

Doktorandenstelle in Theoretischer Chemie: „Mechanismen Licht-induzierter Triplett-Aktivierung“

Am Lehrstuhl für Theoretische Chemie und Computerchemie der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf (<http://www.chemie.uni-duesseldorf.de/Faecher/Theochem>) ist ab sofort für zunächst drei Jahre eine Doktorandenstelle zu besetzen. Das Forschungsvorhaben „Mechanismen Licht-induzierter Triplett-Aktivierung“ wird von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert.

Im Fokus unserer Forschung steht die Entwicklung und Anwendung moderner, rechnergestützter Methoden für elektronisch angeregte Molekülzustände. Ziel ist das Verständnis Licht-induzierter molekularer Prozesse, insbesondere solcher, die einen Wechsel des Spinzustands beinhalten. Das Dissertationsprojekt zielt darauf ab, die Mechanismen ultraschneller Interkombinationen (ISC) zu beleuchten. Im Rahmen des Forschungsvorhabens sollen verbesserte Methoden zur Berechnung von ISC-Raten entwickelt werden, die auf Chromophore in der Gasphase, in Lösung und in makromolekularer Umgebung angewendet werden können. Das Projekt wird in enger Zusammenarbeit mit experimentell orientierten Spektroskopikern durchgeführt.

Zusätzlich zur spezifischen Promotionsausbildung im Fach Chemie bieten wir im Rahmen der Interdisciplinary Graduate and Research Academy Düsseldorf (<http://www.uni-duesseldorf.de/iGRAD/>) Schulungen in Schlüsselqualifikationen und anderen berufsrelevanten Qualifikationen an.

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 und Computerchemie begeistern können. Interessierte und talentierte Kandidatinnen und Kandidaten (idealerweise mit Programmierkenntnissen und einer fundierten Ausbildung in Theoretischer Chemie) senden ihre Bewerbung mit Lebenslauf, kurzem Motivationsschreiben, sowie Kontaktdaten zweier Referenzpersonen (vorzugsweise als pdf) per E-Mail an

Prof. Dr. Christel M. Marian

Lehrstuhl für Theoretische Chemie und Computerchemie
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf
40204 Düsseldorf, Deutschland
(e-Mail: christel.marian@hhu.de).

PhD Student Position in Theoretical Chemistry: “Mechanisms of Light-Induced Triplet Activation”

Applications are invited for a PhD student position at the Institute of Theoretical and Computational Chemistry of the Heinrich-Heine-University Düsseldorf, Germany (<http://www.chemie.uni-duesseldorf.de/Faecher/Theochem>). The research project “Mechanisms of Light-Induced Triplet Activation” is funded by the German National Research Council (DFG). The initial appointment will be for three years, starting as soon as possible.

The main theme of our research is the development and application of state-of-the-art computational tools to achieve an understanding of molecular excited-state processes, in particular those involving a change in spin state. The objective of the PhD project is to elucidate the mechanisms of ultrafast intersystem crossing (ISC) processes. Improved methods for the computation of ISC rates are going to be developed that are applicable to chromophores in the gas phase, in solution, or in a macromolecular environment. The project will be conducted in close collaboration with experimentally oriented spectroscopists.

In addition to the subject-specific doctoral education at the School of Chemistry, we offer services all around your doctoral research project as well as training in transferable skills in the framework of the Interdisciplinary Graduate and Research Academy Düsseldorf (<http://www.uni-duesseldorf.de/iGRAD/>).

Applicants should have a diploma / master’s degree in Chemistry, Physics, or related fields, a good command of the English language, and a strong motivation for Theoretical and Computational Chemistry. Interested and talented candidates (ideally with programming skills and sound knowledge of fundamental theoretical chemistry) should send their application including a C.V., a short letter of intent, and contact data for two references (preferably as pdf) by email to

Prof. Dr. Christel M. Marian
Chair of Theoretical and Computational Chemistry
Heinrich-Heine-University Düsseldorf
40204 Düsseldorf, Germany
(Email: christel.marian@hhu.de)