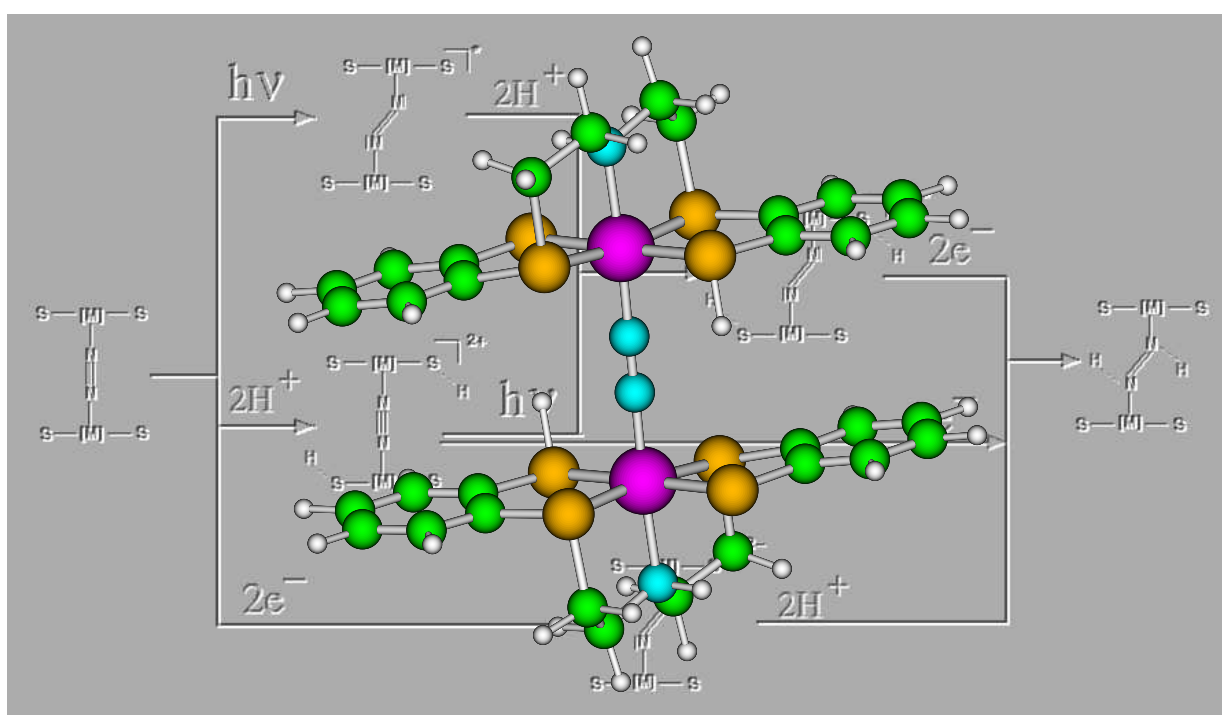


Info

Theoretische Chemie



Ausgabe April 2004

Inhaltsverzeichnis

1 Editorial	3
2 Nachrichten	4
2.1 Tagungsvorschau (Prof. Dr. K. Helfrich, Berlin)	4
2.1.1 April–Dezember 2004	4
2.1.2 Januar–Dezember 2005	5
2.2 Klatsch und Tratsch	6
2.3 Verstorben	6
3 Verschiedenes	6
3.1 Hans G. A. Hellmann-Preis 2004 für Theoretische Chemie	6
3.2 Fachkollegien der DFG — Wahlergebnis	7
4 Arbeitsgruppen stellen sich vor	7
4.1 Arbeitsgruppen am Lehrstuhl für Theoretische Chemie in Bonn	7

1 Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

diese und die folgenden zwei Ausgaben des *Info Theoretische Chemie* (April 2004 – November 2005) werden von den Arbeitsgruppen des Lehrstuhls für Theoretische Chemie in Bonn herausgegeben. Wir bedanken uns herzlich bei den bisherigen Göttinger Herausgebern für ihr Engagement und die Bereitstellung von Informationen für die aktuelle Ausgabe.

