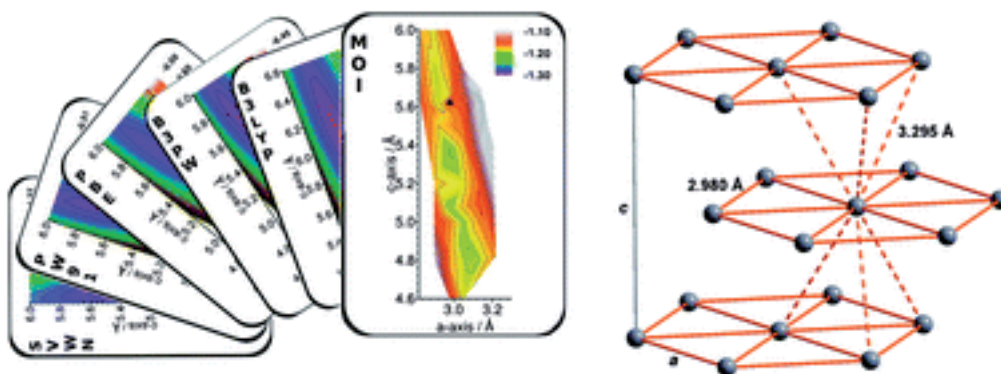


Information

THEORETISCHE CHEMIE



B. Paulus et al., Phys. Chem. Chem. Phys., (2009), DOI: 10.1039/B915967C

November 2009



EDITORIAL

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

die Redaktion bedankt sich herzlich für die Ein-
sendung der Beiträge zur vorliegenden Ausgabe für
November 2009. Nach den letzten drei Ausgaben
übernehmen nun die Gruppen von Prof. Frank Nee-
se und Prof. Thomas Bredow (Universität Bonn) die
Herausgabe der folgenden vier Ausgaben der Infor-
mation Theoretische Chemie. Wir bitten weitere

Beiträge, aktuelle Meldungen für die Rubri-
ken Klatsch & Tratsch, Tagungstermine so-
wie Stellenausschreibungen für die Ausga-
be im April 2010 an die neuen Herausgeber:
neese@thch.uni-bonn.de bzw. bredow@thch.uni-
bonn.de zu schicken.

Berlin im November 2009
Vlasta Bonačić-Koutecký

INHALT

Editorial	2
Arbeitsgruppen stellen sich vor	4
45. Symposium für Theoretische Chemie	12
DFG- Mitteilungen	19
Ankündigungen und Tagungen	20
Klatsch und Tratsch	23
Stellenanzeigen	24

ARBEITSGRUPPEN STELLEN SICH VOR

Prof. Dr. Beate Paulus an der Freien Universität Berlin

Das Institut

Das Institut für Chemie und Biochemie der Freien Universität Berlin ist Teil des Fachbereichs Biologie, Chemie und Pharmazie. Es gliedert sich in fünf Bereiche: die Biochemie, die Didaktik der Chemie, und die drei klassischen Bereiche Anorganische Chemie, Organische Chemie, sowie Physikalische und Theoretische Chemie. Zwischen den letztgenannten drei Bereichen gibt es eine enge Verzahnung in Lehre und Forschung, die sich nicht nur in geförderten strukturierten Programmen wie einem Sonderforschungsbereich und einem Graduiertenkolleg zeigt, sondern auch in vielen individuellen Kooperationen mit gemeinsam betreuten Studenten.

Die Forschungsschwerpunkte in der Anorganischen Chemie liegen in der präparativen Chemie neuartiger Edelgas- und Organometallverbindungen, einschließlich deren Charakterisierung insbesondere hinsichtlich der Bindungsverhältnisse, sowie in der metallorganischen Chemie der Hauptgruppenelemente. In der Organischen Chemie beschäftigen sich zwei Arbeitsgruppen mit stereoselektiver Synthese und bioorganischer Chemie, wobei Naturstoffe als Vorbild für Wirkstoffe und neue Materialien untersucht werden. Zwei weitere Arbeitsgruppen widmen sich der supra- und makromolekularen Chemie.

Physikalische und Theoretische Chemie sind in einem Bereich zusammengefasst. Die experimentellen Gruppen beschäftigen sich einerseits mit Molekülspektroskopie, wobei die Forschungsob-



Prof. Dr. Beate Paulus
Institut für Chemie und Biochemie
Freie Universität Berlin

jekte von Modellsystemen bis zu Nanoteilchen in lebenden Zellen reichen (AG Rühl, AG Illenberger). Dort wird auch die Entwicklung geformter Laserpulse im Femtosekundenbereich vorangetrieben, um dadurch gezielt den Bindungsbruch in chemischen Reaktionen kontrollieren zu können. Die NMR-Spektroskopie (AG Limbach) und die Oberflächenchemie (AG Christmann) ergänzen das Spektrum der physikalischen Chemie. Die Theoretische Chemie an der FU Berlin wird einerseits durch die Arbeitsgruppe „Quantendynamik“ von Prof. Jörn Manz vertreten, wo die quantenmechanische Beschreibung der Kerndynamik in verschiedensten chemischen Reaktionen, auch mit Wechselwirkung zu Laserfeldern, im Mittelpunkt steht. Seit Oktober 2007 wird die Theoretische Chemie durch meine Arbeitsgruppe, die teilweise aus Frauenförderungsmitteln finanziert wird, im Bereich der Quantenchemie verstärkt.

Die Lehre

Das Institut für Chemie und Biochemie der FU Berlin bietet neben einem Bachelorstudiengang Chemie und einem internationalen Masterstudiengang Chemie auch noch einen Masterstudiengang Polymer Science und eine Graduiertenausbildung in der Graduiertenschule des Sonderforschungsbereiches „Multivalente Wechselwirkung“ und im Graduiertenkolleg „Fluor als Schlüsselement“. Ein Lehramtsstudiengang Chemie wird ebenfalls angeboten.

