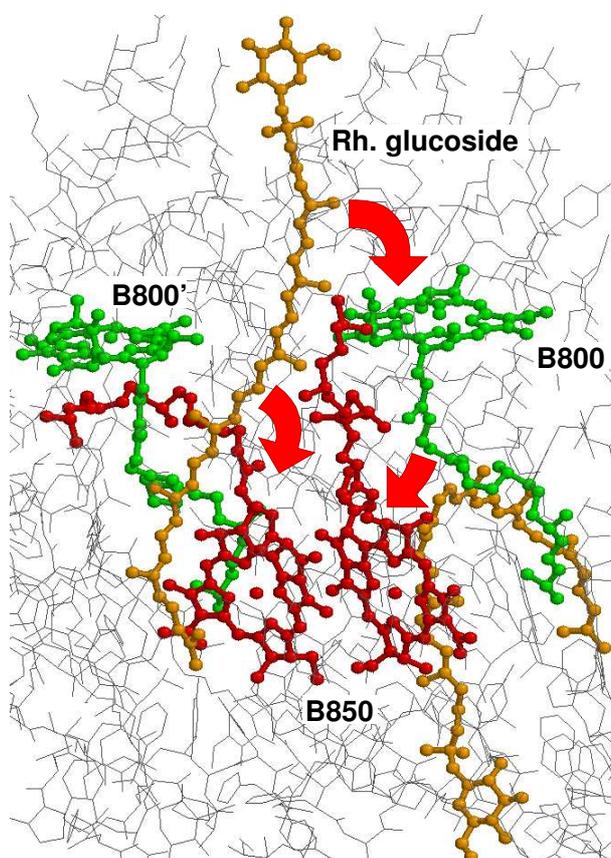


Info Theoretische Chemie



Ausgabe November 2005

Titelbild: Das Titelbild zeigt die wesentlichen Pigmente des Lichtsammelkomplexes LH2 von Purpurbakterien. Die möglichen Energietransferpfade (mit Pfeilen angedeutet) werden am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie sowie am MPI für Biophysik in Frankfurt studiert. Dazu werden modernste Methoden der Strukturaufklärung (Arbeitsgruppe Kühlbrandt, MPI), Spektroskopie (Arbeitsgruppe Wachtveitl, IPTC) sowie moderne quantenchemische Verfahren (Arbeitsgruppe Dreuw, IPTC) verwendet.

Inhaltsverzeichnis

1 Editorial	4
2 Nachrichten	4
2.1 Tagungsvorschau	4
2.1.1 Januar-Dezember 2006	4
2.1.2 Januar-Dezember 2007	5
2.2 Klatsch und Tratsch	5
2.3 Meldungen	6
3 Verschiedenes	6
3.1 Mitgliederversammlung der AG Theoretische Chemie beim 41. Symposium für Theoretische Chemie in Innsbruck	6
3.2 Rückschau: Symposium für Theoretische Chemie 2005 in Innsbruck	9
3.3 Stellenanzeigen	16
4 Arbeitsgruppen stellen sich vor	17
4.1 Theoretische Chemie an der Universität Bielefeld	17
4.2 Theoretische Chemie an der Universität Oldenburg	19
4.3 Theoretische Chemie an der RWTH Aachen	22

1 Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

Sie halten die erste Ausgabe des Infos TC in Ihren Händen, welches wir für Sie zusammengestellt haben. Dieser Ausgabe werden noch zwei weitere aus Frankfurt folgen, im April und November 2006, und wir hoffen, mit vielen Beiträgen von Ihrer Seite rechnen zu dürfen. Vor allem in den Rubriken „Nachrichten, Klatsch und Tratsch, Meldungen“ sind wir für Hinweise, Anregungen und kleine Beiträge dankbar. Wir hoffen, Ihnen eine interessante Zusammenstellung wichtiger Neuigkeiten aus dem Umfeld der AG Theoretische Chemie zu liefern.

Gerhard Stock
Andreas Dreuw

2 Nachrichten

2.1 Tagungsvorschau

[siehe auch die Zusammenstellung <http://www.tu-berlin.de/insi/theofach/tagungen.html> von Prof. Dr. K. Helfrich]

2.1.1 Januar-Dezember 2006

- 14.-22.02.2006, Jülich:
NIC Winter School: „Computational Nanoscience: Do It Yourself!“
www.fz-juelich.de/wscn
- 14.-17.02.2006, Mariapfarr, Salzburg, Österreich:
Arbeitstagung fr Theoretische Chemie: „Molecular Properties“
http://www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr/home_d.html
- 13.-17.03.2006, Frankfurt a. M.:
Frühjahrstagung des Arbeitskreises Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (AMOP) der DFG
<http://www.dpg.tagungen.de/info>
- 19.-22.03.2006, Hamburg:
Chemiedozententagung

<http://www.gdch.de/vas/tagungen.htm>

- 25.-27.05.2006, Erlangen:
Bunsentagung: „Heterogene Katalyse: Brücke zwischen Ideal- und Realsystemen“
<http://www.bunsen.de>
- 21.-26.05.2006, Kyoto, Japan:
XIIth International Conference on Quantum Chemistry (ICQC-2006)
<http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/XII-ICQC2006>
- 11.-14.06.2006, Schmöckwitz, Berlin:
11th International Conference on Theoretical Aspects on Catalysis
www.fhi-berlin.mpg.de/ICTAC-11/
- 3.-7.09.2006, Berlin:
42. Symposium für Theoretische Chemie
Ort: Bildungszentrum Erkner bei Berlin
www.bz-erkner.de

2.1.2 Januar-Dezember 2007

- 29.05-03.06.2007, Budapest, Ungarn:
Molecular Quantum Mechanics - Analytic Gradients and Beyond:
An International Conference in Honor of Prof. Peter Pulay
<http://www.ccqc.uga.edu/pulay>

2.2 Klatsch und Tratsch

- Prof. Dr. Max Holthausen hat einen Ruf auf eine W3-Professur im Institut für Anorganische und Analytische Chemie der Universität Frankfurt angenommen.
- Prof. Dr. Markus Elstner hat einen Ruf auf eine W2-Professur im Institut für Physikalische Chemie der Technischen Universität Braunschweig erhalten.
- Prof. Dr. Christof Hättig hat einen Ruf auf eine W2-Professur an die Ruhr-Universität Bochum angenommen.
- Priv.-Doz. Dr. Frank Neese hat einen Ruf auf den Lehrstuhl für Anorganische Chemie an der Universität Heidelberg erhalten.

