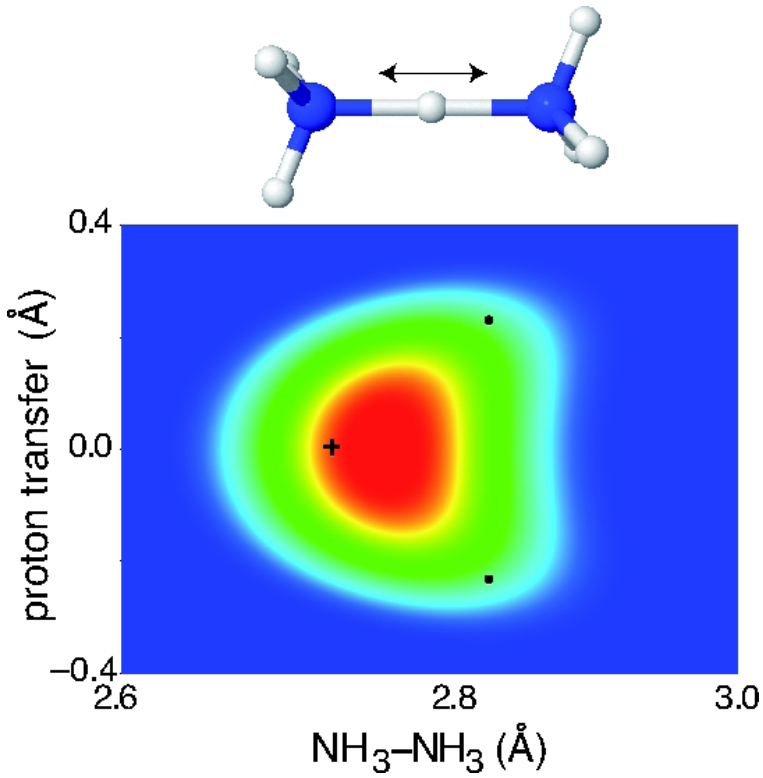
Information
Theoretische Chemie



O. Kühn et al., Angew. Chem. Int. Ed. 46, 8691 (2007).

November 2008

Editorial

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

diese und die folgenden zwei Ausgaben des Information Theoretische Chemie (April 2009 und November 2009) werden von der Arbeitsgruppe des Lehrstuhls für Theoretische Chemie der Humboldt-Universität zu Berlin herausgegeben. Wir bedanken uns herzlich bei den Karlsruher Kollegen für ihr Engagement bei der bisherigen Herausgabe von Information Theoretische Chemie.

Die Redaktion bedankt sich desweiteren für alle Zuschriften zur aktuellen Ausgabe und bittet um weitere Zusendungen für die kommende Ausgabe (April 2009) an vbk@chemie.hu-berlin.de.

Berlin, 07. November 2008
Vlasta Bonačić-Koutecký

Inhalt

Arbeitsgruppen stellen sich vor	4
DFG- Mitteilungen	8
44th Symposium on Theoretical Chemistry	10
Mitgliederversammlung	13
Tagungen	15
Winter School 2009	18
Klung-Wilhelmy-Weberbank-Preis	19
Hans G. A. Hellmann-Preis	19
Ioannes Marcus Marci Medaille	19
Nachruf	20
Stellenanzeigen	21

Arbeitsgruppen stellen sich vor

Arbeitsgruppe „Molekulare Quantendynamik“ am Institut für Physik der Universität Rostock

Die wissenschaftlichen Schwerpunkte des Instituts für Physik der Universität Rostock liegen in den Bereichen Optik/Laserphysik, Nanomaterialien sowie Vielteilchentheorie. Darüber hinaus gehören das Leibniz Institut für Atmosphärenphysik (IAP) in Kühlungsborn und das Institut für Ostseeforschung in Warnemünde als „An-Institute“ zur Universität. Es gibt fünf Theorieprofessuren mit den folgenden Ausrichtungen: Quantentheorie und Vielteilchensysteme (z.B. stark korrelierte Coulombsysteme), Statistische Physik (z.B. warme dichte Materie), Festkörperoptik (z.B. Bose-Einstein Kondensation in Elektron-Loch Systemen) und Quantenoptik (z.B. nichtklassisches Licht und Verschränkung). Mit den 2007 und 2008 erfolgten Berufungen von Stefan Lochbrunner (Experiment) und Oliver Kühn (Theorie) wurde das Spektrum hinsichtlich molekularer Prozesse erweitert, wobei hier insbesondere die Ultrakurzzeitdynamik und Spektroskopie im Mittelpunkt steht. Diese Aktivitäten sind eingebettet in das Department „Light, Life and Matter“, einer der Profillinien der im Oktober 2007 gegründeten Interdisziplinären Fakultät der Universität Rostock. Letztere stellt u.a. den formalen Rahmen für eine strukturierte Ausbildung und Forschung bereit, die über die klassischen Fakultätsgrenzen hinausgeht. Das Department umfasst dabei die Projektbereiche „Atomare und molekulare Prozesse“, „Neue Materialien“ und „Rekonstruktion biologischer Funktionen“. Theoretische Modellbildung und Simulation nehmen hier einen übergeordneten Platz ein, wobei zum Bereich molekularer Prozesse neben unserer Arbeitsgruppe z.B. auch die Theoretische Chemie gehört. Diese wird durch Prof. Ralf Ludwig vertreten, zu dessen Forschungsschwerpunkten aktuell ionische Flüssigkeiten zählen.

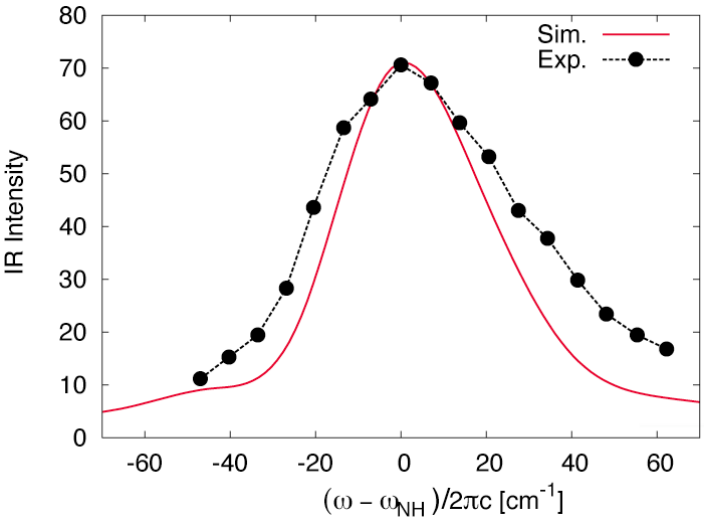
Die Arbeitsgruppe „Molekulare Quantendynamik“ ist noch im Aufbau begriffen; ein Teil der Doktoranden befindet sich kurz vor dem Abschluss in Berlin. Mit nach Rostock gekommen sind Dr. Yun-an Yan (Postdoc) und MSc Mahmoud Abdel-Latif (Doktorand im Rahmen des Channel Progamms der ägyptischen Regierung). Wir sind derzeit noch im historischen Hauptgebäude der Universität im Zentrum Rostocks untergebracht. Der symbolische Spatenstich für ein neues Physikgebäude auf dem Südstadt-Campus fand jedoch kürzlich statt und so wird sich voraussichtlich ab 2013 die Physik in räumlicher Nähe z.B. zur Chemie, zum Institut für Biowissenschaften oder auch zum Leibniz Institut für Katalyseforschung (LIKAT) befinden. Ebenfalls auf dem Campus ist das Rechenzentrum angesiedelt, welches unsere Computerresourcen in Form eines linuxbasierten Clusters - bestehend aus Dual und Quad-core CPUs – bereitstellt.

Prof. Dr. Oliver Kühn, Lehrstuhl für Theoretische Physik am Institut für Physik, Universität Rostock

Methoden. Unsere Forschung konzentriert sich auf durch Licht ausgelöste und auch charakterisierte Prozesse in molekularen Systemen von der Gas- bis hin zur kondensierten Phase. Das Spektrum reicht dabei von der Infrarot(IR)-Spektroskopie von Clustern mit starken Wasserstoffbrücken bis hin zum elektronischen Anregungsenergietransfer in molekularen Aggregaten bestehend aus einigen hundert Monomeren. Dabei kombinieren wir Methoden aus unterschiedlichen Bereichen der Theoretischen Chemie und Physik. Grundlage sind i.d.R. quantenchemische ab initio bis semiempirische Rechnungen, die zur Generierung von Potentialenergieflächen (PES) genutzt werden. Hier haben wir in den letzten Jahren speziell Reaktionsflächenzugänge verfolgt, da sie es prinzipiell gestatten, selbst für Systeme mit mehreren hundert Freiheitsgraden voll-dimensionale – wenn auch approximative - Hamilton-Operatoren zu bestimmen. Durch ihre Konstruktion - speziell in der von uns favorisierten kartesischen Formulierung - eignen sich die Reaktionsflächen-Hamilton-Operatoren insbesondere zur Propagation von multidimensionalen Wellenpaketen mit Hilfe des MCTDH (Multiconfiguration Time Dependent Hartree) Zugangs, wobei wir das Heidelberger Programmpaket benutzen. Für Systeme in kondensierter Phase verfolgen wir zwei Strategien. Zunächst bietet hier der System-Bad Zugang der dissipativen Quantendynamik eine praktika-

ble Methode zur Beschreibung von Effekten der Phasen- und Energierelaxation. Dabei werden quantenchemische PES für das relevante System mit aus klassischen Molekulardynamik-Simulationen bestimmten Korrelationsfunktionen für die System-Bad Wechselwirkung kombiniert. Als Alternative, die keine a priori Separation des Gesamtsystems verlangt, verwenden wir auch Methoden, die auf klassischen Trajektorien basieren. Dabei kommen z.B. vermittels QM/MM Methoden bestimmte on-the-fly Kräfte zum Einsatz. Eine der Herausforderungen besteht hier natürlich darin, Quanteneffekte der Kerndynamik zu berücksichtigen.

