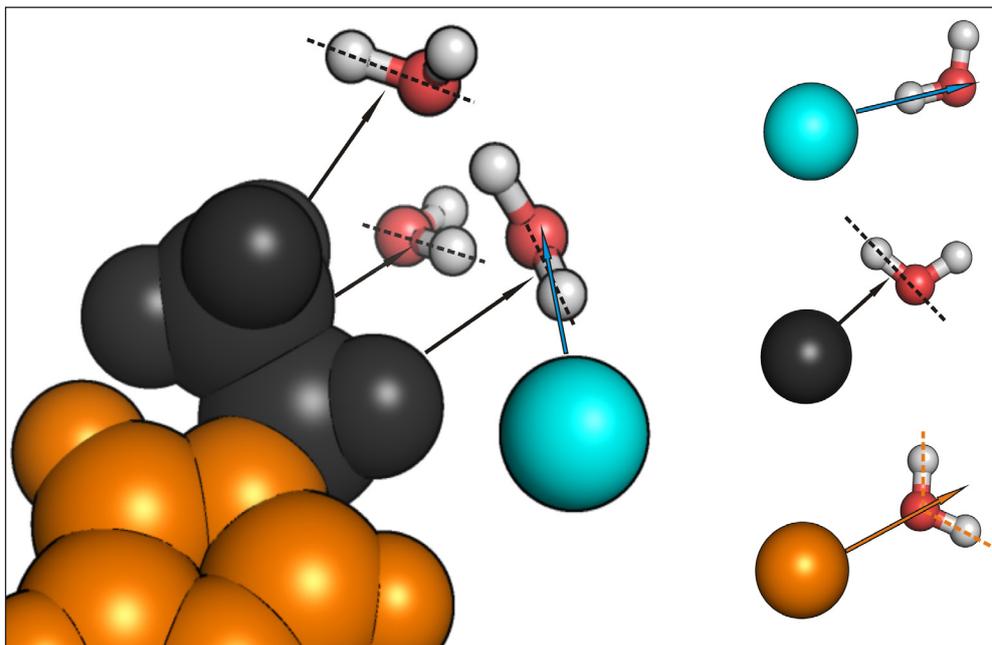


# Information

# THEORETISCHE CHEMIE

---

---



*B. Kirchner et al., J. Chem. Phys., 129, 104505 (2008)*

April 2009



# EDITORIAL

---

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

die Redaktion bedankt sich herzlich für die Ein-  
sendung der Beiträge zur vorliegende Ausgabe  
April 2009. Wir bitten um die Zusendung wei-  
terer Beiträge sowie aktueller Meldungen für die  
Rubriken Klatsch und Tratsch, Tagungstermine,

sowie von Stellenausschreibungen für die Ausgabe  
im November an: [vbk@chemie.hu-berlin.de](mailto:vbk@chemie.hu-berlin.de)

Berlin im April 2009  
Vlasta Bonačič-Koutecký

## INHALT

---

Arbeitsgruppen stellen sich vor	4
DFG- Mitteilungen	14
Wahl des Vorstands	16
13 <sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry	17
Klatsch und Tratsch	21
Stellenanzeigen	23

# ARBEITSGRUPPEN STELLEN SICH VOR

## Prof. Dr. Barbara Kirchner Theoretische Chemie Leipzig

### Das Institut

Die Theoretische Chemie in Leipzig gehört zum Wilhelm-Ostwald Institut (WOI) für Physikalische und Theoretische Chemie. Weitere Professuren des WOI werden von den experimentell-orientierten Kollegen Harald Morgner, Reinhard Denecke und Bernd Abel besetzt. Dabei liegt die Expertise von Prof. Dr. Morgner in der Oberflächenanalytik von sowohl flüssigen als auch festen Grenzflächen. Dazu verwendet die Morgner-Gruppe verschiedene Elektronenspektroskopie-Sorten wie die MIES (Metastable Induced Electron Spectroscopy), UPS, XPS und EELS. Mittlerweile wurde in der Morgner-Gruppe auch Ionen-Streu-Spektroskopie zur speziellen Untersuchung von flüssigen Oberflächen entwickelt, die sogenannten ICISS und NICISS (ion scattering spectroscopy) Methoden. Prof. R. Denecke beschäftigt sich hingegen mit der Elektronen- und Röntgenspektroskopie unter der Maßgabe der Oberflächenanalyse. Seine Untersuchungsobjekte sind Festkörperoberflächen und deren chemische Reaktivität sowie elektronische und geometrische Struktur. Er betrachtet mittels IR- und RAMAN- Spektroskopie die Adsorption aus der Gas- oder Flüssigphase an Festkörpern. Prof. Abel erforscht im Rahmen der molekularen Photonik die zeitaufgelöste (ultraschnelle aber auch langsame) Dynamik chemischer und biologischer relevanter molekularer Systeme in unterschiedlichen Umgebungen. Die Arbeitsgruppe um Bernd Abel interessiert sich sowohl für relativ kleine chemisch interessante Systeme als auch für sehr große



*Prof. Dr. Barbara Kirchner  
Lehrstuhl für Theoretische Chemie am Wilhelm-Ostwald Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Leipzig*

biomolekulare Systeme und Aggregate, die oft als Nanomaschinen fungieren. Durch die inhaltliche sowie räumliche Nähe und dank dem freundlichen Klima, welches in Leipzig herrscht, gibt es aber auch Affinitäten zu den anderen Fachbereichen, z.B. zur synthetisch-orientierten anorganischen Chemie, die sich schon in mehreren wissenschaftlichen Interaktionen gezeigt hat. So werden gemeinsam Studierende betreut, Forschungsanträge geschrieben und es wird gemeinsam an interessanten Themen geforscht.

### Zusammensetzung der Gruppe

Unsere Arbeitsgruppe unterliegt weiterhin einem ständigen Wechsel, weil sie sich noch im Aufbau befindet. Vor Ort befanden sich zum Zeitpunkt

meiner Ankunft in Leipzig die Arbeitsgruppe um Frau Priv.-Doz. Dr. Engler (siehe auch Engler-Teil) mit Ihrem Mitarbeiter Dr. A. Jeninchen, sowie Herr Dr. Matthias Kudra (Rechentechnik und Lehre). Zudem besuchen uns die drei Emeriti Prof. Dr. J. Reinhold, Prof. Dr. F. Dietz und Prof. Dr. D. Heidrich regelmäßig. Zur Geschichte finden Sie auf unseren Webseiten (<http://www.uni-leipzig.de/~pci/geschichte.htm>) und ([www.uni-leipzig.de/~quant](http://www.uni-leipzig.de/~quant)) weitere Hinweise. In Bonn hatte ich zur Zeit des Wechsels mit Herrn Dr. Werner Reckien einen Postdoktoranden, die beiden Doktoranden Jens Thar und Christian Spickermann, sowie die mit Herrn Prof. Dr. F. Neese betreute Diplomandin Simone Koßmann. Von diesen sind Jens Thar und Christian Spickermann mit nach Leipzig umgezogen. Herr Sebastian Lehmann folgte einige Zeit danach zur Diplomarbeit und später zur Doktorarbeit aus Bonn. Überdies stieß aus Jena mit Stefan Zahn ein weiterer Doktorand hinzu. Infolge der starken Einbindung in die Lehre (siehe <http://www.uni-leipzig.de/~quant/lecture/lecture.html>) in der Tradition von Prof. Reinhold war der Kontakt zu den Studierenden schnell hergestellt. Frank Uhlig, der derzeit ein Auslandspraktikum bei Prof. Pavel Jungwirth in Prag absolviert, war einer der ersten Leipziger Studierenden, die uns beim Aufbau halfen. Diesem folgten eine Reihe studentischer Hilfskräfte (SHKs) aus meiner ersten Leipziger Drittsemester-Veranstaltung mit Martin Roatsch (Chemie), Gregor Bruns (Chemie, Mathe, Physik), Uta Greifenhagen (Chemie) und Dorothea Golze (Chemie). Die ersten Bachelorarbeiten absolvierten Frank Uhlig und Eva Perlt, welche beide sehr bald sowohl in der Lehre als auch bei der Entwicklung der vorhandenen Programme einstiegen. Hinzu kamen dann Herr Matthias Schöppke als SHK und Rene Frank, der von sowohl Frau Prof. Dr. Hey-Hawkins (Anorganische Chemie) als auch von mir bei der Anfertigung seiner Masterarbeit betreut wurde. Es folgten zwei weitere Masterstudierende mit Martin Brehms und Katharina Schol-

ze. Zudem konnten wir auch dieses Semester aus der Anfänger-Vorlesung drei SHKs für die Theorie gewinnen, nämlich Johanna Langner, Michael v. Domaros und Henry Weber. Für Mitte des Jahres sollen zwei weitere Stellen vergeben werden, eine an die Postdoktorandin Rupashree Shyama Ray (Promotion bei N. Rösch), die andere an die Doktorandin Miriam Kohagen (Diplomarbeit A. Drews).