2.3 Meldungen

- Prof. Dr. Jaroslav Koutecky verstarb am 10. August 2005 im Alter von 82 Jahren. Er war Emeritus am Physikalisch-Chemischen Institut der Freien Universität Berlin.

3 Verschiedenes

3.1 Mitgliederversammlung der AG Theoretische Chemie beim 41. Symposium für Theoretische Chemie in Innsbruck

Montag, 5. September 2005 Beginn: 18.00 Uhr

Tagesordnung:

1. Genehmigung der Tagesordnung
2. Protokoll zur Mitgliederversammlung 2004
3. Bericht des Vorsitzenden
4. Kassenbericht und Wahl des Kassenprüfers
5. Symposium 2006 und 2007
6. Wahl der Hellmann-Jury
7. Verschiedenes

Protokoll:

TOP 1

Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Änderung akzeptiert.

TOP 2

Das Protokoll zur Mitgliederversammlung 2004 war im Info TC (November 2004) abgedruckt. Es wird ohne Änderung genehmigt.

TOP 3

Im Dezember 2004 wurde von den Mitgliedern der AGTC ein neuer Vorstand gewählt. Bei der Briefwahl wurden 121 Stimmen abgegeben, was einer Wahlbeteiligung von 61 % entspricht. In den Vorstand gewählt wurden (in alphabetischer Reihenfolge); W. Domcke, G. Frenking, J. Gauss, G. Seifert, H.-J. Werner. Die Trägergesellschaften haben als ihre

Vertreter nominiert: W. Thiel (DBG), M. Schreiber (DPG), G. Frenking (GDCh). Die Mitglieder des neuen Vorstands sind somit: Domcke, Frenking, Gauss, Schreiber, Seifert, Thiel, Werner.

Die konstituierende Sitzung des Vorstands fand am 6. Mai 2005 in Frankfurt statt. Auf dieser Sitzung wurden (einstimmig) W. Domcke als neuer Vorsitzender und J. Gauss als Stellvertreter gewählt. Die Amtsübergabe fand am 1.7.2005 statt.

Die Mitgliederversammlung dankt Walter Thiel für dessen engagierten Einsatz für die Belange der AGTC als Vorsitzender des Vorstands von 2001-2005.

Das INFO TC wurde 2004-2005 von Markus Reiher und Mitarbeitern in Bonn herausgegeben. Die Mitgliederversammlung der AGTC dankt den Bonnern für Ihre hervorragende Arbeit. Von 2005 bis Ende 2006 wird das INFO TC von Gerhard Stock und Mitarbeitern (Uni Frankfurt) betreut.

Die Jahresrückblicke 2005 in den Mitteilungen der GDCh ("Blaue Blätter") werden von S. Schmatz, Göttingen (Reaktionsdynamik), F. Neese, Mühlheim (Theoretische Bioanorganische Chemie) und Ch. Hättig, Karlsruhe (Coupled-Cluster-Methoden) verfasst.

In DFG-Angelegenheiten sind die DFG-Fachkollegiaten potentielle Ansprechpartner. Die gewählten Fachkollegiaten aus dem Kreis der AGTC sind: G. Frenking, J. Manz, P. Saalfrank, J. Sauer, W. Thiel.

Die Zahl der Mitglieder der AGTC liegt derzeit bei etwa 200. Da weiterhin neue Arbeitsgruppen in Theoretischer Chemie an deutschen Universitäten gegründet werden, sollte die Zahl der Mitglieder weiter ansteigen. Der Vorsitzende ruft alle Mitglieder dazu auf, aktiv weitere Mitglieder zu werben, insbesondere Nachwuchswissenschaftler aus den eigenen Arbeitsgruppen.

TOP 4

Die Kassenprüfung für das Jahr 2004 wurde von F. Mark, Mühlheim vorgenommen. Herr Mark präsentiert die Ergebnisse seiner Kassenprüfung. Der Kassenstand des Kontos der AGTC zum 31. 12. 2004 beträgt 9.783,73 Euro. Der Kontostand des Hellmann Fonds ist 24.657,77 Euro. Die Zinserträge 2003 und 2004 waren 1.600,- Euro, die Ausgaben 2004 waren 500,- Euro (Hellmann Preisgeld). Der Spendeneingang für den Hellmann-Fonds hat 2004 nachgelassen. Der Vorsitzende wird zu geeigneter Zeit (November 2005) einen weiteren Spendenaufruf verschicken.

Die Mitgliederversammlung nimmt den Bericht von Herrn Mark zustimmend zur Kenntnis und dankt Herrn Mark für die sorgfältige Arbeit. Herr Mark wird einstimmig als Kassenprüfer wiedergewählt.

TOP 5

Das 42. Symposium für Theoretische Chemie wird von 3.-7. September 2006 in Erkner bei Berlin stattfinden. Die Organisation liegt bei J. Sauer (Humboldt-Universität). Das sehr allgemein gehaltene Thema ist: QUANTUM CHEMISTRY: METHODS AND APPLICATIONS. Weitere Informationen sind auf der homepage der AGTC zu finden.

Für das Symposium 2007 konnten keine Veranstalter in der Schweiz gefunden werden, wo das Symposium turnusmäßig stattfinden sollte. Der Vorstand hat daher einen "Tausch" CH/D für die Jahre 2007/2008 beschlossen, d.h. das Symposium 2007 soll in Deutschland stattfinden, das Symposium 2008 in der Schweiz, wenn sich Veranstalter finden lassen. W. Thiel (wegen guter Kontakte zu den Schweizer Kollegen) und der Vorsitzende werden sich bemühen, dass das Symposium 2008 in der Schweiz stattfinden kann.

TOP 6

Turnusgemäß steht 2005 die Wahl der Hellmann-Jury an. Laut Satzung besteht die Jury aus 5 Mitgliedern und 2 Ersatz-Mitgliedern. Mitglieder des Vorstands sollten in der Regel nicht Mitglieder der Jury sein. Laut Satzung sollten alle drei deutschsprachigen Länder (D, A, CH) in der Jury vertreten sein.