Dynamik und Spektroskopie von Wasserstoffbrücken. Wasserstoffbrücken verbinden eine Reihe von Eigenschaften, die aus Sicht der Quantendynamik eine interessante Heraus-forderung darstellen. Insbesondere trifft der Umstand, dass die Bewegung des Wasserstoffatoms oftmals stark an die entsprechende Umgebung (vom Donator und Akzeptor in der H-Brücke bis hin zum Lösungsmittel) gekoppelt ist, mit ausgeprägten Quanteneffekten aufgrund der geringen Masse zusammen. Mit anderen Worten, man hat es hier mit multidimensionaler Quantendynamik zu tun, was sich z.B. in spektroskopischen Observablen niederschlägt. Quanteneffekte und Korrelation von Kernbewegung äußern sich bereits im Schwingungsgrundzustand. Dies kann z.B. geometrische Isotopeneffekte nach sich ziehen, die bei Doppel-H-Brücken Aufschluss über den Charakter der H-Brücken (kooperativ vs. antikooperativ) gestatten (ChemPhysChem 8, 315 (2007)). Ein anderes aktuelles Beispiel ist das hydrierte Hydroxidanion, H_3O^{2-}, dessen Isotopomere wir in voller Dimensionalität untersucht haben. Für diese starke H-Brücke findet man z.B., dass H-Brücken ca. 1 kJ/mol stabiler sind als D-Brücken, unabhängig vom Deuterierungsgrad der terminalen OH Gruppen (Z. Phys. Chem. 222, 1375 (2008)). Starke H-Brücken sind i.d.R. dadurch gekennzeichnet, dass die Barriere sehr niedrig ist, so dass der Schwingungsgrundzustand energetisch oberhalb der Barriere liegt und so z.B. die Struktur durch die Nullpunktsschwingung symmetrisiert wird. Ein interessanter Fall ist das protonierte Ammoniakdimer, $N_2H_7^+$, wo die Barrierenhöhe kT bei Raumtemperatur übersteigt. Ungeachtet dessen liegt der korrelierte Grundzustand energetisch über der Barriere und die H-Brücke ist symmetrisch (Angew. Chem. Int. Ed. 46, 8691 (2007)). Die Tunnelaufspaltung ist eine weitere Größe, deren Bestimmung neben genauen PES eine multidimensionale Behandlung der Kerndynamik erfordert. Dies gilt insbesondere, wenn Aufspaltungen schwingungsangeregter Zustände betrachtet werden, wobei die Schwingungsanregung einer Gerüstmode in Abhängigkeit von der Symmetrie die Aufspaltung vergrößern (promoting mode) oder verringern



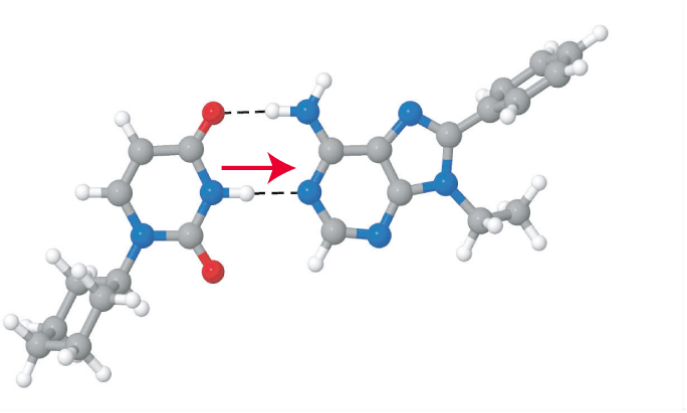


Abb. 1: Berechnete und experimentelle (S. Woutersen, G. Cristalli, J. Chem. Phys. 121, 5381 (2004)) IR Absorption im Bereich der NH-Streckschwingung von 9-ethyl-8-phenyladenin:1-cyclohexyluracil in $CDCl_3$ (nach Y. Yan et al., Chem. Phys. Lett. 464, 230 (2008)).

(hindering mode) kann. Für das Ameisensäuredimer konnten wir in Kooperation mit der Gruppe von N. Došlić (Zagreb) zeigen, dass die Anregung einer asymmetrischen CO Streckschwingung die mit dem konzertierten Doppel-H-Transfer in Verbindung stehende Tunnelaufspaltung, verglichen mit dem Grundzustand, ungefähr halbiert (J. Chem. Phys. 127, 014309 (2007)). Unabhängig von der Tunnelaufspaltung erfordert die Interpretation von durch die Anharmonizität der PES geprägten H-Brücken-Schwingungsspektren eine multidimensionale Betrachtung. Die Stärke von H-Brücken kann z.B. durch die Frequenz des Fundamentalübergangs der H-Streckschwingung charakterisiert werden. Für das bereits erwähnte $N_2H_7^+$ findet man diesen Übergang bei ca. 400 cm^{-1}, ein Wert der weder im Rahmen der harmonischen Näherung noch mit Hilfe effekti-

ver ein-dimensionaler Modelle erhalten werden kann. Wenn man von den Gasphasenclustern zu Systemen in kondensierte Phase übergeht, stellt sich das zusätzliche Problem, dass die ohnehin schon komplexen IR-Absorptionsspektren inhomogen oder homogen verbreitert sind. Bei der Aufklärung der den breiten Absorptionsbanden zu Grunde liegenden Mechanismen spielt die Ultrakurzzeit-Spektroskopie eine entscheidende Rolle (Phys. Rep. 430, 211 (2006)). Im Rahmen des Berliner Sfb 450 konnten wir z.B. mit Hilfe eines System-Bad Zugangs die Pfade der Schwingungsenergierelaxation bestimmen, die zum Zerfall der fundamentalen OH-Streckanregung im Phthalsäuremonomethylester mit einer Zeitkonstante von ca. 400 fs führen (J. Phys. Chem. A. 108, 6083 (2004)). In einer neueren Arbeit haben wir uns den H-Brücken von Adenin-Thymin Paaren in DNS Oligomeren gewidmet, wobei wir in Kooperation mit dem Experiment (K. Heyne, FU Berlin) Aussagen über

