

Info Theoretische Chemie

April 2008



Seite 3: Beitrag zum Competence Center for Computational Chemistry (C⁴) in Zürich.

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.

Karlsruhe, im April 2008
W. Klopper

Inhalt

Arbeitsgruppen stellen sich vor (C ⁴ , Zürich)	Seite 3
Klatsch und Tratsch	Seite 9
DFG-Fachkollegien der Chemie	Seite 10
Kopernikus-Preis	Seite 11
Tagungsvorschau 2008/2009	Seite 13
Publikationen: Springer Lecture Notes in Physics	Seite 16
Stellenanzeigen	Seite 18

- Juniorprofessor (W1) für Theoretische Chemie, Kiel
- Junior Research Group Leader “Theoretical Bioinorganic Chemistry”, HU Berlin
- Postdoc positions, HU Berlin
- Professur (W3) für „Theoretische Chemische Biologie“, Karlsruhe
- Juniorprofessorship (W1) on Applied Quantum Mechanics, Stuttgart
- Doktoranden- und Postdoktorandenstellen, Stuttgart
- Post-Doctoral Researcher in Computational Chemistry, ETH Zürich
- Postdoktorandenstelle, TU Chemnitz

Arbeitsgruppen stellen sich vor

Das Competence Center for Computational Chemistry (C4) der ETH Zürich, des IBM Zürich Forschungslabors, und der Universität Zürich

H.P. Lüthi, Leiter C4

Ausgangslage und Entstehungsgeschichte

Das C4 Projekt wurde 1991 von der ETH Zürich, IBM Research und IBM Schweiz ins Leben gerufen. Das Projekt war Teil einer strategischen Initiative zur Förderung des wissenschaftlichen Rechnens (Computational Science), speziell der computergestützten Chemie (Computational Chemistry). Obgleich die ETH Zürich über eines der angesehensten Chemie-Departemente verfügte, war die computergestützte Chemie zu jener Zeit stark untervertreten. Die Schulleitung der ETH Zürich und die Direktionen des IBM Forschungslabors in Rüschlikon sowie von IBM Schweiz fanden sich zu einer Initiative, welche der Computational Chemistry *made in Zürich* zu europäischem Format verhelfen sollte. Das IBM Forschungslabor verfügte zu jener Zeit über ein kleines, aber sehr aktives Team, bestehend, unter anderem, aus Wanda Andreoni, Peter Blöchl, Michiel Sprik und Michele Parrinello. Ziel der zwischen der ETH Zürich und der IBM eingegangenen Initiative war: *to advance the frontiers in Computational Chemistry by carrying out quality research in this field.*

Zur Zielerreichung standen eine Reihe von Mitteln zur Verfügung, nämlich eine beachtliche Rechnerressource (IBM 3090-VF600 Vektorrechner), mehrere Fellowships für gemeinsame Forschungsprojekte zwischen ETH und dem IBM Forschungslabor, sowie ein gemeinsamer wissenschaftlicher Seminarzyklus, das C4 Seminar. Das C4 Projekt war betrieben von seinem Leitern, Prof. Martin Quack (1991-1994) und Prof. Wilfred F. van Gunsteren (ab 1994), den „Mitgliedern“ (Forscher der ETH und des IBM Forschungslabors), sowie den so genannten „Gästen“ (Gruppen, welche nicht schwerpunktmäßig Computational Chemistry betreiben). Im Verlaufe der Zeit entstand eine enge Zusammenarbeit mit der Universität Zürich (Gruppe Walter Thiel).

Das C4 Projekt hat tatsächlich entscheidend mitgeholfen, die Computational Chemistry als Disziplin an der ETH zu etablieren. Durch die C4-Aktivitäten sind viele Zusammenarbeiten zustande gekommen, und einige der Mitarbeiter haben dank dieser Kontakte attraktive Anstellungen gefunden. Die Anzahl der wissenschaftlichen Arbeiten stieg, gemessen an Publikationen in renommierten Fachzeitschriften, von einer Handvoll auf mehrere Dutzend, und Zürich wurde auf der Landkarte der Computational Chemistry mehr und mehr zu einem „hot-spot“.

Ab Mitte der Neunzigerjahre hatte sich C4 als ein inter-institutionelles Netzwerk etabliert, und war, zumindest in wissenschaftlicher Hinsicht, selbsttragend. Mit den Berufungen von van Gunsteren und Thiel wurden zwei neue Kerngruppen geschaffen, welche der

computergestützten Chemie in der Forschung wie auch in der Lehre starken Auftrieb verliehen.

C4 verfügte zwar immer noch über eine eigene Hardware-Ressource, doch diese wurde zusehends weniger bedeutend. Der wichtigste Aspekt von C4 lag in seiner Eigenschaft als Netzwerk von Wissenschaftlern, welche durch das Seminarprogramm regelmäßig in Kontakt standen. Das C4-Seminarprogramm erfreute sich stets eines guten Besuches, obgleich auf dem Platz Zürich ein sehr starkes Konkurrenzangebot besteht.

Nach zehnjähriger Amtszeit trat Prof. W.F. van Gunsteren Ende 2004 die Projektleitung an PD Dr. Hans P. Lüthi ab. Das C4 Projekt hat viele seiner ursprünglichen Ziele erreicht, und es wurde daher notwendig, diese zu überdenken.



Titelseite des C4 Jahresberichts 2006/2007 mit über einhundert Projektbeschreibungen in Form von Abstracts (Zeitfenster Mitte 2005 bis Mitte 2007) und den dazugehörigen Veröffentlichungen.

