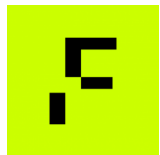


## Freie Universität Berlin - Fachbereich Physik



Die Forschung der Arbeitsgruppe Horch „Ultraschnelle Dynamik in der Katalyse“ zielt darauf ab, komplexe katalytische Systeme und übergeordnete Reaktionsnetzwerke durch den kombinierten Einsatz moderner spektroskopischer und theoretischer Methoden zu verstehen. Hierbei sind wir insbesondere an Metalloenzymen interessiert – großen metallhaltigen Proteinen, die beispielsweise die Umwandlung kleiner Moleküle wie Wasserstoff und Kohlendioxid katalysieren. Unser Interesse an diesen komplexen biologischen Maschinen rührt einerseits daher, dass sie von fundamentaler Bedeutung für den zellulären Stoffwechsel sind. Zum anderen stellen sie durch ihre unübertroffene Aktivität und Spezifität wertvolle Zielobjekte für biotechnologische Anwendungen und das biologisch inspirierte Design von Katalysatoren dar – vorausgesetzt, dass ihre mechanistischen Eigenschaften hinreichend verstanden sind. Vor diesem Hintergrund nutzen wir Techniken der zeitaufgelösten, mehrdimensionalen und theoretischen Spektroskopie, um die Struktur, Funktion und Dynamik dieser faszinierenden Biokatalysatoren im Detail aufzuklären. Detailliertere Informationen zur Arbeitsgruppe Horch finden sich hier: [www.physik.fu-berlin.de/einrichtungen/ag/ag-horch/](http://www.physik.fu-berlin.de/einrichtungen/ag/ag-horch/) [www.unisyscat.de/people/current-group-leaders/horch-marius/](http://www.unisyscat.de/people/current-group-leaders/horch-marius/)

### **Wiss. Mitarbeiter\*in (w/m/d)**

mit 67%-Teilzeitbeschäftigung befristet auf drei Jahre Entgeltgruppe E13 TV-L FU  
Kennung: DM-820

Stadt: Berlin; Beginn frühestens: Frühestmöglich; Dauer: befristet auf drei Jahre;  
Vergütung: Entgeltgruppe 13 TV-L FU; Kennziffer: DM-820

### **Aufgabenbeschreibung**

Angeboten wird eine Stelle im Projekt

„Understanding Metalloenzymes by Computational Nonlinear Infrared Spectroscopy – Insights into the Structure, Function, and Dynamics of Hydrogenases“.

[NiFe]-Hydrogenasen katalysieren die reversible Spaltung von Wasserstoff mittels eines proteinumhüllten Nickel-Eisen-Zentrums mit biologisch unüblichen Kohlenmonoxid- und Cyanid-Liganden. Aufgrund dieser einzigartigen Eigenschaften sowie der Eignung von Wasserstoff als sauberer Energieträger sind diese Metalloenzyme von immensem Interesse. Da die Kohlenmonoxid- und Cyanid-Ligande als ortsspezifische und struktursensitive Infrarot (IR) Sonden verwendet werden können, zählt die IR-Spektroskopie zu den wichtigsten Techniken der Hydrogenase-Forschung. Um die Grenzen konventioneller IR-Absorptionsexperimente zu überwinden, haben wir ultraschnelle und zweidimensionale (2D) IR-Techniken in die Hydrogenase-Forschung eingeführt. Um das Potenzial dieser nichtlinearen IR-Techniken voll auszuschöpfen, sollen rechnerische Strategien für die Simulation von 2D-IR-Spektren von [NiFe]-Hydrogenasen etabliert und angewendet werden. Hierbei sollen quantenchemische Methoden und Moleküldynamik-Simulationen zum Einsatz kommen. Ziel des Projekts ist es, (1) ein Verständnis nichtlinearer IR-Spektren von Hydrogenasen sowie der enthaltenen Informationen zu Struktur und Dynamik zu erlangen, (2) allgemeine theoretische

Strategien zur Untersuchung dieser Aspekte in Metalloenzymen bereitzustellen und (3) ein klares Bild vom katalytischen Mechanismus von Hydrogenasen zu liefern, das auch theoretische Aspekte jenseits spektroskopischer Observablen einbezieht.