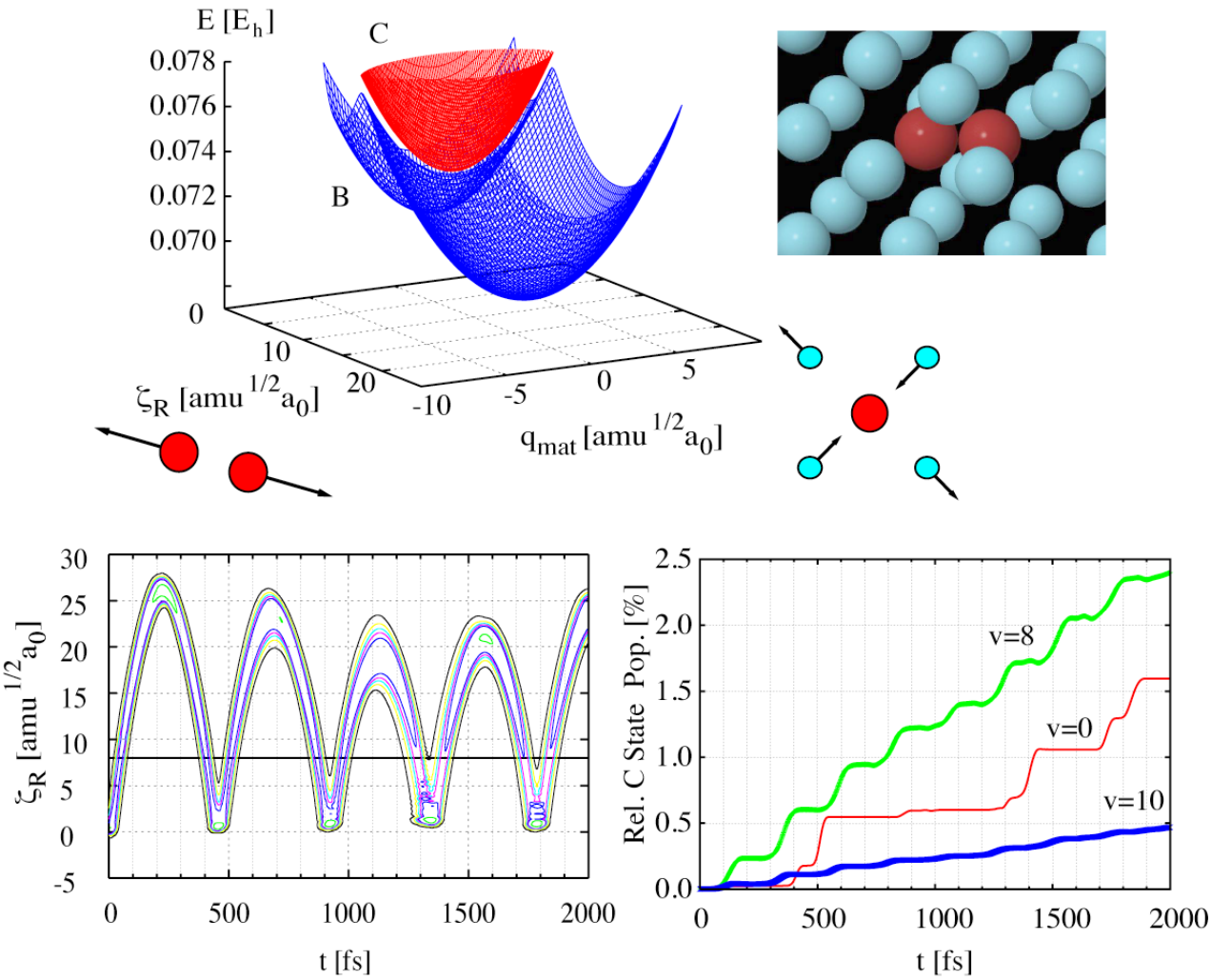


Abb. 2: Nichtadiabatische Wellenpaket-Dynamik von Br_2 in einer Ar-Matrix. Oben: Schnitt durch eine 5D Potentialenergiefläche entlang des Br-Br Abstands sowie einer Matrixkoordinate, welche die Symmetrie des Käfigs reduziert. Unten: Reduzierte Dichte entlang der Br-Br Koordinate nach Anregung auf den B-Zustand (links) sowie die relative Population der beiden Zustände als Funktion der Schwingungsvoranregung im elektronischen Grundzustand (rechts) (A. Accardi, A. Borowski, O. Kühn, Manuskript in Vorbereitung).

das Netzwerk anharmonischer Kopplungen mit Bezug auf die H-Brücken treffen konnten und darüber hinaus die Frequenz der NH_2 Streckschwingung zugeordnet haben, ungeachtet der dominierenden Wasserabsorption (J. Phys. Chem. B 112, 7909 (2008)). Gegenwärtig beschäftigen wir uns mit der Frage, inwieweit lineare und nichtlineare IR-Spektren auch mit Methoden beschrieben werden können, die auf klassischen Trajektorien basieren. Ein Resultat aus einer aktuellen Arbeit ist in Abb. 1 gezeigt. Konkret handelt es sich um eine Simulation des IR-Spektrums im Bereich der NH Streckschwingung eines einzelnen Adenin-Uracil Paares in $CDCl_3$ Lösung (Chem. Phys. Lett. 464, 230 (2008)). Die on-the-fly Trajektorien wurden dabei auf QM/MM Basis berechnet (Gromacs/CPMD). Die sich auf dem Gebiet der IR-Ultrakurzzeitspektroskopie von Schwingungsdynamik in kondensierter Phase ergebenden Perspektiven sind vielfältig. Eine treibende Kraft sind hier

die Möglichkeiten zum Verständnis korrelierter Dynamik, die sich durch die multidimensionale IR Spektroskopie ergeben. Für einzelne H-Brücken könnte dies z.B. die Aufklärung der Rolle von an die H-Dynamik gekoppelten Schwingungsmoden (promoting und hindering modes) für den H-Transfer in kondensierter Phase bedeuten. Daneben gibt es eine Vielzahl von biologischen aber auch artifiziellen Systemen wie ionischen Flüssigkeiten, in denen Mehrfach-H-Brücken eine Rolle spielen. Die offensichtliche Frage ist, inwieweit korrelierte Dynamik hier von Relevanz ist, um z.B. bestimmte biologische Funktionen zu realisieren.

Laserkontrolle molekularer Dynamik. Ein zweiter thematischer Schwerpunkt unserer Arbeitsgruppe ist die Kontrolle molekularer Quantendynamik mit Hilfe maßgeschneiderter Laserpulse, die z.B. mit Hilfe der Theorie der optimalen Kontrolle bestimmt werden. Während der Fokus in der Vergangenheit vorwiegend auf IR Laserpuls-Kontrolle von Protontransferreaktionen (z.B. Chem. Phys. 255, 247 (2000)) oder bindungsselektiver Grundzustandsdissoziation (J. Phys. Chem. A 104, 4882 (2000)) lag, beschäftigen wir uns gegenwärtig mit dem Problem der Kontrolle nichtadiabatischer Dynamik in der kondensierten Phase. Als Beispiel haben wir Br_2 eingebettet in einer Ar Matrix bei tiefen Temperaturen (~10K) gewählt. Dieses System sieht zunächst zwar recht einfach aus, umfasst jedoch neben den 36 Br_2 Valenzzuständen eine sehr große Anzahl von Kernfreiheitsgraden. Auf der Grundlage der Diatomics-in-Molecules Methode haben wir kürzlich eine Kombination aus Reaktionsflächen- und vibronischen Kopplungs-Hamiltonian entwickelt, die es uns gestattet, auf ausgewählte elektronische Zustände zugeschnittene Modelle in reduzierter Dimensionalität zu bestimmen (Chem. Phys. 347, 523 (2008)). In Abb. 2 ist z.B. ein Schnitt durch eine 5D Potentialenergiefläche gezeigt, der die konische Durchschneidung zwischen dem B und C Zustand enthält. Im linken unteren Teil ist die reduzierte Dichte im B-Zustand entlang der Br-Br Bindungskoordinate nach Anregung mit einem 30 fs Laserpuls dargestellt. Rechts daneben ist die relative Population der beiden entarteten C-Zustände als Maß für die Prädissoziation zu sehen und zwar für eine elektronische Anregung, die von verschiedenen Schwingungszuständen im elektronischen Grundzustand startet. Als Funktion der Schwingungsanregung erhält man bei v=8 eine maximale Population des C-Zustands, was darauf zurückzuführen ist, dass die Anregung des Wellenpakets energetisch in den Bereich der Kreuzung geschieht. Wie dieser schwingungsangeregte elektronische Grundzustand in einem homonuklearen Molekül präpariert werden kann, ist eine Frage, an deren Beantwortung wir gegenwärtig arbeiten. Inwieweit die an Hand dieses wohldefinierten Modellsystem entwickelten Strategien zur Kontrolle nichtadiabatischer Dynamik auch auf andere Systeme wie z.B. exzitonisch gekoppelte Chromophore (s.u.) anwendbar sind, wird im Weiteren zu untersuchen sein. Daneben werden wir uns auch verstärkt der IR-lasergetriebenen Grundzustandsdynamik widmen. Thematisch knüpfen wir hier an unserer Untersuchungen zur CO Abspaltung in einem CO-Häm Modell des CO-Myoglobins an (Chem. Phys. Lett. 402, 48 (2005)). Ein interessanter Aspekt dabei ist die Möglichkeit, Kernwellenpakete und damit Reaktionen auch in komplexen Systemen auf der elektronischen Grundzustands-PES zu treiben. Dies sollte nicht nur Rückschlüsse auf die Topologie der PES erlauben, sondern auch wertvolle Hinweise auf die z.B. ansonsten unter thermischen Bedingungen ablaufenden Reaktionen geben.

Exzitondynamik. Die Forschungsaktivitäten des Instituts für Physik in Rostock werden maßgeblich durch den Sfb 652 „Starke Korrelationen und kollektive Phänomene im Strahlungsfeld“ geprägt. Gemeinsam mit der experimentellen AG von Prof. Lochbrunner bringen wir hier ein Thema aus dem Bereich der Exzitondynamik in molekularen Aggregaten ein, wobei wir auf vorhandene Erfahrungen mit Lichtsammelkomplexen (Phys. Rep. 343, 137 (2001)) aufbauen können. Molekulare Aggregate bilden sich unter geeigneten Bedingungen aus gelösten Farbstoffmolekülen und zeichnen sich speziell durch die kollektive Antwort ihrer elektronischen Elementaranregungen (Exzitonen) auf ein externes Strahlungsfeld aus. Unsere Aktivitäten auf diesem Gebiet werden auf die korrelierte Dynamik und Spektroskopie von Multi-Exzitonenwellenpaketen fokussiert sein. Ein wichtiger Aspekt hierbei ist, dass mit steigenden Anregungsdichten Verlustprozesse durch Exziton-Exziton-Annihilation an Bedeutung gewinnen und speziell für Anwendungen z.B. in der molekularen Photonik einen limitierenden Faktor darstellen. Prinzipiell ist die Exziton-Exziton-Annihilation auf nichtadiabatische Übergänge an den Monomeren zurückzuführen. Es gilt jedoch an dieser Stelle mikroskopische Mechanismen aufzuklären und nach Möglichkeit z.B. durch gezieltes Design von Laserfeldern zu beeinflussen.