## Events

Seit wir in Leipzig sind haben wir schon einige kleine Kongresse und "Winterschulen" veranstaltet, nämlich im Juli 2008 ein Doktorandenseminar des SPP 1191, im September 2008 einen Workshop zum Thema "Wasserstoffbrücken in Ionischen Flüssigkeiten" (SPP 1191) und im November 2008 die Paul-Walden-Vorlesung für den Preisträger Prof. Hiroyuki Ohno. Besonders hervorheben möchte ich die zweitägige Veranstaltung des sächsischen Theorie-Seminars (<http://www.uni-leipzig.de/~quant/HTML/Seminare/sachs.html>), wo sich fächerübergreifend Forschende aus Mathematik, Physik und Chemie zusammenfanden, um über ihre Methoden zu berichten. Das Programm finden Sie unter (<http://www.uni-leipzig.de/~quant/HTML/Seminare/sachs.html>).

## Arbeitsgebiete

Ein Hauptanliegen unserer Forschung ist es, große und komplizierte chemische Systeme und Prozesse mittels theoretischer Methoden zu untersuchen. Damit wir die mikroskopischen Abläufe in kondensierter Phase- also unter Bedingungen, die denen im Laboratorium möglichst ähneln - verfolgen zu können, reicht unser Arbeitsgebiet zwangsläufig von der traditionellen Molekulardynamik auf der Basis empirischer Kraftfelder bis hin zur first-principles Quantenchemie. Wichtige Bindeglieder

zwischen diesen beiden extremen Ansätzen stellen die first-principles Molekulardynamik FPMD (Car-Parrinello CPMD und Born-Oppenheimer Molekulardynamik BOMD) sowie die Quanten-Cluster-Equilibrium QCE Methode dar, die dementsprechend entscheidende Säulen unserer Forschungsarbeiten sind. Beide Methoden (FPMD und QCE) haben den Vorteil, kooperative Effekte

in der first-principles Molekulardynamik oder die Berechnung von thermodynamischen Größen in der Quanten-Cluster-Equilibrium-Theorie. An-

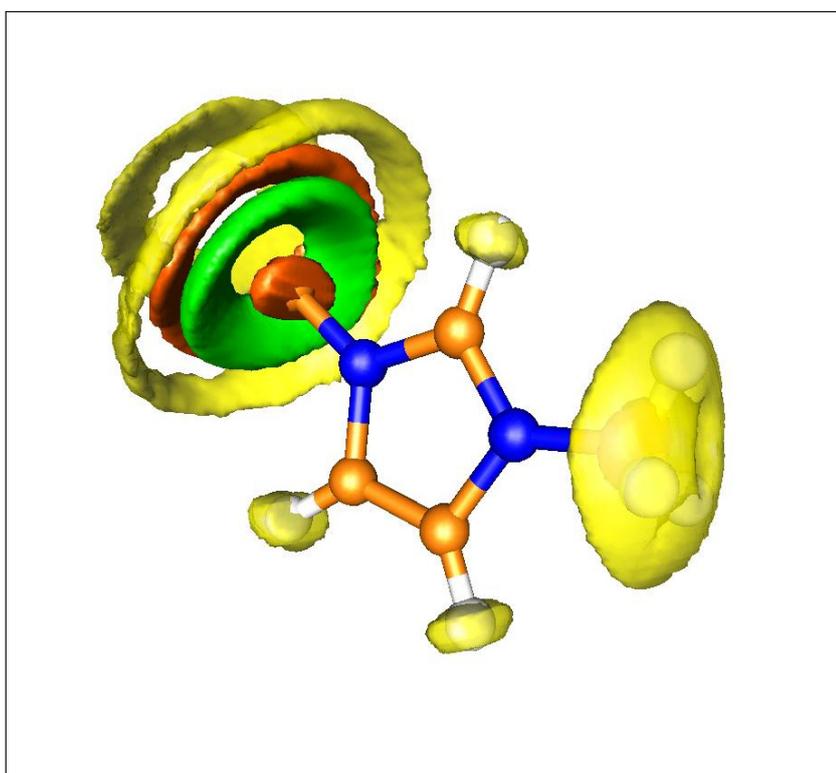


Fig.: Spatiale Verteilungsfunktion des Moleküls um sich selbst.

implizit zu behandeln. Sie eignen sich daher hervorragend für hochassozierte flüssige Systeme, in denen solche Effekte eine Rolle spielen. Die Quanten-Cluster-Equilibrium-Methode erlaubt zudem die Behandlung solcher Systeme auf hohem Niveau bzgl. der elektronischen Struktur, das heißt post-Hartree-Fock oder korrelierte Methoden abweichend von der Dichtefunktionaltheorie können hier ihren Einsatz finden. Im Rahmen der traditionellen und der first-prin-

ziples Molekulardynamik sowie der statistischen Mechanik werden neue Ideen entwickelt und methodisch umgesetzt. Solche methodischen und konzeptionellen Entwicklungen umfassen zum Beispiel die explizite relativistische Beschreibung in der first-principles Molekulardynamik oder die Berechnung von thermodynamischen Größen in der Quanten-Cluster-Equilibrium-Theorie. An-

Anwendungsbasierte Arbeiten betreffen quantenchemische sowie Molekulardynamische Studien chemisch interessanter Systeme. In der supramolekularen bzw. der Templat-Chemie haben wir sowohl molekulare Schalter als auch Oberflächen untersucht. Im Rahmen der Katalyse gelang es uns einige Erkenntnisse über die Aktivierung kleiner Moleküle an Metallkomplexen zu bestimmen. Wir haben außerdem viele Erkenntnisse über neoterische Lösungsmittel und speziell ionische Flüssigkeiten, die in der „grünen“ Chemie eine Rolle spielen, gesammelt.

Unsere Arbeiten werden zur Zeit von der DFG im Rahmen zweier ERA-Chemistry Projekte „A Modular Approach to Multi-responsive Surfactant/peptide (SP) and Surfactant/peptide/nanoparticle (SPN) Hybrid Materials“ und „Development of Dual Transition Metal Activation for Methane and Carbon Dioxide and further Processing to Carbamate Formation“ sowie im Rahmen des Schwerpunktprogramms SPP 1191 „Ionische Flüssigkeiten“ gefördert. Methodische Entwicklungen in der first-principles Simulationen wurden im Rahmen eines Chemie-Fonds Stipendiums für Herrn Dipl.-Chem. Jens Thar gefördert.

### Ausgewählte Themengebiete

(weiteres auf [www.uni-leipzig.de/~quant](http://www.uni-leipzig.de/~quant))

#### QCE

Die Vorhersage der thermodynamischen Zustandssumme für assoziierte Systeme mittels first-principles Methoden gehört nicht zu den Standardrechnungen. Quantenchemische isolierte Molekül-Rechnungen erfassen meist die Umgebungseffekte nicht ausreichend und first-principles Simulationen sind viel zu kurz, um den Phasenraum genügend zu sampeln. Zudem kann hier wie bei allen Molekulardynamischen Verfahren die Zustandssumme nicht direkt bestimmt werden.

Ein Näherungsverfahren zur Bestimmung von Zustandssummen in der kondensierten Phase ist durch die Methode des Quanten-Cluster-Equilibriums gegeben. Diese Methode behandelt in erster Näherung die kondensierte Phase durch ausgewählte Cluster, welche die Zustandssumme als analytischen Ausdruck bilden.