Vom Vorstand wurden folgende Kandidaten für die Wahl, bzw. Wiederwahl vorgeschlagen und haben ihre Bereitschaft zugesagt: L. Cederbaum (Heidelberg), A. Görling (Erlangen), W. Klopper (Karlsruhe), U. Manthe (Bielefeld), C. Marian (Düsseldorf) und H. Lischka (Wien). Von der Mitgliederversammlung wird J. Hutter (Zürich) nominiert.

Die geheime schriftliche Abstimmung ergibt: gewählte Mitglieder der Hellmann-Jury sind: L. Cederbaum, A. Grling, J. Hutter, H. Lischka, U. Manthe. Ersatzmitglieder sind: W. Klopper, C. Marian.

TOP 7

entfällt

Ende der Mitgliederversammlung: 18.30 Uhr.

Gez. W. Domcke

3.2 Rückschau: Symposium für Theoretische Chemie 2005 in Innsbruck

Das von der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie (AGTC) ausgerichtete 41. Symposium for Theoretical Chemistry (STC 2005) fand vom 5.9. bis 7.9.2005 im Kongresszentrum in Innsbruck statt. Organisiert wurde es von **Bernd Michael Rode** und seinem Arbeits-kreis. Die ursprünglich für den deutschsprachigen Raum konzipierte Veranstaltungsreihe hat sich seit der vor einigen Jahren beschlossenen Umstellung auf ausschließlich in englischer Sprache gehaltene Vorträge zu einer der wichtigsten Tagungen Europas auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie entwickelt, deren internationale Akzeptanz aus der Herkunft der rund 200 Teilnehmer aus 17 Ländern und vier Kontinenten deutlich wird.

Das diesjährige Symposium war schwerpunktmäßig dem Thema „Chemical Simulati-



Abbildung 1: Bernd Rode mit seinem Organisationsteam

ons from Small Molecular Clusters to Liquids and Biopolymers” gewidmet, doch waren auch Beiträge aus anderen Teilgebieten der Theoretischen Chemie willkommen. In der Tradition des STC liegend wurden die meisten der insgesamt 43 Vorträge von jüngeren Hochschullehrern und dem akademischen Nachwuchs gehalten, zu denen sich eine kleine Zahl von Plenarvorträgen etablierter Wissenschaftler gesellte. Hinzu kamen rund 120 Posterbeiträge, die in einem erfreulich offenräumigen und ansprechenden Rahmen in zwei Sitzungen zu intensiven Diskussionen anregten.



Abbildung 2: Wilfred van Gunsteren zeigt Möglichkeiten und Grenzen der Computersimulation biomolekularer Systeme auf

Simulation und Dynamik

Zum Auftakt gab **Wilfred van Gunsteren** (Zürich) in einem Plenarvortrag einen Überblick über die Computersimulation biomolekularer Systeme. Zum gleichen Themengebiet referierte **Gerhard Stock** (Frankfurt) über die molekulardynamische Simulation lichtinduzierter Konformationsänderungen von Peptiden zur Realisierung molekularer Schalter. Die problemorientierte Simulation im Rahmen der Medikamentenentwicklung wurde von **Graham Richards** (Oxford) präsentiert, der insbesondere die Adaption von in anderen Wissenschaftsgebieten erfolgreichen Methoden und Techniken ausführlich erläuterte. Dabei beeindruckte der erfolgreiche Einsatz von Grid-Computing mit Hilfe weltweit eingesammelter ungenutzter Rechenleistung aus über 3 Millionen PCs. Auch **Wolfgang Wenzel** (Karlsruhe) präsentierte neue Strategien für das Durchsuchen von Datenbanken im Rahmen der Entwicklung neuer Medikamente. Einen Einblick in die Stickstofffixierung in bioanorganischen Modellsysteme wurde von **Johannes Kästner** (Clausthal-Zellerfeld) gegeben. Über Berechnungen der Struktur von protonierten Wasserclustern berichtete **Antony Fouqueau** (Basel). Eine neue Variante der QM/MM-MD-Simulation von Ionen und Molekülen in Lösung stellte **Thomas Hofer** (Innsbruck) vor. Auch der sich anschließende Vortrag von **Philipp Scherer** (München) beschäftigte sich mit der MD- und MC-Simulation von Molekül-Ionen in Lösung. Dazu nutzte er effektive Fragmentpotentiale. Sein besonderer Dank galt der AGTC für die Unterstützung des Empfangs am



Abbildung 3: Graham Richards referiert über Mustererkennung in der Medikamentenentwicklung

vorhergehenden Abend. Die Erkennung von DNA-Sequenzen in dynamischen Prozessen mit theoretischen Methoden war Gegenstand eines Vortrags von **Klaus Liedl** (Innsbruck). Fluktuationen in biomolekularen Systemen beschäftigen **Kay Hamacher** (San Diego). Er untersuchte die Medikamentenresistenz der HIV-1-Protease. Auch **Othmar Steinhauser** (Wien) beschrieb biologische Systeme mit MD-Methoden und zeigte die Simulation der Protein-Wasser-Schnittstelle.

Die Dynamik viel kleinerer Systeme bekam ebenfalls ihren Platz im Vortragskanon mit den Beiträgen von **Stefan Schmatz** (Göttingen) zur zustandsaufgelösten Dynamik der elementaren S_N2 -Reaktion und von **Gloria Moyano** (Canberra) zur Dynamik auf interpolierten Potentialhyperflächen. Sie stellte zudem die Performance und Entwicklung der Methode zur Interpolation von Hyperflächen vor. Dass auch für Dynamikrechnungen hochgenaue Methoden zum Einsatz kommen können bewies **Hans Lischka** (Wien) mit seiner Anwendung der MR-CI-Methode auf die Photochemie der C=C-Bindung. Auf der anderen Seite der chemischen Größenskala lag der Beitrag von **Stefan Kast** (Darmstadt) zu kombinierten Integralgleichungs-Simulations-Modellen mit der Anwendung auf die kondensierte Phase im Meso-Regime. Auch **Anatole Neufeld** (Göttingen), der eine alternative Methode zur Beschreibung nichtadiabatischer Übergänge vorstellte, beschrieb die Dynamik in der Flüssigkeit. Dass auch bei der Berechnung von Metallion-Hydraten die korrekte Berücksichtigung der sie umgebenden Lösung eine große Rolle spielt, zeigte

Enrique Marcos Sanchez (Sevilla) an Hand von Pd^{2+} , Pt^{2+} und Actinoidoxiden in Wasser.



