

An der **Juniorprofessur für Theoretische Chemie mit dem Schwerpunkt Festkörper- und Materialchemie / Elektrochemie, Physikalisch-Chemischen Institut, Fachbereich Biologie und Chemie**, ist im Rahmen eines von der DFG finanzierten Projektes mit dem Thema „*Redoxchemie ternärer Graphitinterkalationsverbindungen: Theorie und Experiment*“ zum nächstmöglichen Zeitpunkt befristet auf 2 Jahre eine **Vollzeitstelle** mit einer/einem

### **Wissenschaftlichen Mitarbeiterin/Mitarbeiter**

zu besetzen. Bei Vorliegen der tariflichen Voraussetzungen erfolgt die Vergütung nach Entgeltgruppe 13 Tarifvertrag Hessen (TV-H).

#### **Aufgaben:**

Durchführung quantenchemischer Rechnungen zur Modellierung der Interkalation von Ionen und Komplexen in Graphit. Dabei kommen hoch-korrelierte wellenfunktionsbasierte Methoden sowie die Dichtefunktionaltheorie mit aktuellen Korrekturen zum Einsatz. Weiter werden *ab initio* Molekulardynamik-Simulationen durchgeführt, um Diffusionsprozesse genauer zu verstehen. Die Ergebnisse sollen dokumentiert, ausgewertet und anschließend publiziert werden. Es erfolgt eine enge Zusammenarbeit mit der experimentell arbeitenden Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Adelhelm (FSU Jena). Im Bereich der hoch-korrelierten wellenfunktionsbasierten Methoden erfolgt eine Zusammenarbeit mit Dr. Voloshina (HU Berlin).

#### **Anforderungsprofil:**

Sie verfügen über ein abgeschlossenes wissenschaftliches Hochschulstudium (Diplom oder MSc) mit sehr guten Leistungen in Theoretischer Chemie / Physik sowie über eine einschlägige Promotion. Wir erwarten weitreichende Kenntnisse im Fachgebiet der Theoretischen Chemie / Quantenchemie. Idealerweise haben Sie Erfahrungen auf dem Gebiet der Molekulardynamik. In dem Projekt ist ein intensiver wissenschaftlicher Austausch mit Wissenschaftlern anderer Arbeitsgruppen vorgesehen. Dies erfordert zum einen sehr gute Englischkenntnisse, die Bereitschaft zu internationaler Kooperation und zum anderen ein sehr gut ausgeprägtes Kommunikationsvermögen sowie ein Interesse an fachübergreifenden Fragestellungen.

Die Justus-Liebig-Universität Gießen strebt einen höheren Anteil von Frauen im Wissenschaftsbereich an; deshalb bitten wir qualifizierte Wissenschaftlerinnen nachdrücklich, sich zu bewerben. Die Justus-Liebig-Universität versteht sich als eine familiengerechte Hochschule. Bewerberinnen und Bewerber mit Kindern sind willkommen.

Ihre Bewerbung (keine E-Mail) richten Sie bitte unter Angabe des **Aktenzeichens 635/05171/08** mit den üblichen Unterlagen bis zum **15.12.2016** an **Frau Prof. Dr. Doreen Mollenhauer, Physikalisch-Chemisches Institut, Heinrich-Buff-Ring 17, 35392 Gießen**. Bewerbungen Schwerbehinderter werden - bei gleicher Eignung - bevorzugt. Wir bitten, Bewerbungen nur in Kopie vorzulegen, da diese nach Abschluss des Verfahrens nicht zurückgesandt werden.

Nähere Informationen können Sie bei Prof. Dr. Doreen Mollenhauer (Tel.: 0641/99 34560) erhalten.