Studium. An der Universität Rostock wurde mit dem Wintersemester 2007/2008 der Bachelorstudiengang Physik eingeführt. Für das aktuelle Semester haben sich inklusive Lehramt 114 Studenten eingeschrieben. Seit 2003 gibt es einen internationalen Masterstudiengang, der Masterstudiengang Physik wird 2010 starten. Die Thematik unserer Arbeitsgruppe geht hier als Vertiefungsrichtung ein.

Weitere Informationen unter:
http://www.physik.uni-rostock.de/quantendynamik/

Prof. Dr. Oliver Kühn
Institut für Physik
Universität Rostock

DFG- Mitteilungen

Emmy Noether Nachwuchsgruppen

Der Hauptausschuss der DFG hat die Einrichtung zweier Emmy Noether Nachwuchsgruppen beschlossen:

Dr. Christine Peter-Tittelbach, Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz zum Thema:
„Entwicklung vergröberter Simulationsmodelle zum Studium von Strukturbildung und Selbstaggregation in Peptidsystemen“

Dr. Jörg Behler, Ruhr-Universität Bochum zum Thema
„Untersuchung enantioselektiver Prozesse an Oberflächen mit hochdimensionalen, auf neuronalen Netzen basierenden Potentialen“

Dr. Roland Mitrić, Freie Universität Berlin, Fachbereich Physik, Institut für theoretische Physik zum Thema
„Kern- und Elektronendynamik von mikrosolvatisierten Nanopartikel-Biomolekül-Hybridsystemen unter Einfluss Laserfelder“

Heisenberg-Programm

Der Hauptausschuss der DFG hat Herrn Privatdozenten Dr. Timo Fleig, Universität Düsseldorf, ein Heisenberg-Stipendien bewilligt. Herr Fleig hat zwischenzeitlich einen Ruf an die Universite Paul Sabatier, Toulouse III, Frankreich, angenommen.

Programminformationen

DAAD übernimmt Förderung von Kongress- und Vortragsreisen ins Ausland

Zum 1. Januar 2009 übernimmt der DAAD das bisher von der DFG verwaltete Programm „Kongress- und Vortragsreisen ins Ausland“. Mit diesem Förderinstrument wird die Teilnahme an internationalen wissenschaftlichen Veranstaltungen, zum Beispiel Kongresse , Symposien oder Kolloquien, im Ausland unterstützt. Das vom Auswärtigen Amt finanzierte Programm wird mit geringen Modifikationen vom DAAD weitergeführt.

http://www.dfg.de/aktuelles_presse/information_fuer_die_wissenschaft/ausschreibungen_mit_internationalem_bezug/info_wissenschaft_66_08.html

Ausschreibungen

Announcement: ERA-Chemistry 4th Flash-Conference „Modern Chemical Techniques For Light Harvesting“

The European project ERA-Chemistry inaugurated a new style of chemistry conference in 2007: the Flash Conference. The 4th Flash Conference will take place from 9 to 12 November 2008 in El Escorial, Spain, and will be dedicated to „MODERN CHEMICAL TECHNIQUES FOR LIGHT HARVESTING“. Chemical schemes for harvesting, whether for the generation of electricity or for the direct synthesis of energy storage molecules (such as H2), are one of the grand challenges in chemistry. This Flash Conference will serve as an exchange forum for chemical research on modern, second generation light harvesting systems, either on their synthesis or on the characterisation of the elemental charge transport or charge transfer steps. The ultimate goal should be diverse competing chemical systems promoting efficient photocurrent generation or artificial photosynthesis of valuable intermediate molecules.

http://www.dfg.de/aktuelles_presse/information_fuer_die_wissenschaft/andere_verfahren/info_wissenschaft_63_08.html

Forschung für die Zukunft - Ein Themenfindungsworkshop nicht nur für die Chemie

Unter dem Motto „Forschung für die Zukunft" richten die DECHEMA und die DFG erstmals einen gemeinsamen Themenfindungsworkshop im Rahmen der Aktivitäten der nationalen Technologieplattform Sustainable Chemistry SusChem-D aus. Er findet am 20. und 21. November 2008 im Haus der DECHEMA in Frankfurt am Main statt. Die Veranstaltung soll Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern die Möglichkeit geben, prioritäre Forschungsthemen in der Chemie, Chemischen Technik und Biotechnologie zu identifizieren und deren mögliche Umsetzung in einem offenen Netzwerk mit Partnern aus dem akademischen Bereich, der Industrie und Forschungsförderern zu diskutieren. Ein besonderes Anliegen ist es auch, gemeinsam mit der DFG den Brückenschlag zwischen Grundlagenforschung und der anwendungsorientierten Forschung zu versuchen.

http://www.dfg.de/aktuelles_presse/information_fuer_die_wissenschaft/andere_verfahren/info_wissenschaft_62_08.html

Erneute Ausschreibung für deutsch-amerikanische Projekte in der Chemie

Mit einer weiteren Ausschreibung für deutsch-amerikanische Projekte in der Chemie wollen die DFG und die US-amerikanische National Science Foundation (NSF) die Zusammenarbeit zwischen Teams beiderseits des Atlantiks weiter verstärken und fördern. Dabei können alle bei der DFG antragsberechtigten Personen gemeinsam mit ihren amerikanischen Partnern Projektanträge in allen Gebieten stellen, die sowohl durch die DFG (Gruppe Chemie und Verfahrenstechnik) als auch die NSF (Division of Chemistry) gefördert werden; ausgenommen sind jedoch Themen aus der Verfahrenstechnik und aus der chemischen Materialforschung.

http://www.dfg.de/aktuelles_presse/information_fuer_die_wissenschaft/ausschreibungen_mit_internationalem_bezug/info_wissenschaft_58_08.html

Call for Proposals - DFG Priority Programme 1391 „Ultrafast Nanooptics"

The aim of the newly established Priority Programme „Ultrafast Nanooptics" is to analyse and coherently control the spatiotemporal dynamics of electromagnetic excitations in metallic nanostructures and hybrid nanostructures consisting of metals in contact with optically active materials. „Ultrafast nanooptics", the new field of research we envision, offers substantially more than the sum of high temporal and spatial resolution. Dynamic field-localisation offers new and flexible means to control light matter interaction on the nanoscale. Understanding and manipulating these nanoscale field dynamics as well as their application for excitation of nanostructures are challenging tasks to be tackled in this programme, using both theoretical and experimental approaches.

http://www.dfg.de/aktuelles_presse/information_fuer_die_wissenschaft/schwerpunktprogramme/info_wissenschaft_61_08.html

Dr. Johanna Kowol-Santen
Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)
-Chemie und Verfahrenstechnik-
D-53170 Bonn
Johanna.Kowol-Santen@dfg.de
http://www.dfg.de

44TH SYMPOSIUM ON THEORETICAL CHEMISTRY

From Basic Principles to Applications, 23-27. September 2008 Ramsau am Dachstein, Österreich

Sponsors

Bundesministerium für Wissenschaft und Forschung (Austria), Graz University of Technology, NAWI Graz, Das Land Steiermark, Bundesministerium für Verkehr, Innovation und Technologie (Austria), FEMtech, AVL, ACP IT Solutions, Sun Microsystems, Hewlett-Packard, Ramsau am Dachstein, der Dachstein, Eslevier, Canon, Beilstein, Scopus, Bank Austria UniCredit Group, Wiley-VCH, ccl.net, Viewveg+Teubner, and Gesellschaft Österreichischer Chemiker (GÖCh).

Organization

Institute of Inorganic Chemistry,
Institute of Physical and Theoretical Chemistry
Graz University of Technology and Austrian Federal Ministry of Science and Research

Organizing committee
Michaela Flock, Anne-Marie Kelterer

Local organizers, EDV-Support
Michael Ramek, Helmut Eisenkölbl

Local team
Alk Dransfeld, Elisabeth Payrer, Sabine Richert, Barbara Schiefer, Jörg Samannshausen, Amra Suljanovic and Petra Wilfing

Ramsau am Dachstein, an idyllic village located at the foot of the magnificent, albeit often foggy Dachstein mountain, was the stage for the Symposium on Theoretical Chemistry, which took place September 23th to 27th 2008 in the Steiermark, Austria. For this 44th edition of the symposium the theme "From Basic Principles to Application" was chosen, which paved the way to a very general conference where a wide range of subjects was treated. The organizers, guided by Michaela Flock and Anne-Marie Kelterer, conveniently divided the broad audience conference program in different thematic sessions. Following the trend from the last few editions, the meeting has increased again this year its international stature: about 200 scientists from European countries took part in the symposium, mostly from Germany, Austria and Switzerland, but also from Italy, Poland, Denmark and Czech Republic, as well as some American nationals. The program comprised 10 invited lectures, 21 contributed presentations and 125 posters, all presented in the fully equipped conference center Ramsau-Zentrum, which provided an optimal environment for stimulating scientific discussions. It is noteworthy that the organizers succeeded in creating a well balanced program with many prominent speakers featuring a large quota of women.

