

Stelle Wissenschaftliche Hilfskraft Chemie

Theoretische Berechnung von Röntgenabsorptionsspektren

Röntgenabsorptionsspektroskopie stellt einer der wichtigsten Techniken für die molekulare Strukturbestimmung von Katalysatoren, typischerweise Nanopartikel aus Übergangsmetallen und deren Oxide, dar. Die Auswertung von experimentellen Röntgenabsorptionsspektren ist herausfordernd und erfolgt häufig nur oberflächlich anhand von experimentellen Referenzspektren. Im Gegensatz dazu können theoretisch berechnete Spektren anhand chemischer Strukturen ein tieferes Verständnis des Zusammenhangs zwischen Spektroskopie und Struktur einbringen.

Deine Aufgaben:

- Visualisierung der chemischen Strukturen mit geeigneter Software, z.B. Mercury.
- Erstellung von Input-Dateien für die Berechnungen anhand von Molekularstrukturdateien: XYZ, CIF.
- Erstellen von Rechenaufträgen
- Darstellung und Diskussion der berechneten Spektren

Du wirst in die Aufgaben und Software von uns eingewiesen.

Die Stelle (10-15 Std./Woche) ist vom 1. Juli bis 31. Dezember 2021 befristet.

Was Du mitbringst

- Bachelor oder Master/Diplom-Abschluss in Chemie.
- Kenntnisse im Bereich der Kristallfeldtheorie und/oder Kristallographie sind wünschenswert.
- Interesse für Computer-Visualisierung von anorganischen und metallorganischen Kristall- und Molekularstrukturen.
- Gründliche Arbeitsweise
- Lernbereitschaft

Interessiert?

Schicke Dein Anschreiben und Deinen Lebenslauf an Dr. Alexey Boubnov, alexey.boubnov@kit.edu.