



## CONVOCATÒRIA DE VACANT

**DENOMINACIÓ DEL LLOC DE TREBALL:** Investigador Postdoctoral

**NOM PROJECTE :** *Modeling the reverse water-gas shift (RWGS) reaction on nickel and nickel-alloy supported on alumina catalysts using ReaxFF.*

**LÍNEA O GRUP DE RECERCA:** Grup de Química Quàntica. Computational Catalysis

### **DESCRIPCIÓ DEL LLOC DE TREBALL:**

Modelització de la reacció inversa de canvi aigua-gas en aliatges de níquel i níquel sobre alúmina, utilitzant tècniques DFT, ReaxFF i d'aprenentatge automàtic. Modelització de l'estructura d'òxids metàl·lics complexos

### **PERFIL DE LA PERSONA CANDIDATA**

Doctor en química computacional, amb experiència en càlculs periòdics de DFT i estat sòlid

- Antecedents en tècniques d'aprenentatge automàtic
- Coneixement dels camps de força reactiva, en particular, ReaxFF.
- Habilitats de programació
- Domini de l'anglès escrit i oral, i habilitats de comunicació orals fortes, escrites
- Interès per la millora contínua dels processos integrant solucions innovadores
- Capacitat per treballar en equip, així com de manera autònoma amb una supervisió mínima.

### **REQUISITS**

- Competència en VASP, ReaxFF i tècniques d'aprenentatge automàtic
- Experiència en catàlisi de sòlids computacional

### **ES VALORARÀ**

- Habilitats de relació
- Motivació, creativitat, iniciativa i actitud proactiva.
- Capacitat d'aprenentatge permanent, flexibilitat i adaptabilitat.
- Compromesos amb la qualitat, l'optimització dels recursos i l'assoliment de resultats.
- Aptituds per al treball en equip, capacitat de treball autònom, organitzatiu, amabilitat, dinamisme, polivalència, rigor, responsabilitat i confidencialitat.

### **CONDICIONS LABORALS**

- Tipus de jornada: completa
- Lloc físic de treball: Departament de Química Física i Inorgànica
- Contracte: indefinit activitats científica- tècniques ( art. 23 bis de la Llei de la Ciència)
- Categoria: GRUP 1
- Durada: Inicial de 2 anys



- Retribució 28.000 € anuals bruts el primer any, incrementables en funció dels resultats.
- Incorporació aproximada: Octubre de 2022.

### **PROCEDIMENT DE SELECCIÓ**

El comitè de selecció participarà en totes les fases del procés de selecció que es detallen a continuació.

- Selecció de CV's: Identificació dels CV's aptes i no aptes segons requisits exigits. Els aspirants que no compleixin els requisits indicats en el punt perfil de la persona i requisits no passaran a la següent fase.
- Valoració del CV: Experiència en utilització de VASP (10 punts). Experiència en utilització de ReaxFF (10 Punts). Coneixements de Machine Learning (10 punts). Coneixements de Cristal·lografia (10 punts). Coneixements en catàlisi heterogènia computacional (10 punts).  
PUNTUACIÓ: 50 PUNTS
- Entrevista personal: PUNTUACIÓ: 50 PUNTS

En cas d'empat entre persones de diferent gènere, es contractarà a la persona del gènere menys representat en el grup de treball /departament /servei en el que s'incorpori.

### **COMITÈ DE SELECCIÓ**

- President: Josep M. Ricart, Catedràtic, Departament de Química Física i Inorgànica
- Vocal 1: Jordi J. Carbó, Catedràtic, Departament de Química Física i Inorgànica
- Vocal 2: Maria Besora, Prof. lector, Departament de Química Física i Inorgànica

SUPLENTS:

- Josep Maria Poblet, Catedràtic, Departament de Química Física i Inorgànica
- Maria del Mar Reguero, Catedràtica, Departament de Química Física i Inorgànica

Amb el vistiplau de:

- Lourdes Jane (Directora CTTI)

### **CANDIDATURES**

- Enviar el CV a través de web FURV (<https://www.fundacio.urv.cat/ca/fundacio/borsa-treball/>)

**DATA LÍMIT DE RECEPCIÓ DE CV** 15/09/2022

### **COMUNICACIONS**

La FURV publicarà a la seva web el llistat d'admesos i exclosos, així com també l'acta final amb les puntuacions obtingudes pels aspirants.



UNIVERSITAT  
ROVIRA i VIRGILI  
Fundació URV