



ANNEX 1

1. NOMBRE DE CONTRACTES CONVOCATS: 1

2. PRESENTACIÓ DE SOL.LICITUDS: Des del 27 d'octubre al 10 de novembre de 2023

3. PROJECTE DE RECERCA:

- Projecte al qual s'incorporarà la persona adjudicatària: "Development of grand canonical global optimization algorithms assisted by machine learning".
- Responsable del projecte: Albert Bruix Fusté
- Departament al qual s'adscriurà l'investigador o investigadora predoctoral en formació: Departament de Ciència de Materials i Química Física i a l'Institut de Química Teòrica i Computacional.
- Finançament a càrrec dels fons transferits a les partides 2576QU01677000 M2RN002499

4. DOTACIÓ ECONÒMICA:

Les despeses són a càrrec del projecte o contracte de recerca CEX2021-001202-M («Unidades de Excelencia María de Maeztu» 2021), MCIN/AEI/10.13039/501100011033 fins a un total de **23.527,67 euros**.

5. COMISSIÓ ESPECÍFICA DE VALORACIÓ:

- President o presidenta: Jordi Ribas Ariño
- Secretari o secretària (IP del projecte o ajut): Albert Bruix
- Segon investigador o investigadora membre del projecte o amb experiència en l'àrea: Konstantin Neyman

6. MÈRITS ESPECÍFICS PER VALORAR EN L'ADJUDICACIÓ:

- Experiència en el desenvolupament i aplicació de mètodes d'optimització global
- Experiència en modelització computacional de materials amb mètodes basats en la teoria del funcional de la densitat
- Experiència en desenvolupament i aplicació de mètodes d'aprenentatge automàtic (machine learning)
- Experiència en la modelització computacional i optimització de l'estructura i estats d'oxidació de clústers metàl·lics.

7. CARACTERÍSTIQUES DEL CONTRACTE:

- Durada total prevista: 1 any
- Durada del contracte inicial (mínim 1 any): 1 any
- Durada de les possibles pròrrogues (mínim 1 any):

Retribucions:

- Primera anualitat: 17.651,76 €

Tasques que s'han de dur a terme:

- Desenvolupar i implementar mètodes d'optimització global per a la predicció de l'estructura i estat químic de materials nanoestructurats en condicions de reacció.
- Aplicació dels mètodes desenvolupats a sistemes d'interès tecnològic i ambiental.
- Anàlisi i presentació dels resultats obtinguts en reunions del grup de recerca i en congressos nacionals i internacionals.
- Escriure i publicar articles científics descrivint els resultats obtinguts.