Neue Ziele

Die Entwicklung neuer Methoden, leistungsfähiger Anwendungsprogramme und innovativer Anwendungen zur Erschließung neuer Dimensionen (*advancing the frontiers*) in Computermodellierung und Simulation in der Chemie stellt weiterhin das Leitmotiv des C4-Projekts.

Neu soll das C4 Projekt aber den Schritt von einer Plattform für Computational Chemistry zu einer Plattform für *Computational Molecular Science* machen, indem das großzügig vorhandene Potential zur disziplinenübergreifenden Zusammenarbeit in den Molekülwissenschaften und in Computing verstärkt genutzt wird.

Gleichzeitig hat das C4 Programm den know-how und Wissenstransfer innerhalb der Gemeinschaft mittels Tutorien und Workshops zu fördern begonnen. Währenddem sich die Tutorien (typischerweise 2 bis 3 Tage) eher technischen Aspekten wie Visualisierung und Datenverarbeitung widmen, schneiden die Workshops fortgeschrittene Themen an, dauern eine Woche, und erlauben den Teilnehmern Kreditpunkte für ihr Doktoratsstudium zu erlangen.

Ressourcenbeschaffung für das „*commodity computing*“ (Grundversorgung) ist Sache der Mitglieder und Gäste. C4 verfügt immer noch über einen Cluster (32 zum Teil fette 4 CPU-Knoten), doch ist dieser eher für prototypische Anwendungen (viel Memory und Speicher) oder als Reserve bei Engpässen gedacht.

C4 Workshops (seit 2005)

Herbst 2005	Ab initio Molecular Dynamics Jürg Hutter und Marcella Iannuzzi (Uni Zürich)
Herbst 2006	Electron Correlation Methods Wim Klopper und David Tew (TH Karlsruhe)
Herbst 2007	Free Energy Calculation Jürg Hutter, Philippe Hünenberger und Wilfred F. van Gunsteren

Tabelle: Die seit 2005 veranstalteten Tutorien mit wissenschaftlichem Inhalt. An den Tutorien nahmen 25 bis 30 Doktoranden, post-docs und Forscher teil.

Ein weiteres Ziel von C4 ist die Wiedereinführung eines Stipendienprogramms, ähnlich wie es zu Beginn des Projekts in den frühen Neunzigerjahren bestanden hat. Es soll Mitgliedern von C4 möglich gemacht werden, Stipendiengesuche für hervorragende Mitarbeiter (post-docs) für Projekte beantragen zu können, welche aus andern Quellen schwierig zu finanzieren wären, oder welche eine bestehende Finanzierung ergänzen. Die ETH Schulleitung hat Anfang 2008 die dazu notwendigen administrativen Voraussetzungen getroffen.

Wissenschaftliche Agenden, Mitglieder und Partner

Zeit seines Bestehens veröffentlicht C4 einen Jahresbericht, welcher insbesondere auf die wissenschaftlichen Leistungen eingeht. Im letzten Jahresbericht (2006/2007) werden knapp über hundert Projektberichte (Abstract Format) publiziert. Gleichzeitig haben die C4 Mitglieder in den letzten beiden Jahren rund 180 wissenschaftliche Arbeiten in *refereed journals* publiziert.

Institution	Arbeitsgruppen
ETH Zürich	W.F. van Gunsteren, Ph. Hünenberger, H.P. Lüthi, M. Parrinello, M. Reiher und M. Quack (physikal. Chemie), P. Chen (organische Chemie), R. Nesper, H.-J. Grützmacher (anorg. Chemie), A. Baiker (Chem. Ing.)
IBM Research Universität Zürich	A. Gusev, V. Vogel (Materialwissenschaften), M. Troyer, K. Wüthrich (Physik) W. Andreoni, A. Curioni K. Baldrige (organische Chemie), J. Hutter (physikal. Chemie)

Die Tabelle zeigt die Forschungsgruppen, welche zurzeit aktiv zu C4 beitragen.

C4 hat in den vergangenen Jahren begonnen Partnerschaften mit der Industrie und anderen Forschungslaboratorien aufzubauen. Beispiele sind die Novartis Group for Drug Design und das Kenneth S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry der Universität von Kalifornien in Berkeley. Die beiden Institutionen waren Gast beim jährlichen C4 Workshop (siehe später).

The Power of a Network

Wenngleich bescheiden ausgestattet (0.33 Vollzeitstellen, ein jährliches Budget von rund 50 kEUR), so ist C4 an der ETH Zürich, der Universität Zürich und dem IBM Forschungslabor trotzdem zu einer *name brand* geworden. Das während des Semesters alle zwei Wochen stattfindende C4-Seminar zieht regelmäßig zwischen 30 und 50 Zuhörer an. Die Mehrzahl davon sind Doktoranden, welche bei dieser Gelegenheit nicht nur interessante Vorträge zu hören kriegen, sondern auch sich kennen lernen und eigene Netzwerke bilden. Zu bemerken ist, dass alle freiwillig zum Seminar kommen; es herrscht kein Teilnahmepflicht, und der Besuch des Seminars berechtigt auch nicht zu Kreditpunkten. Beachtlich ist auch, dass kaum je ein Vortragender der Einladung nicht Folge leisten würde. Das Programm ist breit gefächert, und bringt neue wie auch große Namen auf die Bühne (siehe Bild Semesterprogramm).



Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zürich

COMPETENCE CENTER FOR COMPUTATIONAL CHEMISTRY C4
ETH Zürich / University of Zürich / IBM Research

Seminar Programm Frühjahrssemester 2008

Auditorium HCI J3, ETH Hönggerberg
13:00-14:00

28. 02. 2008

Hiroko Satoh, National Institute of Informatics (Tokyo, Japan)
Cheminformatics - Towards Making a Guide to the
Chemical Reactions' Complex World

13. 03. 2008

Serge Perez, CNRS / Université Joseph Fourier (Grenoble, France)
The Structural and Dynamical Features of Plant Cell Wall Components

27. 03. 2008

Claudia Filippi, Universiteit Leiden (Leiden, Netherlands)
Excitations in (Bio)Molecules from Quantum Monte Carlo

10. 04. 2008

Stefan Grimme, Westfälische Wilhelms-Universität (Münster, Germany)
Non-local Electron Correlation Effects in Large Molecules

24. 04. 2008

Michael Schaefer, Novartis Pharma AG (Basel, Switzerland)
Exploring the Protein Data Bank in a Challenge to Convention:
Protonation States, Packing, and Helix-Makers

09. 05. 2008

Donald G. Truhlar, University of Minnesota (Minneapolis, USA)
Title open

22. 05. 2008

Dušanka Janežič, National Institute of Chemistry (Ljubljana, Slovenia)
Molecular Modeling - A New Approach

www.c4.ethz.ch

Bild: C4 Seminarprogramm Frühjahrssemester 2007.

Wie groß -ja enorm- die Begeisterung für C4 ist, zeigte sich beim jährlichen Workshop. Anfang 2007 war, mit einer Ausnahme, die gesamte Professorenschaft des UC Berkeley Pitzer Centers zu Besuch um mit C4 an der ETH Zürich ein gemeinsames Symposium abzuhalten, welches gleichzeitig den Beginn einer neuen Ära der Zusammenarbeit setzen sollte. Den Vorträgen wohnten bis zu einhundert Zuhörer bei, auch am Samstagvormittag. Insgesamt 42 Poster wurden von C4 Mitgliedern und ihren Studenten den gezeigt. Die besten davon wurden mit einem Preis geehrt; die Jury stellten die Gäste aus Berkeley. Das IBM Forschungslabor hat inzwischen den „IBM Research Forschungspreis“ für hervorragende Doktor- und Masterarbeiten im Bereich der Computational Molecular Science gestiftet.

C4 WORKSHOP 2006

JANUARY 4 - 6, 2007
ETH Zürich
HCI J3

jointly with the
Kenneth S. Pitzer Center for Theoretical Chemistry
University of California Berkeley
www.cchem.berkeley.edu/pitzer



LECTURES (PITZER CENTER)

William Miller, David Chandler
Jih-Wie Chu, Phillip Geissler, Martin Head-Gordon,
William Lester, Heather Whitley

COMMUNICATIONS (C4)

Clara Christ, Alessandro Curioni,
Francesco Gervasio, Markus Reiher, Joost VandeVondele,
Martin Willeke, Hans Jakob Wörner

POSTER SESSION*

*open for participation to all
submit poster title/authors to c4@igc.ethz.ch

www.c4.ethz.ch

Bild: Ankündigung C4 Workshop mit dem Pitzer Center der UC Berkeley.

Die Kultur der Zusammenarbeit, wie C4 sie zu fördern versucht, hat Spuren hinterlassen. Computational Chemistry, respektive die Computational Molecular Science auf dem Platz Zürich, wird weiter wachsen. Anfang dieses Jahres hat ein Konsortium unter Führung der ETH Lausanne den Zuschlag für die Leitung des Centre Européen de Simulation Atomique et Moléculaire (CECAM) erhalten. C4 wird den Zürcher Knoten der neuen CECAM Organisation leiten.

Weitere Informationen zum C4 Projekt finden Sie unter www.c4.ethz.ch.

Klatsch und Tratsch

- Herrn **PD Dr. Timo Fleig** (HHU Düsseldorf) wurde ein Heisenbergstipendium der DFG bewilligt.
- **PD Dr. Oliver Kühn** (FU Berlin) wurde zum 1.1.2008 zum Professor für Theoretische Physik an der Uni Rostock ernannt.
- **Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff** (Bonn) wurde für ihr umfangreiches Lebenswerk auf dem Gebiet der Quantenchemie mit der Cothenius-Medaille in Gold der Leopoldina ausgezeichnet.
- **Prof. Dr. Joachim Sauer** (HU Berlin) wurde zum Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina, Halle, ernannt.
- **PD Dr. Michael Thoss** (TU München) hat den Ruf auf eine W2-Stelle für Theoretische Physik (Fachrichtung molekulare Elektronik) an der Universität Erlangen erhalten. Außerdem hat er den Ruf auf eine W2-Stelle für Theoretische Chemie (Fachrichtung Dynamische Prozesse in Molekülen und an Grenzflächen) an der TU München.
- **Prof. Dr. Hans-Joachim Werner** (Institut für Theoretische Chemie, Universität Stuttgart) erhielt den Gay-Lussac-Humboldt Preis.

DFG-Fachkollegien der Chemie

Am 4. März dieses Jahres haben sich die sechs Fachkollegien der Chemie (Molekülchemie; Chemische Festkörperforschung; Physikalische und Theoretische Chemie; Analytik/Methodenentwicklung; Biologische Chemie und Lebensmittelchemie; Polymerforschung) im "Fachforum Chemie" konstituiert. Ihren Mitglieder obliegt in den kommenden vier Jahren die wissenschaftliche Bewertung aller Anträge dieser Fachgebiete, die Qualitätssicherung im Begutachtungsprozess, die Vorbereitung der Förderentscheidung, die Mitwirkung bei der Begutachtung in den koordinierten DFG-Verfahren und die Beratung der DFG-Gremien in strategischen Fragen.

