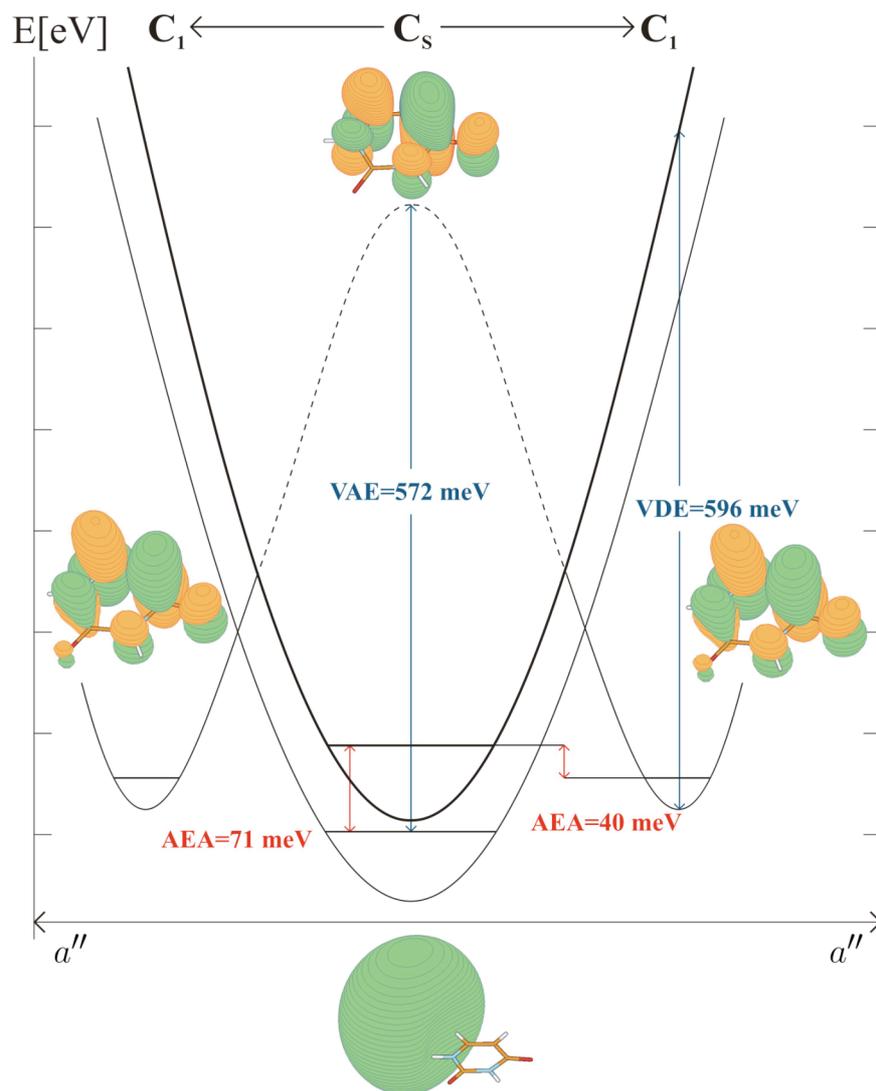


Info Theoretische Chemie

April 2007



Aus: R.A. Bachorz *et al.*, Coupled-cluster and explicitly correlated perturbation-theory calculations of the uracil anion, *J. Chem. Phys.* **126**, 085101 (2007).

Editorial

Liebe Leserinnen und Leser,

diese und die folgenden zwei Ausgaben des *Info Theoretische Chemie* (November 2007 und April 2008) werden von der Arbeitsgruppe des Lehrstuhls für Theoretische Chemie in Karlsruhe herausgegeben. Wir bedanken uns herzlich bei den bisherigen Frankfurter Herausgebern für ihr Engagement und die Bereitstellung von Informationen für die aktuelle Ausgabe.

Als Redaktion bitten wir um Zusendung aktueller Meldungen für die Rubriken *Tagungsvorschau* und *Klatsch und Tratsch* an die folgende E-Mail-Adresse: klopper@chem-bio.uni-karlsruhe.de. Wir bedanken uns herzlich für die eingeschickten Beiträge für die vorliegende Ausgabe, in der sich die Arbeitsgruppen der Universität Bonn vorstellen (Seiten 3–7) und Herr Prof. Jug an das Genealogieprojekt der TC erinnert (S. 8). Vielen Dank auch an Herrn Dr. Auer für den Austausch seiner Erfahrungen als Juniorprofessor (Seite 10). Die üblichen Rubriken finden Sie wie folgt: Mitteilung des Vorstands der AGTC (S. 2), Klatsch & Tratsch (S. 9), Tagungsvorschau (S. 11–14), Stellenausschreibungen (S. 14).

Karlsruhe, im April 2007
W. Klopper

Mitteilung des Vorstands der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie

In der schriftlichen Wahl im Januar 2007 wurden folgende Kandidaten in den Vorstand der AGTC gewählt:

Prof. Dr. Wolfgang Domcke
Prof. Dr. Gernot Frenking
Prof. Dr. Jürgen Gauß
Prof. Dr. Gotthart Seifert
Prof. Dr. Hans-Joachim Werner.

Vorbehaltlich der Bestätigung durch die Trägergesellschaften wird der Vorstand ergänzt durch

Prof. Dr. Michael Schreiber (DPG)
Prof. Dr. Walter Thiel (DBG).

Profesor Frenking vertritt die GDCh im Vorstand.

