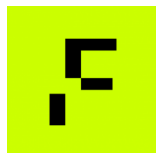


**Freie Universität Berlin - Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie,
Institut für Chemie und Biochemie, PTC / Theoretische Chemie / AG
Keller**



Wiss. Mitarbeiter*in (Praedoc) (w/m/d)

mit 65%-Teilzeitbeschäftigung befristet auf 4 Jahre Entgeltgruppe E13 TV-L FU Kennung:
DM-786

Stadt: Berlin; Beginn frühestens: Frühestmöglich; Dauer: befristet auf 4 Jahre;
Vergütung: Entgeltgruppe 13 TV-L FU; Kennziffer: DM-786

Aufgabenbeschreibung

Das sind wir

Die Arbeitsgruppe Keller entwickelt theoretische und datengetriebene Methoden zur Beschreibung komplexer molekularer Dynamik über viele Zeit- und Längenskalen hinweg. Forschungsschwerpunkte sind seltene Ereignisse und molekulare Kinetik in Systemen mit mehreren metastabilen Zuständen und komplexen Zeitskalenhierarchien.

Geplante Tätigkeiten:

- Molekulardynamische Simulationen von Anwendung von Enhanced-Sampling und Dynamic Reweighting-Methoden
- Entwicklung und Validierung von ML-Kraftfeldern auf Basis von DFT-Referenzdaten
- Nutzung von Hochleistungsrechenressourcen
- Zusammenarbeit mit experimentell arbeitenden Kooperationspartnern
- Kontinuierliche Dokumentation aller Forschungsergebnisse in Form von Berichten und Präsentation, Verfassen von wissenschaftlichen Publikationen in Peer-Review-Journalen

ab 01.04.2028 zusätzlich Mitarbeit in der Lehre. Die Tätigkeit dient der eigenen wissenschaftlichen Qualifizierung (Promotion).

Das erwartet Sie bei uns

Projekt:

Neue Machine-Learning-Kraftfelder ermöglichen es erstmals, chemische Reaktionen in komplexen molekularen Umgebungen mit hoher Genauigkeit und atomistischer Detailtiefe zu simulieren. Um jedoch auch seltene Reaktionsereignisse und relevante dynamische Zeitskalen zugänglich zu machen, müssen diese Ansätze mit modernen Enhanced-Sampling- und dynamischen Umgewichtungsmethoden kombiniert werden.

Das Projekt befasst sich mit der Entwicklung und Anwendung solcher Simulationsmethoden zur Untersuchung seltener Ereignisse in molekularen Systemen. Im Mittelpunkt stehen Aktivierungsprozesse und freie Energiebarrieren, die die Dynamik von Biomolekülen und chemischen Reaktionen bestimmen, mit konventionellen Molekulardynamikmethoden jedoch oft nur schwer zugänglich sind. Ein Schwerpunkt liegt auf der Konformationsdynamik von Peptiden und Proteinen unter Verwendung klassischer Kraftfelder sowie auf der Simulation organischer Reaktionen mit modernen Machine-Learning-Kraftfeldern (ML Force Fields). Das Projekt verbindet Methoden der Computer-Chemie, Multiskalenmodellierung und des Scientific Machine Learning, um komplexe molekulare Prozesse effizient und realistisch zu beschreiben.

<https://doi.org/10.48550/arXiv.2604.24245>

<https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-083122-124538>

Erwartete Qualifikationen

Das bringen Sie mit

- Abgeschlossenes wissenschaftliches Hochschulstudium (Master/Diplom) in Chemie, Physik oder einem verwandten naturwissenschaftlichen Fachgebiet

Das wünschen wir uns von Ihnen

- Überdurchschnittliche Studienleistungen (Bitte Nachweise, z. B. Transcript of Records, beifügen)
- Vertiefung in theoretischer oder computergestützter Chemie
- Programmierkenntnisse, vorzugsweise Python. - Erfahrung mit Machine-Learning-Techniken, insbesondere ML-Kraftfelder
- Erfahrung mit der Modellierung und Simulation molekularer Systeme
- sehr gute Deutsch- und Englischkenntnisse in Wort und Schrift

Unser Angebot

moderner Arbeitsplatz im grünen Bezirk Dahlem

- Arbeitsplatzsicherheit
- Bezahlung nach TV-L FU inkl. Jahressonderzahlung
- Flexible Arbeitszeiten und mobiles Arbeiten nach Absprache, sofern möglich
- die Vereinbarkeit von Beruf und Familie
- 30 Tage Urlaub bei einer 5-Tage-Woche
- Arbeitsfreie Tage am 24.12. und 31.12.
- vielseitiges Fort- und Weiterbildungsangebot für Ihre individuelle fachliche und persönliche Weiterentwicklung
- Möglichkeiten zur Teilnahme am Hochschulsport und Gesundheitsförderprogramm
- kostenfreie Parkmöglichkeiten am Gebäude und gute Anbindung an den öffentlichen Nahverkehr
- vergünstigtes Job-Ticket für den öffentlichen Nahverkehr
- Kostenlose Nutzung des Bibliotheksystems der Freien Universität
- Vergünstigungen in den Mensen
- Rabatte für Mitarbeitende - Corporate Benefits Programm

Bewerbung

Haben wir Ihr Interesse geweckt?

Dann freuen wir uns auf Ihre aussagekräftigen Bewerbungsunterlagen inklusive

- Motivationsschreiben mit Angaben zu bisherigen Forschungsprojekten,
- Lebenslauf,
- Notenauszug,
- Nachweis/Selbsteinschätzung der Sprachkenntnisse,
- Masterarbeit und
- Kontaktdaten eines früheren Betreuers.

Bitte senden Sie uns Ihre Bewerbung ausschließlich über unser Karriereportal, indem Sie auf den Button „Jetzt bewerben“ klicken. Bewerbungen in Papierform oder per E-Mail können leider nicht berücksichtigt werden. Weitere Informationen erteilt Prof. Dr. Bettina Keller / E-Mail: bettina.keller@fu-berlin.de

Schwerbehinderte werden bei gleicher Qualifikation bevorzugt berücksichtigt.

Die Freie Universität Berlin fordert Frauen sowie Personen mit Migrationsgeschichte ausdrücklich zur Bewerbung auf. Vorstellungskosten können von der Freien Universität Berlin leider nicht übernommen werden. Bewerbungsunterlagen werden nicht zurückgesandt. Bitte reichen Sie Ihre Unterlagen nur in Kopie ein.

Weitere Informationen unter <https://stellenticket.de/205726/BUA/>
Angebot sichtbar bis 12.08.2026