Unter den 41 gewählten Vertreterinnen und Vertretern ihrer Fachgebiete finden sich fünf Theoretiker. Es sind die Professoren Joachim Sauer, Berlin; Richard Dronskowski, Aachen; Willem Maarten Klopper, Karlsruhe; Jörn Manz, Berlin und Kurt Kremer, Mainz. Ausgeschieden sind die Professoren Gernot Frenking, Marburg, Peter Saalfrank, Potsdam, und Walter Thiel, Mülheim.

Den Ausgeschiedenen und Wiedergewählten einen herzlichen Dank für die geleistete Arbeit. Den Neu- und Wiedergewählten die besten Wünsche für die vor ihnen liegende Tätigkeit.

Weitere Informationen zu den DFG-Fachkollegien finden sich unter:

http://www.dfg.de/dfg_im_profil/struktur/gremien/fachkollegien/fk_2008_2011/index.html

Dr. Frank-Dieter Kuchta
Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)
- Chemie und Verfahrenstechnik -
D-53170 Bonn

Nr. 13
April 2008

10.

Hervorragende deutsch-polnische Zusammenarbeit in der Wissenschaft

Kopernikus-Preis von DFG und FNP geht an Münchner Chemiker und Physiker aus Warschau

Für ihre Verdienste um die deutsch-polnische Zusammenarbeit in der Wissenschaft erhalten der Münchner Chemiker Professor Wolfgang Domcke und der Warschauer Physiker Andrzej Sobolewski den Kopernikus-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und der Stiftung für die polnische Wissenschaft (FNP). Die beiden Wissenschaftler werden damit für ihre langjährige fruchtbare Kooperation auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie im Bereich der Photochemie und Photophysik biologisch relevanter Moleküle und für ihr gemeinsames Engagement in der Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses ausgezeichnet. Der Preis ist mit 50 000 Euro dotiert und wird am 14. Mai in Warschau von den Präsidenten der DFG und FNP, Professor Matthias Kleiner und Professor Maciej Żylicz, verliehen.

Die beiden Preisträger haben sich – jeweils für sich und durch ihre Zusammenarbeit – vor allem auf den Gebieten der Quantendynamik und Quantenchemie einen Namen gemacht. Wolfgang Domcke hat seit 1999 den Lehrstuhl für Theoretische Chemie an der Technischen Universität (TU) München inne, an die der heute 60-Jährige nach seiner Habilitation in Physik in Freiburg und Stationen in Heidelberg und Düsseldorf kam. Der 56 Jahre alte Andrzej Sobolewski ist seit 1991 Professor am Institut für Physik der Polnischen Akademie der Wissenschaften und wurde seither mit zahlreichen internationalen und nationalen Preisen geehrt, darunter 2007 mit der wichtigsten Auszeichnung für polnische Forscher, dem Preis der Stiftung für die polnische Wissenschaft.

Beide Forscher arbeiten bereits seit über 20 Jahren erfolgreich in zahlreichen Projekten zusammen, dokumentiert in mehr als sechzig gemeinsamen Publikationen. Sie entdeckten einen Mechanismus, der die Photostabilität des Trägers der genetischen Information, der DNS, erklären kann: Nach ihren Berechnungen besitzen die Basenpaare Adenin-Thymin (oder Adenin-Uracil) und Cytosin-Guanin spezifische Mechanismen, um nach UV-Anregung in kürzester Zeit vom instabilen angeregten Zustand in den stabilen Grundzustand zurückzukehren. Die zugrundeliegenden Prozesse laufen in wenigen Femtosekunden ab - also auf einer Zeitskala, in der Licht nur wenige Hunderstel einer Haaresbreite zurücklegen kann. Ohne die Moleküle zu schädigen, wird die zugeführte Strahlungsenergie als Wärme abgeleitet. Beide konnten auch

zeigen, dass der von ihnen vorgeschlagene Mechanismus für diese Basenpaare besonders effektiv ist und dass vergleichbare Mechanismen für die Photostabilität von Proteinen eine Rolle spielen. Bei allen ihren Arbeiten nimmt für beide Forscher die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses stets einen hohen Stellenwert ein. Zahlreiche Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter wurden und werden gemeinsam betreut und haben bei beiden Wissenschaftlern wertvolles Handwerkszeug erlernen können. Diesem Engagement maß auch die Jury des Kopernikus-Preises bei ihrer Entscheidung über die diesjährigen Preisträger besonderes Gewicht bei. Das aus deutschen und polnischen Wissenschaftlern bestehende Gremium wählte Domcke und Sobolewski unter 29 Kandidatinnen und Kandidaten aus allen Fachgebieten aus. Der Münchner Chemiker und sein Warschauer Physikerkollege sind das zweite Wissenschaftler-Tandem, das den Kopernikus-Preis erhält, den DFG und FNP seit 2006 alle zwei Jahre an jeweils eine wissenschaftliche Persönlichkeit aus Deutschland und Polen vergeben. Die ersten Preisträger waren die Pharmakologen Professor Eberhard Schlicker von der Universität Bonn und Professorin Barbara Malinowska von der Universität Bialystok.