Ich habe in der Lehre die Pflichtveranstaltung „Quantenchemie“ im internationalen Masterstudiengang Chemie übernommen, die in jedem Semester gelesen wird (abwechselnd in Deutsch und Englisch). Für die Bachelorstudenten habe ich zweimal

die „Einführung in die Theoretische Chemie“ mit Computerübungen und die Pflichtvorlesung „Atombau und Chemische Bindung“ gelesen. Mit meinen Mitarbeitern kann ich als Wahlfächer für Studenten, die an der Theoretischen Chemie besonders interessiert sind, Vorlesungen

zur „Quantenchemie auf dem Computer“ und „Quantenchemie für Festkörper“ anbieten. Diese Vorlesungen werden immer durch praktische Computerübungen begleitet und ermöglichen einer kleinen, aber sehr engagierten Zahl von Studenten eine Masterarbeit in der Theoretischen Chemie anzufertigen, und dann, gut ausgebildet, auch eine Doktorandenstelle in der Theoretischen Chemie anzunehmen.

Für interessierte Studenten vertiefen bereits die Forschungspraktika die Ausbildung in der Theoretischen Chemie. Im gemeinsamen Gruppenseminar mit der Arbeitsgruppe Manz lernen alle Mitarbeiter voneinander Quantenchemie und Quantendynamik auf dem aktuellen Stand der Forschung.

Arbeitsgruppe und Arbeitsgebiete

Mein Arbeitsgebiet war ursprünglich zwischen der Theoretischen Physik und der Theoretischen Chemie angesiedelt, wobei die Berechnung von Festkörpereigenschaften mit wellenfunktionsbasierten quantenchemischen Methoden (Inkrementenme-



Die Arbeitsgruppe von Frau Prof. Dr. Paulu

thode) im Vordergrund gestanden hat. Seit ich seit zwei Jahren meine Arbeitsgruppe an der FU Berlin aufbaue, erweitern sich die Arbeitsgebiete durch die Anwendung von quantenchemischen Methoden auf verschiedenste Systeme, die an der FU Berlin experimentell untersucht werden.

Vom Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme ist Dr. Elena Voloshina mit mir nach Berlin gewechselt. Sie beschäftigt sich mit der Methodenentwicklung und wurde aus dem inzwischen ausgelaufenen Schwerpunktsprogramm der DFG „Modern and Universal First-Principles Methods for Many-Electron Systems in Chemistry and Physics“ finanziert. Seit sie an der FU Berlin ist, arbeitet sie im Sonderforschungsbereich 765 „Multivalenz als chemisches Organisations- und Wirkungsprinzip“ mit, wobei sie sich dort vor allem für die elektronischen Effekte bei multivalenten Bindung interessiert.

Zum Aufbau der Arbeitsgruppe an der FU Berlin trägt auch PD Dr. Dirk Andrae bei, der aus Bielefeld nach Berlin kam, und sich hier quantenchemischen Rechnungen für Metalle widmet. Er untersucht insbesondere die Abweichungen von der idealen Kristallstruktur in den Elementmetallen, wie Zink und Cadmium, und den zugehörigen Laves-Phasen (Projekt im DFG Schwerpunktsprogramm „Experimentelle Elektronendichten“). Seit September 2009 gehört auch Dr. Carsten Müller zur Arbeitsgruppe. Er hat in Uppsala bei Prof. Kersti Hermansson mit der quantenchemischen Beschreibung von Adsorbaten auf Cerdioxid promoviert, und unterstützt jetzt als Postdoc das neu bewilligte Graduiertenkolleg „Fluor als Schlüsselement“ von Seiten der Theorie.

Ein neues Arbeitsgebiet hat sich mit der Gründung des „Center of Scientific Simulation“ an der FU Berlin ergeben. Die aus Exzellenzmitteln finanzierte Initiative soll die interdisziplinäre Zusammenarbeit der Mathematik mit den Naturwissenschaften stärken. In einem gemeinsamen Projekt mit Prof. Jörn Manz, Prof. Caroline Lasser

(FB Mathematik) und Prof. Christian Hege (Zuse-Institut Berlin) wird die gekoppelte Elektronen- und Kerndynamik untersucht. Im Rahmen dieses interdisziplinären Projekts arbeitet Dr. Anatole Kenfack, zusammen mit Doktoranden aus der Mathematik und der Chemie an der Entwicklung und Anwendung einer Methode, die die Beschreibung gekoppelter Kern- und Elektronenflüsse auf Born-Oppenheimer-Niveau im elektronischen Grundzustand erlaubt. Dieses Arbeitsgebiet wird durch zwei Doktoranden (Timm Bredtmann und Axel Schild) verstärkt, die diese Methode auf größere Moleküle verallgemeinern, und insbesondere auf elektrozyklische Reaktionen anwenden. Am Beispiel der Cope-Umlagerung des Semibullvalens hoffen wir erstmals aufklären zu können, wie viele Elektronen in welcher Richtung bei der Umlagerung fließen.

Als weitere Doktorandin ist seit Herbst 2008 Doreen Mollenhauer in meiner Arbeitsgruppe. Sie beschäftigt sich mit der theoretischen Untersuchung der Adsorption von Pyridinderivaten auf Graphit und Gold-Oberflächen, also mit Systemen wie sie in den experimentellen Arbeitsgruppen des SFBs 765 hergestellt werden. Zwischen Ausbildung und Forschung angesiedelt sind die Forschungspraktikanten, meist Masterstudenten der FU Berlin, die in einem 4-8-wöchigen Praktikum in der Arbeitsgruppe ein Forschungsprojekt aus der Quantenchemie bearbeiten. Mittlerweile haben schon fast 10 Studenten die Gelegenheit genutzt, an einem forschungsrelevanten Beispiel Quantenchemie durch Anwendung zu lernen. Zudem haben sich drei Studenten für eine Bachelorarbeit in der Theorie entschieden.

Im Rahmen einer gemeinsam mit Prof. Dieter Lentz (Anorganische Chemie) betreuten, kombinierten experimentellen und theoretischen Masterarbeit hat Bernhard Grundkötter die Elektronendichte in einem Boranat-Kristall (siehe Abb. 1) untersucht. Hier sind hoch genaue Gitterstrukturbestimmungen und Elektronendichtebe-

rechnungen von theoretischer Seite nötig, um ein systematisches Verständnis für die besondere Bindungssituation sowohl im Boran-Käfig wie zwischen den Anionen und den Kationen zu erlangen. Ausgehend von den Ergebnissen für $(\text{NH}_4)_2\text{B}_6\text{H}_6$ sollen nun Rechnungen für andere Boranate, die in der Arbeitsgruppe Lentz hergestellt werden, ausgeführt werden.

