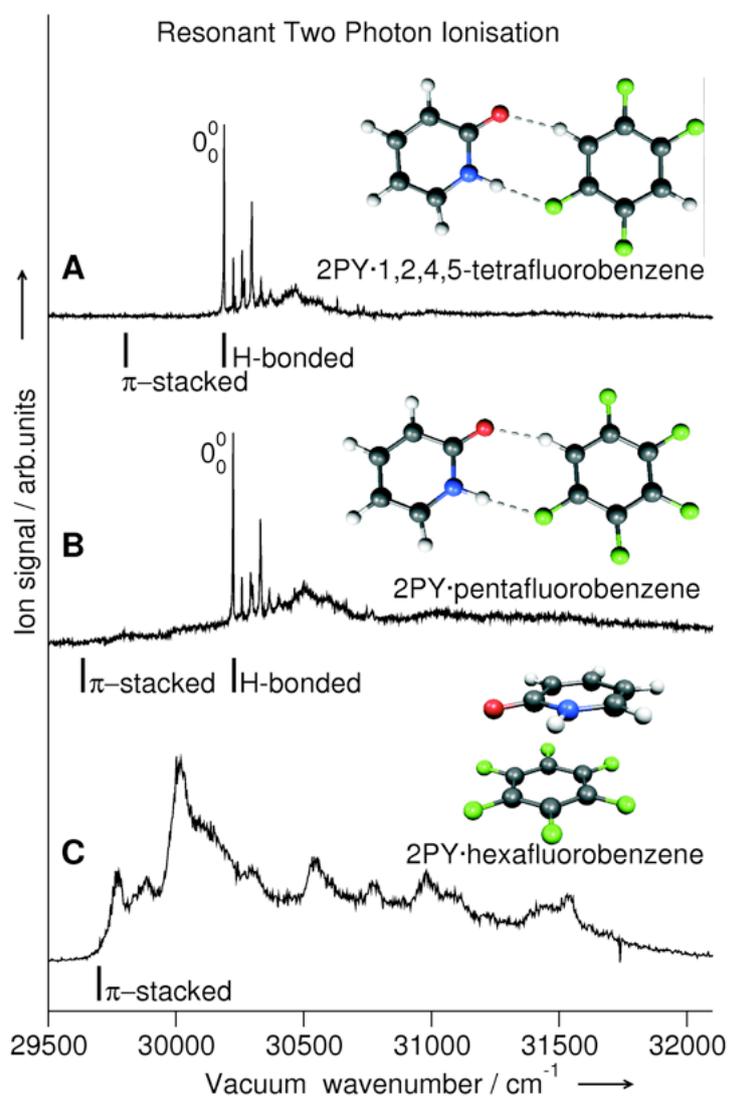


# Info Theoretische Chemie

November 2007



Aus: R. Leist *et al.*, Nucleobase–Fluorobenzene Interactions: Hydrogen Bonding Wins over  $\pi$  Stacking, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 7449–7452.

## **Editorial**

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

die Redaktion bedankt sich herzlich für die eingesendeten Beiträge für die vorliegende Ausgabe und bittet um Zusendung weiterer Beiträge sowie aktueller Meldungen für die Rubriken *Tagungsvorschau* und *Klatsch und Tratsch* an die folgende E-Mail-Adresse: [Willem.Klopper@kit.edu](mailto:Willem.Klopper@kit.edu).

Karlsruhe, im November 2007  
W. Klopper

## **Inhalt**

Mitteilung des Vorstands der AGTC	Seite 3
Das 43. Symposium für Theoretische Chemie in Saarbrücken	Seite 5
Arbeitsgruppen stellen sich vor (L. González, Jena)	Seite 10
Bericht der International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS)	Seite 12
Klatsch und Tratsch	Seite 12
Tagungsvorschau 2008/2009	Seite 13
Einladung zum Review-Artikel in Physics Reports	Seite 15
Ausschreibung des Sofja Kovalevskaja-Preises	Seite 16
Übersicht über Begabtenförderwerke	Seite 16



### **Mitgliederversammlung**

beim 43. Symposium für Theoretische Chemie in Saarbrücken  
Dienstag, 18. 9. 2007  
18:30 – 19:00

### **Tagesordnung**

1. Genehmigung der Tagesordnung
2. Protokoll der Mitgliederversammlung 2006 in Erkner
3. Bericht des Vorsitzenden
4. Bericht und Wahl des Kassenprüfers
5. Wahl der Hellmann-Jury
6. Verschiedenes

### **Protokoll**

#### **TOP 1**

Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Änderung akzeptiert.

#### **TOP 2**

Das Protokoll der Mitgliederversammlung 2006 war im Info TC (November 2006) abgedruckt. Es wird ohne Änderung genehmigt.

#### **TOP 3**

Das **STC 2008** wird von Dr. A.-M. Kelterer und Dr. M. Flock (U Graz) in Ramsau bei Schladming (A) organisiert. Termin: Di, 23. 9. – Sa, 27. 9. 2008. Das gewählte Thema ist generell ("From Basic Principles to Applications"). Die Tagung wird im Konferenzzentrum Ramsau stattfinden. Übernachtung in nahe gelegenen Hotels.

Das **STC 2009** wird von Prof. C. Marian (U Düsseldorf) organisiert. Termin: Mi, 9. 9. – Sa, 12. 9. 2009. Ort: Telekom-Tagungshotel in Neuss bei Düsseldorf.

## **TOP 4**

Dr. Franz Mark (Mülheim) stellt den Kassenbericht 2006 vor.

Der Kassenstand des AGTC-Kontos zum 31. 12. 2006 beträgt 12.245,73 €.

Das Hellmann-Stiftungsvermögen ist durch Spenden kräftig auf 34.548,88 € angewachsen. Die Stiftungsmittel (Zinserträge) von 2006 sind 1.340,- €. Die freien Rücklagen betragen 1.400,- €. Der Vorstand dankt den Verantwortlichen der DBG für die erreichte sehr gute Verzinsung des Stiftungskapitals. Der Hellmann-Preis für 2007 konnte auf 1.000,- € angehoben werden. Der Vorsitzende appelliert an alle Mitglieder, weiterhin für den Hellmann-Fonds zu spenden, um das Preisgeld weiter wachsen zu lassen. Bei der Überweisung bitte „Spende zur Erhöhung des Stiftungskapitals“ angeben.

Es bestehen keine Einwände des Kassenprüfers gegen die Abschlüsse des AGTC-Kontos und des Hellmann-Kontos.

Die Mitgliederversammlung dankt Dr. Mark für die sorgfältige Prüfung der Finanzen. Dr. Mark wird einstimmig zum Kassenprüfer für das Jahr 2007 bestellt.