Deutsche Forschungsgemeinschaft
Bereich Presse- und Öffentlichkeitsarbeit, Kennedyallee 40, 53175 Bonn
Telefon 02 28 - 8 85 22 50 / 22 30, Telefax 02 28 - 8 85 21 80

Der nach dem Astronomen Nikolaus Kopernikus (1473-1543) benannte Preis soll nach dem Willen von DFG und FNP ein Symbol der engen Zusammenarbeit zwischen Deutschland und Polen im Bereich der Forschung sein. Das Preisgeld von 50 000 Euro kommt zu gleichen Teilen von den beiden Organisationen; die beiden Preisträger erhalten jeweils 25 000 Euro und können diese Summe für alle wissenschaftlichen Zwecke verwenden, die DFG und FNP mit ihren Programmen fördern. Ein Schwerpunkt soll dabei jedoch in der Intensivierung der gemeinsamen Nachwuchsförderung liegen. Die DFG hatte bereits im Jahr 2006 eine Vereinbarung mit der FNP geschlossen, um insbesondere die Zusammenarbeit herausragender Nachwuchswissenschaftler aus allen Fachgebieten zu unterstützen. Neben dem Kopernikus-Preis setzen beide Organisationen bereits seit einigen Jahren Akzente für eine intensive Kooperation in der Wissenschaftsförderung.

Weitere Informationen:

Weitere Informationen zum Kopernikus-Preis und den beiden Preisträgern unter www.dfg.de/aktuelles_presse/preise/.

Ansprechpartner für den Kopernikus-Preis bei der DFG ist Dr. Torsten Fischer, Bereich Internationale Zusammenarbeit, Tel. 0228/885-2372, E-Mail torsten.fischer@dfg.de.

Tagungsvorschau 2008 / 2009 Stand: 18. 04. 2008

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
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

2008

- 01. – 03. 05. 2008, Saarbrücken
Bunsentagung 2008, "Analyse, Manipulation und Simulation auf der Nanometerskala"
<http://www.bunsen.de/>
- 30. 06. – 02. 07. 2008, Seattle, Washington / USA
50 Years of Coupled-Cluster Theory
http://www.int.washington.edu/PROGRAMS/08-2a_symposium
- 06. – 10. 07. 2008, Kraków / Polen
Current Trends in Theoretical Chemistry V
<http://www.chemia.uj.edu.pl/cttc5/>
- 11. – 22. 8. / 18. – 22. 8., Dresden
International seminar /workshop
"Quantum Dynamical Concepts: From Path Integrals to Semiclassics"
<http://www.mpipks-dresden.mpg.de/~qdcpis08/>
- 25. – 29. 08. 2008, Heidelberg
XIX International Symposium on the Jahn-Teller Effect: Vibronic Interactions and Orbital Physics in Molecules and in the Condensed Phase
<http://jt2008.uni-hd.de> (Anmeldefrist: 15. 04. – 15. 06. 2008)
- 02. – 05. 09. 2008, Palma de Mallorca / Spanien
6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications - ESPA 2008
<http://www.espa2008.org>
- 06. – 10. 09. 2008, Zürich / Schweiz
Latsis Symposium on Intramolecular Dynamics, Symmetry and Spectroscopy
<http://www.latsis2008.ethz.ch>
- 14. – 19. 09. 2008, Sydney / Australien
WATOC 2008
<http://www.watoc2008.com>
- 16. – 20. 09. 2008, Turin / Italien
2nd European Chemistry Congress
www.euchems-torino2008.it

- 23. – 27. 09. 2008, Ramsau am Dachstein / Österreich
44. Symposium für Theoretische Chemie
www.ptc.tugraz.at/stc2008
Anne-Marie Kelterer und Michael Flock: stc2008@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

2009

DPG-Tagungen 2009

www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2009.html

- 02. – 06. 03. 2009, Hamburg
73. Jahrestagung der DPG und DPG Frühjahrstagung des AMOP
- 16. - 20. 03. 2009, Bochum
DPG Frühjahrstagung, Hadronen und Kerne
- 30. 03. – 03. 04. 2009, Greifswald
DPG Frühjahrstagung, Plasmaphysik
- 09. – 13. 03. 2009, München
DPG Frühjahrstagung, Extraterrestrische Physik, Gravitation und Relativitätstheorie, Teilchenphysik, Theoretische und Mathematische Grundlagen der Physik, Arbeitskreis Philosophie der Physik
- 23. – 27. 03. 2009, Dresden
DPG Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik (AKF; künftig SKM Sektion Kondensierte Materie)
- 21. – 23. 05. 2009, Köln
Bunsentagung 2009
Hauptthema: Physical Chemistry of Solids: The Science behind Materials Engineering
www.bunsen.de/Veranstaltungen/Bunsentagungen/Bunsentagung+2009.htm
- 22. – 27. 06. 2009, Helsinki, Finnland
International Congress of Quantum Chemistry
www.helsinki.fi/kemia/icqc
- 30. 08. – 02. 09. 2009, Frankfurt a. M.
GdCh-Wissenschaftsforum Chemie 2009
<http://www.gdch.de>
- 09. – 12. 09. 2009, Neuss
45. Symposium für Theoretische Chemie
Christel Marian: Christel.Marian@uni-duesseldorf.de

Hinweise auf weitere Tagungskalender:

Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie

WWW: <http://ww.theochem.de/agtc.home.html>

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>

Publikationen

Springer Lecture Notes in Physics

Die Buchserie "Lecture Notes in Physics" (LNP) publiziert regelmäßig Monographien und Mehrautorenwerke im Bereich der gesamten Physik, inklusive Molekülphysik, Chemische Physik und Theoretische Chemie. Die Serie "Lecture Notes in Chemistry" wurde vom Springer-Verlag vor einigen Jahren eingestellt, da zu wenige Manuskripte aus der experimentellen Chemie eingingen. Manuskripte aus dem Bereich der chemischen Physik und Theoretischen Chemie sind jedoch für die LNP sehr willkommen.