In einer Zusammenarbeit mit Prof. Sabine Schlecht (bis Frühjahr 2009 FU Berlin, jetzt Universität Gießen) wurde erfolgreich ein Projekt im Schwerpunktsprogramm „Nanostrukturierte Thermoelektrika: Theorie, Modellsysteme und kontrollierte Synthese“ begonnen. Hier steht in der Theorie eine Doktorandenstelle zur Berechnung von elektronischen und strukturellen Eigenschaften thermoelektrischer Materialien zur Verfügung.

Inkrementenmethode für elementares Zink

Möchte man neben den DFT-Methoden auch wellenfunktionsbasierte Korrelationsmethoden, z.B. Coupled-Cluster, für ausgedehnte Systeme einsetzen, besteht die Möglichkeit, lokale Korrelationsmethoden, wie z.B. die von Pulay, Werner und Schütz, anzuwenden. Um diese lokalen Kor-

relationsmethoden aber auf periodische Festkörper anwenden zu können, muss man entweder eine Formulierung finden, die allen Symmetrieeoperationen einschließlich der Translationssymmetrie genügt (dies wurde mit dem Programmpaket CRYSCOR auf MP2-Niveau erreicht) oder die Korrelationsenergie des Festkörpers nach translationsinvarianten Einheiten aus lokalisierten Orbitalen entwickeln und diese dann in eingebetteten Fragmenten des Festkörpers mit Molekülprogrammen berechnen. Auf dieser Idee beruht die Inkrementenmethode, ursprünglich vorgeschlagen von Prof. Hermann Stoll [1], die damit den Vorteil hat, auf alle verfügbaren größenextensive Korrelationsmethoden zurückgreifen zu können. Sie wurde auf eine Vielzahl von Halbleitern und Isolatoren angewandt. Selbst für schwach gebundene Systeme, wie Edalgaskristalle oder Molekülkristalle, die einen hohen dispersiven Anteil in ihrer Bindung haben wurde eine sehr gute „Übereinstimmung“ mit dem Experiment gefunden. Diese Ergebnisse sind in einem Übersichtsartikel zusammengefasst worden [2].

Die wesentliche Idee dieser Methoden beruht auf

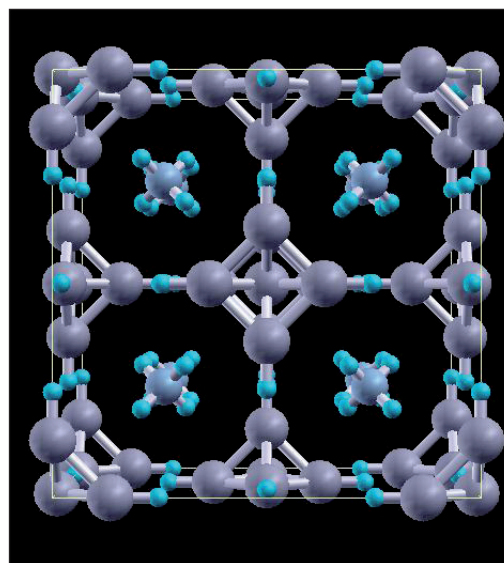
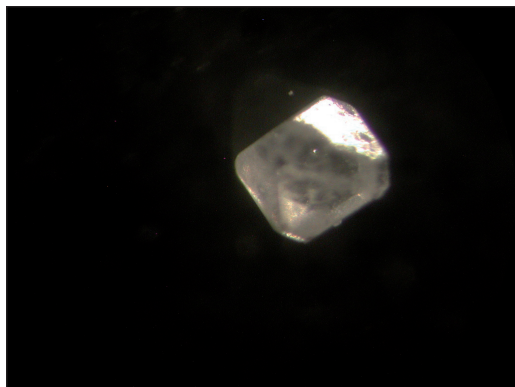


Abbildung 1: Einkristall von $(\text{NH}_4)_2\text{B}_6\text{H}_6$ (links), hergestellt in der AG Lentz (Anorgan. Chemie, FU Berlin), und zugehörige Elementarzelle (rechts).

dem lokalen Charakter der Elektronenkorrelation. Während auf Hartree-Fock-Niveau die langreichweitige Wechselwirkung (Coulomb- und Austauschterm der Elektron-Elektron-Wechselwirkung) signifikant zur Bindung beiträgt, rührt der Korrelationsbeitrag von kurzreichweitigen Wechselwirkungen der Elektronen untereinander her. Langreichweitig fällt diese Wechselwirkung (Van der Waals) mit r^{-6} ab. Um die Korrelationsenergie zu berechnen benutzen alle lokalen Korrelationsmethoden eine Transformation der ausgedehnten Molekülorbitale in lokalisierte Orbitale, z.B. die Lokalisierung nach Foster und Boys oder Pipek und Mezey, oder eine Wannier-Lokalisierung im Festkörper. In der Inkrementenmethoden wird die Korrelationsenergie nun in Beiträge lokalisierter Orbitalgruppen entwickelt: (Deren nichtadditive Korrekturen sukzessive die genäherte Korrelationsenergie der exakten angleichen.)

$$E_{\text{solid}}^{\text{corr}} = \sum_{A \in \text{u.c.}} \epsilon_A + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{A \neq B \\ A \in \text{u.c.}, \\ B \in \text{solid}}} \Delta\epsilon_{AB} + \frac{1}{3!} \sum_{\substack{A \neq B \neq C \\ A \in \text{u.c.}, \\ B, C \in \text{solid}}} \Delta\epsilon_{ABC} + \dots$$

wobei A, B und C die lokalisierten Orbitalgruppen nummerieren und ϵ_A der Korrelationsenergie der lokalisierten Orbitalgruppe A entspricht. Der nichtadditive Beitrag

$$\Delta\epsilon_{AB} = \epsilon_{AB} - (\epsilon_A + \epsilon_B)$$

entspricht der ersten Korrektur, die die Korrelationen zwischen zwei lokalisierten Orbitalgruppen A und B zuläßt. Dies ist der wesentliche Anteil, der zur dispersiven Bindung zweier Atome oder Moleküle beiträgt. Höhere Inkremente werden analog definiert, z.B. das Dreiorbit-Inkrement

$$\Delta\epsilon_{ABC} = \epsilon_{ABC} - (\epsilon_A + \epsilon_B + \epsilon_C) - (\Delta\epsilon_{AB} + \Delta\epsilon_{BC} + \Delta\epsilon_{AC})$$

