

2 PhD Positions in Theoretical Chemistry

New Quantum Chemical Methods for Excitonic Couplings in Covalently Linked Chromophors and for Singlet Fission

The research project focusses on the theoretical description and simulation of electronic excitation energy transfer processes which are essential for molecular functionality in the field of modern organic photovoltaics and optoelectronic organic materials. The project is funded by the German National Research Council (DFG) for a duration of three years with the possibility for extension. The project start is scheduled for October 2011.

The first objective is to develop new quantum chemical algorithms which allow to accurately quantify the electronic interaction within complex organic chromophore assemblies. State-of-the-art methodology for the electron correlation problem will be used here, and a considerable amount of programming is needed. The second goal is to implement numerical simulations of electronic energy transfer and exciton migration and to apply them to new candidates for functional optoelectronic materials. This part puts the emphasis on the photophysics as it is actually happening in chromophore aggregates and bridges the gap to experiment. Besides the purely electronic problem, new challenging aspects enter, e.g., the coupling to vibrational motion, the impact of mesoscopic structure and disorder, or collective phenomena. Here, also techniques from molecular dynamics will be involved.

We are seeking for highly motivated candidates with a recent MSc in chemistry, physics, or a related discipline. Applicants should have strong interests and profound knowledge of theoretical chemistry. They should have a good command of English language and experience with Linux and quantum chemistry software. Moreover, they should be able to act as good team players. Programming skills are very helpful, but can also be acquired in the course of the project. Consideration of candidates will start immediately and continue until the position is filled.

Application

Please send your application including a CV, a short letter of interest, and contact information for at least two academic references as a single PDF-file by email to:

Jun.-Prof. Dr. Jörg Tatchen

Institute of Theoretical and Computational Chemistry
Heinrich Heine University Düsseldorf, 40204 Düsseldorf, Germany
Email: Joerg.Tatchen@hhu.de, Tel.: +49-211-8112552

2 Doktorandenstellen in Theoretischer Chemie

Neue quantenchemische Methoden für exzitonische Kopplung in kovalent verbrückten Chromophoren und für Singulettspaltung

Dieses von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) finanziell geförderte Projekt hat die theoretische Modellierung von elektronischen Energietransferprozessen zum Ziel, die in der modernen organischen Photovoltaik und in neuen optoelektronischen organischen Materialien für die Funktionalität entscheidend sind. Das Projekt hat zunächst eine Laufzeit von drei Jahren, eine Verlängerung ist möglich. Der Beginn ist für den Oktober 2011 geplant.

Das erste Ziel des Projekts besteht darin, neue Algorithmen zu entwickeln, mit denen die elektronische Wechselwirkung innerhalb komplexer Chromophor-Aggregate genau quantifiziert werden kann. Dieser Teil führt an den Stand der Forschung im Bereich der quantenchemischen Korrelationsmethoden für elektronisch angeregte Zustände heran. Gleichzeitig können umfangreiche Programmierarbeiten geplant und umgesetzt werden. Im zweiten Teil geht es darum, realistische Simulationen für Energietransfer und Exzitonwanderung durchzuführen. Hier sind die physikalischen Prozesse, die in den Materialien ablaufen, im Fokus. Die Verbindung zum Experiment ist eng. Neben den rein elektronischen Kopplungen rücken eine Reihe weiterer Aspekte ins Bild. Dazu gehören die Frage, welchen Einfluss die mesoskopische Materialstruktur auf die Funktionalität hat, die Kopplung mit Schwingungen oder die Untersuchung kollektiver Phänomene. Um hier Antworten zu finden, werden auch Verfahren aus der Molekulardynamik eingesetzt.

Wir suchen zum nächstmöglichen Zeitpunkt hochmotivierte Bewerber mit Masterabschluss oder Diplom in Chemie, Physik oder einem verwandten Gebiet. Interessenten sollten Freude an Theoretischer Chemie und eine solide Ausbildung mitbringen. Gewünscht sind gute Englischkenntnisse sowie Erfahrung mit Linux und quantenchemischer Software. Außerdem ist Teamfähigkeit gefragt. Programmierkenntnisse sind sicher hilfreich, können aber problemlos auch in dem Projekt erworben werden.

Bewerbung

Interessiert? Bewerbungen mit Lebenslauf, kurzem Motivationsschreiben und Kontaktdaten von zwei akademischen Referenzen (bitte als eine PDF-Datei) per Email an:

Jun.-Prof. Dr. Jörg Tatchen

Institut für Theoretische Chemie und Computerchemie
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, 40204 Düsseldorf
Email: Joerg.Tatchen@hhu.de, Tel.: +49-211-8112552