Die typischen Beiträge sind, wie der Name sagt, ausgearbeitete Vorlesungsmanuskripte auf Doktoranden/Postdoc-Niveau, in Form von Einzel- oder Mehrautorenwerken. Kleinere Monographien, sowie besonders kohärente Multi-Autoren-Bände sind in Einzelfällen ebenfalls geeignet. Ausgenommen sind traditionelle Tagungsbände, rein review-artige Artikelsammlungen und Lehrstoff auf dem Niveau des Grund- und Hauptstudiums.

Die LNP sind neben der üblichen Druckversion auch elektronisch ähnlich einem Zeitschriftenarchiv verfügbar <http://www.springerlink.com/content/110316/> und der Springer-Verlag bemüht sich derzeit um die mittelfristige Aufnahme der Reihe in die Zitationsauswertung von ISI (Web of Science).

Die komplette Liste der Titel, mit bibliographischen Angaben, Preisskala, etc., findet sich auch im Katalog <http://www.springer.com/series/5304>.

Einige Titel der letzten Jahre mit Bezug zur Molekülphysik, Chemischen Physik und Theoretischen Chemie sind:

- 620: C. Fiolhais et al., A Primer in Density Functional Theory (2003)
- 657 : J. Gemmer et al., Quantum Thermodynamics (2004)
- 658 : K. Busch et al., CFN Lectures on Functional Nanostructures (2005)
- 660 : A. N. Gorban, I. V. Karlin, Invariant Manifolds for Physical and Chemical Kinetics (2005)
- 661: N. Akhmediev, A. Ankiewicz, Dissipative Solitons (2005)
- 666: D. Britz, Digital Simulation in Electrochemistry (2005)
- 675: M. Kröger, Models for Polymeric and Anisotropic Liquids (2005)
- 677: A. Loiseau et al., Understanding Carbon Nanotubes (2006)
- 679: A. Das, B. K. Chakraborti, Quantum Annealing and Related Simulation Methods (2005)
- 680: G. Cuniberti et al., Introducing Molecular Electronics (2006)
- 684: J. Dolinsek et al., Novel NMR and EPR Techniques (2006)
- 689: W. Pötz et al., Quantum Coherence (2006)
- 695: J. Dereziński, H. Siedentop, Large Coulomb Systems (2006)
- 703: M. Ferrario et al., Computer Simulations in Condensed Matter: From Materials to Chemical Biology, Vol. 1 (2006)
- 704: M. Ferrario et al., Computer Simulations in Condensed Matter: From Materials to Chemical Biology, Vol. 2 (2006)
- 706: M. A. L. Marques et al., Time-Dependent Density Functional Theory (2006)
- 714: G. Reiter, G. R. Strobel, Progress in Understanding of Polymer Crystallization (2007)
- 715: S. Hüfner, Very High Resolution Photoelectron Spectroscopy (2007)

- 717: R. Alicki, K. Lendi, Quantum Dynamical Semigroups and Applications (2007)
734: G. Muga et al., Time in Quantum Mechanics (2008)
739: H. Fehske et al., Computational Many-Particle Physics (2008)
745: S. G. Karshenboim, Precision Physics of Simple Atoms and Molecules (2008).

Im Editorial Board der LNP bin ich für die Chemische Physik und Theoretische Chemie zuständig. Wer sich mit dem Gedanken trägt, ein Vorlesungsmanuskript oder eine(n) als Einführung konzipierte Monographie/Mehr-Autoren-Band zu publizieren und die LNP in Erwägung ziehen möchte, kann sich an mich wenden oder an Herrn Caron vom Springer-Verlag (Christian Caron, Springer Verlag Heidelberg, Tiergartenstr. 17, 69121 Heidelberg, christian.caron@springer.com).

W. Domcke, TU München

Stellenanzeigen

Christian-Albrecht-Universität zu Kiel

An der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Christian-Albrecht-Universität zu Kiel ist im Institut für Physikalische Chemie zum nächstmöglichen Termin eine

Juniorprofessur (W1) für Theoretische Chemie

zu besetzen. Die Bewerberinnen und Bewerber sollen mit Entwicklungs- und Anwendungsarbeiten in einem aktuellen Forschungsgebiet der Theoretischen Chemie ausgewiesen sein, das die vorhandene Expertise am Institut (Wellenpaketdynamik, Strukturoptimierung) sinnvoll ergänzt. Möglich sind hier Entwicklung und Anwendung von ab-initio-/DFT-Verfahren der Quantenchemie (auch elektronisch angeregte Zustände) oder ab-initio- bzw. klassische Moleküldynamik, aber auch andere Gebiete. Erwünscht ist die Bereitschaft zur Mitarbeit im Netzwerk "Future Ocean" und im Sonderforschungsbereich 677 "Funktion durch Schalten". Im Bereich der Lehre ist eine angemessene Mitarbeit beim Lehrangebot des Instituts erwünscht.

Die Einstellung erfolgt zunächst befristet für drei Jahre. Nach positiver Evaluierung ist eine Verlängerung um weitere drei Jahre vorgesehen.