Meist wird als Korrelationsmethode eine Coupled-Cluster Methode mit Einfach- und Zweifachanregungen und störungstheoretischen Dreifachan-

regungen (CCSD(T)) verwendet. In den letzten Jahren beschäftigt sich meine Arbeitsgruppe intensiv mit der Verallgemeinerung der Inkrementenmethode auf metallische und stark korrelierte Systeme. Dort treten im Gegensatz zu Isolatoren und Halbleitern zwei Probleme auf: Die Erzeugung und Qualität der lokalisierten Orbitale in metallischen Systemen, und die Quasientartung von Valenz- und Leitungsband. Für den ersten Fall wurde eine spezielle Einbettung entwickelt, die im korrelierten Teil den metallischen Charakter modelliert, aber im Einbettungsteil nur elektrostatische und Van-der-Waals-Wechselwirkungen berücksichtigt, so dass sich die nichtadditiven Effekte von elektronischen Korrelationen und metallischem Charakter über das Inkrementenverfahren erfassen lassen [3]. Im zweiten Fall versagt die Beschreibung mit einer Hartree-Fock-Determinante völlig. Deshalb wurde die Inkrementenmethode auf Multi-Referenz-Korrelationsmethoden erweitert.

Am Beispiel der Gitterstruktur des elementaren Zinks lassen sich die Einflüsse der elektronischen Korrelationen diskutieren. Von Metallen mit geschlossenschaligen Atomen wie Zink oder Magnesium erwartet man, dass sie sich in einer Kugelpackung anordnen. Während Magnesium in dichtester hexagonaler Packung ($c/a=1.63$) vorliegt, findet man bei Zink und Cadmium eine stark verlängerte c -Achse, die einer um 10% größeren Bindungslänge zwischen den hexagonalen Ebenen entspricht.

Verwendet man verschiedene Dichtefunktionale, um die Gitterkonstanten in Zink zu berechnen, kann man zwar die a -Achse mit zufriedenstellender Genauigkeit erhalten, in der c -Achse zeigen sich aber Unterschiede bis zu 1 Ångström, wenn die Funktionale verändert werden. Dies ist immer ein Zeichen, dass elektronische Korrelationen wichtig sind. Wendet man die Hartree-Fock Methode für Zink an, so ergibt sich keine Attraktion und der Kristall zerfällt in einzelne Atome. Dies zeigt, dass die Bindung im metallischen Zink ausschließlich

auf Korrelationen beruht. Wir haben die Inkrementenmethode auf CCSD(T)-Niveau mit einem 20-Valenzelektronen-Pseudopotential und einem Basissatz von pvtz-Qualität für Zink durchgeführt und eine Bindungsenergie gefunden, die weniger als 5% von der experimentellen Bindungsenergie abweicht [4]. In einem weiten Bereich von Gitter-

sorption von Molekülen auf Oberflächen auf den Korrelationsanteil zur Adsorptionsenergie. Gerade für physisorbierte Moleküle wird erwartet, dass der Korrelationsanteil zur Adsorptionsenergie groß ist, da vornehmlich disperse Kräfte für die Bindung verantwortlich sind. Für ein physisorbiertes System „Oberfläche plus Molekül“ liefert eine Lokalisie-

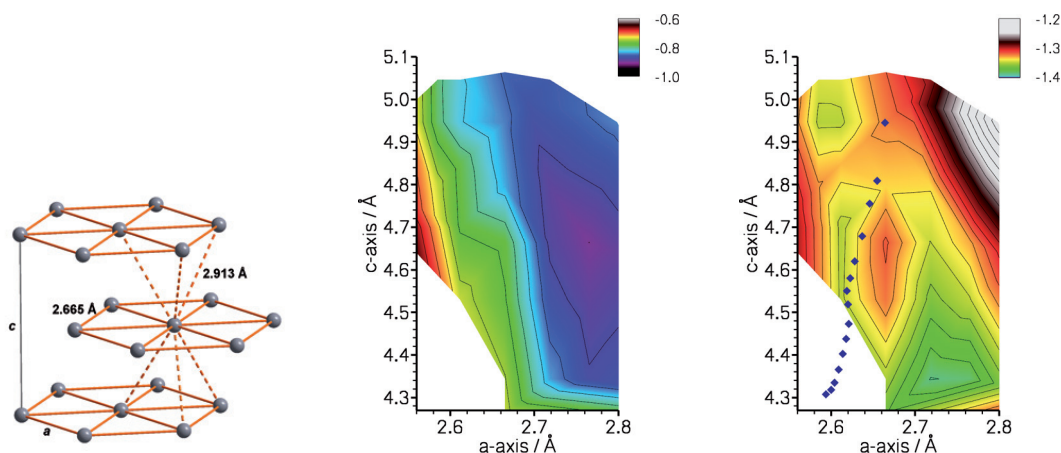


Abbildung 2: Kristallstruktur und Energiepotentialfläche für Zink. Die beiden rechten Abbildungen zeigen die Potentialfläche in Anhängigkeit der beiden Gitterkonstanten a und c , links ohne Korrelation der d -Schale, rechts mit Korrelation der d -Schale. Im rechten Bild sind die experimentellen Gitterparameter aus einem Hochdruckexperiment eingezeichnet.

parametern wurde mit der Inkrementenmethode die Potentialfläche von Zink berechnet. In Abb. 2 sind die Ergebnisse auf der linken Seite ohne Korrelation der geschlossenen 3d-Schale dargestellt, auf der rechten Seite mit d -Korrelation.