A brief overview of the invited lectures

Following an informal gathering on the opening day, the symposium started in the early morning with a session on reaction dynamics. The presentation by Leticia González (Jena) gave the tone by directing the focus to excited states dynamics,

Figure 1: A large number of participants came from all Europe and from America.

Figure 2: Members of the audience enjoying yet another great lecture.

in particular to the control of chemical reactions involving excited states. Another presentation by Claudia Ambrosch-Draxl (Leoben) shed light on the intricate dynamics of mound formation of sexiphenyl molecule in mica, using DFT calculations, nucleation theory and transition state theory, revealing a layer-dependent step edge barrier for the process. On the last session of the first day, Irmgard Frank (Hannover) showed how to use the restricted open-shell Kohn-Sham approach with molecular dynamical calculations, with application in particular to organic photoreactions. A few speakers shifted the focus from chemistry to material science. Georg Kresse (Vienna) presented novel development in periodic plane waves codes allowing the use of Fock exchange and perturbation theory for the description of thermodynamical properties of materials. Avery formal seminar was given by Emily Carter (Princeton), who presented methodological developments towards purely linear scaling algorithms for extracting properties of molecules and materials. In particular, orbital-free density functional theory was hailed as the most natural and efficient way to achieve this goal. Examples from material science as well as from chemistry showed convincingly that the approach is of great interest. Somewhat harder to categorize, Laura Gagliardi (Geneva) offered an inspiring talk about multiconfigurational quantum chemical calculations. Apart from the methodological aspects, the prediction of novel metal hydrides counted as part of the most interesting results.

Large biological molecules as well as solvation effects were tackled by several speakers. A guest from Italy, Roberto Improta (Napoli), reported on his studies of excited states of DNA including solvent and base stacking effects. Barbara Kirchner (Leipzig) shed the light on the facts and opinions about the solvent effects in chemistry and on the possible pitfalls on the way towards an appropriate treatment of solvent. In a more applied talk, Joost VandeVondele (Zürich) showed convincingly that using „post-GGA" methods to characterize the functionalized solid/liquid interface in dye solar cells accounts for the correct electronic structure of the dye. Andreas Dreuw (Frankfurt) was invited to talk about his quantum mechanical calculations to explain the anomalous fluorescence red-shift of the 4-(Dimethylamino)benzoic acid methyl ester in gas phase. A twisted intramolecular charge-transfer mechanism was proposed and investigated to explain the experimental findings. On the last day of the symposium Christel Marian (Düsseldorf) gave a seminar about the electronic spectra and spin-orbit coupling of biological chromophores with the help of DFT and multiconfiguration methods, in order to reveal the complex nature of their electronic structure.

A plethora of contributed talks

Quantum, classical and mixed dynamics were very well represented among the contributed talks. The presentation by Roland Mitric (Berlin) focused on trajectory-based methods for driving photochemical reactions using ultrashort laser pulses, involving excited states dynamics. The seminar by Mario Barbatti (Vienna) followed along those lines, presenting mixed quantum-classical methods for treating ultra-fast processes in organic molecules via excited states relaxation. Applications of multiconfiguration methods were presented by Mathias Nest (Potsdam), who discussed ideas for treating correlated quantum dynamics of large systems in dissipative environments. The talk by Marcus Böckmann (Bochum), on the use of a novel non-adiabatic restricted open-shell Kohn-Sham method for molecular dynamics simulations of photoswitching of azobenzene, sparked a very passionate debate between some members of the audience.

A few contributed talks were concerned with the application of coupled cluster and (TD)DFT methods to the calculation of molecular properties. Tatiana Korona (Warsaw) showed how to use density matrix concepts to describe the electron correlation at the coupled cluster level of theory in a symmetry-adapted perturbation theory framework. Further, Stephan Sauer (Copenhagen) extensively studied the comparison between DFT and coupled cluster results for the NMR shielding tensor. Two other speakers, Nikolai Kryzhevoi (Heidelberg) and Petr Slavícek (Prague), also offered very stimulating presentations on methods for extracting spectra of ions and molecules in aqueous solutions. A spectral analysis of small gas phase cations found in interstellar media have then been discussed Peter Botschwina (Göttingen). The embedding of the algebraic diagrammatic construction in a fully relativistic framework was presented by Markus Pernpointner (Heidelberg), who also applied his ideas to the prediction of the ionization spectra of some platinum complexes and van der Waals clusters.

The study of large systems represented another hot topic of the STC 2008. A description of the embedding scheme to model extended systems in terms of localized orbitals was

given by Beate Paulus (Berlin), as well as its application to metallic systems. In another presentation focused on material properties, Jörg Behler (Bochum) exposed his ideas for using a symmetry-adapted neural network fitting procedure in combination with metadynamics to render more efficient the determination of intramolecular forces for large systems and the prediction of the pressure phase diagram of crystals. Stephan Baeurle (Regensburg) exposed his views on the use of field-theoretic methodologies for treating the multiscale problems arising in the calculation of molecular properties of a wide variety of polymers. Shifting to more biological systems, Martin Korth (Münster) advocated using Fixed Node Diffusion Monte Carlo, as implemented in Quantum Monte Carlo at home (QMC@home), for studying the noncovalent interactions in biomacro molecules such as DNA. Further, Tomás Kubar (Braunschweig) presented a novel multi-scale framework for studying the charge transfer in DNA, combining classical molecular dynamics and quantum mechanical calculations.

Some speakers presented their latest methodological developments. The presentation of Joachim Friedrich (Cologne) focused on a general purpose implementation of the incremental scheme to treat local electron correlation. Andreas Heßelmann (Erlangen) reported on an interesting scheme to introduce exact exchange in time-dependent density functional theory (TDDFT), as applied to several small molecules. Still along those lines Andreas Hansen (Bonn) introduced a semi-local correlation method to treat large electronic systems, based on the coupled pair approximation, the density fitting, and other approximations, which has advantageous scaling properties. The formal talk by Dmitrij Rappoport (Irvine) discussed ways of improving the quality of the results obtained with TDDFT by optimizing the atomic basis sets used in the calculations. The delicate task of being the last speaker of the symposium fell to Reinhold Fink (Würzburg), who took this opportunity to talk about quantum chemical calculations explaining the behavior of excitons in organic solar cells. Interestingly, this last presentation sparked another passionate discussion among members of the audience, proving once and for all that the last is not always the least.

Miscellaneous

The Hellmann prize was given on the third conference day to Robert Berger (Frankfurt), who gave a very pedagogic presentation about electroweak parity violation in chemistry. Application to small organic molecules demonstrated notably that full relativistic treatment is generally not necessary to study such phenomena, as a perturbative 2-component relativistic treatment would often be sufficient. Later on that day, an excursion on the Dachstein summit was proposed to the participants, where „the conference dinner reached news heights" (the pun is originally from Dirk Andrae). Four outstanding

Figure 3: Robert Berger receiving the Hellmann prize from the hands of Wolfgang Domcke.

poster presentations were awarded a special mention. For the first session, sponsored by AVL-List GmbH, the first prize was given to Artur Nenov (Munich) for his presentation "Characterization of the conical intersection seam for trifluoromethylpyrolylfulgid, a highly substituted cyclohexadiene derivative" and the second prize came to Matthias Ruckenbauer (Vienna) for his poster „QM/MM for excited state and nonadiabatic systems". For the second session, sponsored by ACP-IT Solutions GmbH, the first prize fell to Matthias Mehring (Oldenburg) for his poster "Adsorption of CO on TiO2 (100): a first principle approach" and the second prize was given to Stefan Klinkusch (Potsdam), who presented "LASER-induced intermolecular electron transfer calculated by means of TD-CIS". The poster prizes were sponsored by Elsevier Information Systems GmbH.

The conference was organized by the Graz University of Technology in conjunction with the Austrian Federal Ministry of Science and Research. The symposium was sponsored by a large number of organisms (BM.VIT, Das Land Steiermark, NAWI Graz, FEMtech, Ramsau am Dachstein, der Dachtein, GÖCh), partners from industry (AVL-List GmbH, ACP IT Solution GmbH, Hewlett-Packard, Sun Microsystems, Canon, Bank Austria UniCredit Group, Scopus) and publishers (Elsevier Information Systems GmbH, Vieweg-Teubner, Wiley-VCH). Their support, as well as the dedication of Michaela Flock and Anne-Marie Kelterer, helped creating a favorable context for scientific exchange in an enchanting environment.