Da das *Info Theoretische Chemie* von den Informationen der Mitglieder der AGTC lebt, bitten wir um Zusendung aktueller Meldungen für die Rubriken *Tagungsvorschau* und *Klatsch und Tratsch* an die folgende email-Adresse: Reiher@thch.uni-bonn.de

(Selbstverständlich sind auch andere Meldungen, die die Belange der Theoretischen Chemie betreffen, hoch willkommen.)

Die nächste Ausgabe des *Info Theoretische Chemie* wird wie gewöhnlich im November 2004 durch die üblichen Kanäle verschickt.

Bonn, im April 2004

B. A. Hess, M. Reiher, B. Kirchner,
A. Görling, W. Hieringer

2 Nachrichten

2.1 Tagungsvorschau (Prof. Dr. K. Helfrich, Berlin)

Eine aktuelle Fassung von Prof. Dr. K. Helfrich findet sich im WWW unter:

<http://www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html>

oder

<http://www.agtc.uni-bonn.de/agtc.tagvors.html>

2.1.1 April–Dezember 2004

- 20.–22.05.2004, Dresden:
Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie
Hauptthema: *Biomolekulare Grenzflächen*
<http://www.bunsentagung.tu-dresden.de/home.html>
- 24.–25.05.2004, Bonn:
Intermediate colloquium in the priority program “Modern and universal first-principles methods for many electron systems in chemistry and physics”
<http://www.uni-koeln.de/spp1145/>
- 14.–20.06.2004, Krzyzowa, Polen:
International Symposium on Entanglement, Information & Noise
<http://www.mpipks-dresden.mpg.de/~ein04/>
- 28.–30.06.2004, Kiel:
1st Scientific Computing Seminar *Numerical Analysis in Quantum Chemistry*
<http://www.numerik.uni-kiel.de/scs/>
- 04.–09.07.2004, Plymouth, NH:
Gordon Research Conference on *Computational Chemistry*
<http://www.grc.uri.edu/programs/2004/compchem.htm>
- 06.–10.07.2004, Rennes:
8th European Conference on Atomic and Molecular Physics
<http://www.ecamp8.org>
- 10.–14.07.2004, Sainte-Adele, Quebec, CA:
Canadian Symposium on Theoretical Chemistry — CSTC 2004
<http://www.chem.queensu.ca/cstc2004>
- 24.–29.07.2004, Cambridge, UK:
Molecular quantum mechanics: The no nonsense path to progress — An international conference in honour of N. C. Handy
<http://www.ccqc.uga.edu/Handy>

- 01.–04.08.2004, Lucca, Italy:
Modelling and Understanding in Theoretical Chemistry
An international conference in honor of Professor Jacopo Tomasi
<http://tiresia.dcci.unipi.it/mutc>
- 19.–23.09.2004, Suhl, Thüringen:
40. Symposium für Theoretische Chemie
Schwerpunktthema: *Computational Chemistry*
<http://www.chemie.uni-marburg.de/stc2004/>
- 25.–30.09.2004, Les Houches, Frankreich:
9th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry & Physics (QSCP-IX)
<http://lepes.grenoble.cnrs.fr/QSCP9/>
- 14.–16.11.2004, Köln/Bonn:
18. CIC-Workshop (Jahrestagung der GDCh-Fachgruppe Chemie–Information–Computer)
<http://www.gdch.de/vas/tagungen/tagungen2004.htm>

2.1.2 Januar–Dezember 2005

- 16.–21.01.2005, Capetown, South Africa:
7th Congress of the World Association of Theoretically Oriented Chemists
<http://webhost.sun.ac.za/watoc05>
- 23.–26.01.2005, Karlsruhe:
Computational Tools for Molecules, Clusters and Nanostructures
www.ipc.uni-karlsruhe.de/tch/iknw
- 05.–07.05.2005, Frankfurt a. M.:
Hauptversammlung der Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie
Hauptthema: *Detektion und Dynamik einzelner Moleküle*
<http://www.bunsen.de/>
- 16.–21.07.2005, Los Angeles, USA:
American Conference on Theoretical Chemistry
Chair: Emily A. Carter: <http://www.chem.ucla.edu/carter>
- Ende September 2005, Innsbruck oder Umgebung:
41. Symposium für Theoretische Chemie
<http://www-c724.uibk.ac.at/theochem/staff/bmr/StC2005.html>