Die konstituierende Sitzung des neuen Vorstands mit der Wahl des Vorsitzenden und stellvertretenden Vorsitzenden findet in den nächsten Monaten statt.

Arbeitsgruppen stellen sich vor: die Theoretische Chemie in Bonn

Geschichtliches

Die Theoretische Chemie ist in Bonn bekanntermaßen traditionell sehr stark verankert. Der Lehrstuhl hat unter langjähriger äußerst erfolgreicher Führung von Frau Prof. Peyerimhoff viele wichtige Beiträge zur Quantenchemie geleistet und eine Reihe herausragender Wissenschaftler hervorgebracht, welche selber seit geraumer Zeit erfolgreiche wissenschaftliche Karrieren verfolgen.

Seit der Emeritierung von Frau Prof. Peyerimhoff im Jahre 2002 kam es zu einem unfreiwilligen Wechselspiel auf den Bonner Theoriestellen. Zunächst übernahm Andreas Görling die C3-Stelle von Michael Dolg, der seinerseits auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie in Köln berufen wurde. Auf den Bonner Lehrstuhl wurde Bernd Heß berufen, der ja in Bonn über viele Jahre wichtige Beiträge zur Theoretischen Chemie geleistet hatte und der seinerzeit den Erlanger Lehrstuhl für Theoretische Chemie leitete. Zu Bernd Heß' Nachfolger in Erlangen wurde seinerseits Andreas Görling ernannt. Wie ja hinreichend bekannt ist, war Bernd Heß weniger als ein Jahr auf dem Bonner Lehrstuhl vergönnt, bevor er im Sommer 2004 einem Krebsleiden erlag. In der Folge dieser tragischen Situation waren ab Sommer 2004 beide Bonner Theorie-Professuren unbesetzt und wurden mit Vertretern besetzt. Aus der Arbeitsgruppe von Bernd Heß waren seinerzeit Markus Reiher als Habilitierter Wissenschaftler und Barbara Kirchner als Habilitandin in Bonn verblieben. Die Lehrstuhlleitung wurde zunächst von Markus Reiher übernommen, welcher aber bereits im Winter 2004 einen Ruf an die Universität Jena erhielt und Bonn im Frühjahr 2005 verließ. Der Lehrstuhl wurde während der sich anschließenden Ausschreibungs- und Berufungsverfahren in der Folge von Thomas Bredow vertreten. Beide Verfahren wurden praktisch zeitgleich im Februar 2006 abgeschlossen und die beiden Bonner Theoriestellen wurden mit Frank Neese und Thomas Bredow besetzt. Damit waren die Personalwechsel aber noch immer nicht abgeschlossen: Im Sommersemester 2006 schloss Barbara Kirchner erfolgreich ihre Habilitation ab und erhielt bereits im Herbst 2006 den Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Leipzig, den sie im Sommer 2007 übernehmen wird.

An dieser Stelle gilt unser herzlicher Dank noch einmal allen Vertretern (neben den bereits genannten gilt unser Dank auch Herrn PD Dr. Thomas Krüger und Herr PD Dr. Guntram Rauhut, welche beide die C3 Stelle vertreten haben) und Mitgliedern der Bonner Theoretischen Chemie, die während schwieriger Jahre die Fahne der Theorie hochgehalten haben. Durch ihr Engagement war es den Nachfolgern möglich den Lehrstuhl in hervorragendem Zustand zu übernehmen und die neue Arbeit schwungvoll aufzunehmen. Insbesondere gilt unser Dank Markus Reiher und Barbara Kirchner, die die Hauptlast der Verantwortung geschultert haben und es trotz hoher eigener Belastung verstanden haben, hochtalentierte und motivierte Studenten für die Theoretische Chemie zu gewinnen.

Mittlerweile hat die neue Bonner Theoriemannschaft fast ein Jahr gemeinschaftlich gearbeitet und wir freuen uns, unsere Arbeit hier dem Forum der deutschsprachigen theoretischen Chemiker vorzustellen.

Personal

Die beiden Professoren der TC werden von zwei langjährig beschäftigten Mitarbeitern kompetent und freundlich unterstützt, wobei das Sekretariat von Frau Kronz geleitet wird und Herr Mekelburger mit allen Aspekten der Computer-Hardware beschäftigt ist. Weiterhin befinden sich Herr Dr. Nestmann – bis zu seinem Ausscheiden im Jahr 2009 – sowie Herr Dr. Wennmohs zum fest angestellten Personalstamm der TC Gruppen und übernehmen zahlreiche

Funktionen in Forschung, Lehre und Administration. Die Gruppe Wennmohs befindet sich derzeit ebenfalls im Aufbau und die Arbeiten sollen plangemäß in einer Habilitation kulminieren.

Zum gegenwärtigen Zeitpunkt arbeiten in unseren Arbeitsgruppen 6 Postdoktoranden, 8 Doktoranden, 2 Diplomanden sowie diverse wissenschaftliche Hilfskräfte. Durch die stark internationale Zusammensetzung der Gruppe ist ein äußerst interessantes, kooperatives und spannendes Arbeitsklima garantiert.