Einstellungsvoraussetzung ist neben den dienstrechtlichen Erfordernissen für Juniorprofessoren/Juniorprofessorinnen ein abgeschlossenes Hochschulstudium, pädagogische Eignung sowie eine zügig abgeschlossene und herausragende Dissertation. Die Promotions- und Beschäftigungsphase vor der Berufung soll insgesamt nicht mehr als 6 Jahre betragen (Schwangerschaften und Erziehungs- bzw. Elternzeiten werden berücksichtigt).

Die Christian-Albrechts-Universität zu Kiel ist bestrebt, den Anteil der Professorinnen zu erhöhen, und fordert deshalb entsprechend qualifizierte Frauen nachdrücklich auf, sich zu bewerben. Frauen werden bei gleicher Eignung, Befähigung und fachlicher Leistung vorrangig berücksichtigt.

Die Hochschule setzt sich für die Beschäftigung schwerbehinderter Menschen ein. Daher werden schwerbehinderte Bewerberinnen und Bewerber bei entsprechender Eignung bevorzugt berücksichtigt.

Bewerbungen mit den üblichen Unterlagen (Lebenslauf, Zeugniskopien, Schriftenverzeichnis und eine kurz gefasste Forschungsperspektive) sind bis zum **30. Mai 2008** zu richten an den Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 24098 Kiel.

Humboldt-Universität zu Berlin

Within the frame of the Cluster of Excellence “Unifying Concepts in Catalysis” the Faculty of Mathematics and Natural Sciences I, Department of Chemistry, at Humboldt-Universität zu Berlin announces the positions of

Junior Research Group Leader “Theoretical Bioinorganic Chemistry”

Applicants should have an outstanding record of achievement in important areas of the abovementioned field, which complement the existing research activities of the Department for Chemistry as well as the catalysis research within the Berlin area. Scientific exchange with research institutes within and outside Humboldt-Universität and with high tech companies at the science park Berlin-Adlershof and in the Berlin area will be appreciated. The candidate will be involved in the teaching of students covering the entire field of Theoretical Chemistry. Applicants must be qualified by a postdoctoral research period of 2 – 4 years after graduation.

The Humboldt-Universität seeks to increase the number of female employees in research and teaching and thus in particular invites qualified female scientists to apply for this vacant position. Physically handicapped persons will be preferred, if they are equally qualified.

Applications with necessary documents should be sent to Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I, Humboldt-Universität zu Berlin, “Junior Research Group Theoretical Bioinorganic Chemistry”, 12489 Berlin, Newtonstr. 14. Alternatively, you may contact: Prof. Joachim Sauer, Humboldt-Universität, Institut für Chemie, 12489 Berlin, Brook-Taylor-Straße 2, Email: js@chemie.hu-berlin.de

In the quantum chemistry group at **Humboldt University**, Institute of Chemistry, (www.chemie.hu-berlin.de/ag_sauer) **post-doctoral positions** (BAT-O IIa) are available for computational chemists/physicists from July 2008 in different areas:

- Application of *ab initio* electronic structure methods to complex oxides and their surfaces. This project includes the study of transition metal oxide clusters and noble metal clusters on oxide surfaces in comparison to clusters in the gas phase and offers the possibility to close collaboration with excellent experimental groups in the Fritz-Haber-Institute.
- Application of wave-function based electron correlation methods to the structure, dynamics and reactivity of multinuclear transition metal oxides and transition metal complexes as models for active sites of different types of catalysts.

Participation in method developments is welcome, but not a condition.

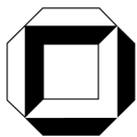
Candidates are expected to have a PhD in Theoretical Chemistry/Physics and experience in non-routine applications of quantum codes and/or simulation codes to complex systems.

We offer an excellent cooperation environment (Center of Collaborative Research 546 - <http://www.chemie.hu-berlin.de/sfb546>; Center of Excellence “Unicat” - <http://unicat.tu-berlin.de>, for recent publications see: http://www.chemie.hu-berlin.de/ag_sauer/publications.html) and excellent computing resources.

Employment is either within projects based on grants or on temporary university assistant positions (maximum employment duration about 5-7 years) that include teaching obligations.

Applications to: js@chemie.hu-berlin.de.

Prof. Joachim Sauer, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Chemie, Brook-Taylor-Str. 2, 12489 Berlin



Universität Karlsruhe (TH)

Forschungsuniversität • gegründet 1825



Die Universität Karlsruhe (TH) und das Forschungszentrum Karlsruhe haben sich im **Karlsruher Institut für Technologie (KIT)** zusammengeschlossen und werden ihre Forschung gemeinsam strukturieren und strategisch planen. In der Fakultät für Chemie und Biowissenschaften der Universität Karlsruhe (TH) ist zum nächstmöglichen Zeitpunkt eine

**Professur (W3 ohne Leitungsfunktion)
für „Theoretische Chemische Biologie“**

zu besetzen.

Zum Wintersemester 2009/2010 wird an der Fakultät ein Bachelor/Master-Studiengang „Chemische Biologie“ eingeführt, in dem der/die zukünftige Stelleninhaber/in sich maßgeblich in Forschung und Lehre einbringen soll.

Der/Die zukünftige Stelleninhaber/in sollte sich insbesondere mit der **Modellierung chemischer Systeme** (z.B. „Molecular Modelling“) beschäftigen, die für die Beantwortung biologischer Fragestellungen relevant sind.