Die Zahl der (zahlenden) Mitglieder ist von 2006 auf 2007 leicht rückläufig. Der Vorsitzende appelliert an alle Arbeitsgruppenleiter, der AGTC beizutreten und insbesondere die jüngeren Mitarbeiter zum Beitritt zu motivieren (Jahresbeitrag 13 €). Auch Wissenschaftler aus der Schweiz und aus Österreich sind als Mitglieder willkommen.

## **TOP 5**

Wahl der Hellmann-Jury: Ende 2007 scheidet 4 Mitglieder turnusgemäß aus: L. Cederbaum, H. Lischka, C. Marian, J. Hutter (letzterer auf eigenen Wunsch). Vom Vorstand wurden folgende 4 Kandidaten für die Wahl in der Mitgliederversammlung 2007 vorgeschlagen: R. de Vivie-Riedle (LMU München), F. Neese (U Bonn), M. Reiher (ETH Zürich), B. Rode (U Innsbruck). Von der Mitgliederversammlung werden folgende zusätzliche Kandidaten nominiert: P. Blaha (TU Wien), M. Kaupp (U Würzburg), F. Müller-Plathe (TU Darmstadt), C. van Wüllen (U Kaiserslautern).

Die geheime und schriftliche Abstimmung ergibt: die neuen Mitglieder der Hellmann-Jury sind: P. Blaha (A), M. Kaupp (D), F. Neese (D), M. Reiher (CH).

## **TOP 6**

Prof K. Jug (U Hannover) hat alle AGTC-Mitglieder um Beiträge zum „Genealogie-Projekt Theoretische Chemie“ gebeten. Der Vorstand der AGTC unterstützt diese Initiative. Insbesondere für jüngere Mitarbeiter in den Arbeitsgruppen der Theoretischen Chemie dürften diese Daten von Interesse sein.

21. 9. 2007

gez. W. Domcke

### Das 43. Symposium für Theoretische Chemie in Saarbrücken

Das 43. Symposium für Theoretische Chemie wurde in Saarbrücken vom 16. bis 20. September 2007 auf dem Campus der Universität des Saarlandes veranstaltet. Das Symposium wurde in diesem Jahr von **Michael Springborg** (Saarbrücken) und seinem Team (**Michael Bauer**, **Anton Bayer**, **Yi Dong**, **Valeri Grigoryan**, **Hanno Kamp**, **Elisaveta Kasabova**, **Marco Schüle**, **Violina Tevekeliyska**, **Habib Ur-Rehman**, **Ingelore Weidenfeld**) organisiert und war das erste Mal zu Gast im Saarland. Wertvolle Hilfe erfuhren die Organisatoren von der Kontaktstelle für Wissens- und Technologietransfer (KWT) der Universität des Saarlandes (**Uta Merkle**).

Den Beginn machte ein Empfang der Stadt Saarbrücken im Festsaal des neugotischen Rathauses aus dem Jahre 1900. Die Stadt lud dabei die STC-Teilnehmer zu einem gemütlichen und informellen Zusammenkommen vor den bevorstehenden Symposiumstagen ein.

Michael Springborg wies in seiner Eröffnung am Montag (Abb. 1) darauf hin, dass die STC zunehmend internationaler geworden ist. Von den 240 registrierten Teilnehmern kamen in diesem Jahr fast 20% aus nicht-deutschsprachigen Ländern. Daher wurde auch wieder Englisch als Tagungssprache verwendet.



Abb. 1: Volles Haus am Montagmorgen (links) und Erholung am Mittwoch mit Blick auf die Saarschleife (rechts).

Die Organisatoren hatten das Thema „*Large, Non-Biological Systems*“ gewählt. Ein Großteil der 12 eingeladenen und 24 beigetragenen Vorträge sowie der fast 170 Posterpräsentationen befassten sich daher mit diesem Thema. Es wurden aber auch biologische und kleinere Systeme sowie neue und erweiterte Methoden vorgestellt.

Den Auftakt bildete eine Molekulardynamik-Sitzung. Den Eröffnungsvortrag hielt **Dominik Marx** (Bochum) über neue Trends bei *ab-initio*-Simulationen, versehen mit einer kleinen Einführung in die Molekulardynamik (MD). Er ging dabei u.a. auf Methoden ein, um antiferromagnetisch gekoppelte Spinsysteme zu berechnen. Es folgten Vorträge über die Berechnung von Impulsraumdichten von Protonen (**Daniel Sebastiani**, Mainz) und photochemische Reaktionen von Molekülen und Molekülclustern (**Petr Slaviček**, Prag) mit Hilfe von *ab-initio*-MD-Simulationen.

**Richard Martin** (Los Alamos) beschäftigte sich anschließend mit der elektronischen Struktur von Oxiden der *f*-Elemente. Er begann mit einem Bekenntnis zur Molekülorbitaltheorie („*MO theory is not perfect, but pretty good!*“). Ebenfalls über schwere Elemente, die Berechnung elektronischer *g*-Matrizen verschiedener Actinidenverbindungen, berichtete **Hélène Bolvin** (Strasbourg). Die Präsentation von **John Perdew** (New Orleans) hatte den Titel „*Hyper-generalized gradient approximation for the exchange-correlation energy of density functional theory*“. Dieser Vortrag

war für viele sicherlich nicht nur deshalb ein Höhepunkt, weil John Perdew handgeschriebene (und *on the fly* korrigierte) Folien verwendete, sondern auch weil er in klaren und einfachen Worten die Grundlagen verschiedener Funktionale erläuterte, um schließlich die Zuhörer die Jakobsleiter der Dichtefunktionale hinaufzuführen. Beginnend bei LDA- und GGA-Funktionalen gelangte er zu meta- und hyper-GGA-Funktionalen. Während die ersten drei vollständig nichtempirische Konstrukte sind, verwendet ein hyper-GGA-Funktional zusätzlich die exakte Austauschenergiedichte, wobei aber die Fehlerauslöschung durch Austausch und Korrelation verloren geht. Daher müssen empirische Parameter verwendet werden, damit eine hohe Genauigkeit – z.B. zur Berechnung von Aktivierungsenergien chemischer Reaktionen – erreicht werden kann.

Vor der ersten Postersession folgten noch einige methodische Vorträge. **Poul Jørgensen** (Århus) erläuterte eine effiziente Methode zur Optimierung der Gesamtenergie eines Systems und **Christian Ochsenfeld** (Tübingen) stellte eine linear skalierende atomorbitalbasierte MP2-Methode mit rigorosen Integralabschätzungen vor. Als eindrucksvolles Beispiel zeigte er einen 16-basigen DNA-Strang mit mehr als 1000 Atomen, der bei über 10000 Basisfunktionen in nur etwa einem Monat berechnet wurde. Schließlich erläuterte **Andreas Köhn** (Mainz) eine Implementierung von Anregungsenergie-Kopplungsmatrixelementen und **Arne Lüchow** (Aachen) präsentierte neue Entwicklungen und Anwendung von Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen. Zu größeren Systemen ging **Benoît Champagne** (Namur) bei seinem Bericht über *ab-initio*-Polymer-Quantentheorie zur Beschreibung der Eigenschaften (Struktureigenschaften, Schwingungsfrequenzen und -intensitäten u.a.) von stereoregulären Polymeren über.