Inkrementenmethode für Adsorptionsenergien

Bis jetzt wurde die Inkrementenmethode vor allem zur Berechnung der Grundzustandseigenschaften von Festkörpern benutzt. Sie kann aber, da in der Methode keine Periodizität vorausgesetzt wird, auch auf Systeme mit reduzierter Symmetrie, wie Moleküle auf Oberflächen oder endliche Systeme, erweitert werden. Die Formulierung der Inkrementenentwicklung bezieht sich im Fall der Ad-

derung die lokalisierten Orbitale des Moleküles, die zu einer Gruppe zusammengefasst werden können (Bezeichnung mol) und die einzelnen lokalisierten Orbitalgruppen der Oberfläche z.B. die der einzelnen Ionen eines ionischen Festkörpers (Nummerierung i,j,\dots). Die Adsorptionsenergie, die als Energiedifferenz zwischen gebundenem System und den getrennten Bestandteilen gebildet wird (unter Anwendung der Counterpoise-Korrektur, um den Basissatzsuperpositionsfehler zu korrigieren), wird in einen Hartree-Fock- und einen Korrelationsanteil zerlegt:

$$E^{\text{adsorb}} = E_{\text{mol/surface}} - E_{\text{surface}} - E_{\text{mol}} = E_{\text{HF}}^{\text{adsorb}} + E_{\text{corr}}^{\text{adsorb}}$$

Während der HF-Beitrag mit einer periodischen Rechnung bestimmt wird, wird der Korrelations-

		HF	MP2	CCSD(T)
CO	(110)	-149 meV	-244 meV	-201 meV
CO	(111)	-48 meV	-323 meV	-283 meV
N ₂ O	N-down	22 meV	-276 meV	-227 meV
N ₂ O	O-down (perp)	4 meV	-142 meV	-133 meV
N ₂ O	O-down (tilted)	-105 meV	-263 meV	-261 meV

Tabelle 1: Die Adsorptionsenergien von CO und N₂O auf der CeO₂ (111) und (110) Oberfläche von CeO₂ berechnet mit verschiedenen Methoden. Die MP2 und CCSD(T) Rechnungen wurden mit der Inkrementenmethode ausgeführt.

anteil nach Inkrementen entwickelt, die in eingebetteten Fragmenten des Systems bestimmt werden.

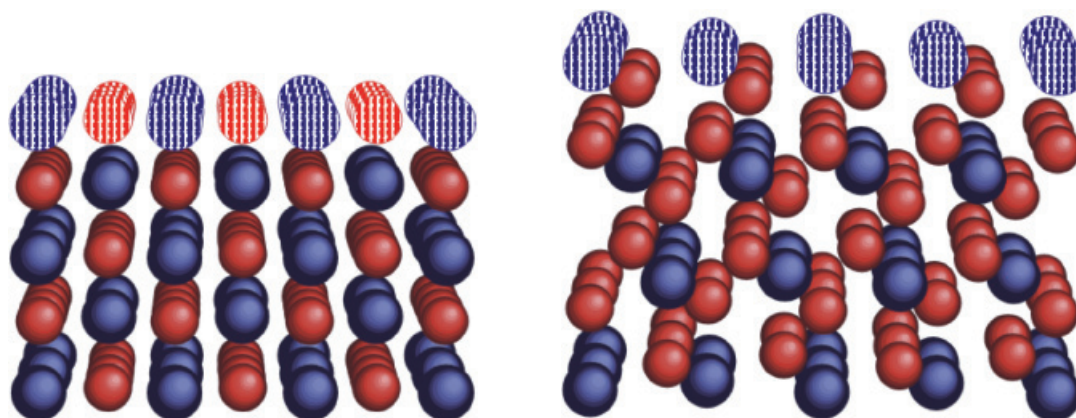
Hierbei ist $\eta_{i,mol}$ die Änderung der Korrelationsenergie des Moleküls durch die Adsorption. Bei physisorbierten Molekülen wird erwartet, dass dieser Beitrag klein ist, da sich die Elektronenstruktur des Moleküls nicht drastisch ändert. Das Gleiche gilt für die Änderung der Einortinkremente η_i der Oberfläche durch die Adsorption. Der größte Beitrag zur Korrelationsadsorptionsenergie wird durch die Zweiortinkremente $\eta_{i,mol}$ erwartet, da diese nur im gemeinsamen System auftreten und genau die korrelierte Wechselwirkung zwischen Molekül und Oberfläche beschreiben.

Nächsthöhere Beiträge, wie die Änderung der

Zweiortinkremente der Oberfläche oder Dreiortinkremente, sind klein gegenüber den Zweiortinkrementen Molekül-Oberfläche.

Als Anwendungsbeispiele haben wir die Adsorption von CO und N₂O auf verschiedenen CeO₂-Oberflächen (siehe Abb. 3) mit MP2 und CCSD(T) untersucht [5]. Auf MP2-Niveau ist es für ausgewählte Geometrien möglich, auch eine volle Rechnung durchzuführen. So konnten wir zeigen, dass die Inkrementenentwicklung mit nur Zweiortinkrementen bis drittnächste Nachbarionen in der Oberfläche zum adsorbierten Molekül 95% der vollen Korrelationsenergie liefert.

Die Moleküle adsorbieren alle auf einem Cer(IV)-Ion, CO in senkrechter Anordnung mit Kohlenstoff zur Oberfläche zeigend, während N₂O sowohl mit



Seitenansichten der CeO₂ (110) (links) und (111) (rechts) Oberfläche (Kristallstruktur des Festkörpers: Calciumfluorid). Cerionen in rot und Sauerstoff in blau, schraffiert die oberste Lage der Oberfläche.