TC Lehre in Bonn

In der **Lehre** ist die Theoretische Chemie in Bonn sehr stark vertreten und es war Studenten über viele Jahre möglich, Theoretische Chemie hier als Schwerpunktfach zu studieren. Es galt also zunächst diese für die Theoretische Chemie sehr günstige Situation in die Zeit der Bachelor/Master Umstellung zu „retten“. Dies ist weitgehend gelungen und die Lehrveranstaltungen der TC nehmen im neuen Curriculum einen breiten Raum ein, was uns in die glückliche Situation versetzt, die Studenten bereits frühzeitig und breit an fortgeschrittenen Themen der TC heranzuführen. Im Bachelor-Studium befinden sich neben der **Mathematik I+II**, die beiden Vorlesungen **Theoretische Chemie I+II** (jeweils einsemestrig, 2 SWS + 1 Stunden Übungen) als Pflichtveranstaltungen wieder. Während in der TC I die allgemein gängigen Grundlagen unterrichtet werden (Grundlagen der Quantenmechanik, Wasserstoffatom, starrer Rotator, harmonischer Oszillator, MO- und Hückel-Theorie) hat die TC II als Schwerpunkt die Gruppentheorie mit Anwendungen in Molekülspektroskopie.

Als zusätzliches Element existiert im Studienplan ein 6-wöchiger **Vertiefungskurs Computerchemie** (ganztägig), in dem die Studenten an praktische Berechnungen herangeführt werden. Wir haben diesen Kurs in einer gemeinschaftlichen Aktion im Winter 2006 völlig neu konzipiert und erfolgreich als Blockpraktikum durchgeführt. Dieser Kurs soll etwas ausführlicher zur Diskussion gestellt werden, da ähnliche Aktivitäten auch an anderen Universitäten stattfinden oder geplant sind und wir hoffen im Dialog mit anderen Lehrern das Kursmaterial weiterzuentwickeln und zu verbessern.

Das Praktikum beruht auf einem umfangreichen Skriptum von 220 Seiten und ist folgendermaßen aufgebaut: nach einem sehr kurz und sehr elementar gehaltenen Einführungsteil zu den Theoretischen Grundlagen schließt sich ein Kapitel über praktische Aspekte an (Betriebssysteme, Editoren, Grafikprogramme, Auswertungsprogramme und Rechenprogramme: Gaussian, ORCA, MSINDO, CPMD). Diese Kapitel werden in den ersten 2 Tagen des Praktikums unterrichtet. Im Allgemeinen findet an 3 von 5 Tagen eine ca. 1-stündige Vorlesung zu den theoretische Grundlagen statt, während der Rest des Tages den Studenten für die praktische Arbeit am Rechner zu Verfügung steht. In dieser Zeit ist jeweils ein Betreuer als Ansprechpartner verfügbar. Der fachliche Teil des Praktikums ist in drei Teile gegliedert, die jeweils aus verschiedenen „Experimenten“ bestehen: Teil 1 vermittelt die elementaren Grundlagen der Computerchemie (Orbitale, Orbitalenergien, Populationen, Elektronendichten, Geometrieoptimierung, Stabilität von Isomeren, Thermochemie und Frequenzanalyse, Berechnung von Übergangszuständen). Dieser Teil muss von allen Studenten vollständig durchgeführt werden. Teil 2 beinhaltet einige speziellere Kapitel der Computerchemie (Grenzorbitale und qualitative MO Theorie, theoretische UV/vis/IR/Raman Spektroskopie, theoretische EPR- und NMR-Spektroskopie, Ionen und Solvatisierung, schwache Wechselwirkungen, Elektronenkorrelation im Heliumatom mit natürlichen Orbitalen, Potentialflächen von zweiatomigen Molekülen mit Einfach- und Multireferenzmethoden und in der Zukunft auch unter Berücksichtigung relativistischer Effekte). Von diesen Themen müssen die Studenten drei „Experimente“ auswählen. In Teil 3 haben wir Experimente untergebracht, welche unseren Forschungsinteressen nahe stehen: Theoretische Koordinationschemie, Theoretische Festkörperchemie und First-Principles Molekulardynamik. In der Zukunft wird noch ein Teil über Simulation von biologischen Makro-

molekülen hinzukommen. Aus diesem Teil müssen die Studenten ein Themengebiet bearbeiten.

Als Leistungsnachweis dienen ein Kurzvortrag von 30 Minuten zu einem aktuellen Forschungsthema sowie die Protokolle der durchgeführten Praktikumsversuche.

Im Hauptstudium befinden sich die beiden Veranstaltungen **Quantenchemie I+II**. Auch diese Vorlesungen haben wir gründlich neu konzipiert. Die **QC I** wird dabei im Masterstudium zum Pflichtprogramm erhoben, während die QC II in deutlich ausgebauter Form als eigenständiges Modul weiter existieren wird. In der QC I werden die Studierenden an die quantitativen Methoden der Elektronenstruktur herangeführt. Zunächst wird die Hartree-Fock Methode im Detail abgeleitet und in allen theoretischen und praktischen Aspekten ausführlich diskutiert. Danach wird die Natur der chemischen Bindung in H_2 und H_2^+ ausführlich dargestellt. Daran anschließend wird eine Einführung in die Theorie der molekularen Eigenschaften auf der Basis von analytischen Ableitungen vermittelt (Gradienten, Geometrieoptimierung, Newton-Raphson-Verfahren, zweite Ableitungen und Frequenzen, CPHF Theorie, Polarisierbarkeiten, chemische Verschiebungen, zeitabhängige Störungstheorie und Ableitung der TDHF-Gleichungen; frequenzabhängige Polarisierbarkeiten und Anregungsenergien). Zum Abschluss der Vorlesung werden die theoretischen Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie vorgestellt (Hohenberg-Kohn-Theoreme, Kohn-Sham-Methode, LDA, GGA, Hybrid- und Doppelhybrid-Funktionale, Benchmarks, DFT-Response Theorie).

