

**Convocatòria del lloc:** 4 places de Research technician (ref. MELIS-PSR-INDF-2022-16)

**Data de publicació de l'oferta:** 14/09/22

**Font de finançament:** NIH R01-GM140090; NIH OpenMM-62913504-178690-G.deFabritiis.  
"OpenMM: Scalable biomolecular modeling, simulation, and machine learning".

**Funcions a desenvolupar:**

The successful candidate will work on next generation molecular simulations and neural network potentials with the goal of substantially impacting physics-based simulations and molecular dynamics.

These positions involve having a key role in the development of OpenMM (<http://openmm.org>) of which we are co-coordinators. The candidate will contribute together with other PhDs fellows and international collaborators from academia and industry to the research lines of the Computational Science Laboratory (<https://www.compscience.org/>).

Depending on your skillset, you are expected to contribute to the machine learning of neural network representations for molecular potentials, improve speed in collaboration with OpenMM and Nvidia, enhance capabilities in terms of representing longer range physical terms, charges, etc.

Relevant publications: TorchMD: A deep learning framework for molecular simulations, S Doerr, M Majewski, A Pérez, A Krämer, C Clementi, F Noe, T Giorgino, ... Journal of chemical theory and computation 17 (4), 2355-2363 (<https://github.com/torchmd>).

**Requisits:**

The candidate will have a BSc in Physics, Chemistry, Science, Engineering, Biotechnology or similar and a MSc in Computational Physics, Industrial Biotechnology, Science, Machine Learning or similar. We seek exceptional candidates with a passion for computing and strong programming skills, good communication skills in English.

**Retribució prevista:** 21.377,58 € anuals

**Grup i complement:** Grup 2 nivell Ñ



**Dedicació i jornada:** 22,5 hores setmanals (temps parcial)

**Tipus de contractació:** Indefinida segons el previst al RD 32/2021 de 28 de desembre de 2021.

**Criteris de selecció:**

1. *Formació Acadèmica: 0-20 punts.*
2. *Experiència professional/Adequació al perfil proposat: 0-60 punts.*
3. *Altres mèrits: 0-20 punts.*

Puntuació mínim per passar el procés de selecció: 80 punts.

**Comissió de selecció:**

President: Gianni de Fabritiis

Vocal 1: Francesc Sabanes

Vocal 2: Berta Alsina Español

**Informació en el procés de participació:** enviar un correu electrònic amb una còpia del currículum vitae del candidat/a indicat la **referència MELIS-PSR-INDF-2022-16** a l'assumpte.

**Contacte:** [recruitment.melis@upf.edu](mailto:recruitment.melis@upf.edu)

**Termini de presentació de sol·licituds:** 28/09/2022