2.2 Klatsch und Tratsch

- **Prof. Dr. Uwe Manthe** hat zum 2.1.2004 die Nachfolge von Prof. Jürgen Hinze, PhD in Bielefeld angetreten.
- **Prof. Dr. Ralf Ludwig** hat zum 1.03.2004 den Ruf auf eine neu geschaffene C3-Professur für “Physikalische Chemie–Theoretische Chemie” an der Univesität Rostock angenommen.
- **Priv.-Doz. Dr. Markus Reiher** erhielt auf der Dozententagung 2004 in Dortmund den ADUC-Jahrespreis für das Jahr 2003.

2.3 Verstorben

- Am 15. März 2004 verstarb John Pople (Nobelpreis 1998).
- H. Christopher Longuet-Higgins verstarb am 27. März im Alter von 81 Jahren.

3 Verschiedenes

3.1 Hans G. A. Hellmann-Preis 2004 für Theoretische Chemie

Im Rahmen des 40. Symposiums für Theoretische Chemie, das vom 19.–23. September 2004 in Suhl (Thüringen) stattfinden wird, soll wieder der Hans G. A. Hellmann-Preis für Theoretische Chemie vergeben werden.

Der Preis wird satzungsgemäß (siehe www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann) für hervorragende wissenschaftliche Leistungen aus dem Gesamtbereich der Theoretischen Chemie an jüngere Nachwuchswissenschaftler(innen) (i.a. nicht über 40 Jahre) verliehen, die noch keine Lebenszeit-Professur innehaben und die der deutschsprachigen Forschungslandschaft verbunden sind.

Vorschläge (mit Curriculum, Laudatio, Publikationsliste und einigen Sonderdrucken des Kandidaten, Details siehe obige Internet-Adresse) werden bis zum 15. April 2004 erbeten an den

Vorsitzenden der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie,

Herrn Prof. Dr. Walter Thiel
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
Kaiser-Wilhelm-Platz 1
D-45470 Mülheim an der Ruhr, Deutschland

3.2 Fachkollegien der DFG — Wahlergebnis

Ergebnis der Wahlen vom November 2003: siehe <http://www.dfg.de/wahlen2003/index.html>

Gewählt wurden unter anderem

FK 301	Gernot Frenking	Marburg
FK 302	Peter Saalfrank	Postdam
FK 302	Joachim Sauer	Berlin
FK 303	Bernd A. Heß	Bonn
FK 303	Walter Thiel	Mülheim

4 Arbeitsgruppen stellen sich vor

4.1 Arbeitsgruppen am Lehrstuhl für Theoretische Chemie in Bonn

Da die Bonner Arbeitsgruppen zum April 2004 das TC-Info übernommen haben, sollen in dieser aktuellen Ausgabe die Aktivitäten in Forschung und Lehre in Bonn dargestellt werden.