Zur Durchführung von QCE-Rechnungen haben wir ein Programm (Peacemaker V2.0) entwickelt. Das Programm ist ein quantenchemisches Nachbearbeitungsprogramm geschrieben in Fortran 90. Die QCE-Rechnungen bedienen sich eines benutzerdefinierten Clustersatzes sowie den zugehörigen aus quantenchemischen Rechnungen gewonnen Wechselwirkungsenergien, Trägheitsmomenten, und (harmonischen) Frequenzen, um eine selbstkonsistente kanonische Zustandssumme der wechselwirkenden Clusterphase zu erhalten. Damit die kondensierte Phase mit einem Clusterbild beschrieben werden kann, muss das System einige wichtige Bedingungen erfüllen. Das System sollte zunächst in der kondensierten Phase durch clusterartige Strukturen beschreibbar sein. Dies ist häufig für hochassozierte Flüssigkeiten, wie zum Beispiel für die meisten wasserstoffbrückegebundenen Flüssigkeiten der Fall. Welche Flüssigkeiten sonst noch durch das QCE beschreibbar sind, bleibt zu zeigen. Interessant wären Flüssigkeiten mit anderen starken intermolekularen Wechselwirkungen wie z.B. die Coulomb-Wechselwirkungen, welche in Ionischen Flüssigkeiten (IL) auftreten. Die Clusterstrukturen müssen also repräsentative Strukturen der kondensierten Phase bilden, d.h. der Clustersatz sollte als eine Art struktureller Durchschnitt der Phase aufgefasst werden. Mehrere Beispiele haben dabei gezeigt, dass die Einbeziehung aller relevanten Clustermotive (wie Koordinationsumgebung, Topologie, etc.) viel wichtiger ist als die Berücksichtigung bestimmter Clustergrößen und Geometrien. Sollten wichtige Clustermotive fehlen, so sind die berechneten Zustandssummen und somit auch die daraus ermittelten thermodynami-

schen Daten nur ungenaue Näherungen der untersuchten Phase.

Peacemaker startet mit dem aufstellen der in Freiheitsgrade zerlegten Cluster-Zustandssummen, welche im QCE-Modell den Standardausdrücken des RRHO Modells (Starrer Rotator - harmonischer Oszillator), wie es auch in den meisten quantenchemischen Programmen Anwendung findet, entsprechen. Dennoch weichen die Zustandssummen in zwei zentralen Punkten ab.

gigkeit zwischen Volumen und Zustandssumme müssen diese beiden Größen iterativ in einer selbst-konsistenten Weise bestimmt werden. Eine analoge Abhängigkeit ist zwischen Volumen und intercluster Wechselwirkung gegeben, denn letztere wird in einem Meanfield-Potential angenähert, welches von der Clustergröße und dem aktuellen Phasenvolumen abhängt. Diese beiden, modell-inhärenten Änderungen der RRHO Zustandssummen resultieren in den beiden iterativen Zyklen des QCE-Programms. Als Startwerte der iterativen

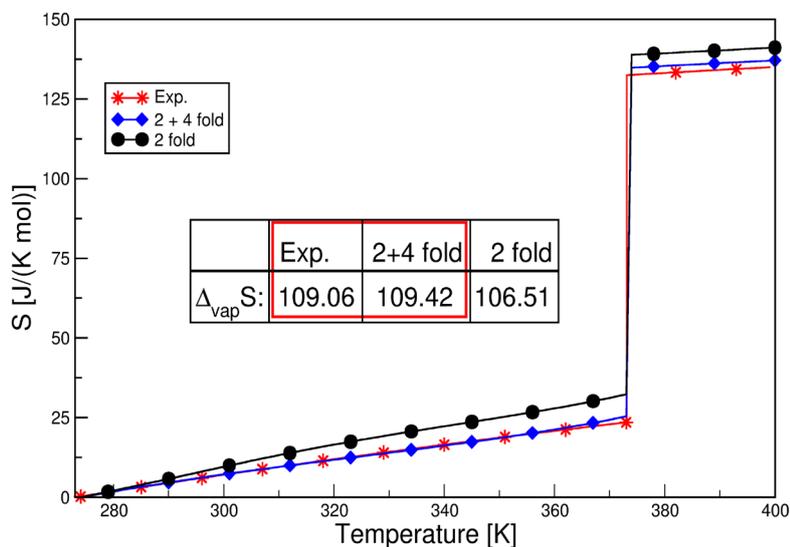


Fig.: Verdampfungsentropie für Wasser. 2+4 fold enthält tetraedrisch koordinierte Wassermoleküle. 2 fold enthält keine tetraedrisch koordinierten Wassermoleküle

Erstens im freien Translationsvolumen, welches in die Translationszustandssumme eingeht und zweitens in der Wechselwirkungsenergie zwischen den Clustern, welche in die elektronische Zustandssumme eingeht.

Die Berechnung des gesamten Translationsvolumens beruht auf dem Ausschlussvolumen der Cluster, wie auch auf dem aktuellen Phasenvolumen, welches aus der molekularen Zustandssumme berechnet wird. Aufgrund der korrelierten Abhän-

Schleifen werden das Volumen des idealen Gases und eine Gleichverteilung der Clusterpopulation aller Cluster angenommen, wodurch anschließend die Anfangszustandssummen berechnet werden können. Im nächsten Schritt werden diese dann benutzt, um die Koeffizienten des Populationspolynoms zu entwickeln. Die Lösungen dieses Polynoms ergeben mögliche Verteilungen der Clusterpopulationen, welche konsistent sind mit der festen Zahl von einem Mol Monomere. Die berechneten

Populationssätze zusammen mit den Anfangszustandssummen gelangen bei der Bestimmung der Koeffizienten des Volumenpolynoms zum Einsatz. Aus der Lösung dieses Polynoms 3. Grades können mögliche neue Phasenvolumina berechnet werden. Beide, sowohl der Satz an Volumina, als auch der Satz an Populationen werden dazu verwendet, um die Freie Gibbs Enthalpie zu berechnen. Die Kombination mit der niedrigsten Freien Enthalpie wird nun als physikalisch sinnvollste Basis für die nächste Iteration benutzt. Diese Rechnung schließt den Iterativen Zyklus nachdem Konvergenz im Volumen erreicht ist (normalerweise 10-9L). Die nun selbstkonsistente Zustandssumme kann genutzt werden, um thermodynamische Daten an dem gegebenen p,T Phasenpunkt zu berechnen. Solche Rechnungen werden standardmäßig innerhalb weniger Sekunden ausgeführt, was die Berechnung großer Intervalle von

Phasenpunkten ermöglicht. Wie bereits erwähnt, beinhaltet das Modell zwei variierbare Parameter, welche für die Skalierung des Cluster-Ausschlussvolumens und der Meanfield-Wechselwirkungsenergie benutzt werden. Diese sind spezifisch für ein untersuchtes Clustersystem. Aktuell wird daran gearbeitet diese beiden Parameter zu eliminieren bzw. sie aus den Clustereigenschaften zu bestimmen. Zurzeit ist der praktischste Weg zur Bestimmung der Parameter jedoch die

Nutzung einer Auswahlroutine, welche in Peacemaker 2.0 implementiert ist. Diese wählt die genaueste Isobare, im Bezug zu experimentellen Referenzdaten aus einem sinnvoll gewählten Parameterintervall aus. Die Auswahl erfolgt durch einen Vergleich der berechneten mit der experimentellen Isobare nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate. Diesem Weg folgend können molare Dichten oder Entropien, z.B. für flüssiges Wasser, aber auch Eigenschaften von Phasenübergängen, wie z.B. der Siedepunkt oder Verdampfungsentropien, mit hoher Genauigkeit und in sehr kurzer Zeit berechnet werden. (J. Chem. Phys., 2008, 128, 244506)

### DKH und FPMD

Im Rahmen dieser Arbeiten implementierten wir die skalar-relativistische Douglas-Kroll-Hess (DKH) Methode

in das Born-Oppenheimer Molekulardynamik-Simulationspaket cp2k. Die Kombination von relativistischen Dichten mit der nicht-relativistischen Gradientenroutine stellt eine sinnvolle Approximation von relativistischen Gradienten dar. Eine hervorragende Übereinstimmung zwischen Geometrien, die mit dieser Approximation optimiert wur-

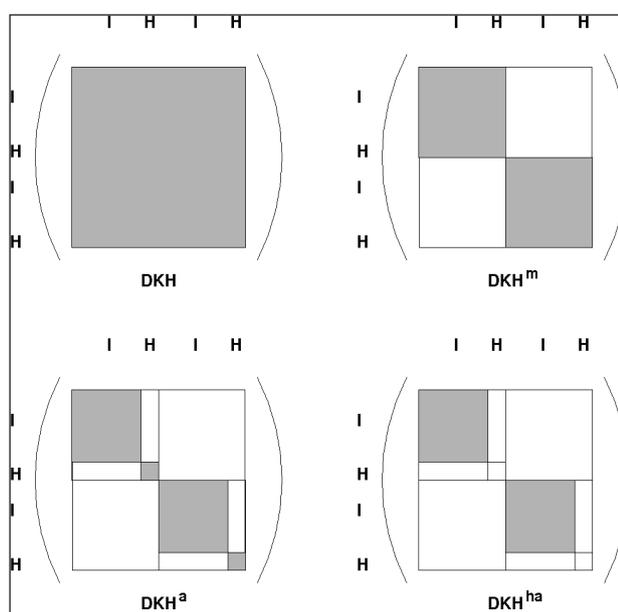


Fig.: Verschiedene Lokalisierungsschemata.