Jean Christophe Tremblay
Institut für Chemie
Universität Potsdam

Mitgliederversammlung

44. Symposium für Theoretische Chemie
Ramsau am Dachstein, 25. September 2008

25. September 2008, 18.00h-18.30h

Tagesordnung

1. Genehmigung der Tagesordnung
2. Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung 2007 in Saarbrücken
3. Bericht des Vorsitzenden
4. Bericht und Wahl des Kassenprüfers
5. Wahl des Vorstands 2008
6. Zukünftige Symposien
7. Verschiedenes

Protokoll

TOP 1

Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Änderung genehmigt.

TOP 2

Das Protokoll der Mitgliederversammlung 2007 war im INFO TC (November 2007) abgedruckt. Es wird ohne Änderungen genehmigt.

TOP 3

Bericht des Vorsitzenden

1. Hellmann-Preis
Für den Hellmann-Preis 2008 sind 5 Nominierungen eingegangen. Der Preisträger 2008 ist Dr. Robert Berger, FIAS, Universität Frankfurt. Das Preisgeld ist 1000,- €.

2. INFO TC
Das INFO TC wurde 2007/2008 von der Arbeitsgruppe Klopper in Karlsruhe herausgegeben.
Die Versammlung dankt der Arbeitsgruppe für ihren Einsatz. Für 2008/2009 wird das INFO TC von der Arbeitsgruppe Bonacic-Koutecky herausgegeben. Ebenfalls vielen Dank!

3. Hohe Auszeichnung
Frank Neese (Uni Bonn) wurde mit dem Klung-Wilhelmy-Weberbank 2008 (100.000,- €) ausgezeichnet. Dies ist die höchst-dotierte Auszeichnung für jüngere Wissenschaftler in Deutschland. Die Mitgliederversammlung gratuliert.

TOP 4

Bericht und Wahl des Kassenprüfers
Dr. Frank Mark (Mülheim) stellt den Kassenbericht 2007 vor.

1. Kassenstand AGTC:
AGTC-Konto am 31. 12. 2007: 15.914,73 €
Einnahmen 2639,- € (2007: 2470,- €)
entspricht 203 zahlenden Mitgliedern
Ausgaben: 58 € für EDV/Internet

2. Hellmann Fonds:
Stand 31. 12. 2007: 34.709,- €
Einnahmen: Spenden 500,- € (2006: 6280 €)
Zinserträge: 624,- €
Ausgaben: 1000,- € Preisgeld
Stiftungsvermögen angewachsen um 124,29 €.

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

Die Mitgliederversammlung beschließt einstimmig die Entlastung des Vorstands.

Dr. Mark wird einstimmig zum Kassenprüfer für das Jahr 2008 bestellt.

Die Zahl der (zahlenden) Mitglieder ist von 2007 auf 2008 leicht angestiegen. 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

Vorstandswahl 2008

5 Mitglieder sind zu wählen.
Kandidaten-Vorschlag des Vorstands:

Jürgen Gauß, Gernot Frenking, Gotthard Seifert, Hans-Joachim Werner kandidieren nochmals.

Weiterhin werden Stefan Grimme und Christel Marian vom Vorstand nominiert. Stefan Grimme und Christel Marian haben die Kandidatur angenommen.

Von der Mitgliederversammlung des Symposiums werden vorgeschlagen:
Barbara Kirchner, Jörn Manz, Beate Paulus, Christoph van Wüllen.

Die Anwesenden erklären ihre Bereitschaft zur Kandidatur.
Die schriftliche Wahl wird im Dezember 2008/Januar 2009 stattfinden.

TOP 6

Zukünftige Symposien für Theoretische Chemie

Das STC 2009 wird von Christel Marian und Mitarbeitern organisiert.
Es wird von Mi, 9. 9. bis Sa, 12. 9. 2009 im Telekom-Tagungshotel Neuss stattfinden.

Das STC 2010 wird von Stefan Grimme und Mitarbeitern organisiert werden.

Garching, 1. Oktober 2008
W. Domcke

Tagungen

Tagungsvorschau 2009/2010

2009

DPG-Tagungen 2009
http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2009.html

73. Jahrestagung der DPG und DPG Frühjahrstagung des AMOP
Hamburg, 02. - 06. März 2009

DPG Frühjahrstagung
Bochum, 16. - 20. März 2009
Hadronen und Kerne

DPG Frühjahrstagung
Greifswald, 30. März - 03. April 2009
Plasmaphysik

DPG Frühjahrstagung
München, 9. - 13. März 2009
Extraterrestrische Physik
Gravitation und Relativitätstheorie
Teilchenphysik
Theoretische und Mathematische Grundlagen der Physik
Arbeitskreis Philosophie der Physik

DPG Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik (AKF; künftig SKM Sektion Kondensierte Materie)
Dresden, 23. - 27. März 2009

17. – 20. 2. 2009, Mariapfarr, Österreich
Workshop on Theoretical Chemistry 2009: Molecular Interactions
http://www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr

8. – 11. 3. 2009, Göttingen
Chemiedozententagung

21. – 23. 5. 2009, Köln
Bunsentagung 2009
Hauptthema: Physical Chemistry of Solids: The Science behind Materials Engineering
http://www.bunsen.de

22. – 27. 6. 2009. Helsinki /Finnland
International Congress of Quantum Chemistry
http://www.helsinki.fi/kemia/icqc

21.-25. 8. 2009, Insbruck, A
31. International Conference on Solution Chemistry
http://www.icsc2009.org

30. 8. -2. 9. 2009, Frankfurt a. M.
GdCh-Wissenschaftsforum Chemie 2009
„Mit Chemie sicher leben"
http://www.gdch.de

31.8. – 4. 9. 2009, Lyon, F
International Conference on the applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics -FT09-
http://www.dft09.org

9. - 12. 9. 2009, Neuss
45. Symposium für Theoretische Chemie
http://www.chemie.uni-duesseldorf.de/STC2009/

2010

DPG-Tagungen 2010

http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2010.html

74. Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung der Fachverbände
Bonn, 15. – 19. März 2010

DPG Frühjahrstagung der Sektion AMOP (SAMOP)
Hannover, 8. 12. März 2010

DPG Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM)
Regensburg, 22. – 26. März 2010

13. 5. -15. 5. 2010, Bielefeld
Bunsentagung 2010
Hauptthema "Interface systems chemistry: Out of the Vacuum - through the Liquid- into the Cell "
http://www.bunsen.de/Veranstaltungen/Bunsentagungen-p-27.html

Hinweise auf weitere Tagungskalender

Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie, Symposien, Tagungen
http://www.theochem.de/agtc.home.html

Deutsche Physikalische Gesellschaft, Tagungen
http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/kalender.html

CONFMENU von Prof. Young S. Kim
http://www.physics.umd.edu/robot

Gesellschaft Deutscher Chemiker, Tagungen
http://www.gdch.de/vas/tagungen.htm

Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen
http://www.bunsen.de/

Konferenzdienst Mandl
http://www.conference-service.com

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

Stand: 18. 10. 2008

Sie finden die aktuelle Fassung unter
www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html

Winter School 2009

Multiscale Simulation Methods in Molecular Sciences
2.-6.03.2009

Scope of the School

The Winter School 2009 continues a series of Schools that was devoted over the years to several well-defined and mature areas like „Quantum Chemistry" (2000), „Quantum Many-Body Systems" (2002), „Soft Matter" (2004), or „Nanoscience" (2006). This School will cover three main strings of themes focusing on how to deal with hard matter, soft matter, and bio matter when it is necessary to cope with disparate length and time scales. Therein aspects like coarse graining of molecular systems and solids, quantum/classical hybrid methods, embedding and multiple time step techniques, creating reactive potentials, multiscale magnetism, adaptive resolution ideas or hydrodynamic interactions will be discussed in detail. In addition, another string of lectures will be devoted to the genuine mathematical and the generic algorithmic aspects of multiscale approaches and their parallel implementation on large, multiprocessor systems including techniques such as multigrid and wavelet transformations. Although this is beyond what can be achieved in a very systematic fashion given the breadth of the topic, introductions into fundamental techniques such as molecular dynamics, Monte Carlo simulation, and electronic structure (total energy) calculations in the flavor of both wavefunction-based and density-based methods will be provided.

The School about „Multiscale Simulation Methods in Molecular Sciences" is tailored for PhD students and early Postdocs with a solid background in basic quantum mechanics coming from physics, chemistry, material science and related disciplines.