Der Dienstag begann mit der diesjährigen Verleihung des Hellmann-Preises an **Andreas Dreuw** (Frankfurt) für seinen Beitrag zum Verständnis des photoinduzierten Elektronentransfers in Chlorophyll-Carotenoid-Komplexen der Lichtsammelkomplexe von grünen Pflanzen und Purpurbakterien mittels zeitabhängiger Dichtefunktionaltheorie (TDDFT) und der „*Configuration Interaction Singles*“-Methode (Abb. 2), den der Preisträger in der traditionell auf Deutsch gehaltenen Hellmann-Vorlesung eingehend erläuterte.

Es folgten Vorträge über Eigenschaften elektronisch angeregter, gelöster Moleküle (**Benedetta Mennucci**, Pisa) und zeitabhängige *configuration-interaction*-Simulationen von Dipolschaltern in großen Molekülen (**Tillmann Klamroth**, Potsdam). **Joachim Sauer** (Berlin) berichtete über Struktur und Reaktivität von Oxid-Katalysatoren mit einem Schwerpunkt auf Übergangsmetalloxiden. In seiner Gruppe wurde insbesondere die Berechnung von Infrarotspektren zur Unterscheidung von Clustern in der Gasphase und dem Festkörper herangezogen. Über Katalyse und die Modellierung realistischer Katalysator-Nanoteilchen berichtete auch **Konstantin Neyman** (Barcelona).

Am Dienstagabend informierte außerdem **Frank-Dieter Kuchta** von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) über Förderprogramme, Antragsvoraussetzungen und Verfahrensabläufe innerhalb der DFG. Er bat dabei insbesondere darum, eine Antragstellung in englischer Sprache in Betracht zu ziehen, und wies auf die bevorstehende Fachgutachterwahl im November 2007 hin.

Auf der anschließenden AGTC-Mitgliederversammlung wurde kurz über das Für und Wider englischsprachiger DFG-Anträge diskutiert. Der wichtigste Tagesordnungspunkt war in diesem Jahr jedoch die Wahl der Hälfte der Hellmann-Preis-Komiteemitglieder. Mit Mehrheit wurden **Peter Blaha** (Wien), **Martin Kaupp** (Würzburg), **Frank Neese** (Bonn) und **Markus Reiher** (Zürich) gewählt.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B} & \mathbf{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix}$$

**TDDFT equation**

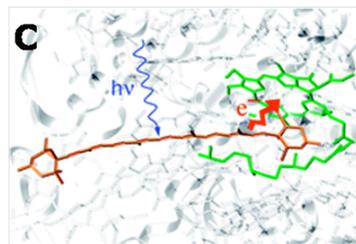
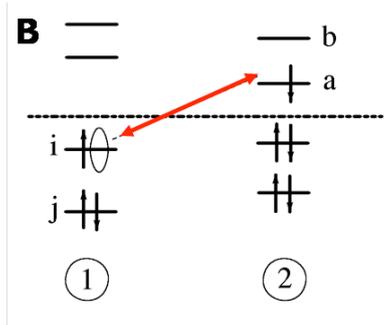
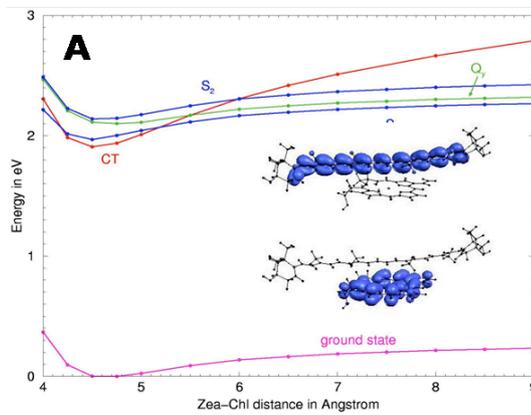


Abb. 2: Langreichweitige *charge-transfer* Zustände, bei denen ein Elektron aus einem besetzten Orbital eines Moleküls (1) in ein unbesetztes Orbital eines Moleküls (2) übertragen wird (B), stellen für die zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie eine besondere Schwierigkeit dar. Mit Hilfe einer Kombination von TDDFT und *Configuration Interaction Singles* können solche Zustände dennoch studiert werden. Vor allem zum Verständnis von photoinduziertem Elektronentransfer in Chlorophyll-Carotenoid-Komplexen der Lichtsammelkomplexe von grünen Pflanzen (A) und Purpurbakterien (C) konnte mit Hilfe solcher Rechnungen grundlegend zur Aufklärung der zu Grunde liegenden Mechanismen beigetragen werden. Abbildung mit freundlicher Genehmigung von Andreas Dreuw.

Einer der Höhepunkte der diesjährigen STC war ohne Frage die Präsentation von **David Wales** (Cambridge) mit dem Titel “*Energy landscapes: from clusters to biomolecules*”, der somit auch den ganzen Bereich des Hauptthemas umfasste. Das Auditorium war fasziniert von seiner Einführung in Methoden zur globalen Geometrieoptimierung (z.B. genetische oder *basin-hopping*-Algorithmen). Unter den verschiedenen untersuchten Systemen waren mathematisch konstruierte (Lennard-Jones-Cluster (Abb. 3) und Cluster aus dipolaren Sphären), aber auch realistischere Systeme, wie z.B. das C<sub>60</sub>-Fulleren oder Nanotropfen aus Wassermolekülen. Viele Filme veranschaulichten dabei, wie Cluster sich formen und zur Struktur des globalen Energieminimums finden.

Außerdem erläuterte am Mittwochvormittag **Karlheinz Schwarz** (Wien) den aktuellen Stand von WIEN2k und zeigte das beeindruckende Beispiel eines damit berechneten Borazin-Nanonetzes (*nanomesh*) auf einer Rh(111)-Oberfläche mit insgesamt 1100 Atomen in der Einheitszelle. Größere Halbleitersysteme präsentierte **Christoph Scheurer** (München) in seinem Vortrag über simulierte Photolumineszenzspektren von Exzitonzuständen in selbstorganisierten InGaAs/GaAs-Quantenpunktsystemen.

Die Exkursion führte die STC-Teilnehmer am Mittwochnachmittag in vier Bussen zur Saarschleife (Abb. 1) und zum Weltkulturerbe Völklinger Hütte. Das anschließende Konferenzdinner fand in der Aula der Universität statt. Hier dankte Karlheinz Schwarz Michael Springborg und seinem Team für eine perfekte und reibungslose Organisation und eine angenehm entspannte Konferenzatmosphäre.