Abbildung 4: Philipp Furche berichtet über TDDFT-Methoden

DFT- und ab initio-Methoden: Entwicklung und Anwendung

Neues aus den Entwicklungsabteilungen von quantenchemischen Methoden wurde in mehreren Vorträgen vorgestellt. **Filipp Furche** (Karlsruhe) präsentierte den Stand der Technik für die zeitabhängigen Dichtefunktional-Methoden. Die Weiterentwicklung der Coupled-Cluster-Verfahren beschäftigen sowohl **Wim Klopper** (Karlsruhe), der neue Korrelationsfaktoren für die r_{12} -Methoden zeigte, als auch **Andreas Köhn** (Aarhus) mit einer neuen Implementierung des CC-Codes. Eine neue Idee zur Berechnung von Lösungsmittelleffekten mit DFT-Methoden ist zur Zeit das Arbeitsgebiet von **Johannes Neugebauer** (Amsterdam). Bei expliziter Berücksichtigung der Lösungsmittelmoleküle wird im Frozen-Density-Embedding-Modell ihre elektronische Dichte einmal berechnet und anschließend konstant gehalten.

Denis Usyvat (Regensburg) stellte eine lokale MP2-Methode für Kristalle vor. Neuere Entwicklungen auf dem Gebiet der Integralnäherungen für die Berechnung der Korrelationsenergie wurden von **Christian Ochsenfeld** (Tübingen) diskutiert. Über eine neue Methode zur Berechnung des Elektronentransports in molekularen Drähten berichtete **Ulrich Kleinekathöfer** (Chemnitz). Thomas Heine (Dresden) stellte eine Hybridmethode von DFT und tight-binding vor während **Clemens Woywood** (München) Quantum

Fluid Dynamics (QFD) als Alternative zu konventionellen Methoden für die Lösung der Schrödinger-Gleichung der Kernbewegung präsentierte.

Für die Anwenderseite des Auditoriums beschrieb **Tanja van Mourik** (London) die Struktur des Dipeptids Tyrosin-Glycin in der Gasphase und stellte eine Methode zur systematischen Konformerensuche kleiner Peptide vor. Über die unterschiedliche Genauigkeit diverser DFT- und ab initio-Methoden zur Berechnung von über Wasserstoffbrücken gebundene Komplexe berichtete **Daniel Böse** (Karlsruhe). Auch der Vortrag des Redners aus der Industrie - **Romano Kroemer** (Sanofi-Aventis, Vitry-sur-Seine) - beschäftigte sich mit Konformerensuche und Biomolekülen in Lösung. Hier ist die korrekte Beschreibung von Wasserstoffbrücken von essentieller Bedeutung. Eine andere Art von nicht-kovalenten Wechselwirkungen untersuchte **George Maroulis** (Patras), wobei das Augenmerk auf Dipolmoment und Hyperpolarisierbarkeit der CO₂-Edelgas-Komplexe lag. Dazu entwickelte er eigene Basissätze und wies auf die Wichtigkeit des Basissatz-Superpositionsfehlers hin. Der Beitrag von **Yi Dong** (Saarbrücken) aus den Materialwissenschaften über die Struktur und elektronischen Eigenschaften von HAlO und AlO rundete das breite Spektrum der Anwendervorträge ab.

Theoretische Spektroskopie

Aus dem Bereich der theoretischen Spektroskopie wurde in Vorträgen von **Michael Bühl** (Mülheim) über Eigenschaften von Übergangsmetallkomplexen in wässriger Lösung und **Wolfgang Eisfeld** (München) über die theoretische Simulation schwingungsaufgelöster, elektronischer Spektren berichtet. **Ulrich Sternberg** (Karlsruhe) stellte eine Methode zur schnellen Berechnung von NMR-chemischen Verschiebungen für jeden Zeitschritt einer MD-Simulation vor. Die chemische Bindung in Metallen wurde in einem Vortrag von **Ulrich Wedig** (Stuttgart) diskutiert. Ebenfalls mit Festkörpern beschäftigte sich der Vortrag von **Reinhard Scholz** (Chemnitz) über spektroskopische Eigenschaften von molekularen Halbleitern.

Die Polarisierung und externe Felder unendlicher Ketten sind das Forschungsgebiet von **Michael Springborg** (Saarbrücken). Zwei Beiträge beschäftigten sich mit der Berechnung laserinduzierter Phänomene: **Tillmann Klamroth** (Potsdam) nutzt TD-CIS um die Dynamik der Elektronen in molekularen Systemen zu untersuchen; **Oliver Kühn** (Berlin) beschrieb die Quantendynamik eines Häm-CO-Modellkomplexes. Eine Methode zur Unterstützung der experimentellen Zuordnung von 2D-IR-Signalen für Peptide stellte **Christoph Scheurer** (München) vor. Ebenfalls auf die Schwingungsspektroskopie - mit Betrachtung gekoppelter Moden - stützte sich die Beschreibung der Potential-

Hyperflächen verschiedener durch Wasserstoffbrücken gebundene Systeme - von **Marius Lewerenz** (Paris) präsentiert.



Abbildung 5: Der Vorsitzende der AGTC, Wolfgang Domke, verleiht den Hans-Hellmann-Preis an Frank Neese

Hans G. A. Hellmann-Preis 2005

Ein Höhepunkt jeder STC seit dem Jahr 1999 ist die Verleihung des Hans-Hellmann-Preises an einen jüngeren Wissenschaftler unter 40 Jahren, der noch keine feste Anstellung hat. Der diesjährige Hellmann-Preis wurde an **Frank Neese** (Mülheim) „für die Entwicklung und Anwendung quantenchemischer Methoden auf dem Gebiet der Bioanorganischen Chemie, insbesondere für die magnetische Spektroskopie von Übergangsmetallverbindungen“ verliehen. Die Würdigung vermerkt weiterhin: „Die wissenschaftlichen Arbeiten von Herrn Neese zeichnen sich durch außergewöhnliche Breite, hohes Niveau sowie große Originalität aus. Thematisch reichen sie von der Entwicklung neuer Methoden zur Berechnung spektroskopischer Parameter bis hin zu deren Anwendung auf die elektronische Struktur von Metallo-Enzymen. Herr Neese hat entscheidend dazu beigetragen, die Quantenchemie als wichtiges Forschungsinstrument in der bioanorganischen Chemie zu etablieren“. Im Anschluss an die Preisverleihung hielt Frank Neese einen Vortrag, der laut Satzung in deutscher Sprache gehalten werden muss.



