

## Assistant Position in Computational/Theoretical Chemistry

Karl-Franzens University Graz, Austria

<https://jobs.uni-graz.at/en/MB/80/99/4842>

### Specification

Function Type- Assistant Position

Hours- 40 hours weekly Contract type: Temporary, 6 years

Application Deadline: 17.4.2019

### Requirements

- Ph.D. in a relevant field (preferably computational chemistry, theoretical chemistry or solid state physics)
- Experience in electronic structure theory and weak interactions
- Software developments skills
- Good written and verbal communication skills in the English language

### Job description

- Computation of Molecular Crystals
- Supervision of Bachelor/Master Students
- Application of periodic boundary conditions, quantum chemical programs as well as embedded (QM/MM or QM/QM) methods
- Development of Theory (QM/MM or QM/QM methods) [e.g. see Loboda, Dolgonos, Boese, J. Chem. Phys. 149, 124104 (2018)]
- Cooperative Development of Computational Chemistry Software
- Preparation of Scientific Publications

The successful candidate is expected to work on the computation of molecular crystals, using theoretical approaches of clusters and periodic boundary conditions for the solid state. Existing methods for such calculations will be improved/extended, including high-level benchmark calculations.

Reference Number: **MB/80/99 ex 2018/19**

If you are interested, please submit your application documents before the stated deadline. Make sure to indicate the reference number on your application and please send your CV and photo to:

[bewerbung@uni-graz.at](mailto:bewerbung@uni-graz.at)

Universitätsassistent/in mit Doktorat

Karl-Franzens Universität Graz, Österreich

(40 Stunden/Woche; befristet auf 6 Jahre; zu besetzen ab sofort)

<https://jobs.uni-graz.at/de/MB/80/99/4841>

#### Aufgabenbereich

- Mitwirkung in der Betreuung von Studierenden im Rahmen von Masterarbeiten und Bachelorarbeiten
- Mitarbeit in der Lehre
- Forschung im Bereich der Berechnung Molekülkristallen
- Anwendung von Programmen mit periodischen Randbedingungen, quantenchemischen Programmen sowie eingebetteten (QM/MM bzw. QM/QM)-Methoden zur Beschreibung der chemischen Fragestellungen
- Methodenentwicklung (QM/MM bzw. QM/QM-Methoden) [z.B. siehe Loboda, Dolgonos, Boese, J. Chem. Phys. 149, 124104 (2018)]
- Kooperation in der Entwicklung von quantenchemischer Software
- Vorbereitung/das Schreiben wissenschaftlicher Veröffentlichungen

#### Fachliche Qualifikation

- Abgeschlossenes Doktors-/PhD-Studium der Physik oder Chemie
- Kenntnisse in Elektronenstrukturtheorie und der Beschreibung von schwachen Wechselwirkungen
- Programmierkenntnisse
- Sehr gute Kenntnisse der englischen Sprache

Kennzahl: **MB/80/99 ex 2018/19**

Bei Interesse senden Sie Ihre Bewerbungsunterlagen innerhalb der angegebenen Bewerbungsfrist unter Angabe der Kennzahl bitte per E-Mail an:

[bewerbung@uni-graz.at](mailto:bewerbung@uni-graz.at)