Stickstoff wie mit Sauerstoff zur Oberfläche zeigen kann. Im letzten Fall verdoppelt sich die Adsorptionsenergie durch eine verkippte Anordnung des Moleküls. Vergleicht man die Hartree-Fock-Werte mit den korrelierten Adsorptionsenergien, so erkennt man dass die Adsorption wesentlich durch elektronische Korrelationen bestimmt ist. Durch die Inkrementenmethode haben wir die Möglichkeit, auch einzelne Korrelationsbeiträge zu diskutieren. So ergab die Studie zur Adsorption auf CeO_2 -Oberflächen, dass die Korrelation der geschlossenen Semicore-Schalen $5s^25p^6$ des Cer(IV)-Ions mit dem Molekül zwischen 30 und 40% zur Adsorptionsenergie beiträgt. Im Vergleich der verschiedenen Oberflächen (110) und (111) kann man deutlich sehen, dass der Korrelationsanteil in der Adsorptionsenergie bei der Adsorption auf (111) deutlich größer ist und auch CO stärker auf (111) gebunden ist. Bei der Adsorption von N_2O

ist bei senkrechter Adsorptionsgeometrie die mit Stickstoff am Cer gebundene Variante deutlich stabiler, aber eine Verkipfung des N_2O in O-down Anordnung liefert eine Adsorptionsenergie die mit dem Experiment im Rahmen der Fehlergrenzen übereinstimmt. Eine weitere Anwendung ist die Adsorption von H_2S auf Graphen [6]. Selbst für das π -System des Graphens ist eine Lokalisierung möglich. Die Wechselwirkungen sind langreichweitiger als bei ionischen Oberflächen, aber können für weit entfernte Oberflächenorbitale durch einen Van-der-Waals-Fit abgeschätzt werden. Dieses Arbeitsgebiet eröffnet eine große Vielfalt von Anwendungen, besonders für physisorbierte Moleküle, bei denen Standard-Dichtefunktionale ihre Schwierigkeiten haben.

Prof. Dr. Beate Paulus
userpage.chemie.fu-berlin.de/~agppaulus

- [1] H. Stoll, Phys. Rev. B, 46 (1992) 6700.
- [2] B. Paulus, Phys. Rep., 421 (2006) 1.
- [3] E. Voloshina and B. Paulus, Wavefunction-based ab initio correlation methods for metals: Application of the incremental scheme to Be, Mg, Zn, Cd, and Hg, in Chemical Modelling: Applications and Theory, Vol. 6, M. Springborg (ed.) R.S.C, Cambridge, 2009.
- [4] N. Gaston and B. Paulus, Phys. Rev. B, 76 (2007) 214116;
 N. Gaston, B. Paulus, U. Wedig, and M. Jansen, Phys. Rev. Lett., 100 (2008) 226404;
 N. Gaston, D. Andrae, B. Paulus, U. Wedig, and M. Jansen, Phys. Chem. Chem. Phys., (2009), DOI: 10.1039/B915967C
- [5] C. Müller, B. Herschend, K. Hermansson, and B. Paulus, J. Chem. Phys., 128 (2008) 214701;
 C. Müller, K. Hermansson, and B. Paulus, Chem. Phys., 362 (2009) 91;
 C. Müller, B. Paulus, and K. Hermansson, Surf. Sci., 603 (2009) 2619
- [6] B. Paulus and K. Rosciszewski, Int. J. Quantum Chem., 109 (2009) 3055.

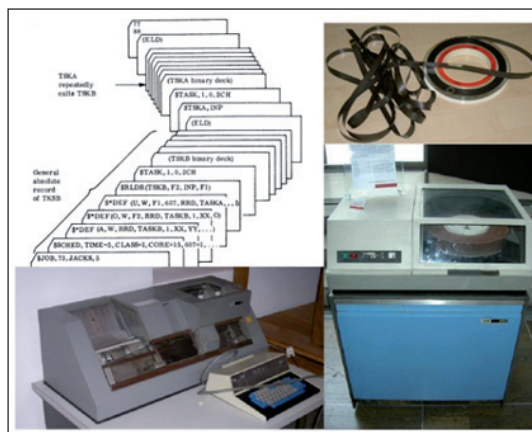
45. SYMPOSIUM FÜR THEORETISCHE CHEMIE

Neuss, 8. bis 12. September 2009

Unter dem Titel „Molecules in the excited state: From Photophysics to Photochemistry“ luden dieses Jahr Christel Marian (Universität Düsseldorf) und Andreas Dreuw (Universität Frankfurt) zum 45. Symposium über Theoretische Chemie. Wie auch in den vergangenen Jahren hatte die von 8. bis 12. September stattfindende Tagung mit 254 Teilnehmern starken Zuspruch unter theoretisch-chemisch orientierten Arbeitsgruppen aus der Schweiz, Österreich und Deutschland, aber auch aus anderen europäischen und außereuropäischen Ländern (darunter dank eines vorangegangenen indisch-deutschen Workshops auch eine recht große indische Delegation). Veranstaltet wurde das Symposium auf der Düsseldorf gegenüberliegenden Rheinseite, in Neuss, einer der ältesten Städte Deutschlands, wie Christel Marian in ihrer Begrüßung betonte.

In der Eröffnungssitzung gaben die zwei eingeladenen Vorträge von Sigrid Peyerimhoff (Universität Bonn) und Sam Leytwyler (Universität Bern) dem Symposium zwei wichtige Perspektiven. Der Vortrag von Frau Peyerimhoff führte die Teilnehmer zu den Anfängen der numerischen Quantenchemie in den 1960er Jahren. „Ein steter Kampf um Rechenzeit“, so die Vortragende und dies unter aus heutiger Sicht schier unglaublichen Einschränkungen: Eingabe über Lochkarten, eventuell tagelange Wartezeit bis zur Ausführung der Rechnung, weniger als 100 kByte Hauptspeicher bei 0.2 Mega-FLOPS Rechenleistung (jeder ein-

fache heutige PC bietet das 10000-fache an Speicher und Leistung). Dennoch, dank intelligenter Konzepte und sorgfältiger Arbeit konnten robuste und tragfähige Vorhersagen gemacht werden, die bis heute Gültigkeit behalten haben und welche schließlich auch Spektroskopiker von dem Nutzen dieses neuen Wissenschaftszweiges überzeugten. Beispiele waren spektroskopische Konstanten von O_2 und die Singulett-Triplett-Aufspaltung von



Zeugen der Vergangenheit: Lochkarten und Lochkartenmaschine (links), Speicherbänder (rechts oben), waschmaschinen großes Festplattenlaufwerk (rechts unten). Sorgfältiges Vorbereiten des Inputs war das A und O des wissenschaftlichen Rechnens, die Einschränkung der Ressourcen konnten durch intelligente Konzepte wettgemacht werden, so dass viele Resultate bis heute Gültigkeit behalten haben. Abbildung mit freundlicher Genehmigung von S. Peyerimhoff.