Abbildung 6: Empfang des Landes Tirol am zweiten Abend des Symposiums

Begleitend zum wissenschaftlichen Programm fand ein Empfang des Landes Tirol und der Stadt Innsbruck statt, der durch eine Rede der Oberbürgermeisterin Hilde Zach eröffnet wurde. Im anschließenden Konzertabend wurden zunächst klassische Stücke vom Klarinetten-Quintett „Working Clarinets“ neu interpretiert.

Im zweiten Teil des Abends unterhielt Michael Tschuggnall von der Universität Innsbruck die Teilnehmer des Symposiums mit musikalischen Beiträgen aus der Popmusik Österreichs, die einen ungewöhnlichen und reizvollen Kontrast zum klassischen Teil bildeten.

Vor der Präsentation des nächsten Austragungsortes für das Symposium stand noch ein besonderer Vortrag auf dem Programm. **W. H. Eugen Schwarz** schärfte in einem philosophischem Vortrag den Teilnehmern das Bewusstsein für Paradoxa in der theoretischen Chemie und anderen Feldern. Schwarz analysierte kontraintuitive Erklärungen in Systemen mit gekoppelten Parametern wie beispielsweise bei der Frage nach der Natur der kovalenten Bindung oder der Rotationsbarriere im Ethan.

STC 2006

Das STC wird an wechselnden Orten in zweijährigen Abständen in Deutschland und in jeweils vierjährigen Abständen in Österreich bzw. der Schweiz veranstaltet. Das STC 2006

findet also turnusgemäß wieder in Deutschland statt. Es wird vom 3.9. - 6.9.06 in Erkner bei Berlin von **Joachim Sauer** (Berlin) unter dem Thema „Quantum Chemistry: Methods and Applications“ organisiert. Die hierfür bereits eingeladenen Vortragenden lassen auf ein weiteres hochkarätiges Symposium hoffen.

Robin Haunschild, Ralf Tonner, Sebastian Metz (Marburg).

3.3 Stellenanzeigen

Doktorandenstelle in Theoretischer Chemie an der FU Berlin

In der Arbeitsgruppe für Theoretische Chemie (Prof. J. Manz) an der Freien Universität Berlin ist eine Doktorandenstelle (0.75 BAT IIa) zu besetzen. Unsere Gruppe arbeitet auf dem Gebiet der Quantenchemie, Quantendynamik und Laserkontrolle chemischer Reaktionen. Weitere Informationen unter: <http://userpage.chemie.fu-berlin.de/manzwww>.

Bewerbungen richten Sie bitte an:

Prof. Dr. Jörn Manz und Monika Leibscher PhD

Institut für Chemie und Biochemie

Freie Universität Berlin

Takustr. 3

14195 Berlin

E-mail: jmanz@chemie.fu-berlin.de und monika@chemie.fu-berlin.de

Assistentenstelle an der Universität Erlangen-Nürnberg

Am Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Erlangen-Nürnberg ist eine Assistentenstelle im Beamtenverhältnis auf Zeit für zunächst drei Jahre mit der Möglichkeit der Verlängerung des Assistentenverhältnisses um weitere drei Jahre wiederzubesetzen. Die Stelle eröffnet bei entsprechender Qualifikation die Möglichkeit zur Habilitation. Nähere Informationen unter: <http://www.chemie.uni-erlangen.de/goerling/stellen.html>.

Kontaktadresse:

Prof. Dr. Andreas Göring,

Lehrstuhl für Theoretische Chemie,

Universität Erlangen-Nürnberg,

Egerlandstr. 3, 91058 Erlangen

Tel.: +49(0) 9131 8528595,

Fax.: +49(0) 9131 8527736

Web: <http://www.chemie.uni-erlangen.de/pctc/>

Stelle als Nachwuchsgruppenleiter am DFG-Forschungszentrum “Funktionelle Nanostrukturen” in Karlsruhe

Das DFG-Forschungszentrum Funktionelle Nanostrukturen in Karlsruhe hat die Stelle der Leiterin/des Leiters der Nachwuchsgruppe Computational Chemistry ausgeschrieben (BAT Ib). Die Nachwuchsgruppe wird für den Zeitraum bis zum 30.06.2009 eingerichtet, mit der Möglichkeit einer Verlängerung auf maximal 5 Jahre. Die Bewerbungsfrist endet bereits am 30.11.2005.

Kontaktadresse:

Prof. W.M. Klopper

Chair of Theoretical Chemistry

Institute of Physical Chemistry

University of Karlsruhe (TH)

4 Arbeitsgruppen stellen sich vor

4.1 Theoretische Chemie an der Universität Bielefeld

Die Theoretische Chemie bildet an der Universität Bielefeld einen eigenständigen Arbeitsbereich innerhalb der Fakultät für Chemie. Seit der Gründung der Fakultät vor 30 Jahren ist die Theoretische Chemie in Bielefeld fest etabliert und wurde durch Jürgen Hinze als Lehrstuhlinhaber vertreten. Dessen Nachfolge habe ich mit Beginn des Jahres 2004 angetreten.

Drei eigenständige Arbeitsgruppen forschen derzeit im Bereich der Theoretischen Chemie: Die Arbeitsgruppe von Wolfgang Schoeller, der als außerplanmäßiger Professor schon langjährig in Bielefeld tätig ist, beschäftigt sich hauptsächlich mit anwendungsorientierten quantenchemischen Rechnungen. Dirk Andrae leitet als Hochschuldozent eine Arbeitsgruppe, die sowohl an methodische Entwicklungen im Bereich relativistischer und numerischer quantenchemischer Verfahren als auch an anwendungsorientierten quantenchemischen Studien arbeitet. Zentrales Themenfeld meiner Arbeitsgruppe ist die Quantendynamik. Zur Zeit arbeiten 2 Postdocs (Alexander Rozhenko, Chris Evenhuis), 5 Doktoranden (Ralf Brodbeck, Dirk Eisner, Daniela Schroeder, Volker Koch, Gerd Schiffel) und ein Gastwissenschaftler (Gunnar Nyman) in den Arbeitsgruppen der Theoretischen Chemie. Um die Computer kümmert sich als Systemadministrator Thorsten Tönsing, der nach seiner Promotion im Arbeitsbereich diese Position übergangsweise besetzt. Das

Sekretariat (Christel Köhler) ist halbtags besetzt.

