

Am Interdisziplinären Zentrum für wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg sind für das Fachgebiet **Computergestützte und theoretische Chemie** in der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. Saeed Amirjalayer (<https://agamirjalayer.iwr.uni-heidelberg.de>, www.samirjalayer.de) ab sofort

eine Promotionsstelle

zu besetzen.

Das **Themenfeld** bewegt sich an der Schnittstelle von **theoretischer Chemie, maschinellem Lernen und den Materialwissenschaften** und umfasst:

- Multiskalen Simulationen von Stimuli-responsiven Funktionsmaterialien
- Untersuchungen von strukturen und dynamischen Eigenschaften von molekularen Schaltern und Maschinen
- Atomistische Untersuchungen von porösen Materialien (e.g. MOF, COFs, Käfigverbindungen)
- Entwicklung und Anwendung von evolutionären Algorithmen, neuronalen Netzwerken und maschinellem Lernen zur Modellierung, Auswertung und Visualisierung von dynamischen Phänomenen

Ihr Profil:

- Erfolgreich abgeschlossenes Grundstudium (M.Sc. oder gleichwertig) in Chemie, Physik oder einem verwandten Fachgebiet
- Erforderlich sind Erfahrungen in mindestens einem der folgenden Bereiche: computergestützte Chemie/Physik, Multiskalensimulationen, Entwicklung oder Anwendung von maschinellem Lernen, neuronalen Netzen oder evolutionären Algorithmen.
- Idealerweise Erfahrungen im Umgang mit quantenchemischen und/oder molekülmechanischen Softwarepaketen sowie in der Programmierung
- Hohe Motivation neue theoretische Methoden zu erlernen, weiterzuentwickeln und für Fragestellungen in der Chemie, Physik oder Materialwissenschaften anzuwenden.
- Interesse an wissenschaftliche Zusammenarbeit und Austausch mit experimentellen Gruppen.
- Teamfähigkeit, Kommunikationsstärke und Lernbereitschaft im Team
- Gute Kommunikationsfähigkeit in Englisch, sowohl mündlich als auch schriftlich

Wir bieten:

- Exzellentes, innovatives Forschungsmilieu
- Aktive Unterstützung bei der akademischen Karriereentwicklung
- Kollegiales, interdisziplinäres, internationales und diversitätsfreundliches Arbeitsumfeld
- Auf Bedürfnisse angepasste Weiterbildungsangebote und angepasste Maßnahmen zur Förderung von Diversität sowie Vereinbarkeit von Beruf und Familie
- Bezuschusstes Deutschlandticket.
- Vergütung nach Entgeltgruppe 13 TV-L (50%) befristet auf 2 (+2) Jahre.

Bitte senden Sie Ihren Lebenslauf, ein aussagekräftiges Motivationsschreiben, in dem Sie Ihr Interesse an der computergestützten und theoretischen Chemie im Bereich der Materialwissenschaften darlegen, sowie Empfehlungsschreiben und relevante Abschluss- oder Arbeitszeugnisse in einer einzigen PDF-Datei per E-Mail mit Betreff "Phd/HD" an untenstehende Kontaktadresse. Bitte beachten Sie, dass nur vollständige Bewerbungen berücksichtigt werden. Die Bewerbungsfrist endet am **15. Januar 2026**, jedoch bleibt die Stelle ausgeschrieben, bis ein geeignete*r Kandidat*in gefunden ist.

Die Universität Heidelberg steht für Chancengleichheit und Diversität. Wir bitten qualifizierte Frauen nachdrücklich um ihre Bewerbung. Menschen mit Schwerbehinderung werden bei gleicher Eignung vorrangig berücksichtigt. Informationen zu Stellenausschreibungen und zum Datenschutz finden Sie unter www.uni-heidelberg.de/stellenmarkt.

Universität Heidelberg
Interdisziplinäres Zentrum für wissenschaftliches Rechnen
zu Händen Herr Prof. Dr. Saeed Amirjalayer
Im Neuenheimer Feld 205A
69120 Heidelberg
saeed.amirjalayer@iwr.uni-heidelberg.de