Der Lehrstuhl für Theoretische Chemie in Bonn wurde im Jahre 1967 eingerichtet. Der erste Lehrstuhlinhaber war Prof. Karl-Heinz Hansen. Nach seinem Tod 1970 wurde Frau Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff im Jahre 1972 seine Nachfolgerin. In den darauf folgenden Jahren entwickelte sich der Lehrstuhl von Frau Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff zu einem der wichtigsten Standorte der Theoretischen Chemie in Deutschland. Zeitweise waren über 30 Mitarbeiter am Lehrstuhl beschäftigt. In der Bonner Schule erfolgten in den 1970er bis 1990er Jahren die Habilitationen von Prof. Dr. W. H. E. Schwarz (heute Siegen), Prof. Dr. C. Marian (heute Düsseldorf), Prof. Dr. B. Engels (heute Würzburg) und Prof. Dr. S. Grimme (heute Münster). Im Jahre 1989 wurde eine C3-Professur für Theoretische Chemie eingerichtet, auf die Prof. Dr. Bernd A. Hess, der zuvor eine zeitlich begrenzte Stiftungsprofessur am selben Lehrstuhl innehatte, berufen wurde. Im Jahre 1998 wurde Bernd Hess auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Erlangen-Nürnberg berufen, den er bis zum Herbst 2003 inne hatte. Zum Oktober 2003 folgte er einem Ruf zurück an die Universität Bonn, um die Nachfolge von Frau Prof. Dr. S. Peyerimhoff anzutreten. Im Jahre 1999 wurde Prof. Dr. M. Dolg auf die C3-Professur (Nachfolge B. A. Hess) berufen. Nach seinem Wechsel an die Universität Köln wurde die C3-Professur im Juli 2003 mit Prof. Dr. Andreas Görling neu besetzt.

Am Lehrstuhl von **Prof. Dr. Bernd A. Hess** in Bonn sind heute außer der Gruppe Hess noch zwei Nachwuchsgruppen angesiedelt: die eine von **Priv.-Doz. Dr. Markus Reiher**, der mit Bernd Hess von Erlangen nach Bonn umzog, und die andere von **Dr. Barbara Kirchner**, die nach einem PostDoc-Aufenthalt in der Gruppe von Prof. Dr. J. Hutter an der Universität Zürich nach Bonn wechselte, um ihre Arbeiten zur Habilitation fortzusetzen.

Forschungsschwerpunkte des Arbeitskreises Hess in der Quantenchemie sind u. a. nach wie vor Relativistik und Korrelationsmethoden. Auf dem Gebiet der relativistischen Theorie befassen sich neue Entwicklungen mit den höheren Ordnungen der DKH-Methode sowohl für Energie- und Struktur-Berechnungen als auch für Berechnungen molekularer Eigenschaften. Die DKH-Transformationsmethode konnte sich in den ersten fünfzehn Jahren nach ihrer Einführung im Jahre 1986 als eine der wichtigsten quasi-relativistischen no-pair Theorien (neben der Verwendung von CPD- bzw. ZORA-Hamilton-Operatoren) durchsetzen und wurde nun verallgemeinert und erweitert (*J. Chem. Phys.* **117** (2002) 9215). Bei der Entwicklung moderner Korrelationsmethoden liegt heute ein Schwerpunkt auf dem Dichtematrix-Renormierungsgruppen-(DMRG)-Verfahren zur exakten Lösung der nicht-relativistischen Vielelektronen-Schrödinger-Gleichung (*Phys. Rev. B* **67** (2003) 125114).

Arbeiten an neuen Schwerpunkten, die in Erlangen etabliert wurden, werden in Bonn fortgesetzt: So stehen z.B. seit kurzem analytische Gradienten für die hocheffiziente LEDO-DFT-Näherung (*Mol. Phys.* **12** (2002) 1945) im Rahmen einer TURBOMOLE-Implementierung zur Verfügung. Ferner entstanden neue Arbeiten im Rahmen der Dichtematrixfunktional-Theorie (*J. Chem. Phys.* **119** (2003) 4655, *J. Chem. Phys.* **120** (2004) 3158) und zur Theorie verschiedenster Spektroskopie-Arten. Haupttätigkeitsfelder sind hier die theoretische Mößbauer- und die Resonanz-Raman-Spektroskopie, die trotz ihrer Bedeutung in der experimentellen Chemie theoretischen Verfahren bisher nicht hinreichend zuverlässig zugänglich sind. Viele der neuen Entwicklungen am Lehrstuhl sind getrieben durch enge Zusammenarbeiten mit experimentell arbeitenden Kollegen in Bonn und Erlangen. Diese Zusammenarbeiten sind in den letzten Jahren im Rahmen des SFB 583 "Redoxaktive Metallkomplexe" (Erlangen) und in jüngster Zeit durch den SFB 624 "Template" (Bonn) vertieft worden.

