Freie Universität Berlin - Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie

Die Arbeitsgruppe Keller entwickelt theoretische und datengetriebene Methoden zur Beschreibung komplexer molekularer Dynamik über einen weiten Bereich von Zeit- und Längenskalen. Forschungsschwerpunkte sind unter anderem seltene Ereignisse und molekulare Kinetik in Systemen mit mehreren metastabilen Zuständen und komplexen Hierarchien von Zeitskalen. Im Rahmen des SFB 1349 „Fluorine-Specific Interactions: Fundamentals and Applications“ untersuchen wir die Wechselwirkungen fluorierter Moleküle mit organischen Materialien. Per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) werden in einer Vielzahl technischer Anwendungen eingesetzt, sind jedoch nicht biologisch abbaubar. Sie werden daher häufig als „Ewigkeitschemikalien“ („forever chemicals“) bezeichnet und stellen eine erhebliche Gefahr für Umwelt und Gesundheit dar. Aufgrund ihres hydrophoben Charakters lagern sie sich leicht an aromatische Moleküle und Oberflächen an. Das Verständnis dieser Wechselwirkungen ist sowohl für die Aufklärung der Mechanismen relevant, über die PFAS biologische Systeme beeinträchtigen, als auch für die Entwicklung von Reinigungsverfahren, mit denen PFAS selektiv aus der Umwelt entfernt werden können. Das ausgeschriebene Projekt untersucht das Bindungsgleichgewicht und die Bindungsraten von PFAS-Molekülen an aromatische Systeme mithilfe von Molekulardynamik-Simulationen und einem grid-basierten Ansatz zur Beschreibung molekularer Assoziation, der in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Bettina Keller entwickelt wird. Die Moleküle werden sowohl mit empirischen Kraftfeldern als auch auf dem Niveau der Tight-Binding-DFT modelliert. https://doi.org/10.1021/acs.jctc.4c01293

Wiss. Mitarbeiter*in (Praedoc) (w/m/d) (DM-932)

Bereich: Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie Vertragsdauer: befristet bis zum 30.06.2027 Besoldungs- / Entgeltgruppe: E 13 TV-L FU Arbeitszeit: 67 % Anf.-Kennung: 932 Bewerbungsende: 09.11.2026

Stadt: Berlin; Beginn frühestens: Frühestmöglich; Dauer: befristet bis zum 30.06.2027; Vergütung: Entgeltgruppe 13 TV-L FU; Kennziffer: 932; Bewerbungsfrist: 09.11.2026

Aufgabenbeschreibung

Das erwartet Sie bei uns

- Aktives und interdisziplinäres Forschungsumfeld
- Modellierung von PFAS-Molekülen mit empirischen Kraftfeldern und Tight-Binding-DFT
- Konstruktion kinetischer Modelle des Bindungsprozesses mithilfe molekularer Simulationen und des grid-basierten Ansatzes
- Vergleich der verschiedenen Modellierungsansätze
- Kontinuierliche Dokumentation der Forschungsergebnisse in Form von Berichten und Präsentationen sowie, bei Eignung der Ergebnisse, Vorbereitung wissenschaftlicher
- Publikationen für begutachtete Fachzeitschriften

Erwartete Qualifikationen

Das bringen Sie mit

Abgeschlossenes wiss. Hochschulstudium (Master/Diplom) in Chemie, Physik oder einem verwandten naturwissenschaftlichen Fach

Das wünschen wir uns von Ihnen

- Überdurchschnittliche Studienleistungen (bitte entsprechende Nachweise, z. B. Transcript of Records, beifügen)
- Spezialisierung im Bereich Theoretische oder Computerchemie
- Erfahrung im Scientific Computing, vorzugsweise mit Python
- Erfahrung in der Modellierung und Simulation

Unser Angebot

- 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
- vergünstigtes Job-Ticket für den öffentlichen Nahverkehr
- kostenlose Nutzung des Bibliotheksystems der Freien Universität
- Vergünstigungen in den Mensen

Bewerbung

Haben wir Ihr Interesse geweckt?

Dann freuen wir uns auf Ihre aussagekräftigen Bewerbungsunterlagen. 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 / Email: bettina.keller@fu-berlin.de

Mit der Abgabe einer Onlinebewerbung geben Sie als Bewerber*in Ihr Einverständnis, dass Ihre Daten elektronisch verarbeitet und gespeichert werden.
Wir weisen darauf hin, dass bei ungeschützter Übersendung Ihrer Bewerbung auf elektronischem Wege von Seiten der Freien Universität Berlin keine Gewähr für die Sicherheit übermittelter persönlicher Daten übernommen werden kann.
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.