Mehrere Lokalisierungsschemata wurden für verschiedene interatomare und intermolekulare Distanzen evaluiert. Die Fehler dieser Lokalisierungsschemata sind vernachlässigbar für Geometrien, die der Gleichgewichtsstruktur ähneln. Sie wachsen mit kleiner werdenden Abständen und führen so zu einer minimalen Bevorzugung dicht gepackter Konfigurationen. (J. Chem. Phys., 2009, 130)

den, und Geometrien, die mittels numerischer Gradienten erhalten wurden, konnten erzielt werden. Der Fehler lag hierbei unter 0.02 pm. Halogenid-Dimere ( $(HX)_2$ , mit  $X=F, Cl, Br, I$ ) wurden als kleine Testsysteme für first-principles Molekulardynamik-Simulationen eingesetzt. Im Vergleich zu nichtrelativistischen Rechnungen wurden die Bewegung der Dimere durch eine größere Amplitude, eine niedrigere Frequenz sowie im Mittel durch größere Abstände charakterisiert. Ein nicht-relativistisch gerechnetes Moleküldimer mit schweren Atomen verhielt sich wie ein relativistisches Moleküldimer bestehend aus leichtem Atom. Das Behandeln auf mal relativistischer bzw. nicht-relativistischer Ebene erlaubte also die Beobachtung von relativistischen Effekten in der Dynamik.

### **Ionische Flüssigkeiten (ILs)**

Im Rahmen von ionischen Flüssigkeiten haben wir die Validierung von DFT-Methoden untersucht. Wir testeten die Genauigkeiten von verschiedenen GGA-, mGGA- und Hybrid-Funktionalen. Weiterhin haben wir zwei dispersionskorrigierte DFT Ansätze studiert (Berücksichtigung über einen additiven Term im Funktional (DFT-D; entsprechend dem Fit von S. Grimme) und über ein dispersionskorrigiertes atomzentriertes Dispersionspseudopotential (DCACP von U. Roethlisberger)). Es konnte gezeigt werden, dass übliche DFT-Funktionale sowohl andere Strukturen als globales Minimum bevorzugen als auch die Wechselwirkungsenergien deutlich unterschätzten im Vergleich zu den korrigierten Funktionalen und zu Post-HF-Methoden mit moderaten Basissätzen. (J. Phys. Chem. A, 2008, 112, 8430) Bei der Analyse der intermolekularen Kräfte in einem typischen Salz (NaCl) und verschiedenen ILs mit Hilfe der SAPT Methode fanden wir entscheidende Unterschiede. Während in NaCl Dispersionskräfte eine vernachlässigbare Rolle spielen, ist ihr Beitrag für ILs mit ca. 10% Anteil der attraktiven

Kräften (Elektrostatik, Induktion und Dispersion) relativ groß. Es zeigte sich, dass in ILs der Gleichgewichtsabstand des Gesamtpotential deutlich in den repulsiven Bereich der hypothetischen Potentialkurve bestehend aus Pauli-Repulsion und Elektrostatik verschoben ist. Das heißt, die Ionen wechselwirken im Repulsiven bzgl. der Elektrostatik. Dadurch können die Kräfte nicht optimal aufaddiert werden und wir erhalten eine abgeflachte Potentialkurve der Gesamtenergie. Dies ermöglicht eine höhere Beweglichkeit der Ionen in der IL im Vergleich zu NaCl und ist damit ein Indiz für den geringen Schmelzpunkt von ILs. (Angew. Chem. Int. Ed., 2008, 41, 3639) Mit Hilfe von first-principles Simulationen konnten wir zeigen, dass das azide H-Atom in imidazolium-basierten ILs die bevorzugte Koordinationsstelle für die Anionen ist. Eine detaillierte Analyse der Trajektorie von [Emim][AlCl<sub>4</sub>] zeigte unter anderem, dass zwei Chloratome sich die Position am aziden H-Atom teilen. Dies entspricht eher einer klassisch schwachen als einer starken, gerichteten Wasserstoffbrücke. Die koordinierenden Chloratome stammen dabei in 30% der Fälle von zwei unterschiedlichen Anionen und gehören in 70% der Fälle zu dem gleichen Anion. Eine Studie von [Emim][Cl] gelöst in AlCl<sub>3</sub> zeigte die Bildung von größeren Anionen bestehend aus vier Aluminiumeinheiten. Dies konnte als eine Folge von Elektronenmangel mit Hilfe der Elektronenlokalisierungs-Funktion identifiziert werden. (Inorg. Chem. 2007, 47, 2751) Außerdem beschäftigten wir uns mit der Frage "Warum führt das Entfernen einer Wasserstoffbrücke zu einer Erhöhung des Schmelzpunktes?". In imidazolium-basierten ionischen Flüssigkeiten führt die Substitution des aziden Wasserstoffatoms durch eine Methylgruppe sowohl zu einer Erhöhung des Schmelzpunktes als auch zu einer Erhöhung der Viskosität. Dies erscheint konträr, weil eine attraktive Wechselwirkung durch eine repulsive Wechselwirkung ersetzt wird. Der Vergleich der Potentialkurve der Bewegung des Chlo-

ridanions um die Imidazoliumebene zeigte, dass wegen der Substitution des aziden H-Atom durch die Methylgruppe die Energiebarriere von ca. 10 kJ/mol ([Dmim][Cl]) auf über 40 kJ/mol ([Tmim][Cl]) erhöht wird. Traditionelle MD-Simulationen von [Emim][Cl] und [Emim][Cl] zeigen durch Betrachtung der durchschnittlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit strukturelle Unterschiede der beiden Flüssigkeiten. (Phys. Chem. Chem. Phys.,

dass auf der Zeitskala der Simulation keine deutliche Ionenpaar-Dissoziation im Sinne von vollständig getrennten Solvatschalen stattfindet. Die Untersuchung lokaler Dipolmomente gab Hinweise auf eine Depolarisierung der Wassermoleküle in der Nähe der hydrophoben Gruppen des Kations sowie in der Nähe des Anions. Die Analyse der Verteilung diverser Winkel hingegen deutete auf eine lineare Koordination des Chlorids begleitet von

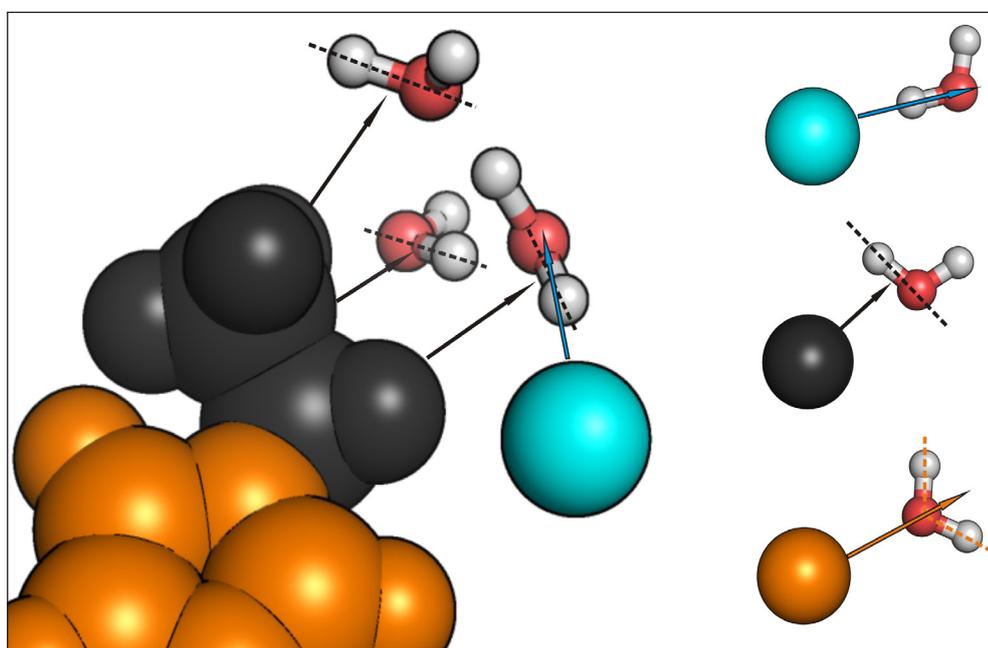


Fig.: Solvatschale eines Ionenpaars in Wasser.