Keynote Speakers and Lecturers

Joerg Behler, Luigi Delle Site, Ralf Drautz, Burkhard Duenweg, Marcus Elstner, Stefan Goedecker, Christof Haettig, Bernd Koerfgen, Peter Kratzer, Kurt Kremer, Phivos Mavropoulos, Bernd Mohr, Stefan Mueller, Aiichiro Nakano, Mike Payne, Anthony T. Paxton, Arnold Reusken, Karsten Reuter, Godehard Sutmann, Klaus Schulten, Walter Thiel, Mark E. Tuckerman, Wolfgang Wenzel, Rudolf Zeller

For the lecture titles see
www.fz-juelich.de/wsms/speaker

Programme Committee

Johannes Grotendorst, IAS-JSC, Forschungszentrum Juelich
Norbert Attig, IAS-JSC, Forschungszentrum Juelich
Stefan Bluegel, IFF & IAS, Forschungszentrum Juelich
Dominik Marx, Chair of Theoretical Chemistry, Ruhr-Universitaet Bochum

Participation

The number of participants is limited to 50. The participants will be selected by the programme committee on the basis of the scientific background of the applicants. Interested young scientists are invited to submit an applicaton to wsms@fz-juelich.de before 31 December 2008. For details see

www.fz-juelich.de/wsms/application

The programme committee will decide in the week 5 - 9 January 2009 on acceptance or rejection of the application and will immediately inform the applicants by e-mail.

Poster Presentations

All participants are kindly invited to present a poster on topics in their working group or on their own work during the School. Detailed information is provided on
www.fz-juelich.de/wsms/posters

Fees

Registration fee: 150,- Euro

The fee includes meals, social events, lecture notes, and the commuter bus service between Juelich and Aachen. Participants are asked to bear travel and accommodation costs themselves.

For details see
www.fz-juelich.de/wsms/registration

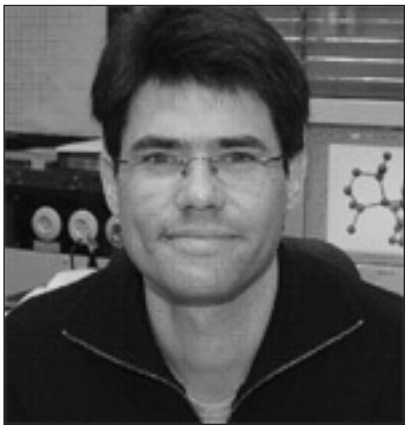
We are looking forward to seeing you in Juelich,

Johannes Grotendorst, IAS-JSC, Juelich
Norbert Attig, IAS-JSC, Juelich
Stefan Bluegel, IFF & IAS, Juelich
Dominik Marx, Ruhr-Universitaet Bochum

Klung-Wilhelmy-Weberbank-Preis

erhält Prof. Dr. Frank Neese für Chemie

Der diesjährige Klung-Wilhelmy-Weberbank-Preis wird an Prof. Dr. Frank Neese, Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Bonn, verliehen. Der mit 100.000 Euro ausgestattete Preis ist die höchst dotierte Auszeichnung für jüngere Wissenschaftler in Deutschland. Mit seinen Bahn brechenden Arbeiten zur hocheffizienten Berechnung der Elektronenstruktur großer Moleküle ermöglicht der gelernte Biologe Frank Neese experimentell tätigen Naturwissenschaftlern in vielen Arbeitsgebieten, ihre Ergebnisse präzise und effizient zu interpretieren und neue sinnvolle Experimente zu konzipieren. Die Preisverleihung findet am 14. November 2008 an der Freien Universität Berlin statt.

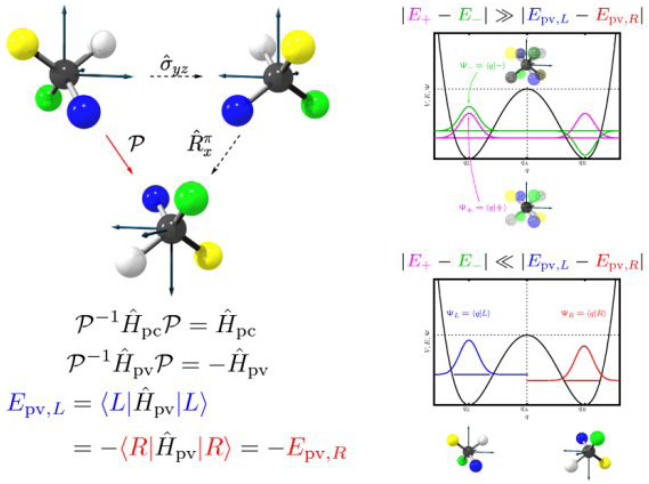


Prof. Dr. Frank Neese

Hans G. A. Hellmann-Preis

geht in diesem Jahr an Dr. Robert Berger

Für seine richtungsweisenden Arbeiten zur elektroschwachen Quantenchemie und zu fundamentalen Eigenschaften chiraler Moleküle erhält Dr. Robert Berger, Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS), Johann Wolfgang-Goethe Universität, den Hellmann-Preis 2008.
Robert Berger hat mit seinen Arbeiten zur elektroschwachen Wechselwirkung in der Molekülchemie ein modernes Forschungsgebiet für die Quantenchemie erschlossen. Er hat einen systematisch verbesserbaren Ansatz zur Berücksichtigung der schwachen Wechselwirkung in der Quantenchemie etabliert und zur Vorhersage paritätsverletzender Effekte in der Spektroskopie chiraler Moleküle angewandt. Die hierzu realisierten Konzepte stellen methodische Fortschritte auch für konventionelle Anwendungen dar, etwa der theoretischen rovibronischen Spektroskopie.



Ioannes Marcus Marci Medaille

Prof. Per Jensen der Universität Wuppertal erhielt am 3. September 2008 von der Tschechischen-Slowakischen Spektroskopischen Gesellschaft die Iohannes Marcus Marci Medaille.

Nachruf

Prof. em. Jürgen Hinze, Ph.D.

Am 10. Oktober 2008 verstarb Jürgen Hinze, Ph.D., Professor emeritus für Theoretische Chemie an der Universität Bielefeld, im Alter von 71 Jahren. Jürgen Hinze studierte Chemie an der Technischen Hochschule (heute Universität) Stuttgart bis zum Vordiplom (1959), setzte sein Studium dann mit Hilfe eines Fulbright-Stipendiums in den U.S.A. fort und promovierte 1962 bei Hans H. Jaffé in Cincinnati. Nach Aufenthalten als Postdoktorand bei Kenneth S. Pitzer (Houston, 1962–1964) und Theodor Förster (Stuttgart, 1964–1966) ging er zu Robert S. Mulliken und Clemens C. J. Roothaan an das Laboratory of Molecular Structure and Spectra (LMSS) in Chicago. Bereits nach einem Jahr wurde er Assistant Professor am Department of Chemistry der University of Chicago. Im Jahr 1975 nahm Jürgen Hinze einen Ruf an die neu gegründete Universität Bielefeld an, und wurde einer der vier Gründungsprofessoren der Fakultät für Chemie. Das Fach Theoretische Chemie hat er dort in Forschung und Lehre bis zu seiner Emeritierung 2002 vertreten. Er war zweimal Dekan der Fakultät für Chemie, lange Mitglied des Senats der Universität Bielefeld sowie Vorsitzender des Ortsverbands Bielefeld der Gesellschaft Deutscher Chemiker. Die ausgezeichneten Möglichkeiten des Bielefelder Zentrums für interdisziplinäre Forschung (ZiF) nutzte er zur Durchführung sogenannter ZiF:Forschungsgruppen ("Eigenschaften und Reaktionen isolierter Moleküle und Atome", 1978–1980; "Interactions of Oriented Molecules", 1996/1997) und internationaler Tagungen, die auch außerhalb der Fachgrenzen Beachtung fanden. Seine Forschungsbeiträge waren oft grundlegend und wegweisend, seine Arbeitsgebiete reichen von chemischen Konzepten (Elektronegativität, Populationsanalyse) über Methodenentwicklung und Anwendungen in Quantenchemie, Quantendynamik und Streutheorie (MCSCF, hypersphärische Koordinaten und Funktionen, R-Matrix-Theorie) bis zur Chemieinformatik (SMILES-Strings und graphische Benutzeroberflächen) und der Geschichte der Quantenchemie (Hans Hellmann). Diese ungewöhnliche und bemerkenswerte thematische Vielfalt spiegelt seine vielseitigen Interessen nur zum Teil wider. Jürgen Hinze war auch passionierter Segler, begeisterter Koch, und ein Meister im Flugmodellbau. Mit seinem Tod haben wir einen großen Wissenschaftler und die Theoretische Chemie einen ihrer Wegbereiter verloren.