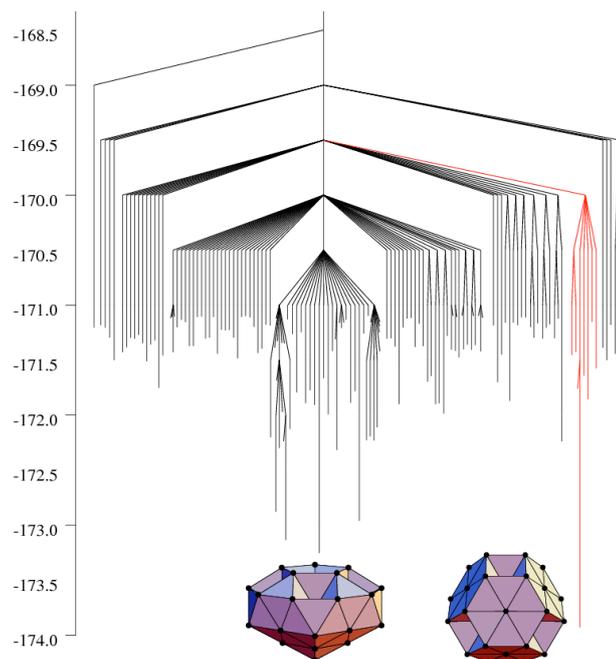


Abb. 3: Diskonnektivitätsgraph für einen mit einem Lennard-Jones-Potential beschriebenen Cluster mit 38 Atomen. Das globale Energieminimum ist ein abgeschnittenes Oktaeder, allerdings gibt es zahlreiche, auf unvollständigen Iksoaedermotiven beruhende Strukturen, die eine nur unwesentlich höhere Energie haben. Dieses System besitzt daher einen Tieftemperaturübergang zwischen zwei Festkörpermorphologien, der eine Herausforderung für Simulationen von thermodynamischen oder dynamischen Eigenschaften darstellt. Abbildung mit freundlicher Genehmigung von David Wales.

Am letzten Symposiumstag berichteten **Martin Kaupp** (Würzburg) über lokale Hybridfunktionale und **Dominik Kröner** (Potsdam) stellte molekulare laserkontrollierte Schalter und ihre quantenchemische Behandlung vor (Abb. 4). **Hermann Stoll** (Stuttgart) erläuterte sein Verfahren zur Berechnung langreichweitiger Korrelation mittels lokaler Inkremente.

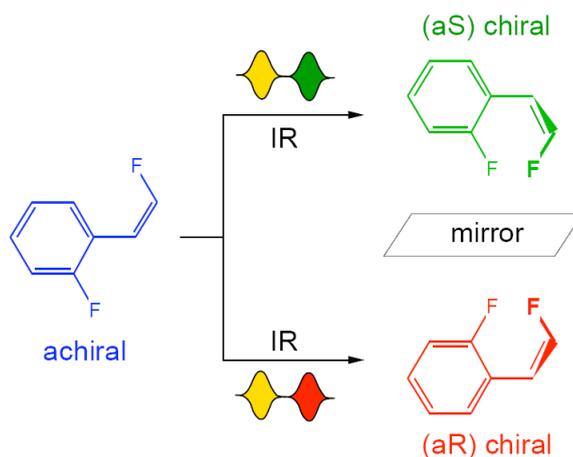


Abb. 4: Linear polarisierte Laserpulse erlauben ein stereoselektives Schalten zwischen achiralen und (aS)- oder (aR)-Atropisomeren. Abbildung mit freundlicher Genehmigung von Dominik Kröner.

Der größte Teil der wissenschaftlichen Beiträge wurde in den zwei Postersessions (Montag und Dienstag) an fast 170 Postern diskutiert. Neben vielen unterschiedlichen methodischen und theoretischen Arbeiten (etwa ein Drittel) gab es in diesem Jahr viele Beiträge, die sich mit

angeregten Zuständen verschiedener Systeme, mit  $f$ -Elektronensystemen (meist atomarer Komplexe), neuen Materialien (z.B. *metal-organic frameworks*, Wasserstoffspeicherung) oder Berechnung verschiedener spektroskopisch messbarer Eigenschaften beschäftigten. Weitere Themengebiete von angewandten theoretischen Arbeiten waren Halbleiter- und Metallcluster, Oberflächen sowie organische und biologische Systeme unterschiedlicher Größen. Auch dynamische und katalytische Prozesse wurden untersucht.

In der gut besuchten Abschlußsitzung wurden in diesem Jahr sechs vom Verlag Wiley-VCH gesponsorte Posterpreise vergeben. Die Posterpreiskommission unter Vorsitz des AGTC-Vorsitzenden **Wolfgang Domcke** (München) zeichnete die Beiträge von **Thomas Adler** (Stuttgart), **Joachim Friedrich** (Köln), **Oriol Vendrell** (Heidelberg, Abb. 5), **Hilke Bahmann** (Würzburg), **Konstantina Damianos** (München), **R. Kovacik** (Bochum) mit Bücherpreisen und Gutscheinen aus.

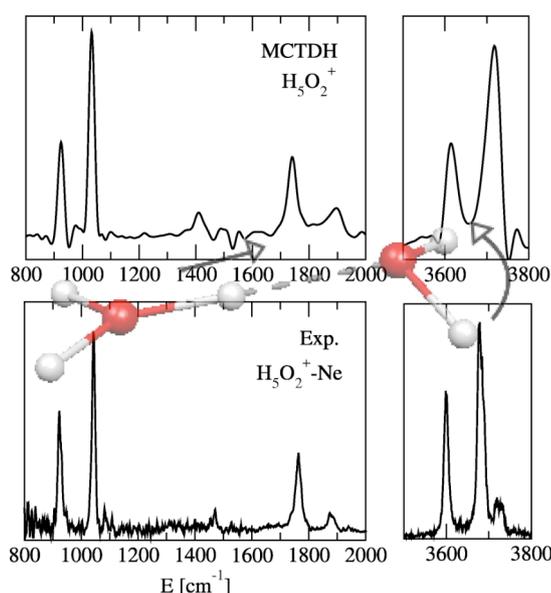


Abb. 5: Volle quantendynamische Simulation (15D) des Infrarot-Absorptionsspektrums des Zundelkations ( $\text{H}_3\text{O}_2^+$ ) mittels der MCTDH-Methode (*multi-configuration time-dependent Hartree method*). Das bisher unverstandene Dublett bei  $1000\text{ cm}^{-1}$  konnte so auf eine Fermi-Resonanz zwischen der Protonentransfer-Mode und einer Kombination aus Wasser-Wasser-Streck- bzw. Biegeschwingung zurückgeführt werden. Abbildung mit freundlicher Genehmigung von Oriol Vendrell.

