

2 Doktorarbeiten in Theoretischer Chemie

Thema: Methodik und Anwendung der relativistischen Quantenchemie auf Photoelektronenspektren von Systemen mit schweren Elementen, elektronische Zerfallsreaktionen

Im Rahmen eines genehmigten DFG-Projektes sollen Einfach- und Doppelionisierungsspektren von Systemen mit schweren Elementen berechnet werden, um einerseits die experimentellen Daten interpretierbar zu machen, andererseits die relativistischen Einflüsse auf die nachfolgenden elektronischen Zerfallsprozesse zu verstehen.

Hierzu wird ein relativistischer Ansatz auf der Basis von Propagatoren gewählt und eine entsprechende Implementation in das Programmpaket DIRAC angestrebt. Eine Kooperation mit experimentellen und theoretischen Gruppen ist vorhanden.

Gute mathematisch-physikalische Kenntnisse sind von Vorteil und der Doktorand sollte auch Spaß am Programmieren mitbringen.

Kontakt:

PD Dr. M. Pernpointner, Tel.: 06221/545262, Fax.: 06221/545221

email: Markus.Pernpointner@pci.uni-heidelberg.de
