

BASES ESPECÍFIQUES	CODI CONVOCATÒRIA LE2321994
Convocada per la Resolució del rector de 9 de maig de 2023 Termini de presentació de sol·licituds: fins al dia 25 de maig de 2023, inclòs. Taxes d'inscripció: No n'hi ha Descripció del lloc de treball: Tecnòleg Municipi del lloc de treball: Tarragona Grup/categoria professional: Grup II -clt U Nombre de places: 1 Unitat d'adscripció: Departament de Química Física i Inorgànica Grup de recerca: Química Quàntica Línia de recerca: Catàlisi computacional	
Projecte	
Programa: Resolució REU/42/2022, de 17 de gener del Departament de Recerca i Universitats que estableix les bases reguladores per a la concessió de subvencions públiques destinades al finançament del «Programa Investigo», de contractació de persones joves demandants de feina en la realització d'iniciatives de recerca i innovació, en el marc del Pla de Recuperació, Transformació i Resiliència. Organisme finançador: Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca - Pla de Recuperació, Transformació i Resiliència –Finançat per la Unió Europea- NextGenerationEU Contracte finançat pel projecte: Machine-learned reactive force fields for large scale simulations of catalysis Aquest contracte està vinculat i finançat: Total Energies One Tech Belgium Projecte T22408S gestionat per la FURV Finançat per  En compliment de les disposicions en matèria d'informació i publicitat establertes en les convocatòries dels ajuts, citem, de forma expressa, aquests organismes com a entitats finançadores d'aquesta contractació. Així mateix, tant la URV com el/la treballador/a, si s'escau, citarem aquestes entitats finançadores en el contracte de treball, publicacions, ponències, activitats de difusió i altres resultats de la investigació. Codificació pressupostària: • Orgànica: • Funcional: • Econòmica: • RC:	
Característiques de la contractació	
Tipus de contracte: Contracte temporal acollit al Pla de Recuperació, Transformació i Resiliència Jornada: Temps complet: 35 hores setmanals Horari i disponibilitat: estàndard Previsió inicial de durada: 24 mesos Data inici del contracte/ data màxima d'incorporació a la URV: 01/09/2023	

Retribució bruta anual jornada completa:	
Salari base:	29.994,44 €
Altres:	71,40 €
CLT/U:	1.177,80 €
Tasques	
Principals tasques a realitzar:	
Donar suport a la recerca dirigida al disseny de nous catalitzadors per processos químics industrials del sector energètic orientats a la descarbonització, mitjançant simulacions a gran escala. Les activitats inclouran optimitzar i testear camps de força reactius desenvolupats a mida per reaccions catalítiques específiques. En aquest procés es prepararan conjunts d'entrenament a partir de recerca estructurada, datamining, en bases de dades; s'implementaran algorismes d'aprenentatge automàtic, machine learning, per l'optimització dels paràmetres; es realitzaran simulacions per identificar els llocs actius dels catalitzadors; i es construiran models de regressió amb descriptor globals i topològics que permetin el disseny de configuracions catalítiques més actives i eficients.	
Coneixements	
- Coneixements de química a nivell de grau en química - Coneixements bàsics de catàlisi i química computacional a nivell de màster en el àmbit. - Anglès nivell B2.	
Mèrits	
- Machine learning - Catàlisi computacional - Dinàmica molecular - Mecànica molecular - Teoria de bandes	
Comissió de selecció	
President/a titular:	Jorge Juan Carbó Martín
President/a suplent:	José Manuel Ricart Pla
Vocal titular:	Antoni Rodríguez Fortea
Vocal suplent:	Maria Besora Bonet
Vocal titular:	Pendent de designació
Vocal suplent:	Pendent de designació

Data de publicació: 15/05/2023