Zum Abschluß wurden erste Pläne für die STC 2008 vorgestellt, die von **Anne-Marie Kelterer** und **Michaela Flock** (TU Graz) ausgerichtet und vom 23.-27.09.2008 in Ramsau am Dachstein stattfinden wird. Ab Februar 2008 ist die STC 2008 online unter [www.ptc.tugraz.at/stc2008](http://www.ptc.tugraz.at/stc2008) (E-mail: [stc2008@ptc.tugraz.at](mailto:stc2008@ptc.tugraz.at)). Bilder der STC 2007 stehen schon jetzt unter [www.stc2007.uni-saarland.de](http://www.stc2007.uni-saarland.de) im Netz. Michael Springborg schloss die STC 2007 mit einem Dank an sein Team und der Vorfreude auf die STC 2008 in Österreich.

*Jan-Ole Joswig*  
(Physikalische Chemie, TU Dresden)

## Arbeitsgruppen stellen sich vor

### Theoretische Chemie an der Friedrich-Schiller-Universität Jena

Die Geschichte der Theoretischen Chemie an der Friedrich-Schiller Universität Jena beginnt Mitte der 1960er Jahre mit der Etablierung der Quantenchemie als selbständigem Teilgebiet der Physikalischen Chemie. 1971 wurde Hans Müller zum ordentlichen Professor für Theoretische Chemie und Leiter des Wissenschaftsbereiches Quantenchemie berufen. Nach seiner Verabschiedung in den Ruhestand im Jahre 1998 dauerte es bis zum April 2005, bis mit Prof. Markus Reiher die Professur als W2-Stelle für Physikalische und Theoretische Chemie wiederbesetzt wurde. Dessen Aufenthalt an der Uni Jena war aber nur von kurzer Dauer. Nach lediglich zehn Monaten nahm er einen Ruf als ordentlicher Professor an die ETH Zürich an. Bis zum Sommersemester 2007, in welchem Frau PD Dr. Leticia González, vormals Freie Universität Berlin, die Professur vertrat, war die Stelle wieder vakant. Seit September 2007 ist die W2-Stelle mit Frau Prof. Dr. Leticia González neu besetzt.

Die Theoretische Chemie ist Teil des Instituts für Physikalische Chemie. Die Arbeitsgruppe besteht gegenwärtig (Oktober 2007) fast nur aus der Berliner Truppe, die mit nach Jena umgezogen ist: zwei Postdocs, Dr. Ines Corral (AvH Stipendiatin) und Dr. Jesús González-Vázquez, sowie vier Doktoranden. Hinzu kommen aktuell ein Gastdoktorand aus Brasilien, ein Gastwissenschaftler aus Polen (Dr. Marta Łabuda) und ein wissenschaftlicher Mitarbeiter, Dr. Dirk Bender, der unter anderen für die Computersysteme zuständig ist. Im Wintersemester freuen wir uns auf zwei hinzukommende Diplomanden. Die Finanzierung der Mitarbeiter erfolgt überwiegend aus Drittmitteln, teilweise von der DFG, vom DAAD, der AvH-Stiftung und ausländischen Stipendien.

Die Arbeit fokussiert sich im Wesentlichen auf zwei Schwerpunkte: a) die Anwendung der **Quantenchemie auf Photophysik und Photochemie** sowie b) **Reaktionsdynamik und Kontrolle**. Im ersten Fall werden Standardprogramme der Quantenchemie, wie zum Beispiel GAUSSIAN, MOLCAS, TURBOMOLE oder MOLPRO benutzt, um den elektronischen Grund- bzw. weit häufiger den angeregten Zustand molekularer Systeme zu charakterisieren. Hierbei liegt das Hauptinteresse bei der Berechnung vertikaler und adiabatischer Anregungsenergien, von Dipolmomenten und von photochemischen Reaktionsmechanismen. Eine der großen Herausforderungen ist das Auffinden von konischen Schnittflächen und das Bestimmen der Relaxationspfade des angeregten Zustandes. Sind die Kanäle bekannt, die durch Bestrahlung aktiviert werden, werden die Potenzialflächen entlang spezifischer Reaktionskoordinaten entwickelt, die Dipol- und nichtadiabatische Kopplungen erzeugt und letztendlich das Verhalten der nuklearen Wellenpakete studiert. Als Ergebnis dieser Simulationen lässt sich die Dynamik der Reaktion in Echtzeit nachvollziehen und man erfährt, welche Reaktionskanäle aus der Vorhersage für den stationären Zustand effizient sind und auf welcher Zeitskala dies geschieht.

Der Beitrag zur Chemie des angeregten Zustandes beinhaltet u. a. die Berechnung von UV/VIS-Spektren organometallischer Komplexe (J. Phys. Chem. A. 111 (2007) 4737), Halomethanen (J. Phys. Chem. A 110 (2006) 10251), organischer Spezies (Chem. Phys. Lett. 446 (2007) 262) und von Systemen von biologischer Relevanz, z. B. DNA Basen (J. Photochem. Photobiol. A: Chem., 190 (2007) 301). In den meisten Fällen wird die Berechnung des angeregten Zustandes und der verwandten Eigenschaften mit Multikonfigurationstechniken wie CASSCF und CASPT2 durchgeführt. Kürzlich wurde ein Projekt begonnen, welches darauf angelegt ist, den Mechanismus der Entstehung von molekularem Singulett-Sauerstoff in Photosensibilisatoren zu verstehen. Diese besitzen einen breiten Anwendungsbereich einschließlich der photodynamischen Ansätze in der Krebstherapie. Beispiele für solche Photosensibilisatoren sind Endoperoxide,

welche den molekularen Sauerstoff direkt durch Photoanregung abspalten können, aber auch Porphyrinderivate, bei denen  $^1\text{O}_2$  durch intersystem crossing Prozesse erzeugt wird.

Viele Projekte laufen dabei in Zusammenarbeit mit experimentell tätigen Partnern, sowohl in Berlin als auch weltweit, welche unterschiedliche spektroskopische Techniken (meist auf Basis der Femtosekundenspektroskopie) einsetzen, um photochemische Reaktionen zu verfolgen. An der FSU Jena gibt es gegenwärtig eine Zusammenarbeit mit dem Institut für Anorganische Chemie (AG Prof. Weigand) zur Aufklärung des durch Licht induzierten Bindungs-Aktivierungs-Mechanismus in Pt-Komplexen.

Über das Untersuchen von Reaktionsmechanismen in Echtzeit hinaus besteht großes Interesse am Einsatz maßgeschneiderter Laserpulse zur Kontrolle von Reaktionen. Die Gruppe hat wesentliche Beiträge auf dem Feld der Laserkontrolle von chemischen Reaktionen in der Gasphase geleistet. Anwendungen sind die Modellierung selektiver Bindungsbrüche in verschiedenen Systemen (s. z. B. Science 299 (2003) 536) und von Isomerisationsprozessen (J. Phys. Chem. A 108 (2004)). Es wurde ein beträchtlicher Aufwand betrieben, um ein Racemat mittels Laserpulse in seine Enantiomere aufzulösen (z.B. Phys. Chem. Chem. Phys. 7 (2005) 4096) und Funktionalität auf molekularer Ebene zu induzieren (Chem. Phys. Lett., 386 (2004) 248).