## **Aufgaben**

- Quantenchemische Rechnungen (primär mittels DFT) und QM/MM Rechnungen
- Klassische, ab initio, and QM/MM Dynamik-Simulationen
- Design von theoretischen Modellen des katalytischen Nickel-Eisen Zentrums und seiner Protein-Umgebung
- Detaillierte Analyse von strukturellen Aspekten, Potentialflächen und Bindungseigenschaften
- Vorhersage statischer und dynamischer Observablen von 2D-IR Spektren, z.B. Übergangsenergien (mittels Schwingungsstörungstheorie, GVPT2) und spektrale Diffusion (mittels MD-Simulationen)
- Gegebenenfalls Beteiligung an ausgewählten spektroskopischen Experimenten
- Verfassen wissenschaftlicher Artikel zur Publikation in internationalen begutachteten Journalen
- Präsentation von Forschungsergebnissen bei internationalen wissenschaftlichen Konferenzen

## **Erwartete Qualifikationen**

### **Das bringen Sie mit**

Abgeschlossenes wissenschaftliches Hochschulstudium (Master oder gleichwertig) in physikalischer bzw. theoretischer Chemie, (chemischer bzw. Bio-)Physik, oder verwandten Feldern.

### **Das wünschen wir uns von Ihnen**

- Sehr guter Studienabschluss
- Erfahrung mit quantenchemischen Methoden und/oder Moleküldynamiksimulationen (siehe oben)
- Erfahrung mit nichtlinearen und/oder schwingungsspektroskopischen Techniken
- Kenntnisse in biologischer und/oder anorganischer Chemie
- Programmierkenntnisse, vorzugsweise in Python
- Fähigkeit zu selbständiger und kooperativer Arbeit in einem interdisziplinären Team
- Kreativität, Enthusiasmus und ein aufrichtiges Interesse an dem geplanten Forschungsprojekt
- sehr gute Englischkenntnisse in Wort und Schrift

### **Unser Angebot**

- moderner Arbeitsplatz im grünen Bezirk Dahlem
- Bezahlung nach TV-L FU inkl. Jahressonderzahlung
- flexible Arbeitszeiten und mobiles Arbeiten nach Absprache, sofern möglich
- 30 Tage Urlaub bei einer 5-Tage-Woche
- vielseitiges Fort- und Weiterbildungsangebot für Ihre individuelle fachliche und persönliche Weiterentwicklung

- Möglichkeiten zur Teilnahme am Hochschulsport und Gesundheitsförderprogramm
- kostenfreie Parkmöglichkeiten am Gebäude und gute Anbindung an den öffentlichen Nahverkehr
- vergünstigtes Job-Ticket für den öffentlichen Nahverkehr
- kostenlose Nutzung des Bibliotheksystems der Freien Universität
- Rabatte für Mitarbeitende - Corporate Benefits Programm

## Bewerbung

### Haben wir Ihr Interesse geweckt?

Dann freuen wir uns auf Ihre aussagekräftigen Bewerbungsunterlagen. Bitte senden Sie uns Ihre Bewerbung ausschließlich über unser Karriereportal, indem Sie auf den Button „Jetzt bewerben“ klicken. Bewerbungen in Papierform oder per E-Mail können leider nicht berücksichtigt werden.

Weitere Informationen erteilt Dr. Marius Horch ([marius.horch@fu-berlin.de](mailto:marius.horch@fu-berlin.de))

Mit der Abgabe einer Onlinebewerbung geben Sie als Bewerber\*in Ihr Einverständnis, dass Ihre Daten elektronisch verarbeitet und gespeichert werden.

Wir weisen darauf hin, dass bei ungeschützter Übersendung Ihrer Bewerbung auf elektronischem Wege von Seiten der Freien Universität Berlin keine Gewähr für die Sicherheit übermittelter persönlicher Daten übernommen werden kann.

Schwerbehinderte werden bei gleicher Qualifikation bevorzugt berücksichtigt.

Die Freie Universität Berlin fordert Frauen sowie Personen mit Migrationsgeschichte ausdrücklich zur Bewerbung auf. Vorstellungskosten können von der Freien Universität Berlin leider nicht übernommen werden.

Bewerbungsunterlagen werden nicht zurückgesandt. Bitte reichen Sie Ihre Unterlagen nur in Kopie ein.

Weitere Informationen unter <https://stellenticket.de/206853/FUB/>  
Angebot sichtbar bis 26.09.2026