Priv.-Doz. Dr. Dirk Andrae, Freie Universität Berlin
andrae@chemie.fu-berlin.de
dirk.andrae@uni-bielefeld.de

Stellenanzeigen

Academic position
Theoretical Chemistry

The University of Namur - FUNDP, Department of Chemistry, Namur, Belgium

The Department of Chemistry at the University of Namur - FUNDP - invites applications for a Faculty position in the area of „Theoretical Chemistry" starting Spring 2009.
Applicants will be expected to have earned a Ph.D degree in chemistry or related disciplines and possess a post-doctoral experience with a proven and outstanding record of accomplishments in "theoretical chemistry".
The successful candidate will be expected to participate, in the mean term in French, in the normal teaching program (i.e., quantum chemistry, statistical mechanics, non-equilibrium thermodynamics, …) of the university at the bachelor, master, and graduate level.
The occupant of the position will have to develop an outstanding program of new fundamental methodologies in Theoretical Chemistry with strong complementarities with other research groups of the department and the university. The research will be conducted in the "Unité de Chimie Physique, Théorique et Structurale" and inscribed in one of the poles of excellence of the department: "Chimie du vivant" and "Chimie des (nano)matériaux". The originality of the proposed research program will be a primordial criterion in the selection of the candidate.
Applicants should submit the following documents to Prof. M. Scheuer, Rector of the University of Namur, 61 rue de Bruxelles, B-5000 NAMUR (Belgium): the completed and signed copy of the official application form (downloadable from http://www.fundp.ac.be/universite/jobs) accompanied by a complete curriculum vitae (including research accomplishments, teaching experiences, and a publication list), a detailed research program, a list of collaborations, a teaching statement, and a list of at least three referees by December 15, 2008.
Further information can be obtained via Profs D.P. Vercauteren, J. Wouters, or B.-L. Su, Director of the Chemistry Department (email: daniel.vercauteren@fundp.ac.be, johan.wouters@fundp.ac.be, direction.chimie@fundp.ac.be; Tel.: 0032 81 72 45 34, 0032 81 72 45 50, 0032 81 72 45 31).

Academic position
Theoretical Chemistry

The University of Namur - FUNDP, Department of Chemistry, Namur, Belgium

The Department of Chemistry at the University of Namur - FUNDP - invites applications for a Faculty position in the area of „Theoretical Chemistry" starting Spring 2009.
Applicants will be expected to have earned a Ph.D degree in chemistry or related disciplines and possess a post-doctoral experience with a proven and outstanding record of accomplishments in "theoretical chemistry". The successful candidate will be expected to participate, in the mean term in French, in the normal teaching program (i.e., quantum chemistry, statistical

mechanics, nonequilibrium thermodynamics, …) of the university at the bachelor, master, and graduate level.
The occupant of the position will have to develop an outstanding program of new fundamental methodologies in Theoretical Chemistry with strong complementarities with other research groups of the department and the university. The research will be conducted in the "Unité de Chimie Physique, Théorique et Structurale". The originality of the proposed research program will be a primordial criterion in the selection of the candidate.
Applicants should submit the following documents to Prof. M. Scheuer, Rector of the University of Namur, 61 rue de Bruxelles, B-5000 NAMUR (Belgium): the completed and signed copy of the official application form (downloadable from http://www.fundp.ac.be/universite/jobs) accompanied by a complete curriculum vitae (including research accomplishments, teaching experiences, and a publication list), a detailed research program, a list of collaborations, a teaching statement, and a list of at least three referees by January 23, 2009.
Further information can be obtained via Profs D.P. Vercauteren, J. Wouters, Prof. B.- L. Su, Director of the Chemistry Department (email: daniel.vercauteren@fundp.ac.be, johan.wouters@fundp.ac.be, bao-lian.su@fundp.ac.be;
Tel.: 0032 81 72 45 34, 0032 81 72 45 50, 0032 81 72 45 31).

Postdoctoral Position in Theoretical Chemistry

Topic: Methodology and application of relativistic quantum chemistry. Photoelectron spectra of molecules with heavy elements and corresponding electronic decay processes.

- A three-year full position, financed through an approved DFG grant.
- Implementation of the two-particle propagator into the DIRAC program system together with a powerful final state analysis.
- Calculation of single and double ionization spectra and electronic decay mechanisms by the propagator method; interpretation of experimental spectra; possible extension to lifetime calculations.
- Investigation of relativistic effects on electronic decay processes such as Auger decay, Intermolecular Coulombic Decay (ICD) and Electron Transfer Mediated Decay (ETMD) in heavy systems.

Please contact:
PD Dr. M. Pernpointner
University of Heidelberg,
Theoretical Chemistry
Im Neuenheimer Feld 229
69120 Heidelberg, Germany
Phone: 0049-6221-545262, Fax.: 0049-6221-545221
email: Markus.Pernpointner@pci.uni-heidelberg.de

PhD Position in Theoretical Chemistry

Center for Theoretical Chemistry, University of Bochum, Germany

In a joint project of the groups of Dr. Behler and Professor Marx a PhD fellowship is available at the Ruhr-University in Bochum. The project will be embedded in the NRW Research School "Research with Synchrotron Radiation" and involves state-of-the-art density-functional theory calculations and molecular dynamics simulations for complex processes at surfaces. A close collaboration with experimental groups within the Research School is envisaged. The Center for Theoretical Chemistry at the Ruhr-University offers an exciting interdisciplinary research environment and excellent facilities including several high-performance parallel platforms in house.

For more information, please see: www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/home.en.html.

Please send your application including CV (preferably by email) to
Dr. Jörg Behler
Lehrstuhl für Theoretische Chemie
Ruhr-Universität Bochum
44780 Bochum, Germany
Email: joerg.behler@theochem.rub.de

Consideration of candidates will begin immediately and continue until the position is filled. The University particularly welcomes applications from women.

Junior Research Group Leader / Research Associate Position: Ab Initio Biomolecular Simulation

Center for Theoretical Chemistry, University of Bochum, Germany

Applications are invited for a research associate position which is available immediately or upon mutual agreement. Depending on the applicant there will be the opportunity for establishing a Junior Research Group and for academic qualification in the framework of Habilitation. The ideal candidate should have significant experience in electronic calculations of complex biomolecular systems and reactions, including preferentially multiscale QM/MM–type approaches. A PhD in theoretical physics or chemistry is required, as well as research experience as a postdoc. She or he will be involved in a number of challenging projects in the realms of ab initio biomolecular simulation (see e.g. some of our recent papers: JACS Commun. 130, (2008) 2768; PNAS 104 (2007) 20725; PNAS 104 (2007) 6980; JACS 128 (2006) 13815). Information on the techniques used and developed at CTC are accessible via www.theochem.rub.de/go/cprev.html.

The Center for Theoretical Chemistry at RUB offers an exciting interdisciplinary research environment and excellent facilities including several high-performance parallel platforms in house, see www.theochem.rub.de/go/jobs.html. Candidates should send a detailed resume including an outline of their research achievements and interests as well as contact information to obtain academic references to:

Prof. Dominik Marx
Lehrstuhl fuer Theoretische Chemie
Ruhr-Universitaet Bochum
44780 Bochum, Germany
Email: theochem@theochem.rub.de

There is no deadline. Consideration of candidates will begin immediately and continue until the position is filled. The University particularly welcomes applications from women.

Ph.D. Student Position inTheoretical Molecular Chemistry/Quantum Optics

In a long-term research program we are pursuing high-resolution spectroscopy of the molecular hydrogen ions, with the goal of determining fundamental constants such as the electron-to-proton mass ratio, the radii of proton and deuteron, and the quadrupole moment of the deuteron. A second goal is development of methods for the manipulation of cold molecules. The molecular ions are trapped in an ion trap and cooled to milliKelvin temperature using laser cooling. We perform spectroscopy in the radio-frequency, THz and optical domains.

We are looking for a skilled and highly motivated theoretical Ph.D. student to develop a detailed theoretical understanding of the interaction of single and ensembles of trapped molecular hydrogen ions with external fields (Zeeman and Stark effects, light shifts, one- and two-photon transitions), including hyperfine structure and coherence effects, that will be applied for an accurate interpretation the experimental results.
Applicants should have experience in quantum mechanical calculations. Salary level is 50% EG 13.

Apply to: Prof. S. Schiller, step.schiller@uni-duesseldorf.de
For further information, see www.exphy.uni-duesseldorf.de

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

Doktoranden oder Postdoc Stellen

am Institut für Theoretische Chemie, Universität Stuttgart

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

Postdoctoral Positions in Theoretical Chemistry

at the Chemistry Department of the Humboldt University in Berlin

Topic:
Methodology and application of combined quantum chemical and molecular dynamics methods for:
1) Theoretical design of hybrid nanocluster-biomolecule based fluorescent biochips
2) Exploration, analysis and control of photodynamics in microsolvated biochromophores

Full position is available in frame of SFB 450 "Analysis and Control of ultrafast photoinduced reactions" starting from 1. Jan. 2009 until 1. July 2010 in the theoretical chemistry group headed by Prof. Vlasta Bonačić-Koutecký.

Please contact Prof. Vlasta Bonačić-Koutecký:
vbk@chemie.hu-berlin.de
Phone: +49-30-2093-5579

Impressum

Prof. Dr. Vlasta Bonačić-Koutecký
Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin, Brook-Taylor-Str. 2, D-12489 Berlin
Tel: +49 (0)30 2093 - 5579, vbk@chemie.hu-berlin.de, http://www.chemie.hu-berlin.de/vbk

Redaktion: Matthias Wohlgemuth
Satz: Christian Schmelzer

November 2008