Übergreifendes Thema der Forschung im Bereich der Quantendynamik ist die Entwicklung theoretischer Methoden, die genaue quantenmechanische Simulationsrechnungen für polyatomare Systeme ermöglichen, und deren Anwendung auf Probleme von grundlegendem chemischen Interesse. Zentrale Bedeutung hat hier die Weiterentwicklung und Anwendung des zeitabhängigen Multikonfigurations-Hartree (*time-dependent multi-configurational Hartree*, MCTDH) Verfahrens, welches numerisch exakte, hochdimensionale Wellenpaketdynamikrechnungen ermöglicht.

Die genaue Beschreibung elementarer chemischer Reaktionen ist ein Hauptanwendungsfeld. Thermische Reaktionsraten werden für Gasphasenreaktionen wie $\text{H} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3$, $\text{O} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{HO} + \text{CH}_3$ oder $\text{OH} + \text{HCl} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{Cl}$, die sowohl von grundsätzlichem als auch von angewandtem Interesse im Bereich der Atmosphären- oder Verbrennungschemie sein können, genau berechnet. Benötigte Potentialflächen werden durch Shepard-Interpolation von elektronischen Strukturdaten, die mittel genauer ab-initio Rechnungen gewonnen wurden, erhalten. Neben bimolekularen Reaktionen in der Gasphase werden auch Reaktionen an Oberflächen, z.B. die dissoziative Adsorption von N_2 und H_2 auf Metalloberflächen, und intramolekulare Protontransferprozesse, z.B. multi-dimensionale Tunneleffekte im Malonaldehyd, untersucht.

Im Bereich der Photochemie bzw. Photophysik wird die Dynamik ultraschneller nicht-adiabatischer Übergänge untersucht, die durch konische Durchschneidungen der elektronischen Potentialflächen verursacht werden. Quantendynamische Studien, die Spektren, Populationsdynamik und eventuelle Reaktionsprodukte beschreiben, werden dabei durch die Entwicklung von ab initio Potentialflächen unterstützt.

Im Bereich der anwendungsorientierten elektronischen Strukturrechnungen werden von der Arbeitsgruppe Schoeller in Kooperation mit einer Gruppe aus der organischen Chemie Gast-Wirt-Komplexe, die Calixarene mit Ionen und kleinen Molekülen bilden, charakterisiert. Auch werden von Übergangsmetall-Carben-Komplexen katalysierte, stereoselektive Reaktionen von Alkenen und phosphor- und borhaltige biradikalische Vierringe untersucht.

In der Arbeitsgruppe Andrae werden einerseits elektronische Struktur und Gleichgewichtsgeometrien von Polyoxometallaten und Potentialflächen von elektronisch angeregten Interhalogenverbindungen berechnet und verknotete Kohlenwasserstoffe und Schwefelketten charakterisiert. Andererseits beschäftigen sich methodische Entwicklungsarbeiten u.a. mit basisfreien ab initio Verfahren und relativistischen Rechnungen.

Die Computerausstattung der Theoretischen Chemie besteht aus einem Cluster mit derzeit 10 Quad-Opteron-Knoten (eine zweite Ausbaustufe wird voraussichtlich im nächsten

Jahr beschafft), zwei Dual-Opteron-Servern und AMD-Athlon64-Arbeitsplatzrechnern. Das Rechenzentrum der Universität stellt keine relevante Rechenkapazität zur Verfügung. Das Chemiestudium an der Universität Bielefeld wurde mit Beginn des WS 2004/5 auf Bachelor/Master umgestellt (jetzt unter der offiziellen Bezeichnung "Molekühlwissenschaften mit vertiefendem Nebenfach Chemie der Materialwissenschaften"). Dabei ist im Bachelor in den ersten vier Semestern im wesentlichen ein Pflichtprogramm vorgegeben, an dem die Theoretische Chemie mit der Vorlesung *Theoretische Chemie I* (Einführung in die Quantenmechanik, 2V+2Ü, 5 LP) im 4. Semester sowie der Betreuung der Mathematikvorlesung für Chemiker im 1. und 2. Semester (je 2V+2Ü, insgesamt 10 LP) beteiligt ist. Im 5. und 6. Semester besteht weitgehend Wahlfreiheit, hier wird die Theoretische Chemie die Wahlpflichtveranstaltungen *Theoretische Chemie II* (Einführung in die Quantenchemie, 2V+2Ü, 5 LP, 5. Semester) und *Computational Chemistry* (Computerpraktikum, je 1V+3Ü im 5. und 6. Semester, 10 LP) anbieten.

Im Masterprogramm bietet sich die Möglichkeit, den Schwerpunkt "Theoretische Chemie und Computeranwendungen" zu wählen. Dieser Schwerpunkt beinhaltet im Pflichtprogramm: *Fortgeschrittene Theoretische Chemie I* (Reaktionsdynamik und Spektroskopie, 2V+2Ü, 7.5 LP), *Fortgeschrittene Theoretische Chemie II* (Gruppentheorie und Korrelationsmethoden, 2V+2, 7.5 LP) und ein dreimonatiges Forschungspraktikum (15 LP). Daneben besteht die Möglichkeit z.B. ein Programmentwicklungspraktikum und Grundvorlesungen in Theoretischer Physik zu belegen.

Weitere Informationen zur Bielefelder Theoretischen Chemie finden Sie unter:
www.uni-bielefeld.de/chemie/tc/.

Uwe Manthe, Bielefeld

4.2 Theoretische Chemie an der Universität Oldenburg

Am Institut für Reine und Angewandte Chemie der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg ist das Fach Theoretische Chemie durch zwei Arbeitsgruppen vertreten. In der Arbeitsgruppe „Computerchemie“ (Leitung: Dr. Rainer Koch) werden hauptsächlich anwendungsorientierte Projekte der Organischen und Anorganischen Chemie bearbeitet, so dass im Jahr 2004 mit der Berufung von Thorsten Klüner auf eine neu eingerichtete W2-Professur für „Theoretische Physikalische Chemie“ das Methodenspektrum auf physikalisch chemische Fragestellungen erweitert wurde. Unsere Arbeitsgruppe ist international

besetzt und besteht zur Zeit aus Dr. Wai-Leung Yim (Postdoktorand), Erik Asplund, Sören Dittrich, Doron Lahav und Imed Mehdaoui (Doktoranden).

