



## Postdocstelle (m/w/d)

(English text see below)

Am **Lehrstuhl für Theoretische Chemie II der Ruhr-Universität Bochum** von Prof. Dr. Jörg Behler ist zum nächstmöglichen Zeitpunkt eine Postdocstelle für 2 Jahre zu besetzen.

Als Lehrstuhl für Theoretische Chemie II der Ruhr-Universität Bochum sind wir gleichzeitig eine Abteilung des neu eingerichteten Research Centers Chemical Sciences and Sustainability der Research Alliance Ruhr (RAR). Die RAR ist eine gemeinsame Einrichtung der TU Dortmund, der Ruhr-Universität Bochum und der Universität Duisburg-Essen, die von der Landesregierung von Nordrhein-Westfalen etabliert wurde, um die Forschungslandschaft in der Metropolregion Ruhr weiter auszubauen. Unser Lehrstuhl befindet sich in unmittelbarer Nähe des RUB-Campus in Bochum.

Als sehr interdisziplinär ausgerichtetes Team arbeiten wir im Grenzbereich zwischen Chemie, Physik und den Materialwissenschaften. Wir beschäftigen uns mit atomistischen Simulationen komplexer Systeme. Im Zentrum unseres Interesses stehen hierbei chemische Prozesse an Grenzflächen (z.B. Elektrochemie, Katalyse) und Reaktionen in Lösung. Um diese Fragestellungen bearbeiten zu können, entwickeln wir moderne Machine Learning Potentiale, die die Genauigkeit von quantenmechanischen Elektronenstrukturmethoden und die Effizienz von Kraftfeldern verbinden. Auf diese Weise können wir große Systeme auf lange Zeitskalen z.B. mit Hilfe von Molekulardynamik untersuchen, um Mechanismen und Eigenschaften im Detail auf der atomaren Skala zu verstehen. Wir gehören zu den weltweit führenden Forschungsgruppen auf dem Gebiet der Machine Learning Potentiale und haben ihre Entwicklung in den letzten zwei Jahrzehnten maßgeblich mitgeprägt.

Der Schwerpunkt der Postdocstelle (2 Jahre, TV-L E13) liegt auf methodischen Entwicklungen im Bereich des maschinellen Lernens und der Implementierung neuer Methoden für atomistische Simulationen komplexer Systeme. Es ist eine enge Kollaboration mit Arbeitsgruppen aus der Informatik am Research Center Trustworthy Data and Security vorgesehen. Programmierkenntnisse sind erforderlich und ein großes Interesse an methodischen Entwicklungen ist für die Stelle zentral.

### **Bewerbung:**

Interessierte Bewerberinnen und Bewerber werden gebeten, ihre Bewerbungsunterlagen (Motivationsschreiben, Lebenslauf, Zeugniskopien, Publikationsliste, Stellungnahme zur Programmiererfahrung und zu Erfahrungen mit maschinellem Lernen) als eine pdf-Datei per E-mail an [joerg.behler@rub.de](mailto:joerg.behler@rub.de) zu senden. Die Stelle wird zum nächstmöglichen Zeitpunkt besetzt. Bei Fragen können Sie sich jederzeit sehr gerne an uns wenden.



## Postdoc Position (m/f/d)

A postdoc position for 2 years is immediately available at the Chair for Theoretical Chemistry II of Prof. Dr. Jörg Behler at Ruhr-Universität Bochum.

As Chair for Theoretical Chemistry II of Ruhr-Universität Bochum we are part of the newly founded Research Center Chemical Sciences and Sustainability of the Research Alliance Ruhr (RAR). The RAR is a joint initiative of TU Dortmund, Ruhr-Universität Bochum and Universität Duisburg-Essen funded by the state of North Rhine-Westphalia to further expand the research landscape in the metropolitan area Ruhr. Our group is situated very close to the RUB-Campus in Bochum.

As a very interdisciplinary team we are working at the frontier between chemistry, physics and materials science performing atomistic simulations of complex systems. Our central interests are chemical processes at interfaces (e.g. electrochemistry and catalysis) and reactions in solution. To study these topics, we develop modern machine learning potentials, which combine the accuracy of quantum mechanical electronic structure methods and the efficiency of classical force fields. With these tools we can perform molecular dynamics simulations of large systems on long time scales to understand in detail mechanisms and properties at the atomic scale. Our group is among the world-leading groups in the field of machine learning potentials, and in the past two decades we have substantially contributed to the progress in this field.

The advertised position is dedicated to methodical developments in the field of machine learning potentials and the implementation of new methods for atomistic simulations. A close collaboration with the Research Center Trustworthy Data and Security is part of the project. Programming experience is required and a high interest in method development is essential for the position.

### **Application:**

Interested candidates should send their detailed application documents (motivation letter, CV, copies of certificates and transcripts, list of publications, statement on programming experience and possible background in machine learning) as a single pdf-file by e-mail to [joerg.behler@rub.de](mailto:joerg.behler@rub.de). The positions will be filled as soon as a suitable candidate has been found. In case of any questions, you are welcome to contact us anytime.