Die Fakultät strebt an, die **Theoriekomponente in Forschung und Lehre** zu verstärken. Diese neue Professur ist inhaltlich zwischen den bestehenden Gruppen der Theoretischen Chemie und der Theoretischen Biophysik angesiedelt. Eine Zusammenarbeit mit experimentellen Gruppen am Ort ist sehr erwünscht.

Zu den Aufgaben der Professur in der Lehre gehört die engagierte und umfassende Beteiligung an bestehenden und neuen, auch englischsprachigen und interdisziplinären Studiengängen.

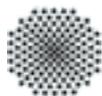
Die Universität erhöht den Anteil von Professorinnen und begrüßt deshalb die Bewerbung entsprechend qualifizierter Frauen.

Voraussetzung für die Bewerbung ist eine Habilitation oder eine gleichwertige wissenschaftliche Leistung.

Schwerbehinderte Bewerber/innen werden bei gleicher Eignung bevorzugt berücksichtigt.

Es gelten die Einstellungs Voraussetzungen des § 47 Landeshochschulgesetz Baden-Württemberg.

Bewerbungen mit den üblichen Unterlagen, einer Darstellung der bisherigen und geplanten Forschungs- und Lehrtätigkeit sowie Sonderdrucke der fünf wichtigsten eigenen Arbeiten werden bis zum 15.5.2008 erbeten an den Dekan der Fakultät für Chemie und Biowissenschaften, Universität Karlsruhe (TH), 76131 Karlsruhe.



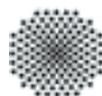
Universität Stuttgart

Doktoranden oder Postdoc Stellen am Institut für Theoretische Chemie

Im Rahmen des DFG Exzellenzclusters "Simulation Technology" (SimTech) sind am **Institut für Theoretische Chemie** der Universität Stuttgart (AG Werner) ab sofort zwei Stellen TVL-13 für zunächst 3 Jahre zu besetzen. Die Projekte sind vorwiegend methodischer Art und haben die Entwicklung von parallelisierten lokalen und explizit korrelierten Coupled Cluster Methoden sowie neuen Multireferenzmethoden zum Ziel.

Gesucht werden Mitarbeiter (Doktoranden oder Postdocs) mit Interesse an anspruchsvollen Methoden- und Programmentwicklungen. Eine enge Zusammenarbeit mit anderen Arbeitsgruppen im SimTech Exzellenzcluster, insbesondere aus der Technischen Informatik und dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart, ist geplant.

Bewerbungen mit den üblichen Unterlagen (Lebenslauf, Zeugniskopien, Publikationsliste) richten Sie bitte an Prof. Dr. H.-J. Werner, Institut für Theoretische Chemie, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 55, 70569 Stuttgart



Universität Stuttgart

The **Stuttgart Research Center for Simulation Technology (SRC SimTech)** is asking for applications for a

Juniorprofessorship (W1) on Applied Quantum Mechanics

at the Institute of Theoretical Chemistry of the University of Stuttgart.

The Junior Professor should be experienced in the field of computational chemistry with focus on the simulation of complex molecular systems, in particular using ab initio molecular dynamics or QM/MM methods. He/she should closely collaborate with the theoretical chemistry and other modeling groups. e.g., in Physics, Technical Biochemistry, or Molecular Thermodynamics. Participation in the Collaborative Research Centre SFB 706, "Selective catalytic oxidation reactions using molecular oxygen" is expected. Applications with the usual documents (CV, degree certificates, references, publication list, selected off-prints) should be sent to the Coordinator of the Cluster of Excellence in Simulation Technology, Prof. Dr.-Ing Wolfgang Ehlers, Institute of Applied Mechanics, Pfaffenwaldring 7, 70569 Stuttgart, Germany.



Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

In the research group of Hans P. Lüthi at the ETH Zürich Laboratory of Physical Chemistry there is an opening for a

Post-Doctoral Researcher in Computational Chemistry

The research, funded by a grant of the Swiss Federal Agency for Research and Education, concerns the derivation of structure-property relationships in donor/acceptor functionalized polyactylenes using quantum chemical computations at large scale (grid computing), the archival of the computed data in a generalized format (XML/CML), and their analysis using statistical or other methods. This project is part of the COST Action D37 ("GridChem": www.cost.esf.org) and is also a collaboration with the ETH Zürich Chemistry Biology Pharmacy Information Center. A feasibility study is reported in *Chimia*, **61** 165 (2007).

The successful candidate is expected to have a profound knowledge of computational quantum chemistry, expertise in programming, and a strong interest in data processing (workflows, database design) and analysis. At the ETH Zurich Laboratory of Physical Chemistry, post-doctoral researchers are expected to also serve in teaching and education. The position is available as of June 1, 2008 and is for an initial period of one year.

Candidates are invited to submit their application documents to luethi@phys.chem.ethz.ch

Technische Universität Chemnitz

Im Rahmen eines DFG-Projektes zum Thema "Aktive Diffusion von Polymeren und anderen komplexen Molekülen in Medien mit ausgeprägten Gedächtniseffekten" ist ab sofort eine Stelle für eine promovierte wissenschaftliche Mitarbeiterin oder einen promovierten wissenschaftlichen Mitarbeiter nach TV-L E-13 für 3 Jahre zu besetzen. Es sollen analytische und numerische Untersuchungen zunächst für Dimere, danach für komplexere Polymere durchgeführt werden. Interessenten wenden sich bitte an Prof. Dr. Michael Schreiber, e-mail: schreiber@physik.tu-chemnitz.de, Tel.: 0371 531 21910.