

*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 eine/n

**wissenschaftliche Mitarbeiterin/wissenschaftlichen Mitarbeiter (w/m/d)**

**(Entgeltgruppe 13 TV-L)**

**Ihre Aufgabenschwerpunkte:**

Mitwirkung am Forschungsprojekt „**CharGeBatCat – Charting chemical space to generate insight into lifetime-defining processes in batteries and catalysts**“ mit dem Schwerpunkt der Entwicklung grosskanonischer Monte Carlo Methoden zur Exploration des chemischen Raums in Energiematerialien.

Batterien und (Elektro-)Katalysatoren sind aus unserem Alltag und der Industrie nicht mehr wegzudenken und ein wichtiger Baustein für eine nachhaltige Energieversorgung. Zugleich sind die ablaufenden physikochemischen Prozesse komplex und im Detail oft nicht vollständig verstanden. Dies gilt insbesondere für Prozesse, die die Lebensdauer dieser Energiesysteme durch unerwünschte Nebenreaktionen beeinflussen.

Ziel der ausgeschriebenen Stelle ist es, diese Prozesse mit einer Kombination aus effizienten Elektronenstrukturmethoden und grosskanonischen Monte Carlo Simulationen zu identifizieren. Methodisch steht dabei die Entwicklung und Implementierung einer grosskanonischen Monte Carlo Methode im Zentrum. Mit dieser Methode wird dann die Stabilität der betrachteten Batteriesysteme und insbesondere die Entstehung des „solid-electrolyte interface“ (SEI) unter unterschiedlichen Bedingungen (Oberflächentypen, Additivzusatz etc.) untersucht. In Kombination mit anderen Teilprojekten dieses Forschungsvorhabens wird es diese Exploration des chemischen Raums erlauben, Mechanismen aufzudecken, die die Lebensdauer von Energiematerialien verkürzen.

Die Mitarbeit an der Vorbereitung und Durchführung von Lehrveranstaltungen sowie die Übernahme von Verwaltungsaufgaben werden ebenfalls erwartet. Im Rahmen der Tätigkeit wird Gelegenheit zur wissenschaftlichen Weiterqualifikation (mit Abschluss Promotion) geboten. Die Stelle wird durch das NRW-Rückkehrerprogramm (an Dr. Stein) unterstützt.

**Ihr Profil:**

Abgeschlossenes Hochschulstudium im Fach Physik oder Chemie von mind. 8 Semestern. Eine gute (< 2.0 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
- Firmenticket
- Sport- und Gesundheitsangebote (Hochschulsport)

**Besetzungszeitpunkt:** 01.08.2021

**Vertragsdauer:** 3 Jahre

**Arbeitszeit:** 75 Prozent einer Vollzeitstelle

**Bewerbungsfrist:** 25.06.2021

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 (Motivationsschreiben, Lebenslauf, Abschlusszeugnisse, Verzeichnis der belegten Module mit Benotung, ein Empfehlungsschreiben) richten Sie bitte unter Angabe der Kennziffer 296-21 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](mailto:christopher.stein@uni-due.de)

*Informationen über die Fakultät und die ausschreibende Stelle finden Sie unter:*

<http://www.uni-due.de/physik>

[www.uni-due.de](http://www.uni-due.de)