2008, 10, 6921)

Zur Untersuchung von Mischungseffekten zwischen ionischen Flüssigkeiten und Wasser haben wir ein einzelnes [Emim][Cl] Ionenpaar in 60 Wassermolekülen mittels der Car-Parrinello Methode simuliert. Es wurde eine Bevorzugung der in-plane Koordination des Chlorids bezüglich der Kation-Ringebene gegenüber der energetisch etwas ungünstigeren on-top Koordination beobachtet. Die Auswertung von verschiedenen radialen Paarverteilungsfunktionen zeigte, dass die Struktur der Hydratschale um das Ionenpaar sich deutlich von der Struktur von reinem Wasser unterscheidet und

einer tangentialen Orientierung der Wassermoleküle um die hydrophoben kationischen Gruppen hin, was ein typisches Merkmal der hydrophoben Hydratisierung ist. Auf der Grundlage dieser Orientierungen wurde ein Strukturmodell zur Erklärung der Bevorzugung von assoziierten Ionenpaaren vorgeschlagen. Hierbei handelt es sich um eine Solvent-induzierte Ionenpaar-Bildung, welche das Assoziationsverhalten der solvatisierten Ionen im Rahmen einer energetisch günstigen Schnittstelle zwischen den Solvatschalen des Anions und der hydrophoben Gruppen des Kations erklärt.

(J. Chem. Phys., 2008, 129, 104505)

## Supramolekulare Chemie

Wir beschäftigten uns im Rahmen dieser Arbeiten mit den Bindungsmotiven von Rotaxanen und Pseudorotaxanen und deren abgeleiteten Mimika (J. Phys. Chem. A, 2006, 110, 12963). Grob

Die C=O Streckschwingung und die N-H Streckschwingung haben wir mit der Wasserstoffbrückenenergie korreliert. Des Weiteren haben wir verschiedene Minima des Entfädelungsprozesses eines Pseudorotaxans untersucht (Chem. Phys., 2008, 343, 186). Auch hier haben wir verschiedene

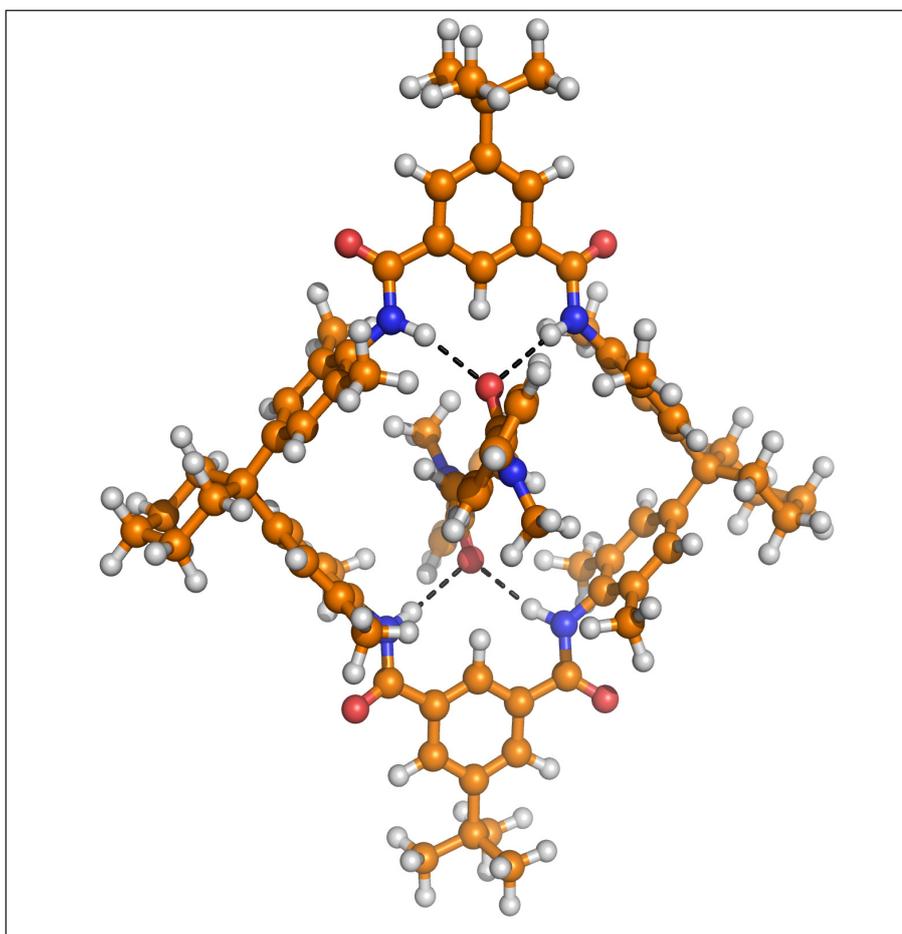


Fig.: Modell eines Pseudorotaxan-Moleküls

gesprochen bestehen Rotaxane aus zwei mechanisch verknüpften Untereinheiten, einem Reifen und einem Stab, der den Reif durchdringt. Um die Bindungsmotive in diesen Systemen zu verstehen, haben wir energetische Studien sowie Frequenzanalysen durchgeführt. Wir konnten eine Beziehung zwischen der Stärke der Wasserstoffbrücken und der Ladung am Akzeptor-Sauerstoffatom identifizieren und Substitutionsmuster erklären.

Dichtefunktionale getestet und fanden sehr große Beiträge (50 kJ/mol) zur Bindungsenergie. Die thermochemische Analyse zeigt zudem, dass eine zweifache Wasserstoffbrücke, wie sie in Rotaxanen vorliegt als Templat agiert und sich wie eine Entropiesenke verhält. Es wurden auch die Substitutionseinflüsse auf die Bindung von Achse und Reif untersucht (Chem. Eur. J., 2008, 14, 1216). Substitution mit elektronenziehenden Gruppen erhöh-

te die Ladung am Sauerstoff und umgekehrt. Die Untersuchung von Lösungsmittelleffekten legte die experimentell bestätigte Vermutung nahe, dass die Systeme in  $\text{CHCl}_3$  und  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  stabil sind während sie in Wasser entfälten würden. Berücksichtigt man eine Austauschreaktion wobei der Stab

durch ein Lösungsmittelmolekül ersetzt wird, so lässt sich die freie Energie genauer abschätzen als bei Vernachlässigung des Lösungsmittels oder bei der Behandlung auf der Grundlage eines Kontinuumsmodell-Ansatzes.

[www.uni-leipzig.de/~quant](http://www.uni-leipzig.de/~quant)

## Arbeitsgruppe Engler

Der Schwerpunkt der Arbeiten der Gruppe Engler liegt auf dem Gebiet der Beschreibung von Halbleiterstrukturen (Volumen, Oberflächen und Reaktionen an Oberflächen). Aktuell werden zwei Themenkreise bearbeitet:

### 1. MOVPE (Metal Organic Vapour Phase Epitaxy)-Wachstum, Stabilität, Struktur und elektronische Eigenschaften ternärer und quaternärer AIII-BV-Halbleitermischkristalle

Praxisrelevant in Bezug auf elektronische und optoelektronische Eigenschaften („band gap tuning“) ist insbesondere der Einbau von Stickstoff bzw. von Bor in Galliumarsenid und Galliumphosphid (ternäre Mischkristalle) sowie zur Kompensation von Gitterverspannungen der zusätzliche Einbau von Indium (quaternäre Mischkristalle). Wir bearbeiten folgende Fragestellungen:

- Welche Fremdatomstrukturen sind bei verschiedenen Substitutionsgraden stabil und wie sind deren strukturelle und elektronische Eigenschaften (Gitterverspannungen, „band gap bowing“)?
- Wie lässt sich die (positive) Substitutionsenergie an der Oberfläche durch geeignete Wahl der Wachstumsbedingungen minimieren? (Oberflä-

chenstabilitäten mit Fremdatomsubstitutionen in Abhängigkeit von den chemischen Potentialen der Precursorspezies in der Gasphase)

- Wie ist die Effizienz verschiedener Precursorspezies? (Reaktionsmechanismen, Barrieren)