Die Arbeitsgruppe verfügt über einen lokalen 20-Knoten Cluster; jeder Knoten besteht aus 2 Xeon CPU mit 3GHz und 1GB RAM pro CPU. In naher Zukunft wird dieser Cluster durch mehrere SMP-Maschinen mit großem Hauptspeicher ergänzt werden, welche vor allem im Bereich der Quantenchemie, aber auch bei neu zu entwickelnden Methoden der Quantendynamik zum Einsatz kommen werden.

Der FSU Jena bietet Chemiestudenten einen modularisierten Diplomstudiengang mit sechssemestrigem Basisstudium und viersemestrigem Schwerpunktstudium. Die Theoretische Chemie ist - außer mit der Einführung in die Quantenmechanik im Rahmen der Pflichtveranstaltung Physikalische Chemie III - mit einem Wahlpflichtfachmodul (12CP) - bestehend aus Vorlesung, Übungen und 7SWS Praktikum - am Basisstudium beteiligt. Zusätzlich angeboten wird ein fakultativer MO Kurs; dessen Inhalt ein praxisorientierter Überblick über Methoden der Computerchemie anhand von Beispielen mit gängigen Programmen ist. Im Schwerpunktstudium kann Theoretische Chemie als eines von zwei obligatorischen zweisemestrigem Vertiefungsfächern (18,5 CP) gewählt werden. Auch dieses besteht aus Vorlesung und (Computer-)Praktikum.

Weitere Informationen zur Theoretischen Chemie in Jena sind unter <http://www.theochem.uni-jena.de/> zu finden.

Leticia González, Jena (leticia.gonzalez@uni-jena.de)

## Jahrestagung der International Academy of Quantum Molecular Science in Menton



### **ACADÉMIE INTERNATIONALE DES SCIENCES MOLÉCULAIRES QUANTIQUES INTERNATIONAL ACADEMY OF QUANTUM MOLECULAR SCIENCE**

---

Die International Academy of Quantum Molecular Science (<http://www.iaqms.org>) hat bei ihrer Jahrestagung vom 5. bis 7. Juli 2007 in Menton (Frankreich) als neue Mitglieder Prof. Dr. Walter Thiel (Max-Planck-Institut für Kohlenforschung Mülheim) und Prof. Dr. Tom Ziegler (Department of Chemistry, University of Calgary, Canada) gewählt. Mit der Medaille der Academy (die außerdem mit einem Preisgeld in Höhe von € 3000 verknüpft ist) wurde Dr. Frederick R. Manby (School of Chemistry, University of Bristol) ausgezeichnet. Die Academy veranstaltet den nächsten International Congress of Quantum Chemistry vom 22. – 27. Juni 2009 in Helsinki, Finnland. Einzelheiten findet man unter [www.helsinki.fi/kemia/icqc](http://www.helsinki.fi/kemia/icqc).

Sigrid Peyerimhoff, President IAQMS

### Klatsch und Tratsch

- **PD Dr. Michael Bühl**, Gruppenleiter am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr, hat den Ruf auf den neu geschaffenen Chair of Computational Chemistry an die University of St. Andrews, Schottland, angenommen.
- **PD Dr. Filipp Furche**, Theoretische Chemie, Universität Karlsruhe (TH), hat den Ruf auf eine Professur für Theoretische Chemie an der Universität von Kalifornien in Irvine angenommen.
- **Frau PD Dr. Leticia González**, Theoretische Chemie, FU Berlin, wurde zum WS 2007/08 zur W2 Professorin für Theoretische Chemie an der Universität Jena ernannt.
- **PD Dr. Oliver Kühn**, Theoretische Chemie, FU Berlin, erhielt einen Ruf auf eine Professur für Theoretische Physik an der Universität Rostock.
- **Frau PD Dr. Beate Paulus**, Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden, hat den Ruf auf eine W2 a.Z. Professur für Theoretische Chemie an der Freien Universität Berlin zum WS 07/08 angenommen.
- **Dr. Daniel Sebastiani** hat sich an der Universität Mainz in Physikalischer Chemie habilitiert.
- **Prof. Dr. Walter Thiel**, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr, wurde zum Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina und zum Mitglied der International Academy of Quantum Molecular Science gewählt (siehe oben).

## Tagungsvorschau 2008 / 2009 Stand: 23. 10. 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, Sekr. C 7. E-Mail: [Helfrich\\_TUB@t-online.de](mailto:Helfrich_TUB@t-online.de)  
URL: <http://www2.tu-berlin.de/~insi/theofach/helfrichhome.htm>

Im WWW finden Sie die aktuelle Fassung unter [www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html](http://www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html)

### 2008

- 19. – 22. 2. 2008, Mariapfarr, Salzburg / Österreich  
Arbeitstagung für Theoretische Chemie  
[http://www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr/home\\_d.html](http://www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr/home_d.html)
- 25. – 29. 2. 2008, Berlin  
DPG Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (früher AKF)
- 10. – 14. 3. 2008, Darmstadt  
DPG Frühjahrstagung des AMOP und des Fachverbandes Hadrone und Kerne
- 03. – 07. 3. 2008, Freiburg  
DPG Frühjahrstagung, Gravitation und Relativitätstheorie, Teilchenphysik, Theoretische und Mathematische Grundlagen der Physik, Arbeitskreis Philosophie der Physik
- 01. – 03. 5. 2008, Saarbrücken  
Bunsentagung 2008, "Analyse, Manipulation und Simulation auf der Nanometerskala"  
<http://www.bunsen.de/>
- 25. – 29. 8. 2008, Heidelberg  
XIX International Symposium on the Jahn-Teller Effect: Vibronic Interactions and Orbital Physics in Molecules and in the Condensed Phase  
(University Campus, Chemistry Lecture Hall (INF 252))  
Horst Köppel: [Horst.Koepfel@pci.uni-Heidelberg.de](mailto:Horst.Koepfel@pci.uni-Heidelberg.de)
- 14. – 19. 9. 2008, Sidney / Australien  
WATOC 2008  
<http://www.watoc2008.com>
- 16. – 20. 9. 2008, Turin / Italien  
2nd European Chemistry Congress  
[www.euchems-torino2008.it](http://www.euchems-torino2008.it)
- 23. – 29. 9. 2008, Ramsau am Dachstein / Österreich  
44. Symposium für Theoretische Chemie  
[www.ptc.tugraz.at/stc2008](http://www.ptc.tugraz.at/stc2008)  
Anne-Marie Kelterer: [kelterer@ptc.tugraz.at](mailto:kelterer@ptc.tugraz.at)
- 02. – 06. 10. 2008, Elba / Italien  
XIV European Seminar on Computational Methods in Quantum Chemistry  
[http://h2.ipcf.cnr.it/rizzo/XIV\\_ESCMQC.html](http://h2.ipcf.cnr.it/rizzo/XIV_ESCMQC.html)

