



NORMATIVA DE CONTRACTACIÓ DEL PERSONAL INVESTIGADOR PREDOCTORAL EN FORMACIÓ DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA AMB CARREC A FINANÇAMENT DE PROJECTES O CONTRACTES DE RECERCA

ANNEX - BASES DE LA CONVOCATORIA

DADES GENERALS

Objecte

El candidat proposat s'incorporarà a un projecte de recerca amb títol "Modelització de nous materials luminescents basats en terres rares per aplicacions en optoelectrònica" i quedarà adscrit al departament de Química Física i Ciència de Materials (secció de Química Física) realitzant la seva tasca com a part de la seva tesi doctoral.

Funcions

Les tasques a realitzar per la persona que obtingui aquest contracte seran:

- Anàlisi sistemàtic de l'estructura electrònica de compostos de coordinació amb lantànids. A partir de models que cobreixin diferents nombres de coordinació, geometries i tipus d'àtom donador, es farà un estudi exhaustiu del desdoblament dels orbitals f per complexos amb metalls del bloc f
- Extracció de paràmetres de camp de lligand per complexos del bloc f emprant la metodologia Ab Initio Ligand Field Theory (AILFT) sobre càlculs NEVPT2. Amb aquests paràmetres es modelitzarà la luminescència d'aquests compostos dintre del marc de la teoria Judd-Ofelt
- Calibratge de funcionals d'intercanvi/correlació per modelitzar la fotoquímica de compostos de coordinació del bloc f. A partir de dades experimentals, es buscarà una metodologia quantitativa per calcular les excitacions electròniques en aquests sistemes.
- Exploració del espai químic (chemical space) en compostos de coordinació del bloc f. A partir de la metodològica desenvolupada en el punt anterior, es faran modificacions in silico dels lligands a fi d'explorar com aquests canvis modifiquen les propietats d'efecte antena del lligand. Amb les dades obtingudes, i emprant metodologies d'aprenentatge autònom (Machine learning), es construiran models per a un disseny òptim de nous sistemes amb propietats fotoquímiques específiques.
- Construcció, amb eines d'aprenentatge autònom (Machine learning), de camps de forces per elements del bloc f a partir dels paràmetres del model del solapament angular. Amb tota la informació generada, i emprant algorismes genètics, es buscaran els paràmetres òptims per la construcció de camps de forces basats en primers principis per compostos de coordinació del bloc f.

Tipus de finançament i òrgan finançador	Unidades de Excel·lència María de Maeztu CEX2021-001202-M finançat per MICIU/ AEI/10.13039/501100011033
Responsable del projecte	Eliseo Ruiz Sabín
Director de tesi	Pere Alemany Cahner / Jordi Cirera Fernández
Departament i Programa de doctorat	Departament de Química Física i Ciència de Materials (secció de Química Física). Programa de doctorat de Química Teòrica i Modelització Computacional
Durada del contracte	1 any
Possibilitat de prorroga	D'acord amb els límits que es descriuen a la normativa, previsió de 2 anys. Supeditat a la existència de dotació econòmica i a la vigència del projecte
Retribució anual bruta (14 mensualitats)	17.823,97 €
Despeses matrícula (si escau)	Amb càrrec al projecte de recerca o l'ajut que finança el contracte, pot assumir-se l'import corresponent al preu públic en concepte de direcció, tutela i avaluació continuada de la tesi doctoral. Les despeses derivades de la gestió de l'expedient acadèmic van a càrrec de l'investigador o investigadora predoctoral.
Termini de presentació de sol·licituds	10 dies hàbils des de la publicació a la seu-e
Fonts de reclutament	Seu-e de la UB i a EURAXESS .
REQUISITS DELS ASPIRANTS	
Mèrits específics per valorar en l'adjudicació	Requisits específics dels sol·licitants: <ul style="list-style-type: none"> - Màster, o estar finalitzant el màster, en química computacional o similar - Formació en química de coordinació - Experiència en l'ús de programari d'estructura electrònica (ORCA, Gaussian, SIESTA, ...) - Experiència en programació amb llenguatges Python i Fortran, així com encriptació bash. - Experiència en l'ús de grans equips de càlcul - Estar inscrit en el programa de doctorat de Química Teòrica i Modelització Computacional



	<p>Altres mèrits específics a valorar en l'adjudicació del contracte:</p> <ul style="list-style-type: none">- Es valoraran les capacitats de comunicació del candidat (presentacions en congressos, conferències, etc..)- Capacitat de comunicació en llengua anglesa- Capacitat de treball en equip així com capacitat de treball autònom- Capacitat de síntesi i organització- Es valorarà la incorporació de minories poc representades en el camp de la química teòrica i computacional
Documentació requerida	<ul style="list-style-type: none">• Sol·licitud i declaració responsable signades• CV• Copia dels expedients acadèmics de grau i màster (en cas d'estudis no cursats a la UB)• En cas d'estudis cursats a l'estranger cal adjuntar l'equivalència de les notes mitjanes segons s'indica a les bases de la convocatòria.
	<p>Altres: certificats d'idiomes, d'habilitats o de formacions complementaries, si escau.</p>
COMISSIÓ ESPECÍFICA DE VALORACIÓ	
<ol style="list-style-type: none">1. President o presidenta: Eliseo Ruiz Sabín2. Secretari o secretaria (IP): Pere Alemany Cahner3. Investigador o investigadora: Jordi Cirera Fernández	