|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | |  | | --- | | **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 лет  Полная занятость, полный день  Срок 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. | |  |
|  |  |  |