

Oferta de Doctorado en España

*Centro de Física de Materiales
San Sebastián*

Estudio de la estructura y la dinámica de polímeros y biopolímeros mediante *machine learning*

Supervisor: Dr. Gustavo Ariel Schwartz (gustavo.schwartz@csic.es)

Co-supervisor: Dr. Luis Alejandro Miccio (INTEMA)

Está abierta la convocatoria para una posición predoctoral en el Centro de Física de Materiales de San Sebastián (España). El objetivo del trabajo consiste en explorar una ruta numérica para determinar las propiedades físicas de polímeros y biopolímeros mediante el uso de técnicas *machine learning*. Durante los últimos años se han realizado esfuerzos considerables en el desarrollo de modelos que relacionan la estructura y las propiedades de forma cuantitativa (Quantitative Structure Property Relationship - QSPR). Entre los muchos métodos de modelado QSPR, el uso de redes neuronales artificiales (ANN) ha surgido como un enfoque muy prometedor y adecuado para establecer relaciones estructura-propiedades. Además de las ANN, también nos centraremos en esta línea de investigación en otros enfoques numéricos (clustering, vectorization, PCA) para correlacionar la estructura y las propiedades físicas de los materiales poliméricos, así como para comprender mejor los mecanismos moleculares involucrados en estos comportamientos. La posibilidad de predecir el comportamiento de nuevos materiales (incluso antes de sintetizarlos) y de comprender cómo la estructura y la dinámica están relacionadas con las propiedades macroscópicas es de gran importancia para la ciencia de materiales como así también para aplicaciones industriales.

El contrato predoctoral es por tres años y la fecha de comienzo tentativa es el 1º de septiembre de 2020. Se buscan candidatos altamente motivados, con sólidos conocimientos de programación (preferentemente en Matlab) y con buen nivel de inglés (escrito y oral). También es recomendable un conocimiento básico de física o química de polímeros. Los candidatos deberán haber terminado sus estudios de licenciatura o master para la fecha de comienzo del contrato.

Se ofrece un entorno de trabajo multicultural, de alto nivel profesional y de gran calidad humana. Los interesados deben enviar, **antes del 26 de marzo de 2020**, un CV (incluyendo las notas de la carrera), una breve carta de motivación (menos de 20 líneas) y el nombre y contacto de dos referencias al Dr. Gustavo Ariel Schwartz (gustavo.schwartz@csic.es).