

In der Arbeitsgruppe von Professor Dr. A. C. Filippou ist ab sofort

**eine Doktorandenstelle (Vergütung E13/2 TV-L) zu besetzen.**

(auch zur Durchführung einer Masterarbeit  
mit anschließender Promotion auf o.a. Stelle geeignet)

Die Promotionsprojekte liegen auf dem Gebiet der computerunterstützten metall- und elementorganischen Chemie oder der Komplexchemie und umfassen folgende Themen:

Dreifachbindungen zwischen Übergangsmetallen und den Elementen Si–Pb  
Organosiliziumchemie in niedrigen Oxidationsstufen  
Metallzentrierte C-C-Kupplungsreaktionen von elektronenreichen Alkinen

Das Aufgabengebiet umfasst die Durchführung quantenchemischer Berechnungen, wie Strukturoptimierungen (in Gasphase und unter Berücksichtigung von Solvenzeffekten (COSMO), Berechnung thermodynamischer Parameter, Analyse der Wellenfunktion (Molekülorbitale, NBO, AIM, ELF, ETS-NOCV, etc.), Berechnung spektroskopischer Eigenschaften (UV/VIS, NMR, EPR, IR/Raman) mittels ab initio und DFT Methoden an geschlossen- und offenschaligen Systemen mittels gängiger QC-Programme (Orca, Turbomole, ADF, Gaussian). Ein Anlernen ggf. noch unbekannter Methoden durch einen erfahrenen Mitarbeiter ist möglich, jedoch wird auch eigenes Engagement zum Erlernen neuer Fertigkeiten erwartet.

Die Mitarbeiter unserer überwiegend experimentell ausgerichteten Arbeitsgruppe forschen auf den o.a. Themen und liefern damit zahlreiche experimentelle Befunde, die es mit Hilfe der theoretischen Berechnungen zu erklären und verstehen gilt. Ein reger gedanklicher Austausch zwischen dem zukünftigen Stelleninhaber und den experimentell arbeitenden Mitarbeitern ist dabei ausdrücklich gewünscht. Darüber hinaus kann der Bewerber zukünftig auch eine experimentelle analytische Methode (z.B. UV/Vis oder Cyclovoltammetrie) erlernen und neben der eigenen Promotionsforschung auch entsprechende Messungen für Arbeitsgruppenmitglieder durchführen. Mitarbeit bei der Administration der AK-Computerinfrastruktur wird ebenfalls erwartet.

Wir bieten ein attraktives Arbeitsumfeld mit umfangreicher experimenteller und computertechnischer Ausstattung. Neben einem AK-eigenen Cluster bestehen Zugangsmöglichkeiten zu im Rahmen des SFB813 angeschafften Großclustern zur Durchführung der Berechnungen.

Vorausgesetzt werden ein mit überdurchschnittlichem Erfolg abgeschlossenes Hochschulstudium der Chemie vorzugsweise mit Schwerpunkt in der Computational Chemistry oder anorganischen Molekülchemie/Metallorganik. Darüber hinaus erwarten wir Team- und Kommunikationsfähigkeit, sowie gute Englischkenntnisse.

Bitte richten Sie Ihre schriftliche Bewerbung inklusive einer fünfseitigen Zusammenfassung der Master Thesis mit den üblichen Unterlagen (Anschreiben, Lebenslauf, Lichtbild, Zeugnissen, zwei Empfehlungsschreiben) vorzugsweise als pdf-Dokument per E-Mail unter Angabe des frühest möglichen Antrittstermins an:

Postanschrift: Institut für Anorganische Chemie  
Dr. Gregor Schnakenburg  
Gerhard-Domagk-Straße 1  
53121 Bonn

E-Mail: (gregor.schnakenburg@uni-bonn.de)