

Wir sind eine der jüngsten Universitäten Deutschlands und denken in Möglichkeiten statt in Grenzen. Mitten in der Ruhrmetropole entwickeln wir an 11 Fakultäten Ideen mit Zukunft. Wir sind stark in Forschung und Lehre, leben Vielfalt, fördern Potenziale und engagieren uns für eine Bildungsgerechtigkeit, die diesen Namen verdient.

Die **Universität Duisburg-Essen** sucht am **Campus Duisburg** in der Fakultät für Physik, Fachgebiet Theoretische Physik einen

**wissenschaftlichen Mitarbeiter (w/m/d) an Universitäten
(Entgeltgruppe 13 TV-L)**

Ihre Aufgabenschwerpunkte:

Mitwirkung am Forschungsprojekt **Entwicklung neuer Mikrosolvatationsmodelle mit Kopplung an lokale großkanonische Ensembles.**

Die Beschreibung der Auswirkung von Solvatationseffekten auf physikochemische Prozesse in *ab initio* Berechnungen basiert in der Regel auf impliziten Lösungsmittelmodellen, bei denen die Freiheitsgrade der Lösungsmittelmoleküle nicht explizit betrachtet werden. Eine solche Unterteilung in ein explizit beschriebenes System und ein dieses System umgebendes Lösungsmittelbad erfordert die Annahme schwacher Wechselwirkungen, welche häufig nicht gerechtfertigt ist. Hybridmodelle, bei denen ein Teil des Solvens explizit beschrieben wird, sind in der Lage die Genauigkeit zu verbessern. Es ist jedoch schwierig, solche Modelle systematisch zu konstruieren.

In der ausgeschriebenen Stelle sollen Hybridmodelle entwickelt werden, in denen die explizit beschriebenen Moleküle an lokale großkanonische Ensembles (gekennzeichnet durch eine Temperatur und ein chemisches Potential) gekoppelt werden. Angefangen von hard-sphere-Annahmen sollen Modelle konstruiert werden, die einen hierarchischen Aufbau mikrosolvatisierter Komplexe ermöglichen. Eine geeignete Parametrisierung für die Kopplung an die lokalen großkanonischen Ensembles soll dabei durch Vergleich mit Molekulardynamiksimulationen ermittelt werden. Für stark wechselwirkende Lösungsmittel soll zudem die Kombination mit verschiedenen impliziten Lösungsmittelmodellen untersucht werden.

Die Mitarbeit an der Vorbereitung und Durchführung von Lehrveranstaltungen wird ebenfalls erwartet. Im Rahmen der Tätigkeit wird Gelegenheit zur wissenschaftlichen Weiterqualifikation (mit Abschluss Promotion) geboten. Die Stelle wird durch den Exzellenzcluster RESOLV (Ruhr Explores Solvation, [ww.solvation.de](http://www.solvation.de)) unterstützt. Eine Teilnahme an der integrierten RESOLV Graduiertenschule ist Voraussetzung.

Ihr Profil:

Abgeschlossenes Hochschulstudium im Fach Physik oder Chemie von mind. 8 Semestern. Eine sehr gute (< 1,5 im deutschen System) Benotung der Abschlussarbeit und der gewichteten Kursnoten wird vorausgesetzt. Sehr gute Englischkenntnisse in Wort und Schrift sind ebenfalls Voraussetzung.

Darüber hinaus sind gute Kenntnisse im Bereich der Elektronenstrukturtheorie und der statistischen Physik, erste Erfahrungen in der Anwendung von DFT-Programmen (Q-Chem, Orca o.Ä.), sowie Programmiererfahrung in gängigen Sprachen (C++, Fortran, Python) erwünscht.

Wir bieten:

- ein abwechslungsreiches, vielseitiges Aufgabengebiet
- Fort- und Weiterbildungsangebote
- Vergünstigtes Firmenticket
- Sport- und Gesundheitsangebote (Hochschulsport)

Besetzungszeitpunkt: schnellstmöglich

Vertragsdauer: 3 Jahre

Arbeitszeit: 75 Prozent einer Vollzeitstelle

Bewerbungsfrist: 30.09.2021

Die Universität Duisburg- Essen verfolgt das Ziel, die Vielfalt ihrer Mitglieder zu fördern
(s. <http://www.uni-due.de/diversity>)

Sie strebt die Erhöhung des Anteils der Frauen am wissenschaftlichen Personal an und fordert deshalb einschlägig qualifizierte Frauen nachdrücklich auf, sich zu bewerben.
Frauen werden nach Maßgabe des Landesgleichstellungsgesetzes bei gleicher Qualifikation bevorzugt berücksichtigt.

Bewerbungen geeigneter Schwerbehinderter und Gleichgestellter i. S. des § 2 Abs. 3 SGB IX sind erwünscht.

Ihre Bewerbung mit den üblichen Unterlagen richten Sie bitte unter Angabe der Kennziffer **494-21** an Herrn Dr. Christopher J. Stein, Universität Duisburg- Essen, Fakultät für Physik , Lotharstr. 1, 47048 Duisburg, oder bevorzugt in einer pdf-Datei per E-Mail an christopher.stein@uni-due.de

Informationen über die Fakultät und die ausschreibende Stelle finden Sie unter:
<http://www.uni-due.de/physik> bzw. <https://www.uni-due.de/physik/stein/>

www.uni-due.de