### 2. Wachstum, Stabilität und Morphologie von Halbleiternanonadeln

Halbleiternanonadeln sind sowohl für die Grundlagenforschung (großes Oberflächen-Volumen-Verhältnis und damit verbundene neue physikalische und chemische Eigenschaften) als auch für technologische Anwendungen in Nanobauteilen von großem Interesse. Voraussetzung für technologische Anwendungen ist die wohldefinierte Herstellung bezüglich Zusammensetzung, Struktur, Morphologie und geometrischer Anordnung auf einem Substrat. Hierfür wiederum ist ein grundlegendes physikalisches und chemisches Verständnis der Wachstumsprozesse erforderlich. Eine häufig verwendete Technik zur Herstellung von Halbleiternanonadeln ist das katalysatorgestützte 1D-Kristallwachstum durch den VLS (Vapour-Liquid-Solid)-Mechanismus. Die vollständige Kontrolle des VLS-Nanonadelwachstums in Bezug auf Positionierung, Dimension, Richtung, Verjüngung,

chemische Zusammensetzung (z.B. Züchtung von „core-multishell“-Heterostrukturen) erfordert das Verständnis und die Kontrolle aller Teilschritte des Wachstumsprozesses. Wir wollen folgende Fragestellungen, bezogen auf GaAs-Nanonadeln, bearbeiten:

- Wirkt der Katalysator (in der Praxis wird überwiegend Gold verwendet) im Sinne einer chemischen Katalyse (Absenken der Aktivierungsbarrieren beim Wachstumsprozess) oder nur im Sinne einer physikalischen Katalyse (Gold als Kollektor der für das Kristallwachstum benötigten Partikel)? (Untersuchungen zu Reaktionsmechanismen)
- Wie lassen sich Wachstumsrichtung auf der Sub-

stratunterlage sowie Wachstum auf den Seitenflächen der Nanonadeln gezielt beeinflussen? (Oberflächenstabilitätsuntersuchungen)

- Wie lässt sich die Morphologie der Nanonadeln (Kristallstruktur, Durchmesser, Querschnittsform) durch die äußeren Reaktionsbedingungen beeinflussen? (Nadelquerschnitte über Wulff-Konstruktionen, Modellierung realer Nadeln aus Volumen- und Oberflächenanteilen)

Die Berechnungen (DFT) werden überwiegend an periodischen Superzellenmodellen durchgeführt. Für aufwendige Untersuchungen zu Reaktionsmechanismen werden lokale Strukturausschnitte (molekulare Clustermodelle) benutzt.

## DFG- MITTEILUNGEN

### Heisenberg-Programm

Der Hauptausschuss der DFG hat Herrn Privatdozenten Dr. Daniel Sebastiani, Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz, ein Heisenberg-Stipendium bewilligt.

### Reinhart Koselleck-Projekt

Der Hauptausschuss der DFG hat Herrn Professor Dr. Dominik Marx, Ruhr-Universität Bochum, ein Reinhart Koselleck-Projekt zum Thema „Understanding Mechanochemistry“ bewilligt.

Programminformationen:

Antragstellung bei gemeinsamen Forschungsprojekten wird erleichtert

D-A-CH-Organisationen vereinbaren Lead Agency-Verfahren

Im Rahmen eines zunächst zweijährigen Pilotprojekts, das die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) gemeinsam mit dem Österreichischen Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) und dem Schweizerischen Nationalfonds (SNF) durchführt, wurde 2008 eine Vereinbarung zum Lead Agency-Verfahren unterzeichnet.

Antragstellende Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler müssen demnach bei Gemeinschaftsvorhaben nicht mehr wie bisher jeweils in ihrem Land einen Antrag einreichen, der dann getrennt begutachtet wird. Künftig werden bi- oder trilaterale Forschungsanträge nur noch bei einer federführenden Förderorganisa-

tion, der sogenannten Lead Agency, eingereicht, administriert und begutachtet. Das Ergebnis der Begutachtung durch die Lead Agency wird von den beteiligten Partnerorganisationen anerkannt. Die Finanzierung der D-A-CH-Projekte erfolgt dabei nach wie vor getrennt.

Unter das Begutachtungs- und Förderverfahren fallen gemäß der D-A-CH-Vereinbarung nur bi- oder trilaterale Projekte, die einen aufgrund der grenzüberschreitenden, komplementären Forschung deutlich erkennbaren wissenschaftlichen Mehrwert versprechen. Die einzelnen Länderteile dürfen somit keine eigenständig förderbaren Projekte darstellen.

Durch diese administrative Vereinfachung soll die Zusammenarbeit der Nachbarländer auf dem Gebiet der Grundlagenforschung intensiviert und so der wissenschaftliche Mehrwert erhöht werden.

[www.dfg.de/internationales/europa/foerderung/netzwerke.html](http://www.dfg.de/internationales/europa/foerderung/netzwerke.html)

## Ausschreibungen:

### Ausschreibung für deutsch-französische Projekte in der Chemie

Mit einer neuen Ausschreibung für deutsch-französische Projekte in der Chemie wollen die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) und die französische Agence Nationale de la Recherche (ANR) die Zusammenarbeit zwischen Teams von Forscherinnen und Forschern dieser beiden Länder weiter verstärken und fördern. Dabei können alle bei der DFG antragsberechtigten Personen gemeinsam mit ihren französischen Partnern Projektanträge in allen Gebieten stellen, die sowohl durch die DFG (Gruppe Chemie und Verfahrenstechnik) als auch der ANR (Programme Blanc International „Chimie“) gefördert werden. Um das Verfahren zu vereinfachen, müssen kooperierende Teams nur einen einzigen gemeinsamen Antrag stellen, der bei der ANR einzureichen ist. Die Gutachtenden werden von beiden Partnerorganisationen gemeinsam festgelegt, die Förderentscheidungen werden ebenfalls gemeinsam getroffen.

[www.dfg.de/info\\_wissenschaftler/nw/download/dfg\\_anr\\_0901.rtf](http://www.dfg.de/info_wissenschaftler/nw/download/dfg_anr_0901.rtf)

### ERA-Chemistry Announces Call for 2009 „Open Initiative“

ERA-Chemistry is pleased to announce the 2009 „Open Initiative“ to fund transnational collaborative projects in the broad field of curiosity-driven chemical research.

ERA-Chemistry is a consortium of 14 research funding organisations from twelve European countries with the goal to develop and implement joint bottom-up European funding programmes. After two successful thematic calls in 2005 and 2007, the „Open Initiative“ aims now at stimulating excellence in chemical research through competition and cooperation without any thematic restriction. Seven of the ERA-Chemistry partners participate in this year's „Open Initiative“.

[www.erachemistry.net](http://www.erachemistry.net)

# WAHL DES VORSTANDS

---

## Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie 2009 - 2011

In der schriftlichen Wahl im Januar 2009 wurden folgende Kandidaten in den Vorstand der AGTC gewählt:

Prof. Dr. Gernot Frenking

Prof. Dr. Jürgen Gauß

Prof. Dr. Stefan Grimme

Prof. Dr. Christel Marian

Prof. Dr. Hans-Joachim Werner

Vorbehaltlich der Bestätigung durch die Trägergesellschaften wird der Vorstand ergänzt durch

Prof. Dr. Michael Schreiber (DPG)

Prof. Dr. Walter Thiel (DBG)

Prof. Frenking wird die GDCh im Vorstand vertreten.

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

# 13<sup>TH</sup> INTERNATIONAL CONGRESS OF QUANTUM CHEMISTRY

Helsinki, Finland, 22-27 June 2009

The 13th ICQC will be held on the downtown campus of the University of Helsinki, Finland, at time of the summer solstice, 2009. For exact times and places, see below. This conference series was started by the International Academy of Quantum Molecular Sciences (IAQMS, [www.iaqms.org](http://www.iaqms.org)) in 1973 and it has been held every third year ever since. The four latest ones were Kyoto 2006, Bonn 2003, Menton 2000 and Atlanta, GA 1997. Since the beginning, this meeting has been a most important international gathering in fundamental and applied theoretical chemistry. It also is a large one. In Kyoto 2006 there were 727 participants from 41 countries. Computational chemistry has now permeated much of the rest of chemistry, as one of its reliable standard tools. Nevertheless, there has to be a forum where its hard-core experts can take stock of the previous achievements, and sight the future developments.

This is ICQC. It is now held for the second time in the Nordic region. The previous one was Uppsala 1982. It is a great honour for our part of the world to welcome it back. Our colleagues in Norway will organize a satellite symposium before the main conference, and our colleagues in Sweden another one after the main conference. The University of Helsinki was established in Turku (Åbo) in 1640, and transferred to Helsinki in 1828. Chemistry has its own chair since 1761. Its' second, and perhaps so far most prominent, holder was Johan Gadolin (1760–1852), whose contributions

include the chemical discovery of the rare earths in 1794, or that of disproportionation in 1788. – With its 38000 students the University of Helsinki is the largest in Finland. As a research university, its output and impact are large, even in an European scale. For us who live in these latitudes, the nightless nights of midsummer hold a special fascination. Welcome to enjoy it with us.

