



UNIwersytet
Warszawski

Wydział Chemii



Warszawa, dnia 11 czerwca 2025 r.

WCH.1210-11/2024

Ogłoszenie o konkursie

na stanowisko typu **postdoc** (adiunkt w grupie pracowników badawczych) w ramach projektu „Projektowanie obliczeniowe paliw rakietowych nowej generacji opartych na hipergolicznych sieciach metaloorganicznych”. Kierownik projektu: **dr hab. Mihails Arhangeliskis, prof. ucz.**

Osoba zatrudniona będzie prowadziła badania w zakresie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne. Liczba dostępnych etatów: 1;

Celem projektu jest projektowanie obliczeniowe hipergolicznych sieci metalowo-organicznych (angl. metal-organic framework, MOF) jako materiałów do produkcji paliw rakietowych nowej generacji. Materiały hipergoliczne szybko ulegają zapłonowi w kontakcie z utleniaczem. Osiąga się to poprzez zastosowanie organicznych łączników zawierających nienasycone podwójne i potrójne wiązania, tzw. grupy wyzwalające. Istnieje jednak wiele dowodów na to, że hipergoliczność MOFów zależy w dużym stopniu od wyboru węzłów metalowych i ogólnego upakowania struktur krystalicznych. Niedawno opublikowaliśmy pierwsze obliczeniowe projektowanie MOFów przy użyciu CSP, demonstrując szerokie możliwości tego podejścia. Dzięki obliczeniowemu przewidywaniu struktur krystalicznych (angl. crystal structure prediction, CSP) możemy teraz przeprowadzać obliczeniowe badania przesiewowe struktur MOFów i niezawodnie wybierać struktury kandydujące o interesujących właściwościach do syntezy eksperymentalnej.

Jednak nadal brakuje nam kluczowego elementu w naszym protokole projektowania obliczeniowego, ponieważ nie ma ogólnej teorii, która pozwoliłaby nam przewidzieć hipergoliczną właściwość danego MOFa, tj. czas między kontaktem z utleniaczem a pojawieniem się płomienia. Ponieważ to hipergoliczne opóźnienie zapłonu (angl. ignition delay, ID) jest kluczową cechą charakterystyczną dla paliw stałych, musimy opracować niezawodne podejście do przewidywania ID dla struktur MOFów generowanych przez CSP.

Wybrany kandydat będzie wykorzystywał obliczenia CSP w połączeniu z modelami uczenia maszynowego (ML) do przewidywania struktur i właściwości nowych typów hipergolicznych MOFów. W części projektu dotyczącej CSP kandydat na stanowisko postdoc będzie współpracował z doktorantem zaangażowanym w projekcie, natomiast opracowanie modeli ML do przewidywania właściwości energetycznych i ID będzie wyłączną odpowiedzialnością postdoca

Najważniejsze publikacje

- (1) Titi, H. M.; Marrett, J. M.; Dayaker, G.; Arhangeliskis, M.; Mottillo, C.; Morris, A. J.; Rachiero, G. P.; Frišćić, T.; Rogers, R. D. Hypergolic Zeolitic Imidazolate Frameworks (ZIFs) as next-Generation Solid Fuels: Unlocking the Latent Energetic Behavior of ZIFs. *Sci. Adv.* **2019**, 5 (4), eaav9044. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aav9044>
- (2) Titi, H. M.; Arhangeliskis, M.; Katsenis, A. D.; Mottillo, C.; Ayoub, G.; Do, J.-L.; Fidelli, A. M.; Rogers, R. D.; Frišćić, T. Metal–Organic Frameworks as Fuels for Advanced Applications: Evaluating and Modifying the Combustion Energy of Popular MOFs. *Chem. Mater.* **2019**, 31 (13), 4882–4888. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b01488>
- (3) Darby, J. P.; Arhangeliskis, M.; Katsenis, A. D.; Marrett, J. M.; Frišćić, T.; Morris, A. J. *Ab Initio* Prediction of Metal–Organic Framework Structures. *Chem. Mater.* **2020**, 32 (13), 5835–5844. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c01737>
- (4) Xu, Y.; Marrett, J. M.; Titi, H. M.; Darby, J. P.; Morris, A. J.; Frišćić, T.; Arhangeliskis, M. Experimentally Validated *Ab Initio* Crystal Structure Prediction of Novel Metal–Organic Framework Materials. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145 (6), 3515–3525. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c12095>



UNIwersytet
Warszawski

Wydział Chemii



Kwalifikacje kandydata/teki:

- Stopień doktora nauk w zakresie chemii lub nauk pokrewnych (wymagany najpóźniej w momencie rozpoczęcia pracy)
- Doświadczenie w symulacjach materiałów, w szczególności w periodycznych obliczeniach DFT.
- Doświadczenie w uczeniu maszynowym do przewidywania struktury i właściwości materiałów.
- Dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie.

Kandydat/ka musi spełniać wymagania zawarte w art. 113 ustawy - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dn. 20.07.2018 (t. j. Dz.U. z 2024 r., poz. 1571).

Podstawowe obowiązki:

- Budowa modeli ML do przewidywania właściwości hipergolicznych struktur metaloorganicznych.
- Pomoc kierownikowi projektu w opiece nad doktorantem zatrudnionym w projekcie.
- Prowadzenie dokumentacji naukowej i przygotowywanie publikacji naukowych.
- Prezentowanie wyników badań na konferencjach naukowych.

Zgłoszenie powinno zawierać:

- Życiorys (CV),
- List motywacyjny, podkreślający wcześniejsze doświadczenie i przydatność na ogłoszone stanowisko,
- Dwa kontakty referencyjne,
- Informacja o przetwarzaniu danych osobowych,
- Oświadczenie dot. zasad przeprowadzenia konkursów na UW.

Warunki zatrudnienia:

Zatrudnienie na pełnym etacie. Planowany okres zatrudnienia od 1.10.2025 do 30.09.2026 (z możliwością przedłużenia), na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Wynagrodzenie będzie wypłacane z grantu NCN w wysokości 140 000 PLN brutto brutto rocznie.

Termin składania dokumentów upływa z dniem 18 lipca 2025

Zgłoszenia prosimy wysłać na email m.arhangelskis@uw.edu.pl. W temacie wiadomości prosimy wpisać „Postdoc application”.

Wybrani kandydaci zostaną zaproszeni na rozmowę kwalifikacyjną online wkrótce po upływie terminu składania zgłoszeń. Ostateczna oferta zostanie złożona na podstawie wyników rozmowy kwalifikacyjnej. Decyzja komisji konkursowej będzie przedstawiona kandydatom za pomocą poczty elektronicznej do 20 września 2025 r.

Konkurs jest pierwszym etapem procedury zatrudnienia na stanowisku nauczyciela akademickiego, a jego pozytywne rozstrzygnięcie stanowi podstawę do dalszego postępowania.

Na Uniwersytecie Warszawskim obowiązuje procedura zgłaszania przez sygnalistów naruszeń prawa i podejmowania działań następczych – Procedura zgłoszeń wewnętrznych, stanowiąca załącznik do zarządzenia nr 94 Rektora UW z dnia 17 września 2024 r. w sprawie procedury zgłaszania przez sygnalistów naruszeń prawa i podejmowania działań następczych na Uniwersytecie Warszawskim, opublikowana i dostępna w Monitorze UW z 2024 r., poz. 266