Die Expertise unserer Arbeitsgruppe umfasst die Entwicklung und Anwendung quantenchemischer und quantendynamischer Methoden für materialwissenschaftliche Fragestellungen, wobei insbesondere die Charakterisierung photochemischer Prozesse an Festkörperoberflächen zu unseren Forschungsschwerpunkten gehört. Unser Ziel ist es dabei, in enger Kooperation mit experimentell arbeitenden Gruppen, photochemische Elementarreaktion an Oberflächen möglichst detailliert zu untersuchen.

Während in unserer Arbeitsgruppe zahlreiche materialwissenschaftliche Fragestellungen unter Verwendung von Standardprogramm Paketen wie VASP, WIEN2k und CASTEP mit DFT-Superzellrechnungen untersucht werden, kommen bei der Beschreibung photochemischer Prozesse in der Regel eingebettete Cluster und quantenchemische ab initio Verfahren (HF, CASSCF, CASPT-2) zur Anwendung. Insbesondere gelang uns in den letzten Jahren die Berechnung von multidimensionalen Potentialflächen elektronisch hochangeregter Zustände von Adsorbat-Substrat-Systemen unter Verwendung von Konfigurationswechselwirkungsverfahren (CI).

In der Regel stellen diese Potentialflächen die Grundlage für quantendynamische Simulationen (zeitabhängige Wellenpaketdynamik) dar, wobei unser Programmpaket insbesondere auf die optimale Ausnutzung von Massivparallelrechnern ausgelegt ist. So wird auf diesen Architekturen durch einen optimalen Lastenausgleich und eine hocheffiziente Kommunikationsstrategie eine nahezu lineare Reduzierung der Rechenzeit als Funktion der Prozessorenzahl auch bei Verwendung mehrerer 100 Prozessoren erzielt. Dies ermöglicht die routinemäßige Durchführung exakter quantendynamischer Rechnungen in einer Darstellung von z. Zt. 10^9 bis 10^{10} DVR-Basisfunktionen bzw. Gitterpunkten. Derartige stochastische Wellenpaketrechnungen auf multidimensionalen ab initio Potentialflächen ermöglichen ein weitgehendes Verständnis quantenzustandsaufgelöster experimenteller Resultate zur laserinduzierten Desorption als einfachste photochemische Elementarreaktion auf Oberflächen und erlauben darüber hinaus die Vorhersage neuartiger Effekte bei zukünftigen Experimenten.

Im Rahmen der stochastischen Wellenpaketrechnungen wird die elektronische An- und Abregung jeweils als vertikaler Übergang approximiert. Eine vollständige Beschreibung des Desorptionsprozesses sollte jedoch sowohl den anregenden Laserpuls als zeitabhängige Störung berücksichtigen als auch ein realistisches Modell für die nichtadiabatische Relaxation des Wellenpaketes beinhalten. In Zusammenarbeit mit Prof. Dr. Ronnie Kosloff (Jerusalem) wird in unserer Arbeitsgruppe zur Beschreibung dieser dissipativen Prozesse ein „Surrogate Hamiltonian“ eingesetzt, der die elektronische Relaxation durch Kopplung

des Systems an ein Bad aus Elektron-Loch-Paaren beschreibt. Auch für diesen von uns mit entwickelten Ansatz ist uns eine hocheffiziente massivparallele Implementierung gelungen, die einen direkten Vergleich zwischen Theorie und Experiment ermöglicht.

Neben den beschriebenen algorithmischen und methodischen Entwicklungen in der Quantendynamik beschäftigen wir uns in Kooperation mit Prof. Dr. Emily Carter (Princeton) auch mit der Weiterentwicklung quantenchemischer Verfahren bei materialwissenschaftlichen Fragestellungen. So gelang uns die Formulierung, Implementierung und Anwendung einer neuartigen Einbettungstheorie, in welcher die Vorteile von DFT-Supercellverfahren und ab initio Clusterrechnungen kombiniert werden. Hier wird ein Ausschnitt aus dem Festkörper (Cluster) mit quantenchemischen Methoden behandelt, während die Umgebung mittels DFT-Supercellverfahren beschrieben wird. Die Kopplung beider Regionen erfolgt über einen dichteasierten, effektiven Einbettungsoperator, der z. Zt. partiell selbstkonsistent behandelt wird. Ein erfolgreiches Anwendungsbeispiel ist die Berechnung elektronisch angeregter Zustände von molekularen Adsorbaten auf Metalloberflächen. Die Weiterentwicklung der bestehenden Einbettungstheorie (vollständig selbstkonsistente Beschreibung von System und Umgebung) ist Gegenstand aktueller Forschung.

Die Arbeitsgruppe „Computerchemie“ beschäftigt sich wie erwähnt in erster Linie mit der Anwendung theoretischer Methoden auf Problemstellungen der Anorganischen und Organischen Chemie. Exemplarische Projekte aus der Anorganischen Chemie umfassen dabei die Untersuchung von Struktur, Eigenschaften und Reaktivität der Gruppe 14-Element-Verbindungen und früher Übergangsmetallkomplexe. Die Reaktionen kumulenter (metall)organischer Reaktionen bilden den organischen Schwerpunkt. Weitere Forschungsgebiete umfassen die Simulation von „Surface Enhanced Raman Spektren“ (SERS) von verschiedenen Adsorbaten auf Metalloberflächen sowie die Untersuchung materialwissenschaftlicher Fragestellungen.

Beide Arbeitsgruppen werden z. Zt. im Rahmen verschiedener Projekte durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft, den Fonds der Chemischen Industrie, die Max-Planck-Gesellschaft, die Alexander von Humboldt-Stiftung und das Hanse Wissenschaftskolleg (HWK) finanziell unterstützt.

In der Lehre ist die Theoretische Chemie seit der Umstellung des Diplomstudiengangs auf Bachelor /Master-Studiengänge (ab WS 2005/2006) in mehreren Modulen vertreten. Im ersten Studiensemester existiert das Pflichtmodul „Theoretische und Quantitative Grundlagen der Chemie“ mit einer Vorlesung über Atombau und Chemische Bindung (2 SWS), einer Übung (2 SWS) und einem Praktikum (1 SWS). Die Studierenden werden so sehr früh mit theoretisch-chemischen Fragestellungen vertraut gemacht. Im weiteren Verlauf des Bachelor-Studiengangs werden die Grundlagen der Quantenmechanik im Rahmen ei-

ner Vorlesung „Spektroskopie und Struktur der Materie“ (2 SWS) vermittelt und in einem Modul „Molekülchemie für Fortgeschrittene“ anhand der Vorlesung „Einführung in die Theoretische Chemie“ (2 SWS) mit Übungen (1 SWS) und einem computerchemischen Kurs (2 SWS) vertieft. Im Masterstudiengang sind zwei weitere Vorlesungen (je 2 SWS) mit Übungen (je 1 SWS) sowie ein forschungsnahes Praktikum in Theoretischer Chemie (2 SWS) vorgesehen.