Die **QC II** steht ganz im Zeichen der Elektronenkorrelation. Nach einer kurzen Rekapitulation der HF-Methode wird einiger Formalismus entwickelt (full CI Methode, reduzierte Dichtematrizen, natürliche Orbitale, zweite Quantisierung, Diagrammtechniken), die dann auf alle gängigen Korrelationsmethoden angewendet werden (Störungstheorie, Konfigurationswechselwirkung, Coupled-Pair-Methoden, Coupled-Cluster-Methoden). Das letzte Drittel der Vorlesung beschäftigt sich dann mit Multireferenzmethoden (CASSCF, MR-CI, MR-PT). Dieser Kurs wird, wie die QC I, von einer Doppelstunde Übungen begleitet und durch eine Klausur abgeschlossen. Für das Master-Studium haben wir diesen Kurs verbunden mit einer Veranstaltung, welche wir im Sommer 2006 erstmals durchgeführt haben und die unter dem Namen **Einführung in das wissenschaftliche Programmieren** lief. Hier werden elementare Programmiertechniken auf der Basis von Pseudocode, Fortran und C/C++ vermittelt. Der Kulminationspunkt ist das Schreiben eines eigenen kleinen Hartree-Fock- und MP2-Programms auf der Basis von vorgegebenen Integralroutinen.

In der Zukunft werden wir zusätzlich im Masterstudium zu der Veranstaltung **Molekulardynamik** beitragen, welche sich mit zeitabhängigen Prozessen und zeitaufgelöster Spektroskopie beschäftigen wird. Zusätzlich werden im Turnus Spezialvorlesungen angeboten, z.B. zu Themen wie theoretische Festkörperchemie, theoretische Spektroskopie, vertiefte Dichtefunktionaltheorie, Simulationstechniken und – abhängig von den ansässigen Wissenschaftlern – andere Themen von aktuellem Interesse.

Arbeitsgruppe Neese

Die Arbeitsgruppe Neese ist thematisch recht weit gefächert. Unsere Forschungsbemühungen betreffen sowohl Entwicklungs- wie auch Anwendungsaspekte.

Im Bereich der Anwendungen ist unser Kernarbeitsgebiet die elektronische Struktur von Übergangsmetallen. Das betrifft vor allem die Bioanorganische Chemie, die theoretische Koordinationschemie sowie den molekularen Magnetismus. In diesen Bereichen haben wir uns in den vergangenen Jahren – jeweils in enger Zusammenarbeit mit experimentell arbeitenden Gruppen – vor allem in den Bereichen von „super-oxidierten“ Eisenzentren in Modellsystemen und in den Katalysezyklen von Metallproteinen, mit Enzymen des biologischen Stickstoffkreislaufes sowie mit Metall-Radikal Wechselwirkungen beschäftigt. In zunehmendem Maße finden bei der Berechnung von Aktivzentren von Metallproteinen QM/MM-Methoden Anwendung, welche in Zusammenarbeit mit befreundeten

Arbeitsgruppen verfolgt werden. In unserem neuen Umfeld beginnen wir aber auch, neue Interessen in den Bereichen Katalyse und Festkörper zu entwickeln.

Ein Schwerpunkt unserer Arbeiten der vergangenen Jahre in Entwicklung und Anwendung betrifft die optischen- (Absorption, Fluoreszenz, MCD, Resonanz-Raman), vibrations- (IR, Raman, NRVs) und magnetischen- (EPR, NMR, Mössbauer, SQUID) Eigenschaften von offenschaligen Übergangsmetallen. Diese Eigenschaften sind in vielerlei Hinsicht von großer Bedeutung und ihre theoretische Berechnung führt zwanglos zu einer Vielzahl von spannenden, weltweiten Kooperationen mit experimentellen Arbeitsgruppen.

Unsere Entwicklungsarbeiten finden fast ausschließlich im Rahmen des von uns entwickelten Programmpaketes ORCA statt, dessen Weiterentwicklung uns ein wichtiges Anliegen ist. Bei ORCA handelt sich um ein „general purpose“ Programm mit den Schwerpunkten Übergangsmetalle und theoretische Spektroskopie. Es befinden sich sowohl DFT- wie auch korrelierte *ab initio*-Methoden und auch semi-empirische Methoden im Funktionsumfang. Das Programm ist benutzerfreundlich, flexibel und für Akademiker frei verfügbar unter <http://www.thch.uni-bonn.de/tc/orca>.

In der Implementierung der Dichtefunktionaltheorie haben wir weitgehend eine „Anwendermentalität“. Unsere Entwicklungsbemühungen beziehen sich auf besonders effiziente Algorithmen sowie die Berechnung von spektroskopischen Parametern auf DFT-Basis. Hierbei haben wir besonders Beiträge zur Theorie der EPR-Spektroskopie geleistet. Die Geschwindigkeit der DFT-Implementierung ist wahrscheinlich mit den effizientesten existierenden Programmen zumindest vergleichbar.