## 2009

### DPG-Tagungen 2009

[www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung\\_2009.html](http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2009.html)

- 02. – 06. 3. 2009, Hamburg  
73. Jahrestagung der DPG und DPG Frühjahrstagung des AMOP
- 09. – 13. 3. 2009, München  
DPG Frühjahrstagung, Extraterrestrische Physik, Gravitation und Relativitätstheorie, Teilchenphysik, Theoretische und Mathematische Grundlagen der Physik, Arbeitskreis Philosophie der Physik
- 16. - 20. 3. 2009, Bochum  
DPG Frühjahrstagung, Hadronen und Kerne
- 23. – 27. 3. 2009, Dresden  
DPG Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik (AKF; künftig SKM Sektion Kondensierte Materie)
- 30. 3. – 03. 4. 2009, Greifswald  
DPG Frühjahrstagung, Plasmaphysik
- 22. – 27. 6. 2009, Helsinki, Finnland  
International Congress of Quantum Chemistry  
[www.helsinki.fi/kemia/icqc](http://www.helsinki.fi/kemia/icqc)
- 21. – 23. 5. 2009, Köln  
Bunsentagung 2009, „Physical Chemistry of Solids: The Science behind Materials Engineering“  
[www.bunsen.de/Veranstaltungen/Bunsentagungen/Bunsentagung+2009.htm](http://www.bunsen.de/Veranstaltungen/Bunsentagungen/Bunsentagung+2009.htm)
- 9. – 12. 9. 2009, Neuss  
45. Symposium für Theoretische Chemie  
Christel Marian: [Christel.Marian@uni-duesseldorf.de](mailto:Christel.Marian@uni-duesseldorf.de)

### 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>

## Einladung zum Review-Artikel in Physics Reports

Ich werbe dafür, dass Theoretische Chemiker ihre Arbeiten auch in einer mehr Physiker-orientierten Umgebung bekannt machen. Zur Veröffentlichung eines Review-Artikels über ein bestimmtes Gebiet, z.B. auch für eine Habilitationsschrift, wäre Physics Reports eine ideale Plattform.

Zitat: „Physics Reports keeps the active physicist up-to-date on developments in a wide range of topics by publishing timely reviews which are more extensive than just literature surveys but normally less than a full monograph. Each report deals with *one specific subject*. These reviews are specialist in nature but contain enough introductory material to make the main points intelligible to the non-specialist. The reader will not only be able to distinguish important developments and trends but will also find a sufficient number of references to the original literature” (<http://www.elsevier.com/locate/physrep>).

Im Editorial Board bin ich für die Sektion Molecular Physics zuständig. Bisherige Hefte im Bereich Molekülphysik sind z.B.:

- Polymers as Solids: A Quantum Mechanical Treatment (J. J. Ladik)
- Resonant Interactions of Diatomic Molecules with Intense Laser Fields: Time-independent Multi-Channel Green Function Theory and Application to Experiment (A. I. Pegarkov).
- Finite Nuclear Charge Density Distributions in Electronic Structure Calculations for Atoms and Molecules (D. Andrae)
- The Multiconfiguration Time-dependent Hartree (MCTDH) Method: A highly efficient Algorithm for Propagating Wavepackets (M. H. Beck, A. Jäckle, G. A. Worth, H.-D. Meyer).
- Ultrafast Excitation Energy Transfer Dynamics in Photosynthetic Pigment-Protein Complexes (T. Renger, V. May, O. Kühn)
- Theory of Light Hydrogen-like Atoms (M. I. Eides, H. Grotch, V. A. Shelyuto).
- Study of Diatomic van der Waals Complexes in Supersonic Beams (J. Koperski)
- Non-Hermitian Electronic Theory and Applications to Clusters (R. Santra, L. Cederbaum).
- Electron-Molecule Scattering Cross-Sections: Experimental Techniques and Data for Diatomic Molecules (M. Brunger, S. Buckman)
- Multidimensional Quantum Dynamics and infrared Spectroscopy of Hydrogen Bonds (K. Giese, M. Petrovic, H. Naundorf, O. Kühn)
- The Method of Increments: A Wavefunction-based ab initio Correlation Method for Solids (B. Paulus)
- Theory of Complicated Liquids; Investigation of Liquids, Solvents and Solvent Effects with Modern Theoretical Methods (B. Kirchner)
- Spin-Dependent Tunneling and Coulomb Blockade in Ferromagnetic Nanoparticles (K. Yakushiji, S. Mitani, F. Ernult, K. Takanashi, H. Fujimori).

Der Umfang der Hefte liegt zwischen 40 und 150 gedruckten Seiten. Wer Lust hat, oder darüber nachdenkt, einen entsprechenden Artikel zu schreiben, möge sich wegen des Procederes bitte an mich wenden. Die Manuskripte werden alle referiert; die Zeit, bis der Artikel erscheint, ist kurz. Der Impact Factor von Phys. Reports ist derzeit 10,43. Die Autoren erhalten 25 Frei-Exemplare und lebenslang 30% Autorenrabatt auf alle Elsevier-Bücher, inklusive solchen von Academic Press.

Sigrid Peyerimhoff  
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie  
Uni Bonn, Wegelerstr. 12, 53115 Bonn  
E-Mail: [unt000@uni-bonn.de](mailto:unt000@uni-bonn.de)

## **Ausschreibung: Sofja Kovalevskaja-Preis der Alexander von Humboldt-Stiftung**

Frau Prof. Dr. S. D. Peyerimhoff (U Bonn) möchte mittels unten stehendes Zitats aus einem Brief vom 13. 6. 2007 von Herrn Dr. Georg Schütte, Generalsekretär der Alexander von Humboldt-Stiftung, auf die erneute Ausschreibung des Sofja Kovalevskaja-Preises aufmerksam machen:

„Exzellente Universitäten zeichnen sich in der internationalen Wahrnehmung insbesondere auch dadurch aus, dass hervorragende ausländische Forscherinnen und Forscher mit ihren Kolleginnen und Kollegen an diesen Universitäten kooperieren. Mit dem Sofja Kovalevskaja-Preis, einem der zurzeit höchst dotierten Wissenschaftspreise in Deutschland, bietet die Alexander von Humboldt-Stiftung Spitzennachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftlern aller Disziplinen aus dem Ausland, die an deutschen Forschungseinrichtungen eigene Nachwuchsgruppen etablieren wollen, eine besondere Chance. Wir freuen uns daher, dass wir den Preis jetzt wieder ausschreiben können (Bewerbungsfrist: 4. Januar 2008).