Die Hauptarbeitsgebiete der Gruppe Reiher sind die Bioanorganische Chemie, die relativistische Quantenchemie und die Schwingungsspektroskopie. Während sich die Arbeiten im Rahmen der Bioanorganischen Chemie mit der Aufklärung von Reaktionsmechanismen in Metalloenzymen und der Konstruktion biomimetischer Analogsysteme beschäftigen (Stickstoff-Fixierung, NiFe-Hydrogenase), ist das Ziel der neueren Arbeiten zur relativistischen Quantenchemie die Ausarbeitung einer relativistischen electrons-only Theorie auf der Grundlage des vollständig entkoppelten Dirac-Operators. Für derartige Hamilton-Operatoren soll in zukünftigen Arbeiten die DMRG-Methode, die eine direkte Konstruktion des Vielteilchenzustands ohne Referenz auf eine Determinanten-Basis erlaubt, verallgemeinert werden. Im Rahmen der Schwingungsspektroskopie werden Verfahren entwickelt, die für große Systeme eine Fokussierung auf essentielle Informationen (z.B. auf charakteristische Moden) erlauben, um so zum Beispiel Interpretationshilfen für experimentelle Vibrational-Raman-Optical-Activity-Spektren bereitzustellen (in Zusammenarbeit mit Prof. Dr. K. Ruud, Tromsø).

Die Arbeiten der Gruppe Kirchner zielen auf die theoretische Behandlung chemischer Prozesse in kondensierter Phase ab. Für diesen Zweck eignet sich die Car-Parrinello-Molekulardynamik (CPMD), deren Vorteile u.a. die Berücksichtigung sämtlicher Wechselwirkungen im Rahmen einer *first-principles*-Methode sind, so daß Mehrkörper-Terme im Gegensatz zur traditionellen MD automatisch behandelt werden. Weil CPMD in der Praxis DFT als Elektronenstrukturmethode verwendet, werden methodische Entwicklungen zur Validierung und

Verbesserung der Dichtefunktionale (Stichwort: schwache Wechselwirkungen) unternommen. Weitere Entwicklungen beschäftigen sich mit verteilten Eigenschaften, z.B.: Partiaalladungen aus Wannier-Funktionen, und mit der Einführung von geeigneten Reaktionskoordinaten. Untersucht werden Solvenseffekte auf Energetik, Struktur und molekulare Eigenschaften. So ist beispielsweise das DMSO–Wasser-System mit seinen besonderen Eigenschaften (Gefrierpunkt, Viskosität, ...) bei einem Mischungsverhältnis von etwa 1:3 bis heute nicht verstanden, und neue Impulse und Einsichten sind nur von detaillierten CPMD-Studien zu erwarten. Polarisierungseffekte werden im Rahmen von ionischen Flüssigkeiten (sogenannte neoterische Flüssigkeiten) und hydrophoben Solvatationen näher verstanden. Hieraus lassen sich neue polarisierbare Kraftfelder entwickeln.

In der Arbeitsgruppe von **Prof. Dr. Andreas Görling** sind derzeit ein Habilitand, **Dr. Wolfgang Hieringer**, eine Postdoktorandin und zwei Doktoranden tätig. Das Arbeitsgebiet umfasst die Entwicklung und Anwendung quantenchemischer und festkörperphysikalischer Methoden, insbesondere solcher mit Bezug zur Dichtefunktionaltheorie. Die Aktivitäten reichen dabei von der Weiterentwicklung der grundlegenden Theorie über die Entwicklung und Implementation neuer Methoden bis zur Anwendung letzterer wie auch etablierter Methoden in enger Kooperation mit experimentell arbeitenden Gruppen vor allem aus dem Bereich der Materialwissenschaften. Dabei können zwei Schwerpunkte, nämlich endliche Systeme (Atome, Moleküle, Cluster) und unendliche, periodische Systeme (molekulare Drähte, Polymere, Schichten und Festkörper), unterschieden werden. In beiden Bereichen werden derzeit vor allem Dichtefunktionalverfahren und zeitabhängige Dichtefunktionalmethoden betrachtet, die orbitalabhängige Funktionale verwenden und häufig in enger Beziehung zu klassischen, d.h. Hartree–Fock-basierten quantenchemischen Verfahren bzw. entsprechenden Ansätzen aus der Festkörperphysik stehen.