Weitere Informationen zu den Arbeitsgruppen, den Forschungsprojekten und den Lehrveranstaltungen finden Sie unter

<http://www.chemie.uni-oldenburg.de/pc/kluener/>

<http://www.chemie.uni-oldenburg.de/cc/>

Thorsten Klüner, Oldenburg (Thorsten.Kluener@uni-oldenburg.de)

4.3 Theoretische Chemie an der RWTH Aachen

An der RWTH Aachen besteht schon seit den siebziger Jahren eine C3-Professur für Theoretische Chemie, die bis 2004 dem Institut für Organische Chemie zugeordnet war. Professor für Theoretische Chemie war in dieser Zeit Jörg Fleischhauer. Mit der Berufung von Prof. Arne Lüchow wechselte die C3-Professur in die Physikalische Chemie. In Aachen ist darüberhinaus die Theoretische Festkörperchemie am Lehrstuhl von Prof. Richard Dronskowski im Institut für Anorganische Chemie vertreten sowie die theoretische organische Chemie durch apl. Prof. Gerhard Raabe am Institut für Organische Chemie.

Der Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe Lüchow ist die Entwicklung der Quanten-Monte-Carlo-Methode, einem stochastischen Verfahren zur direkten numerischen Lösung der Schrödingergleichung.

Im Elektronenstruktur-Quanten-Monte-Carlo (QMC) wird ausgenutzt, dass die zeitabhängige Schrödingergleichung in imaginärer Zeit eine Diffusionsgleichung ist. Durch eine Quantensimulation der Elektronenbewegung als Diffusionsprozess lässt sich daher die elektronische Schrödingergleichung numerisch direkt unter vollem Einschluss der Elektronenkorrelation lösen. In der praktischen Realisierung stehen die Knoten der Wellenfunktion im Vordergrund. Sie müssen vorgegeben werden, um das Pauliprinzip zu erfüllen. Zur Zeit wird an der Erweiterung der Methode zur Anwendung für angeregte Zustände und Übergangsmetallverbindungen gearbeitet. Ein weiteres Projekt beschäftigt sich mit dem Einsatz von sparse-matrix-Methoden für QMC, wobei die Effizienzsteigerung für Systeme mit bis zu 500 Elektronen im Vordergrund steht.

In der Arbeitsgruppe wird das QMC-Programm Amolqc entwickelt, das direkt Wellen-

funktionen von Turbomole, Gamess (US) und Gaussian verarbeiten kann. Das Programm steht interessierten Forschern kostenlos zur Verfügung.

Im Schwingungs-Quanten-Monte-Carlo wird der QMC-Ansatz auf die Kerndynamik angewendet. Wie im Elektronenstrukturproblem lassen sich die Kopplungen der Schwingungskordinaten vollständig und direkt numerisch behandeln. Man erhält auf diese Weise die exakte Grundzustandsenergie und die ersten Anregungsenergien. Wichtig ist die exakte Berechnung aller Kopplungen bei schwach gebundenen Clustern wie Edelgas-Clustern oder auch wasserstoffbrückengebundene Cluster. Es hat sich gezeigt, dass die Nullpunktenergie die Stabilitätsreihenfolge isomerer Cluster, wie kleiner Wasser-Cluster $(\text{H}_2\text{O})_n$, Phenol- $(\text{H}_2\text{O})_n$ oder Benzol- $(\text{H}_2\text{O})_n$ verändert. Die Ergebnisse der QMC-Rechnungen unterstützen die Interpretation der laserspektroskopischen Daten. Zusammenarbeit besteht hier mit der Düsseldorfer Arbeitsgruppe von Prof. Karl Kleinermanns. In Kooperation mit der Prof. Daniel Neuhauser (UCLA) wird an der Entwicklung einer QMC-Methode zur exakten Berechnung angeregter Schwingungszustände auch größerer Moleküle gearbeitet. Die Arbeitsgruppe besteht zur Zeit aus einem Postdoc, Dr. Tony Scott und zwei Doktorandinnen, Dipl.-Chem. Annika Bande und Dipl.-Inform. Anja Simon.

Die Computerausstattung ist derzeit auch für die cpu-intensiven QMC-Rechnungen ausreichend. Es steht ein LINUX-Cluster aus 14 Dual-Xeon-Rechnern im Rechnerraum der Arbeitsgruppe zur Verfügung. Darüberhinaus sind 18 Dual-AMD-Opteron-Rechner, davon 12 mit schnellem Infiniband-Netzwerk, im Rechenzentrum zur ausschließlichen Nutzung durch die Arbeitsgruppe vorhanden. Die kompetente Nutzung der Ressourcen ist durch einen Systemadministrator gesichert.

Die Theoretische Chemie ist in der Lehre mit einer zweistündigen Pflichtvorlesung mit einstündiger Übung „Theorie der chemischen Bindung“ im 4. Semester vertreten. Im Hauptstudium hat eine zweistündige Pflichtvorlesung der Physikalischen Chemie „Theoretische Chemie“ zum Inhalt. Daneben werden weitere Theorievorlesungen angeboten, vor allem „Bänder und Bindungen“ zur Theoretischen Festkörperchemie und „Computational Chemistry“, eine anwendungsorientierte Vorlesung mit praktischen Übungen am Computer. Letztere Vorlesung soll im Bachelor-Studiengang, der an der RWTH voraussichtlich zum WS 06/07 beginnt, als Pflichtveranstaltung verankert werden. Eine Besonderheit in Aachen ist das sechswöchige Forschungspraktikum, das in einer Arbeitsgruppe an jedem Institut absolviert werden muss. Theoretisch Interessierte Studenten können so eine theoretische Arbeit in der Physikalischen Chemie, aber teilweise auch in den übrigen Instituten, absolvieren.

Arne Lüchow