CH₂. Das Fazit von Sigrid Peyerimhoff: "Es war eine aufregende Zeit".

Sicherlich nicht mehr vom Nutzen der Theorie überzeugt werden musste Sam Leytwyler, der das Thema der Konferenz aus der Perspektive des Spektroskopikers beleuchtete. Er begann seinen Vortrag mit einem Dank an die Theoretiker, welche mit vielen Tabellen und Vorhersagen seine Arbeit unterstützt haben. Thema des Vortrags waren die Konformationen der Dimere von Nucleobasen-Analoga und deren Untersuchung mit modernen spektroskopischen Methoden, wie etwa masseselektierter resonanter zwei-Photonenionisierung.

Der weitere Rahmen der Konferenz wurde von 12 weiteren eingeladenen Vorträgen aufgespannt, welche (durchaus stets mit starkem Bezug zum Motto der Konferenz) die gesamte Breite des Spektrums quantenchemischer Methoden aufspannten, tradi-

tionsgemäß ergänzt um Beiträge aus experimentell arbeitenden Gruppen. Neben dem bereits erwähnten Vortrag von Sam Leytwyler, berichtete auch Peter Gilch (LMU München) aus Sicht des Spektroskopikers über das Zusammenspiel von Theorie und Experiment bei der Aufklärung der Photochemie von o-Nitrobenzaldehyd.

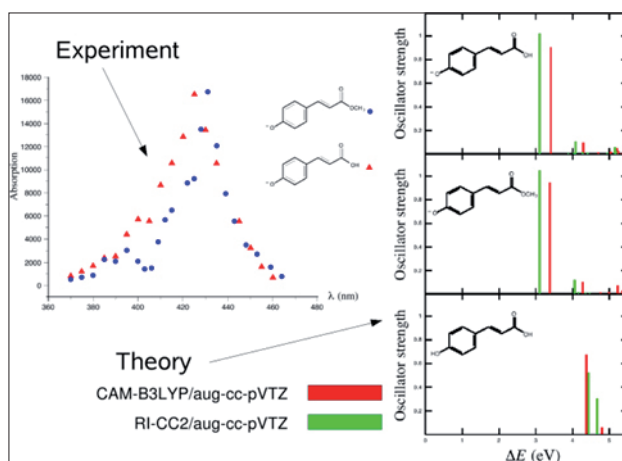
Als genereller Trend bei den theoretisch orientierten Vorträgen war die Beschäftigung mit großen Systemen, insbesondere solchen mit biologischer oder technologischer Relevanz, zu bemerken. Von

Interesse waren hier vor allem Chromophore und ihre Wechselwirkung mit der Proteinumgebung, wie sie Jun-ya Hasegawa (Universität Kyoto) in seinem Vortrag beschrieb. Er stellte vor allem Arbeiten zum Verständnis des "color tunings" der Farbstoffe vor, ein Beispiel waren die menschlichen Farbzeptoren in der Retina. Als Rechenverfahren kommen hier Hybridmethoden zum Einsatz, im folgenden kurz als QM/MM bezeichnet. Hierunter versteht man die die explizit quantenmechanische (QM) Behandlung eines Subsystems, während der

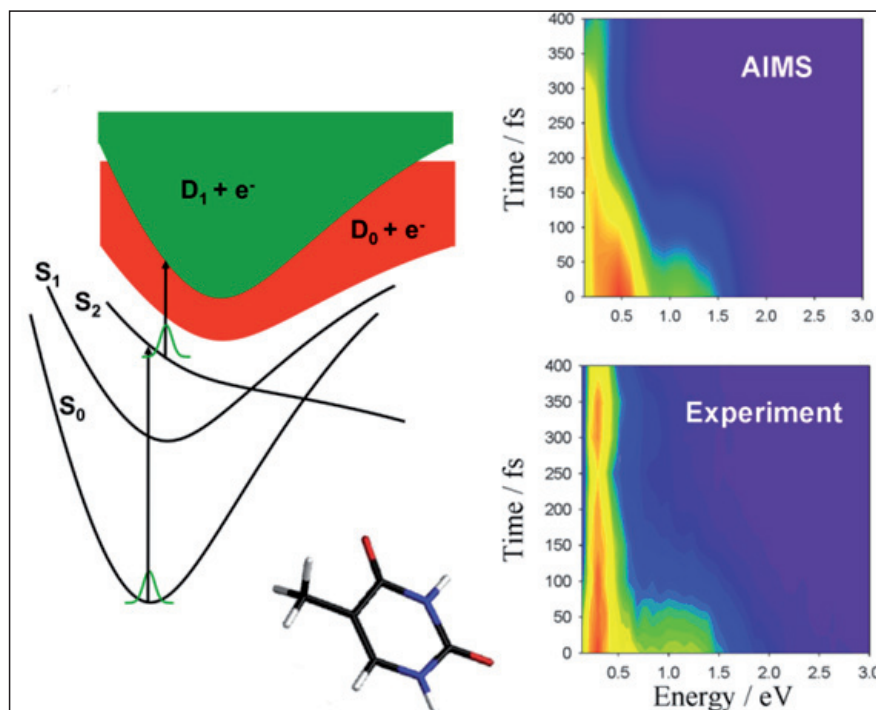
Einfluss der Umgebung über eine auf empirischen Kraftfeldern beruhende, sogenannte molekulmechanische (MM) Methode modelliert wird. Ein wichtiger Punkt hierbei ist die korrekte Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen dem Chromophor und der Umgebung. In den von Jun-ya Hasegawa gezeigten Beispielen war es über die rein elektrostatischen Wechsel-

wirkungen hinaus auch wichtig, bestimmte Seitengruppen des Proteingerüsts, welche mit dem Chromophor unmittelbar wechselwirken, in den QM-Kern miteinzubeziehen.