Pekka Pyykkö

Chairman of the Local Organization Committee,  
Vice-President of IAQMS

## Scientific Committee:

Jean-Marie André (Namur)  
Kimihiko Hirao (Tokyo)  
William H. Miller (Berkeley)  
Pekka Pyykkö (Helsinki)  
Björn O. Roos (Lund)

## Local Organization Committee:

Hannu Häkkinen (Jyväskylä)  
Lauri Halonen (Helsinki)  
Matti Hotokka (Åbo Akademi)  
Kari Laasonen (Oulu)  
Jan Lundell (Jyväskylä)  
Risto M. Nieminen  
(Helsinki University of Technology)

Kai Nordlund (Helsinki)  
 Tapani Pakkanen (Joensuu)  
 Pekka Pyykkö (Helsinki)  
 Tapio Rantala (Tampere University of Technology)  
 Dage Sundholm (Helsinki)  
 Juha T. Vaara (Helsinki)

The Helsinki participants belong to the Finnish Centre of Excellence in Computational Molecular Science (CMS, 2006–2011) that comprises about sixty scientists, including the graduate students.

The chairman of the local Organization Committee is Professor Pekka Pyykkö (University of Helsinki).

### Program

The detailed program is available on ICQC 2009 Homepage:

<http://www.helsinki.fi/kemia/icqc/>

### Satellite Symposia

#### Molecular Properties 2009:

Bridging the gap between theory and experiment  
 Stockholm, Sweden, June 28th – July 1st 2009.

The symposium highlights the calculation of molecular properties by quantum-chemical methods, including developments in methodology and applications to challenging problems in chemistry and physics, with emphasis on the relationship between theory and experiment. The conference begins at 4 pm on Thursday June 18 2009 and ends at 1 pm on Sunday June 21 2009. The main ICQC conference begins on June 22 in Helsinki, Finland.

There will be a total of 18 lectures given by inviting the speakers (40 minutes including discussion) and 14 lectures given by contributing speakers (30 minutes including discussion). The contributing speakers will be selected among those registered for oral presentations/posters.

<http://www.ctcc.no/mp09>

### Materials Oriented Modelling: Catalysis and Interactions

Oslo, Norway, 18–21 June 2009

This international meeting is the 3rd Annual Symposium of the Division of Theoretical Chemistry of the Swedish Chemical Society, and at the same time also serving as one of the Satellite meetings of the 13th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC).

The topic of the meeting is Materials Oriented Modeling – Catalysis and Interactions, as defined in the broadest sense. We welcome practitioners from all fields of the modeling community, from Academia as well as Industry. The Symposium will be divided in the following categories, again considered in a broad sense: General theory and modeling; Nanomaterials; Biomaterials/biomimetics; Catalysis; Soft matter.

The meeting will be held in the Magneli lecture hall (Magnelisalen) located in the Arrhenius Laboratory at Stockholm University, Stockholm, Sweden, between June 28 and July 1, 2009.

<http://www.fos.su.se/~aatto/theochem>

### Call for papers and abstract submission

Registered participants (including Invited Speakers) may submit their abstracts via the congress home page. Templates will be provided. This can be done any time after the registration opens. The submission will be closed on 30 April, 2009. The acceptance will be confirmed by e-mail shortly after that date. All contributed papers will be given as posters. The maximum poster dimensions are 95 cm (width) by 115 cm (height).

### Registration

Please, register via the internet at [www.helsinki.fi/kemia/icqc](http://www.helsinki.fi/kemia/icqc)

Registration opens in October 2008.

The participants should register using the online registration form, which is available at [www.helsinki.fi/kemia/icqc](http://www.helsinki.fi/kemia/icqc). All reservations (including the social program and hotel) should be made on the same registration form, also for the items that are included in the registration fee. We also ask you to kindly confirm or cancel your participation in the three evening parties, included in the registration fee. The purpose of the latter is to avoid “no-show” cases. Tickets will be delivered only to those interested. Kindly make sure that you receive to your e-mail the reference number for your registration. You will need it for abstract submission and other later communication with us.

If you have any questions concerning the registration form or procedure, please contact TAVI Congress Bureau at [icqc2009@tavicon.fi](mailto:icqc2009@tavicon.fi) or +358 3 233 0400 (Finnish office hours 08:30 – 16:30, UTC+2).

### Conference fees 2009

Delegate	Accompanying person
Early fee by 31 January	
400 EUR	130 EUR
Normal fee 01 Feb – 30 April	
450 EUR	130 EUR
Late fee from 01 May	
550 EUR	130 EUR

Conference fee includes VAT 0 %

Delegate fee includes:

- Admission to the scientific sessions
- Conference material (there will not be any printed proceedings)
- The program and abstract information will be available to the participants electronically.
- Refreshments during the breaks
- Welcome reception, Helsinki city reception and Conference Dinner
- Conference services at the venue

Accompanying person fee includes:

- Welcome reception, Helsinki city reception and Conference Dinner

Please note that the costs for travel, accommodation, insurances, lunches and the social program of 26 June are not included in the fees.

### Economic support

In certain, very limited cases the organizing committee may be able to offer some financial exemptions or support. To apply for economic support, please contact [icqc@chem.helsinki.fi](mailto:icqc@chem.helsinki.fi). For students a recommendation of the Thesis Advisor is required.

### Important Dates in 2009

Registration opens in October 2008

Early fee until 31 January

Normal fee until 30 April

Late fee from 01 May

Abstract submission (both lectures and posters)

30 April

Poster abstract acceptance information will be sent in May.

Conference dates

22–27 June

Post Conference tours starting

27 June

Tour registration for Svanhild Sailing or St.Petersburg 24 April

Tour registration for other tours 22 May

### Contact information

Practical arrangements:

If you have questions concerning registration, ac-

commodation, travel etc, please contact:

TAVI Congress Bureau

Ms Varpu Taavetila

Papinkatu 21, FI-33200 Tampere, Finland

Tel. +358 3 233 0400

Fax. +358 3 233 0444

E-mail: [icqc2009@tavicon.fi](mailto:icqc2009@tavicon.fi)

[pekka.pyykko@helsinki.fi](mailto:pekka.pyykko@helsinki.fi)

Conference web pages:

If you have problems concerning the conference

web pages [www.helsinki.fi/kemia/icqc](http://www.helsinki.fi/kemia/icqc),

please contact: [teopze@chem.helsinki.fi](mailto:teopze@chem.helsinki.fi)

If you need an invitation letter for visa formalities,  
please contact: [ICQC@chem.helsinki.fi](mailto:ICQC@chem.helsinki.fi)

Scientific program:

If you have questions concerning the scientific  
program, please contact:

# KLATSCH UND TRATSCH

## Reinhart Kosellek-Förderung für Dominik Marx

Den rein mechanischen Einfluss auf chemische Substanzen und insbesondere auf chemische Reaktionen von Molekülen wird Dominik Marx (Inhaber des Lehrstuhls für Theoretische Chemie der Ruhr-Universität) untersuchen. Gefördert wird er dabei im Rahmen des neu geschaffenen Reinhart Kosellek-Programms der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) mit einer Million Euro für fünf Jahre. Marx gehört als einziger Chemiker zu den ersten sechs ForscherInnen, die aus diesem Programm gefördert werden, das besonders innovativen, aber auch risikoreichen Projektideen exzellenter EinzelwissenschaftlerInnen vorbehalten ist.

### **Mechanochemische Simulationen: „Molekulare Nanomechanik“**

Marx befasst sich mit der theoretischen Untersuchung von chemischen Reaktionen, die ausschließlich durch äußere Einwirkung mechanischer Kräfte auf Moleküle hervorgerufen werden. Derartige Experimente sind erst seit wenigen Jahren mittels atomarer Kraftmikroskopie oder neuen sonochemischen Techniken möglich. Diese Prozesse unterscheiden sich konzeptionell von den lange bekannten thermisch oder photochemisch induzierten Reaktionen, wie sie üblicherweise in experimentellen wie auch theoretischen Untersuchungen betrachtet werden. Ein besonderer Fokus des Projekts liegt dabei auf der Entwicklung mechanochemischer Simulationstechniken, die neueste Experimente möglichst realitätsnah erfassen



sollen. Marx beschäftigt sich mit dieser innovativen Thematik schon seit einigen Jahren erfolgreich, allerdings „undercover“ wie er sagt, d.h. ohne explizite Förderung. „Hier macht sich eine strategisch eingesetzte vernünftige Grundausrüstung im wahrsten Sinne des Wortes bezahlt“, so Marx. Sein ambitioniertes Fernziel ist es, einen allgemeinen Rahmen samt Leitlinien für das Verständnis der Mechanochemie vorzuschlagen.