In der *ab initio*-Theorie haben wir aufgrund unseres Engagements für Übergangsmetalle seit längerem vor allem Interesse an Multireferenzmethoden. In dieser Hinsicht existiert ein recht flexibles individuell selektierendes MR-CI Programm unter anderem mit Einschluß von Spin-Bahn-Kopplung, Magnetfeldern und der RI-Näherung. Eine besondere Methode ist die von uns vorgeschlagene „Spectroscopy Oriented CI“ (SORCI) Methode, welche erstaunlich akkurat ist und sich auch auf größere Moleküle anwenden lässt. Nach dem Wechsel der Arbeitsgruppe in die „reine“ Theorie in 2006 steht eine entscheidende Erweiterung unseres Methodenarsenals auf vereinfachte, niedrig-skalierende, hochkorrelierte, hocheffiziente und teilchenzahlkonsistente single- und Multireferenz- *ab initio*-Methoden weit oben auf unserer Prioritätenliste. Effiziente Matrix-getriebene Programme sind derzeit bereits weit fortgeschritten. Die Berechnung von Molekülspektren aller Art auf der Basis dieser Methoden wird ein wichtiges zukünftiges Betätigungsfeld der Arbeitsgruppe darstellen.

Arbeitsgruppe Bredow

Der Schwerpunkt des Arbeitsgebiets der Gruppe Bredow liegt in der Beschreibung von kristallinen Festkörpern und ihrer Oberflächen. In enger Kooperationen mit experimentellen Arbeitsgruppen werden die Bildung und Mobilität von Defekten, die Adsorption von Molekülen auf perfekten und defekten Oberflächen, sowie Oberflächenreaktionen untersucht. Neue, in Bonn gestartete Projekte sind die Untersuchung des Einflusses der Adsorption an Metalloberflächen auf inter- und intramolekulare Wasserstoffbrückenbindungen (zusammen mit der Arbeitsgruppe Kirchner) und die Änderung der Elektronenstruktur konjugierter Moleküle infolge der Wechselwirkung mit oxidischen Substraten. In weiteren aktuellen Projekten werden die Li-Ionenwanderung in gemischten Ti-Chalkogeniden und in oxidischen Nanokompositen sowie die Ausbildung neuartiger Modifikationen ternärer und quaternärer Übergangsmetall-Oxidnitride behandelt.

Unsere Arbeit ist überwiegend anwendungsorientiert. Abhängig von der Wahl des theoretischen Modells werden periodische Programme wie CRYSTAL, VASP und CP2k oder Molekülprogramme eingesetzt. Hier gibt es im ersten Jahr in Bonn bereits erfolgreiche gemeinsame Projekte mit der Arbeitsgruppe Neese. Durch Kombination periodischer und eingebetteter Cluster-Modelle konnten optische Eigenschaften defekter Festkörperstrukturen berechnet werden.

Die dichtefunktionalbasierten periodischen Rechnungen werden weitgehend durch Strukturoptimierungen mit dem Programm MSINDO unterstützt. Die Entwicklung dieser semi-empirischen Methode wurde in der Arbeitsgruppe Jug in Hannover begonnen und wird nun von uns fortgesetzt. Hauptaugenmerk gilt der Weiterentwicklung des in MSINDO implementierten zyklischen Clustermodells zur Beschreibung von zwei- und dreidimensional periodischen Systemen. Das Modell bietet die Möglichkeit, molekulare quantenchemische Verfahren zur Beschreibung von Festkörpern einzusetzen. Des Weiteren wird die Anwendbarkeit der semi-empirischen Methode auf weitere Elemente des Periodensystems vorangetrieben.

Arbeitsgruppe Wennmohs

Die Nachwuchsgruppe Wennmohs betätigt sich im Bereich Life Sciences, d.h. ihre Forschung beschäftigt sich mit der Aufklärung von Struktur und Funktionen von großen makromolekularen Systemen wie Proteinen, Nukleinsäuren bis hin zu kompletten biologischen Membranen.

Verwendet werden bei Systemen von derartiger Größe Kraftfelder und Molekulardynamik Simulationen. Programme wie GROMACS sind heute derart effizient, dass eine Behandlung von 100.000 Atomen und einer Simulationsdauer von einigen Nanosekunden möglich wird.

Neben Struktur und Dynamik dieser Systeme werden mit Hilfe einer QM/MM Einbettung kleinere Bereiche der Biomoleküle mit hochgenauen quantenchemischen Methoden untersucht. Dazu zählen sowohl hochkorrelierte als auch Multireferenz-Methoden. Diese Kombination ermöglicht die Untersuchung der katalytischen Eigenschaften von Proteinen und Nukleinsäuren auf Ebene der elektronischen Struktur. Gleichzeitig erschließen sich auch Methoden zur Berechnung von Reaktionspfaden und Übergangszuständen. Von entscheidender Bedeutung ist dabei die Berechnung von elektronischen und magnetischen Eigenschaften dieser Zentren, da durch die Bestimmung von spektroskopischen Parametern ein direkter Bezug zum Experiment und somit auch eine Überprüfung der durchgeführten Simulationen erreicht werden kann.