Der Preis ermöglicht wissenschaftliche Arbeit zu einzigartigen Konditionen: Fünf Jahre lang können junge Forscher ohne administrative Zwänge an einem Institut ihrer Wahl arbeiten und eigene Nachwuchsforscherguppen aufbauen. Der Kovalevskaja-Preis ist ein Vertrauensvorschuss für Spitzentalente, die in einer sehr frühen Phase in ihrer Karriere Risikokapital für innovative Projekte erhalten. Belohnt werden herausragendes Talent, überdurchschnittliche Initiative und kreative Forschungsansätze. Das Preisgeld von jeweils bis zu 1,65 Millionen Euro stammt aus Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung. Das Programm richtet sich an herausragend qualifizierte Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler aller Disziplinen aus dem Ausland, die ihre Promotion vor nicht mehr als sechs Jahren abgeschlossen haben. Dies umfasst auch deutsche Wissenschaftler im Ausland.

Wir würden uns freuen, wenn Sie diese Ausschreibung in Ihrem Hause bekannt machen könnten, damit die Forscherinnen und Forscher, die mit Ihnen in Kontakt stehen, geeignete Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler auf den Preis aufmerksam machen können. Details über das Bewerbungsverfahren fuer den Sofja Kovalevskaja-Preis finden Sie auf unserer Website unter: <http://www.humboldt-foundation.de/de/programme/preise/kova.htm>. Gerne stehen Ihnen in der Humboldt-Stiftung Herr Dr. Thomas Hesse (0228-833-119, [thomas.hesse@avh.de](mailto:thomas.hesse@avh.de)) sowie Frau Regina Basse (0228-833-170, [regina.basse@avh.de](mailto:regina.basse@avh.de)) für Fragen zur Verfügung.“

## **Übersicht über Begabtenförderwerke**

### *Graduiertenschulen*

Im vergangenen Jahr wurden im Rahmen der Exzellenzinitiative von Bund und Ländern die ersten 18 Graduiertenschulen für den wissenschaftlichen Nachwuchs eingerichtet. In einer zweiten Förderrunde kamen in diesem Jahr weitere 21 Schulen hinzu, die jährlich mit jeweils einer Million Euro gefördert werden (<http://www.bmbf.de/de/1321.php>). Es existieren auch zahlreiche private Stiftungen und Institutionen, die ebenfalls Promotionsstipendien oder Zuschüsse für besondere Aufwendungen vergeben. Eine Liste der geförderten Kollegs (nicht nur im Rahmen der Exzellenzinitiative) der und weitere Informationen finden Sie unter <http://www.dfg.de>.

### *Landesgraduiertenstipendien*

Die einzelnen Hochschulen vergeben Landesgraduiertenstipendien, die alle ähnliche Voraussetzungen beinhalten. Die Stipendiaten müssen auch hier ein sehr gutes Examen abgelegt haben und die Dissertation muss einen wichtigen Beitrag für die Wissenschaft erwarten lassen. Die Förderungsdauer beträgt in der Regel zwei Jahre und kann in einigen Bundesländern um ein weiteres Jahr verlängert werden. Zur Antragstellung wendet man sich an die Hochschule, an der

man promoviert. Jede Hochschule hat eine bestimmte Anzahl von Stipendien zur Verfügung und entscheidet über die Vergabe. Landesgraduiertenstipendien sind unabhängig von Studienfach und Studienabschluss.

#### *Deutscher Akademischer Austauschdienst (DAAD)*

Der Deutsche Akademische Austauschdienst ist eine gemeinsame Einrichtung der deutschen Hochschulen und wohl die bekannteste Förderstelle für ausländische Hochschulabsolventen, die zu einem Forschungsaufenthalt nach Deutschland kommen. Aber auch Deutsche, die im Ausland Forschungsvorhaben durchführen wollen, die im Zusammenhang mit ihrer Dissertation stehen, können beim DAAD Stipendien beantragen. Druckkostenzuschüsse für Veröffentlichungen der Stipendiaten werden vom DAAD ebenfalls gezahlt. Weitere Informationen finden Sie unter <http://www.daad.de>.

#### *Begabtenförderungswerke*

In Deutschland sind elf Begabtenförderungswerke bundesweit tätig. Mit Hilfe staatlicher Zuschüsse werden Stipendien an Studierende und Promovierende vergeben. Im Einzelnen handelt es sich um die folgenden Stiftungen:

- Studienstiftung des Deutschen Volkes (<http://www.studienstiftung.de>)
- Cusanuswerk - Bischöfliche Studienförderung (<http://www.cusanuswerk.de>)
- Evangelisches Studienwerk Villigst (<http://www.evstudienwerk.de>)
- Hans-Böckler-Stiftung (<http://www.boeckler.de>)
- Stiftung der Deutschen Wirtschaft - Studienförderwerk Klaus Murmann (<http://www.sdw.org>)
- Konrad-Adenauer-Stiftung (<http://www.kas.de>)
- Heinrich-Böll-Stiftung (<http://www.boell.de>)
- Friedrich-Ebert-Stiftung (<http://www.fes.de>)
- Rosa-Luxemburg-Stiftung (<http://www.rosalux.de>)
- Friedrich-Naumann-Stiftung (<http://www.fnst.de>)
- Hanns-Seidel-Stiftung (<http://www.hss.de>)

Die Stiftungen haben unterschiedliche Voraussetzungen für die Gewährung von Stipendien. Ihnen ist jedoch gemeinsam, dass sie neben den fachlichen und persönlichen Aspekten Wert auf das Engagement der Stipendiaten in Staat und Gesellschaft legen. Die Förderungswerke stehen Parteien, den Kirchen oder anderen gesellschaftlich relevanten Gruppen weltanschaulich nahe und erwarten von ihren Stipendiaten, dass sie an der Arbeit der Stiftung interessiert sind und aktiv daran teilnehmen. An den einzelnen Hochschulen werden die Stiftungen durch Vertrauensdozenten vertreten. Die Begabtenförderungswerke vergeben, was die Zahl, die Laufzeit und die Stipendienhöhe anbelangt, die meisten Promotionsstipendien in Deutschland. Kurzbeschreibungen sowie Bewerbungsvoraussetzungen und -verfahren der einzelnen Werke finden Sie unter <http://www.begabtenfoerderungswerke.de>.

#### *Private Stiftungen*

Neben den staatlichen Stiftungen existiert auch eine Vielzahl privater Stiftungen, die Stipendien vergeben und Zuschüsse zum Druck von Doktorarbeiten zahlen. Wichtig für die Beantragung eines solchen Stipendiums ist das Thema der Dissertation. Die privaten Stiftungen fördern hauptsächlich Themen, die sich mit dem Schwerpunkt der Stiftung befassen. Neben der thematischen Orientierung können aber auch andere Aspekte wie der Hochschulort oder die Hochschule, der Geburts- oder Wohnort des Bewerbers o.ä. eine Förderung begründen. Einen guten Überblick über die forschungsfördernden Institutionen finden Sie auf der Seite <http://www.stiftungsindex.de>.