Die Reinhart Kosellek-Projekte der DFG ermöglichen ausgewiesenen WissenschaftlerInnen die Durchführung von Forschungsprojekten, die weder im Rahmen der Arbeit an ihrer jeweiligen Institution noch in den anderen Förderverfahren der DFG realisiert werden können. Zusätzlich zu ihren guten Ideen müssen die antragstellenden WissenschaftlerInnen auch mit ihrem bisherigen wissenschaftlichen Lebenslauf überzeugen und so den nötigen Vertrauensvorschuss rechtfertigen.

Namensgeber des neuen Fördermoduls ist der im Jahr 2006 verstorbene Reinhart Koselleck, einer der bedeutendsten deutschen Historiker des 20. Jahrhunderts, der in Deutschland zu den Be-

gründern der modernen Sozialgeschichte gehörte.

Ruhr-Universität Bochum am 16.12.2008

## Juniorprofessor Johannes Kästner

Johannes Kästner wurde zum Juniorprofessor für Angewandte Quantenmechanik an die Universität Stuttgart, Institut für Theoretische Chemie berufen.

<http://www.theochem.uni-stuttgart.de/~kaestner>



## Professur für Timo Feig

PD Dr. Timo Feig (bisher Heinrich Heine-Universität Düsseldorf) hat am 1. November 2008 eine

Professur für Theoretische Physik an der Université Paul Sabatier in Toulouse (Frankreich) angetreten.

## Juniorprofessur für Jörg Tatchen

Den Ruf auf die am Institut fuer Theoretische Chemie und Computerchemie der Heinrich Heine-Universität Düsseldorf ausgeschriebene Juniorprofessur hat Herr Dr. Jörg Tatchen (Weiz-

mann Institut, Rehovot, Israel) angenommen. Er wird ab Juli 2009 das Forschungsspektrum des Instituts um Dynamische Methoden erweitern.

## STELLENANZEIGEN

---

Ludwig-Maximilians-University of Munich (LMU)

The Department of Chemistry and Biochemistry at the University of Munich (LMU) invite applications for the position of

### **Chair of Theoretical Chemistry (Full Professor W3)**

with a focus on „Structure and dynamics of large-scale molecular systems in biological and artificial environments“. The position is part of the LMUinnovativ project „Chemical Dynamics“ and will play a key role in the expansion of theoretical chemistry at the Department for Chemistry and Biochemistry. The newly appointed professor will carry out research on large molecular systems and their dynamics in a chemical and/or biochemical context. Active participation in the local research networks, including the SFB 749 „Dynamics and intermediates of molecular transformations“ and the clusters „Center for Integrated Protein Science Munich“ (CIPSM) und „Nanosystems Initiative Munich“ (NIM) is highly desired. The successful candidate is expected to have an internationally visible research program in theoretical chemistry. Habilitation or equivalent scientific and teaching experience is required. In-depth experience in ab initio based method development, particularly at the interface between quantum chemical and classical molecular dynamics models, is highly desirable. The new professor will contribute to teaching in theoretical chemistry and physical chemistry. The candidate must be younger than 52 years upon appointment to the position. Exceptions are possible.

The University of Munich seeks to increase the participation of women in research and teaching and invites qualified women to apply. The LMU offers a Dual Career Service. Handicapped candidates with identical qualifications will be given preference. Applicants should submit a curriculum vitae including a list of publications, a research summary with three to five relevant publications, and a summary of teaching activities in printed and electronic form before April 1, 2009 to:

Dekan der Fakultät für Chemie und Pharmazie, Prof. Dr. Patrick Cramer, Ludwig-Maximilians-Universität, Butenandtstr. 5-13, D-81377 München, Germany, email: [dekanat@cup.uni-muenchen.de](mailto:dekanat@cup.uni-muenchen.de)

## Postdoctoral Position

Nano- to Mesoscale Modelling of Growth of Biominerals, BIMSIM-Project

Development of simplified nano- to mesoscale models and Computer-Simulations to explore the morphogenesis of biominerals with the perspective of applications as bone or dental replacement materials.

Technische Universität,  
Physikalische Chemie, Darmstadt and  
Max Planck Institut für  
Chemische Physik fester Stoffe, Dresden

The position is initially opened for one year, and available immediately. Renewal is desired upon mutual agreement. Place of work will be mainly in Darmstadt but also in Dresden. Candidates will be screened according to their background in physics, advanced scientific computing and Programming (C++). The successful candidate will enjoy working in a small team but also be capable to do independent research. Excellent writing and communication skills are desired. Both computational and mathematical skills are needed. The candidate must have demonstrated the capability to develop new theoretical methods and implement these methods in computer programs. Therefore, experience in C/C++, scripting, and Linux is strongly desired.

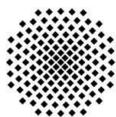
Key references BIMSIM-Project: H. Tlatlik, P. Simon, A. Kawska, D. Zahn and R. Kniep, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2006, 45, 1905–1910 A. Kawska, O. Hochrein, J. Brickmann, R. Kniep and D. Zahn, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2008, 47, 4982–4985

R. Paparcone, R. Kniep and J. Brickmann

*Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, 2009, DOI: 10.1039/B817723F

Applications (including CV, a full list of publications, a list of at least 2 references, a brief statement of research experiences and a description of research interests) and requests to

Prof. Dr. Juergen Brickmann, TU Darmstadt, brickmann@molcad.de



**Universität Stuttgart**



**PhD position  
in the field of biosimulations is available at the  
Institute for Theoretical Chemistry, Stuttgart University.**

[www.theochem.unistuttgart.de/~kaestner/](http://www.theochem.unistuttgart.de/~kaestner/)

In the Computational Biochemistry Group we investigate biochemical reactions by means of QM/MM simulations. Projects are a combination of applications (like the radical enzyme glutamate mutase) and method development. QM/MM calculations and implementations will be done using ChemShell ([www.chemshell.org](http://www.chemshell.org)), codeveloped in our group.

Possible candidates should have a background in chemistry, physics, biology, or related disciplines and should have a strong interest in computer simulations and program development. They should be willing to collaborate with experimentalists as well as theoreticians. Excellent English skills are a prerequisite. We offer the successful candidates an intellectually challenging position in the inspiring atmosphere of an interdisciplinary team in the SimTech cluster of excellence. Advanced training in different fields, participation at international conferences, as well as a stay abroad for three months in a collaborating institute are highly encouraged. The position is initially for three years with a possible extension, salary according to TVL13/2.

Please send your application with a letter describing your background and interests, the CV, the contact addresses of two academic references and copies of certificates to:

Johannes Kästner, [kaestner@theochem.unistuttgart.de](mailto:kaestner@theochem.unistuttgart.de)



## PhD Positions

Are available in the newly established Emmy Noether research group at the Department of Physics of the Free University Berlin. The positions are available immediately and the starting date is flexible.

Research topics: Molecular and Cluster Physics, Femtochemistry, Optimal Control

Subject: The PhD projects will focus on the development and application of theoretical methods for the simulation and control the coupled electron-nuclear dynamics in complex molecular systems. In particular, ultrafast dynamics of microsolvated biomolecules and of biomolecules interacting with metal nanoparticles will be investigated. The aim is to gain fundamental understanding of laser driven ultrafast dynamics in biomolecules interacting with different environments and thus to provide a theoretical basis for the design of new bioinspired chromophores, nanocluster based biosensors and photonic nanoarchitectures.

Funding: The positions are funded initially for three years. The salary will be according to BAT-IIa (2/3).

Requirements: Diploma or master degree in physics, chemistry or biophysics. Applicants are expected to have a broad knowledge in the field of molecular physics or quantum chemistry.

Contact:

Dr. Roland Mitric

Tel: +49-30-2093-5575

E-Mail: [mitric@chemie.hu-berlin.de](mailto:mitric@chemie.hu-berlin.de)

## 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](mailto:vbk@chemie.hu-berlin.de), <http://www.chemie.hu-berlin.de/vbk>

Redaktion: Matthias Wohlgemuth, Humboldt-Universität, Berlin  
Satz: Christian Schmelzer, Universität Leipzig

April 2009