Erinnerung

**THEORETISCHE CHEMIE
LEIBNIZ UNIVERSITÄT HANNOVER**

Prof. Dr. K. Jug

Am Kleinen Felde 30
30167 Hannover, 05.02.2007
Telefon 0511 / 762-5445
Telefax 0511 / 762-5939
Email: jugthc@mbox.theochem.
uni-hannover.de

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

vor einigen Jahren haben wir den 100. Geburtstag von Hans Hellmann gefeiert. Über Hellmann hat es viele Recherchen gegeben und sein Lebenslauf und seine wissenschaftlichen Aktivitäten sind neben denen von Hückel gut bekannt. Solche Informationen sollte man zumindest für die theoretische Chemie im deutschsprachigen Raum auf eine breitere Basis stellen. Angeregt durch ein Genealogieprojekt der Mathematiker schlage ich vor, ein entsprechendes Projekt für die Theoretische Chemie im deutschsprachigen Raum zu beginnen und weiterzuführen. Bei dem Projekt der Mathematiker handelt es sich um eine im Internet über eine Homepage (z.B. <http://genealogy.mathematik.uni-bielefeld.de>) zur Verfügung gestellte Datenbank, in der alle in der Mathematik tätigen Professoren, Dozenten und Promovierten erfasst sind. Diese Datenbank wurde in den USA begonnen und hat inzwischen über 100 000 Einträge weltweit. Man kann durch Eingabe in eine Eingabemaske den wissenschaftlichen Stammbaum jedes einzelnen Mathematikers mit Titel der Doktorarbeit, Promotionsjahr, Universität und Betreuer der Doktorarbeit finden. Je nach Bedeutung der Person ist auch ein wissenschaftlicher Lebenslauf zu finden. Für Professoren und Dozenten sind alle ihre Schüler gelistet. Auf diese Weise konnte ich auch einige Kommilitonen aus Frankfurt wiederfinden. Wer sich über das Mathematik-Projekt informieren möchte, kann die genannte Webseite aufsuchen und einen Mathematiker mit Namen eingeben. Ich selbst habe z. B. Reinhold Baer eingegeben, einen meiner Lehrer aus Frankfurt, der selbst wissenschaftlicher Enkel von Hilbert ist.

Ich möchte eine entsprechende Datensammlung anlegen. Der Vorstand der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie unterstützt dieses Projekt und will die Daten langfristig auf der Homepage der AGTC zur Verfügung stellen. Ich habe auch Kontakt mit dem deutschen Projektleiter des Genealogie-Projekts der Mathematik aufgenommen und die Zusage erhalten, dass wir deren Software nutzen können.

Ich bitte deshalb alle promovierten Kolleginnen und Kollegen, die auf dem Gebiet Theoretische Chemie tätig sind oder waren, einen von mir beigefügten Fragebogen auszufüllen, und die Professoren und Dozenten, etwa eine DIN A4-Seite wissenschaftlichen Werdegang per Text beizufügen sowie eine Liste der Schüler mit Titel der Doktorarbeit etc.. Ich selber füge meine eigenen Daten als Beispiel bei.

Bitte senden Sie mir die angesprochenen Daten per Email zurück.

Mit freundlichen Grüßen



Prof. Dr. K. Jug

Klatsch und Tratsch

- Priv.-Doz. Dr. Nikos Doltsinis, Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Ruhr-Universität Bochum, hat den Ruf auf eine Stelle als Senior Lecturer am Department of Physics des King's College London angenommen.
- Frau Dr. Karin Fink hat sich in Bochum für das Fach Theoretische Chemie habilitiert.
- Dr. Filipp Furche hat sich in Karlsruhe für das Fach Theoretische Chemie habilitiert.
- Frau Priv.-Doz. Dr. Leticia González hat einen Ruf auf eine W2-Professur für Theoretische Chemie an der Universität Jena erhalten. Auch wurde sie zum 1. Februar 2007 in Berlin durch ein Heisenberg-Stipendium ausgezeichnet.
- Frau Priv.-Doz. Dr. Barbara Kirchner hat einen Ruf auf die W3-Professur für Theoretische Chemie an die Universität Leipzig erhalten (Nachfolge J. Reinhold) und angenommen. Sie wird die Stelle am 1. Mai 2007 antreten.
- Dr. Bernd Meyer hat sich in Bochum für das Fach Theoretische Chemie habilitiert.
- Prof. Dr. Christoph van Wüllen hat einen Ruf auf eine W3-Professur für Theoretische Chemie an der TU Kaiserslautern erhalten (Nachfolge W. Meyer).
- Die Evaluierungen der Juniorprofessur von Dr. Alexander A. Auer ist im Januar 2007 nach dreijähriger Arbeit an der TU Chemnitz mit positivem Ergebnis abgeschlossen worden. Der Evaluierungsprozess umfasste die Bewertung der Leistungen in Forschung, Lehre, Wissenschaftsmanagement und akademischer Selbstverwaltung und wurde Evaluierungskommissionen aus internen und externen Gutachtern durchgeführt.
- Die Theoretische Chemie hat bei der ersten Ausschreibung der "Cooperative Activities in Chemistry between US and German investigators (NSF-DFG)" 2006 gut abgeschnitten: von 25 Bewerbungen aus allen Bereichen der Chemie wurden bei sehr harter, amerikanischer und deutscher Begutachtung nur fünf bewilligt, darunter zwei aus der Theoretischen Chemie (W. Domcke, TU München, und L. González, FU Berlin, mit Partnern.)

