|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  |

|  |
| --- |
| **Научный сотрудник в подразделение «департамент прикладной математики» (Программа российских постдоков)**от 110 000 рублей до вычета НДФЛ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»Москва Требуемый опыт работы: не менее 3-х летПолная занятость, полный деньСрок работы: 1 год с возможностью продления на второй Мы, **Высшая школа экономики** – один из крупнейших университетов России, ведущий центр образования, научных исследований и разработок. Сегодня в Вышке учится более 47 000 студентов и аспирантов, работает более 7000 преподавателей, ученых и административных сотрудников.В настоящее время у нас открыт конкурс Программы привлечения российских постдоков. В рамках конкурса открыта вакансия **постдока (научного сотрудника) в подразделение «департамент прикладной математики».****Название проекта**: Моделирование молекулярных жидкостей и растворов в наноразмерных порах. **Цель проекта:** В современных строительных технологиях широко используются пористые материалы, такие как глины, цементы и асфальтовые покрытия. В процессе эксплуатации эти материалы взаимодействуют с водой и водными электролитами, сорбируя их молекулы и ионы в своих порах. В результате образуются жидкие пленки в нанопорах, которые создают избыточные механические напряжения, включая сдвиговые и нормальные. Это приводит к деформации и износу материала. Поэтому важно разработать теоретическую модель для моделирования этих жидких пленок, с особой акцентом на расчет механических напряжений.Целью проекта является создание новой теории, которая будет описывать полярные жидкости и растворы электролитов на их основе в условиях ограниченной геометрии нанопор. Эта теория имеет потенциал для различных физико-химических приложений. Мы фокусируемся, главным образом, на изучении адсорбции воды на микро- и мезопористых материалах, а также на электросорбции водных растворов электролитов возле заряженных стенок нанопор. Также мы исследуем механические напряжения в тонких жидких пленках раствора электролита и изучаем различные межмолекулярные взаимодействия, вносящие свой вклад в эти напряжения. Для верификации полученных теоретических результатов будет использованы методы молекулярной динамики.**Задачи в рамках проекта:** * Разработка нелокальной теории самосогласованного поля полярных жидкостей в условиях ограниченной геометрии нанопор различных форм и применение ее к описанию воды в условиях ограниченной геометрии;
* Моделирование локальных механических напряжений в нанопоре кремнезема с шероховатыми стенками с помощью тензора напряжений, полученного из теории самосогласованного поля с помощью разработанного нами подхода. Сравнение результатов расчета c результатами полноатомного молекулярно-динамического моделирования;
* Разработка теории самосогласованного поля пространственно-неоднородного раствора электролита с явным учетом полярного растворителя для описания водного раствора электролита в кремнеземных и углеродных нанопорах. Вычисление расклинивающего давления за пределами теории ДЛФО с учетом структурных (сольватационных) эффектов и всех релевантных межмолекулярных взаимодействий.

**Что мы ждем от успешных кандидатов на данную должность:*** Российское гражданство или иностранное гражданство при условии получения ученой степени в РФ;
* Ученая степень (Ученая степень кандидата наук, успешная защита кандидатской диссертации, степень PhD);
* Обязательны хорошие знания высшей математики, общей физики и численных методов. Желательны навыки программирования на Python и в Matlab, опыт решения задач средствами молекулярно-динамического моделирования в пакетах Gromacs, Lammps, и т.д., знания основ методов машинного обучения. Приветствуются знания основ физической химии.

**Что мы предлагаем:*** Работа с известными специалистами в предметной области в междисциплинарном исследовательском коллективе, опыт научно-исследовательской работы;
* Доступ к вычислительным ресурсам суперкомпьютера cHARISMa;
* Оборудованное рабочее место;
* Доступ к информационным ресурсам, базам данных и электронным подпискам НИУ ВШЭ;
* Участие в программах академической мобильности и повышения квалификации НИУ ВШЭ.
 |

 |  |
|  |  |  |