within University of Warsaw – the leading academic research institution in Poland. Projects carried out in international collaborations with highly renowned scientists, both theoreticians and experimentalists. Being a part of the worldwide network of Q-Chem users and developers.  |
| Please submit the required documents to:  | E-mail: <a href="mailto:careers@cent.uw.edu.pl">careers@cent.uw.edu.pl</a> with the competition number 'CeNT-64-2022' as the e-mail title  |
| Application deadline:                     | February 17 <sup>th</sup> , 2023   |
| Date of announcing the results:           | February 22 <sup>st</sup> , 2023   |
| Method of notification about the results: | Via e-mail, website  |

The competition is the first stage of the recruitment procedure for the position of academic teacher specified in the Statutes of the University of Warsaw, and its positive result is the basis for further proceedings. Following an initial screening of the applications, selected candidates will be contacted by e-mail for further recruitment steps.



CeNT-64-2022

***Dyrektor Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego za zgodą Rektora Uniwersytetu Warszawskiego, ogłasza konkurs na stanowisko stażysty podoktorskiego (badacza wizytującego) w grupie pracowników badawczych w Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego.***

## OGŁOSZENIE O KONKURSIE

|  |  |
|--|--|
| Stanowisko:  | Stażysta podoktorski (badacz wizytujący)   |
| Dyscyplina naukowa:                                | Nauki chemiczne  |
| Słowa kluczowe:                                    | Obliczenia ab initio, struktura elektronowa, metody sprzężonych klasterów, autojonizacja, chemia kwantowa, teoria rozpraszania   |
| Forma zatrudnienia:                                | Umowa o pracę  |
| Wymiar etatu:                                      | Pełny  |
| Liczba stanowisk:                                  | 2  |
| Wynagrodzenie miesięczne:                          | Ok. 11400 PLN brutto brutto miesięcznie + 13 pensja  |
| Termin rozpoczęcia pracy:                          | 1 marca 2023 lub jak najszybciej po tym terminie   |
| Maksymalny okres zatrudnienia/umowy stypendialnej: | 12 miesięcy z możliwością przedłużenia na 24 miesiące  |
| Jednostka UW:                                      | Centrum Nowych Technologii   |
| Kierownik projektu:                                | Wojciech Skomorowski   |
| Tytuł projektu:                                    | Nowe metody obliczania zespolonych powierzchni energii potencjalnej i własności spektroskopowych dla elektronowych stanów rezonansowych  |
| Typ konkursu NAWA:                                 | Polskie Powroty  |
| Instytucja finansująca:                            | NAWA   |
| Opis projektu:                                     | Projekt dotyczy badań teoretycznych nad stanami metastabilnymi (auto-jonizującymi) w strukturze elektronowej z zastosowaniem metod ab initio. Celem jest rozwinięcie i przetestowanie nowych metod pozwalających na efektywne obliczanie zespolonych powierzchni energii potencjalnej w oparciu o metodę sprzężonych klasterów, równań ruchu (EOM-CC), w połączeniu z techniką projekcji Fano-Feshbacha. Nowo obliczone powierzchnie energii potencjalnej zostaną wykorzystane do kwantowo-dynamicznego modelowania procesów takich jak jonizacja Penninga, rozpad Auger, czy foto-fragmentacja wywołana promieniowaniem X. Projekt może obejmować części zarówno obliczeniowe jak i deweloperskie. W przypadku jakichkolwiek pytań prosimy o bezpośredni kontakt z kierownikiem projektu ( <a href="mailto:w.skomorowski@cent.uw.edu.pl">w.skomorowski@cent.uw.edu.pl</a> ) |
| Zakres obowiązków:                                 | Wykonywanie kwantowo-chemicznych obliczeń ab initio z wykorzystaniem programu Q-Chem, testowanie nowych metod  |



|  |  |
|--|--|
|  | struktury elektronowej, wyprowadzanie równań i implementacja niezbędnych obliczeń, pisanie raportów i publikacji   |
| Profil kandydata/ wymagania:             | <p>Do konkursu mogą przystąpić osoby, które spełniają warunki określone w:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- ustawie z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2022 r., poz. 574) i Statucie UW;</li></ul> <p>Osoby aplikujące muszą mieć stopień doktora w obszarze chemii teoretycznej/obliczeniowej, fizyki, lub pokrewnej dziedziny. Kandydaci powinni wykazywać się bardzo dobrą znajomością teorii struktury elektronowej oraz/lub kwantowej teorii rozpraszania, mieć doświadczenie w obliczeniach ab initio dla małych cząsteczek, oraz pewną znajomość języków programowania.</p>  |
| Wymagane dokumenty:                      | <ol style="list-style-type: none"><li>1. List motywacyjny</li><li>2. Aktualny życiorys</li><li>3. Kopia dyplomu doktorskiego lub innego dokumentu potwierdzającego, że kandydat uzyska stopień doktora najpóźniej na dzień zatrudnienia w projekcie</li><li>4. Lista publikacji wraz z danymi kontaktowymi jednego lub dwóch doświadczonych naukowców, którzy mogą być poproszeni o nadesłanie listu polecającego w późniejszym terminie (Ważne: ten załącznik prosimy przesłać bezpośrednio do kierownika projektu: w.skomorowski@cent.uw.edu.pl)</li><li>5. Podpisana <a href="#">informacja o przetwarzaniu danych osobowych</a></li><li>6. Podpisane <a href="#">oświadczenie</a>, w którym kandydat potwierdza, że zapoznał się i akceptuje zasady przeprowadzania konkursów, zawarte w następujących dokumentach:<br/><a href="#">Zarządzenie nr 106 Rektora UW z dnia 27 września 2019</a><br/>Par. 126 Statutu UW <a href="#">Uchwała nr 443 z 26 czerwca 2019</a></li></ol> |
| Oferujemy:                               | Pracę w Centrum Nowych Technologii, które jest wysoce umiędzynarodowioną i multidyscyplinarną jednostką naukową będącą częścią Uniwersytetu Warszawskiego – wiodącej uczelni badawczej w Polsce. Realizację projektu badawczego we współpracy międzynarodowej ze znanymi naukowcami, zarówno teoretykami jak i doświadczalniami. Bycie częścią międzynarodowej społeczności użytkowników i deweloperów programu Q-Chem.  |
| Forma nadsyłania zgłoszeń:               | Mailowo na adres: <a href="mailto:careers@cent.uw.edu.pl">careers@cent.uw.edu.pl</a> z numerem konkursu 'CeNT-64-2022' w tytule maila  |
| Termin nadsyłania zgłoszeń:              | 17 lutego 2023   |
| Termin ogłoszenia wyników konkursu:      | 22 lutego 2023   |
| Sposób informowania o wynikach konkursu: | e-mail, strona internetowa   |

Konkurs jest pierwszym etapem określonej w Statucie UW procedury zatrudniania na stanowisku nauczyciela akademickiego, a jego pozytywne rozstrzygnięcie stanowi podstawę do dalszego postępowania. Po dokonaniu



UNIWERSYTET  
WARSZAWSKI

**CeNT** CENTRUM  
NOWYCH  
TECHNOLOGII

---

wstępnej analizy nadesłanych zgłoszeń, skontaktujemy się z wybranymi kandydatami celem przeprowadzenia dalszych etapów procedury rekrutacyjnej.



**POLISH** NATIONAL AGENCY  
FOR ACADEMIC EXCHANGE