

Ph.D. Student Position in Theoretical Spectroscopy: "Simulation of rotation-vibration spectra of floppy molecules by means of the program TROVE"

A Ph.D. student position (67% of the BAT IIa/E13 salary) is available in the research group "Theoretical Spectroscopy" (<http://www.ptc.uni-wuppertal.de/team/hochschullehrer/prof-per-jensen-phd.html>) at the University of Wuppertal, Germany, initially for two years. The research project "Simulation of rotation-vibration spectra of floppy molecules by means of the program TROVE" is supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG).

The research focuses on the development and application of modern, computer-based methods for the simulation of rotations-vibration-spectra of small molecules that are, or could be, present in space or in the Earth's atmosphere. The work is intended to assist the investigation, by remote sensing experiments, of interstellar space, the outer layers cool stars and the upper layers of the terrestrial atmosphere. With the program system TROVE [Theoretical ROTation-Vibration Energies; S. N. Yurchenko, W. Thiel, and P. Jensen, *J. Mol. Spectrosc.* **245**, 126-140 (2007)], the rotation-vibration spectrum of any molecule in an isolated electronic state can, at least in principle, be simulated by variational calculations. In the framework of the project, various extensions of TROVE are planned, aiming at making TROVE more flexible and thus applicable in practice to more diverse molecules. The extensions include a correct treatment of singular points of the Hamiltonian, an implementation of permutation-inversion-symmetry (as expressed by the molecular symmetry group) for spherical top molecules, a description of molecules with more than one large-amplitude vibration, and the simultaneous treatment of interacting electronic states (*i.e.*, the breakdown of the Born-Oppenheimer approximation). The project is carried out in close collaboration with Dr. Sergei N. Yurchenko, University College London, UK.

In addition to the specific Ph.D. education in theoretical chemistry, the University of Wuppertal offers, through the Centre for Graduate Studies (<http://www.zgs.uni-wuppertal.de>), workshops and courses for further education and for acquiring key qualifications.

The position is open to applicants of all nationalities. Applicants should have a Diplom or a Master's degree in chemistry, physics or a related subject, good knowledge of English, and enthusiasm for theoretical chemistry, theoretical spectroscopy and computer applications. Interested and talented candidates (ideally with knowledge of programming and a thorough education in theoretical chemistry and/or spectroscopy) should send their application with curriculum vitae, a short motivation letter and contact information for two persons to supply letters of reference by e-mail (preferably as pdf) to

Prof. Per Jensen, Ph.D.

FB C – Physikalische und Theoretische Chemie
Bergische Universität Wuppertal
Gaussstrasse 20
42097 Wuppertal, Deutschland
(e-Mail: jensen@uni-wuppertal.de).

Doktorandenstelle in Theoretischer Spektroskopie: "Simulation of rotation-vibration spectra of floppy molecules by means of the program TROVE"

In der Arbeitsgruppe "Theoretische Spektroskopie" (<http://www.ptc.uni-wuppertal.de/team/hochschullehrer/prof-per-jensen-phd.html>) an der Bergischen Universität Wuppertal ist ab sofort für zunächst zwei Jahre eine Doktorandenstelle (67% von BAT IIa/E13) zu besetzen. Das Forschungsvorhaben "Simulation of rotation-vibration spectra of floppy molecules by means of the program TROVE" wird von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert.

Im Fokus der Forschung stehen die Entwicklung und Anwendung moderner, rechnergestützter Methoden zur Simulation der Rotations-Schwingungsspektren kleiner Moleküle, die im Weltraum oder in der Erdatmosphäre vorhanden sind oder vorhanden sein könnten. Die Arbeiten dienen zur Unterstützung der Erforschung des interstellaren Raums, der äußeren Schichten von kühlen Sternen und der höheren Schichten der Erdatmosphäre durch Fernerkundungsexperimente. Mit dem Programmsystem TROVE [Theoretical ROTation-Vibration Energies; S. N. Yurchenko, W. Thiel, and P. Jensen, *J. Mol. Spectrosc.* **245**, 126-140 (2007)] kann, zumindest im Prinzip, das Rotations-Schwingungsspektrum eines willkürlichen Moleküls in einem isolierten Elektronenzustand durch Variationsrechnungen simuliert werden. Im Rahmen des Forschungsvorhabens sind mehrere Erweiterungen des TROVE-Programmsystems geplant; die Erweiterungen zielen darauf, TROVE flexibler zu machen und damit in der Praxis für eine größere Menge von verschiedenen Molekültypen einsetzbar. Die Erweiterungen beinhalten eine korrekte Behandlung von singularen Punkten des Hamiltonoperators, eine Implementation der Permutations-Inversions-Theorie der molekularen Symmetriegruppen für Kugelkreisel, die Beschreibung von Molekülen mit mehreren Großamplitude-Schwingungen sowie die gleichzeitige Behandlung zweier wechselwirkenden Elektronenzustände (d.h. des Zusammenbruchs der Born-Oppenheimer-Näherung). Das Projekt wird in enger Zusammenarbeit mit Dr. Sergei N. Yurchenko, University College London, UK, durchgeführt.

Zusätzlich zur spezifischen Promotionsausbildung im Fach Chemie bietet die Bergische Universität im Rahmen des Zentrums für Graduiertenstudien (<http://www.zgs.uni-wuppertal.de>) Workshops und Kurse zur fachlichen Weiterbildung und zum Erwerb von Schlüsselqualifikationen.

Staatsangehörige aller Nationalitäten können sich bewerben. Bewerberinnen und Bewerber sollten ein Diplom oder einen Masterabschluss in Chemie, Physik oder verwandten Gebieten haben, gute englische Sprachkenntnisse besitzen und sich für Theoretische Chemie/Spektroskopie und Computeranwendungen begeistern können. Interessierte und talentierte Kandidatinnen und Kandidaten (idealerweise mit Programmierkenntnissen und einer fundierten Ausbildung in Theoretischer Chemie und/oder Spektroskopie) senden ihre Bewerbung mit Lebenslauf, kurzem Motivationsschreiben, sowie Kontaktdaten zweier Referenzpersonen (vorzugsweise als pdf) per E-Mail an

Prof. Per Jensen, Ph.D.

FB C – Physikalische und Theoretische Chemie
Bergische Universität Wuppertal
Gaussstrasse 20
42097 Wuppertal, Deutschland
(e-Mail: jensen@uni-wuppertal.de)