Im Bereich der Moleküle und Cluster stellt das Programmpaket TURBOMOLE die Arbeitsbasis für die Entwicklung und Implementation neuer Methoden dar. So wurde vor einiger Zeit ein “effective exact-exchange” Kohn–Sham-Verfahren implementiert, das verbesserte Orbitale und Eigenwertspektren liefert, die als Grundlage zur Berechnung von Responseeigenschaften (Anregungsenergien, NMR-Verschiebungen) oder als Input für MRCI oder Multireferenz-Störungstheorie dienen können. Kürzlich wurden Kohn–Sham-Verfahren zur Behandlung von offenschaligen Systemen und Multiplettaufspaltungen sowie zur selbstkonsistenten Behandlung angeregter Zustände fertiggestellt. Letzteres erforderte eine grundlegende Erweiterung der Dichtefunktionaltheorie, da angeregte Zustände sonst nur über den Umweg der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie beschrieben werden können. Derzeit wird an Multireferenz-Dichtefunktionalmethoden, an neuartigen zeitabhängigen Dichtefunktionalmethoden und als Spezialgebiet von Wolfgang Hieringer an effizienten Methoden zur Behandlung nichtlinearer optischer Eigenschaften gearbeitet. Bei den Anwendungen stehen Untersuchungen elektrooptischer Materialeigenschaften, beispielsweise von Oligothiophenen, und von Adsorptionssystemen im Vordergrund.

Zur Behandlung periodischer Systeme wurde in den letzten Jahren ein Dichtefunktionalprogramm entwickelt, das ebene Wellen als Basissatz verwendet und neben konventionellen Funktionalen auch den Einsatz orbitalabhängiger Funktionale gestattet. Derzeit wird ein

Modul zur Behandlung der frequenzabhängigen dielektrischen Konstante periodischer Systeme fertiggestellt, das die Behandlung elektrooptischer Eigenschaften periodischer Systeme einschliesslich exzitonischer Effekte gestattet. Schwerpunkte in der Anwendung sind derzeit neben Standard-Halbleitern molekulare Drähte.

Die **Hardware-Ausstattung** des Lehrstuhls wird zur Zeit vollständig erneuert und im Rahmen eines HBFUG-Antrags bis Ende 2005 weiter ausgebaut. Geplant ist, einen ausgedehnten PC-Cluster aus Dual-Xeon-IA32-Maschinen und Dual-Opteron-IA64-Rechnern zu installieren. Während die IA32-Computer für Standardrechnungen mit dem Karlsruher TURBOMOLE und den gruppeneigenen Frequenzprogrammen wie SNF angeschafft werden, sollen auf den 64Bit-Computern Spezialanwendungen wie z.B. die ressourcenaufwendigen DMRG-Rechnungen abgearbeitet werden. Für die kommunikationsintensiven CPMD-Simulationen ist ferner eine schnelle Myrinet-Vernetzung eines Teils der Opteron-Computer geplant. Der Ausbau eines derartigen Compute-Clusters ist notwendig, um so von Rechenzentren mit langen Queueing-Zeiten autark zu sein: Effizientes Arbeiten bei flexibler Nutzung der Ressourcen ist heute nur durch den systematischen Aufbau eigener Rechenleistung gewährleistet.

Im nächsten Info Theoretische Chemie werden wir die Einbindung der Theoretischen Chemie in die Chemieausbildung in Bonn darstellen.