Juniorprofessuren

Mit dem positivem Abschluss der Evaluierung bestätigt die TU Chemnitz den Juniorprofessoren die Eignung für die Tätigkeit als Hochschullehrer. Alexander Auer war im April 2004 auf die Juniorprofessur "Theoretische Chemie" berufen worden, sein Hauptforschungsgebiet ist die Entwicklung von lokalen Coupled-Cluster-Methoden und Algorithmen sowie die Anwendung von hochgenauen Methoden auf chemische Fragestellungen. Die Berufung auf eine von zwei Juniorprofessuren in der Chemie der TU Chemnitz (Dr. Matthias Lehmann und Dr. Alexander Auer) stellte die Inhaber vor die Aufgabe des Aufbaus einer unabhängigen Arbeitsgruppe mit personeller und apparativer Ausstattung sowie der Entwicklung und Umsetzung eines Lehrkonzepts im eigenen Fachgebiet. Mit der positiven Evaluierung verlängert sich die Anstellung am Institut für Chemie an der TU Chemnitz bis April 2010. Ein Tenure Track-Verfahren an der TU ist jedoch nicht in Aussicht. Die sächsischen Nachwuchswissenschaftler, deren Status sich bislang in einem rechtlichen Schwebezustand befand, wurden erst im Januar 2007 zu "Juniorprofessoren" (so auch der offizielle Titel) ernannt. Mit in Kraft treten einer Novellierung des sächsischen Hochschulgesetzes im Januar 2007 war Sachsen das letzte Bundesland, das die Grundlage zur Ernennung der designierten Juniorprofessoren geschaffen hat. Die Umsetzung dieser Regelung an der TU Chemnitz wurde mit der Ernennung der Kandidaten im selben Monat zügig durchgeführt. Das Juniorprofessorenmodell wird aufgrund der hohen Anforderungen durch gleichzeitige Wahrnehmung aller Pflichten eines Lehrstuhlinhabers (Universitäre Selbstverwaltung, Lehre, Drittmittelwerbung, Profilierung durch Forschungs- und Publikationsleistungen) mit verhaltenem Optimismus betrachtet, die weiteren Entwicklungen müssen zeigen, ob es zukunftsfähig ist. Als besonders positiv ist jedoch die kollegiale Unterstützung durch die Professoren der Fakultät und der TU Chemnitz zu erwähnen.

- Tagungsvorschau 2007 / 2008 Stand: 30. 4. 2007

Zusammengestellt von: Prof. Dr.phil.nat. **Klaus Helfrich**

Fachgebiet Theoretische Chemie - Quantenchemie
Fakultät II Mathematik und Naturwissenschaften
Technische Universität Berlin

Straße des 17. Juni 135
10623 Berlin
Sekt. C 7

Tel. (030) 314 23774

E-Mail: Helfrich_TUB@t-online.de

WEB: www.tu-berlin.de/~insi/theofach/helfrichhome.htm

Im WWW finden Sie die aktuelle Fassung unter
www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html sowie
unter
www.agtc.uni-bonn.de/agtc.tagvors.html

2007:

- **17. – 19. 5. 2007, Graz /AU**
Bunsentagung gemeinsam mit der Gesellschaft Österreichischer Chemiker GÖCh
"Neuartige Kohlenstoffstrukturen"
<http://www.bunsen.de>
- **29. 5. – 3. 6. 2007, Budapest /HU**
Molecular Quantum Mechanics – Analytic Gradients and Beyond -
An International Conference in Honor of Prof. Peter Pulay
<http://www.ccqc.uga.edu/pulay>
- **16. – 20. 6. 2007, Cetraro/I**
Theoretical Biophysics Symposium
<http://chimica.unical.it/theobio%2D07/>
- **26. – 30. 8. 2007, Amsterdam/NL**
DFT2007, <http://www.dft2007.nl/dft2007/welcome.php>
- **02. – 06. 9. 2007, Torun/PL**
Symposium on Advanced Methods of Quantum Chemistry and Physics (SAMQCP 2007)
<http://www.samqcp.fizyka.umk.pl/>
- **03. – 07. 9. 2007, Dijon/F**
The 20th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy
<http://icb.u-bourgogne.fr/HRMS>
- **12. - 15. 9. 2007, Dresden**
Local Correlation Methods: From Molecules to Crystals
<http://www.mpipks-dresden.mpg.de/~lcc2007/>

- **16. – 19. 9. 2007, Ulm**
Wissenschaftsforum Chemie 2007 - GDCh-Jahrestagung
www.gdch.de/vas/tagungen/tg/5570.htm
- **16. – 20. 9. 2007, Saarbrücken**
43. Symposium für Theoretische Chemie
www.stc2007.uni-saarland.de
- **19. – 22. 9. 2007, Tromsø-Trondheim/NO**
A Coastal Voyage of Current Density Functional Theory
<http://quantique.u-strasbg.fr/cdft2007/>
- **23. – 26. 9. 2007, Litschau/A**
Central European Symposium on Theoretical Chemistry (CESTC2007)
<http://www.ptc.tugraz.at/cestc2007/>
- **23. – 28. 9. 2007, Berlin-Spandau**
Cluster-Treffen
<http://www.physik.tu-berlin.de/institute/OI/clusterreffen2007>
- **11. – 13. 11. 2007, Goslar**
21. CIC-Workshop: German Conference on Chemoinformatics
<http://www.gdch.de/vas/tagungen/tg/5316.htm>

2008:

- **25. – 29. 2. 2008, Berlin**
DPG Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (früher AKF)
- **03. – 07. 3. 2008, Freiburg**
DPG Frühjahrstagung
Gravitation und Relativitätstheorie; Teilchenphysik; Theoretische und Mathematische Grundlagen der Physik; Arbeitskreis Philosophie der Physik
- **10. – 14. 3. 2008, Darmstadt**
DPG Frühjahrstagung des AMOP und des Fachverbandes Hadronen und Kerne
- **01. – 03. 5. 2008, Saarbrücken**
Bunsentagung 2008, "Analyse, Manipulation und Simulation auf der Nanometerskala"
<http://www.bunsen.de/>
- **14. – 19. 9. 2008, Sydney/AU**
Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC
<http://www.watoc2008.com/>
- **16. – 20. 9. 2008, Turin /I**
2nd European Chemistry Congress
- **02. – 06. 10. 2008, Elba/I**
XIV European Seminar on Computational Methods in Quantum Chemistry
http://h2.ipcf.cnr.it/rizzo/XIV_ESCMQC.html

Hinweise auf weitere Tagungskalender:

- **Deutsche Physikalische Gesellschaft, Tagungen**
WWW: <http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/kalender.html>
 - **CONFMENU von Prof. Young S. Kim**
WWW: <http://www.physics.umd.edu/robot>
 - **Gesellschaft Deutscher Chemiker, Tagungen**
WWW: <http://www.gdch.de/vas/tagungen.htm>
 - **Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen**
WWW: <http://www.bunsen.de/>
 - **Konferenzdienst Mandl**
WWW: <http://www.conference-service.com>
-

ANNOUNCEMENT OF DFT2007:

Dear Sir/Madam

The organizing committee is pleased to let you know that from now on you can register for the 12th Density Functional Theory Conference which will be held in Amsterdam, The Netherlands, from 26-30 August 2007. You can register via the website <http://www.dft2007.nl/dft2007/registration.php>

This conference succeeds events organized in Rome (1999), Madrid (2001), Brussels (2003), and Geneva (2005).

The DFT2007 Conference will be devoted to fundamental and applied aspects of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, focussing on recent advances in:

- * Van der Waals interactions
- * Properties
- * Density Matrices and functionals
- * Linear scaling methods
- * Time-dependent DFT
- * Functionals and applications
- * Orbital dependent functionals and OEP
- * Catalysis
- * Large / Biosystems
- * Biological applications

Other applications of DFT are also invited.

Invited Speakers

P. Ayers	McMaster University, Hamilton, Ontario (CDN)
V. Barone	Universita degli Studi di Napoli Federico II, Napels (I)
E. Engel	J.W. Goethe-Universitat, Frankfurt am Main (D)
S. Grimme	Organisch-Chemisches Institut, Münster (D)
K. Houk	University of California, Los Angeles (USA)
G. Jansen	Universität Duisburg-Essen, Essen (D)
W. Kutzelnigg	Ruhr-Universität Bochum, Bochum (D)
R. van Leeuwen	Rijksuniversiteit Groningen, Groningen (NL)

B.I. Lindqvist	Göteborg University and Chalmers University of Technology, Göteborg (S)
D. Mazziotti	The University of Chicago, Chicago (USA)
P. Ordéjon	Institut de Ciencia de Materials de Barcelona - CSIC, Barcelona (E)
J. Perdew	Tulane University, New Orleans (USA)
L. Reining	CNRS-CEA-Ecole Polytechnique, Palaiseau (F)
K. Reuter	Fritz Haber Institute of the Max Planck Society, Berlin-Dahlem (D)
A. Rubio	Universidad del Pais Vasco, San Sebastian (E)
J. Sauer	Humboldt Universität, Berlin (D)
W. Thiel	Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr (D)
P. Stephens	University of Southern California, Los Angeles (USA)
J. VandeVondele	Universität Zürich, Zürich (CH)
W. Yang	Duke University, North Carolina (USA)
T. Ziegler	University of Calgary, Calgary, Alberta (CDN)

With kind regards
Loes Swaning
congress secretariat

Mw. L.G.M. Swaning
Universiteit van Amsterdam
HRSMC Congresorganisatie
Nieuwe Achtergracht 166
1018 WV Amsterdam
The Netherlands
tel. +31 (0)20-5256454
fax. +31 (0)20-5256456
e-mail DFT2007: dft2007@science.uva.nl
Website DFT2007: <http://www.dft2007.nl/dft2007/welcome.php>

Stellenausschreibung

An der **Freien Universität Berlin** ist folgende Stelle zu besetzen:

Einrichtung: Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie Institut für Chemie und Biochemie, Physikalische und Theoretische Chemie

Stellenbezeichnung: Wiss. Mitarbeiterin / Wiss. Mitarbeiter mit Teilzeitbeschäftigung bis zu 19,25 WoStd. zur Promotion für 3 Jahre Vgr. IIa BAT. BVL-Gr.

Beschäftigungsdauer: 3 Jahre

Aufgabengebiet: Mitarbeit in Forschung und Lehre in der Theoretischen Chemie. Ausführung von Forschungsaufgaben im Zusammenhang mit dem Sonderforschungsbereich 450 "Analyse und Kontrolle ultraschneller photoinduzierter chemischer Reaktionen"

Einstellungsvoraussetzungen: Abgeschlossenes Hochschulstudium der Chemie oder Physik.

Erwünscht: Erfahrung auf dem Gebiet der Quantenchemie und/oder Quantendynamik. EDV-

Kenntnisse: Programmierung in Fortran, C und/oder Matlab, Erfahrung im Umgang mit Unix-Systemen. Bewerbungen mit den üblichen Unterlagen (Bewerbungsschreiben, tab. Lebenslauf, Nachweis der erforderlichen Qualifikation) sind zu richten an: PD Dr. Leticia González, Institut für Chemie und Biochemie, Freie Universität Berlin, Takustr. 3, 14195 Berlin.