Ähnliche Entwicklungen wurden auch in den Vorträgen von Ove Christiansen (Universität Århus) und Nikos Doltsinis (King's College, London) geschildert. Ove Christiansen stellte vor allem die Vorhersage von Zwei-Photonen-Absorptionsquerschnitten in den Vordergrund, im zweitge-



Phenoxide als Modell für das Chromophor des photoreaktiven gelben Proteins. Das beobachtete Spektrum hat eine starke Absorptionsbande in Einklang Coupled-Cluster- (RI-CC2) und Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen (CAM-B3LYP Funktional). Abbildung mit freundlicher Genehmigung von O. Christiansen

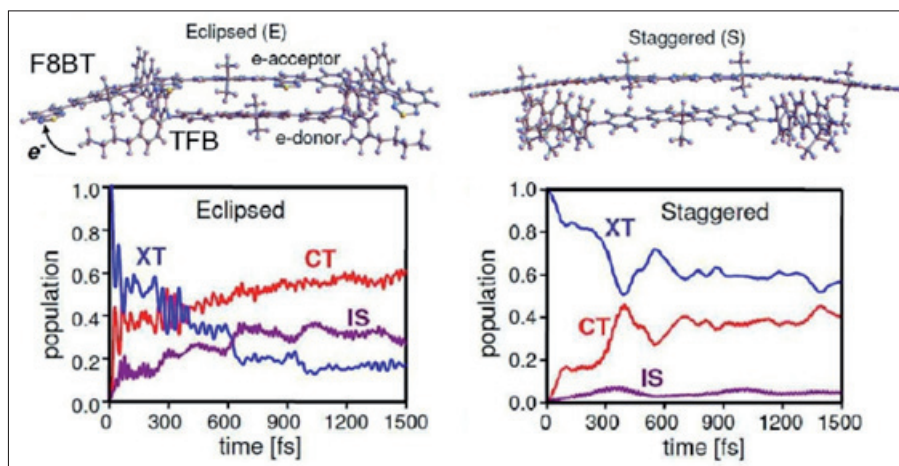


Ab initio-Berechnung von zeitaufgelösten Photoelektronenspektren (Hudock et al., *J. Phys. Chem. A* 111, 8500–8508 (2007), Hudock und Martinez, in Vorbereitung). Links: Schematische Darstellung des Experiments. Nach Anregung durch den pump-Laserpuls in einen optisch erlaubten Zustand (hier der S_2 -Zustand), wird die Zeitentwicklung der Kernwellenfunktion durch die entsprechende Potentialfläche bestimmt. Nach einer kontrollierten Zeitverzögerung wird das Molekül durch einen probe-Laserpuls ionisiert und die Anzahl sowie die kinetische Energie der emittierten Elektronen kann detektiert werden. Wie im Schema angedeutet können dabei mehrere Ionisationskontinua zugänglich sein (verschiedene elektronische Zustände des Kations). Rechts oben: Vorhergesagtes zeitaufgelöstes Spektrum von Thymine (ohne Verwendung von anpassbaren Parametern). Rechts unten: Experimentelles Spektrum. Abbildung mit freundlicher Genehmigung von T. Martinez.

nannten Vortrag kam zudem noch die Komponente der Multiskalen-Modellierung hinzu: Bei noch größeren Systemen muss von einer atomistischen MM-Beschreibung auf eine coarse-grained Beschreibung übergegangen werden, wobei einzelne Atome zu Gruppen (beads) zusammengefasst werden. Ein anderer hier thematisierter Aspekt ist die Behandlung von dynamischen Vorgängen. Wesentlich hierbei ist die Mitnahme von über die Born-Oppenheimer Näherung hinausgehenden Effekten, beispielsweise über semi-klassische “sur-

face hopping”-Ansätze im Rahmen einer ansonsten klassischen Behandlung der Kernbewegungen. Ein weiterer Kernpunkt der sogenannten *ab initio* molecular dynamics (AIMD) ist die direkte Berechnung von Energien und Kräften im Verlauf der Dynamiksimulation (“on-the-fly”), im Gegensatz zu vorberechneten Energieflächen, was nur für wenige Freiheitsgrade praktikabel ist.

Eine Erweiterung dieses Ansatzes stellte Todd Martinez (Stanford University) vor: Bei “multiple-spawning” Methoden wird die Kernwellenfunkti-



Modellierung des Ladungstrennungsprozesses an der Grenzfläche zweier organischer Halbleiter, TFB und F8BT (Tamura, Ramon, Bittner, Burghardt, Phys. Rev. Lett. 100, 107402 (2008)). Zwei mögliche Orientierungen der Moleküle (oben: F8BT, unten: TFB) sind im oberen Teil der Abbildung zu sehen. Im unteren Teil sind die Resultate der Quantendynamischen Rechnung (3 Zustände, 28 Moden) dargestellt. Aufgetragen sind die zeitlichen Entwicklungen der Populationen des initial besetzten lokalisierten Exciton-Zustandes (XT) auf dem TFB-Molekül, des intermediären Zustandes (IS) und des Ladungstransfer-Zustandes (CT, Elektron auf F8BT, Loch auf TFB). Wichtige Schlussfolgerungen der Arbeiten sind der starke Einfluss der relativen Orientierung und die Bedeutsamkeit des intermediären Zustands; eine Analyse der Dynamik über ein vibronisches Kopplungsmodell zeigt außerdem, dass Torsionsmoden eine Schlüsselrolle für eine effektive $XT \rightarrow CT$ Reaktion spielen. Abbildung mit freundlicher Genehmigung von I. Burghardt.

on über eine adaptive Basis aus Gaußfunktionen beschrieben, was eine – je nach Größe der Basis – recht genaue Mitnahme von Quanteneffekten insbesondere im Bereich stark koppelnder Potentialflächen erlaubt.

In einer der vorangegangenen Sitzungen hatte bereits Jörn Manz (FU Berlin) eine historische Übersicht über theoretische Arbeiten zu quantum control mit ultrakurzen Laser-Pulsen gegeben. Die Idee hierbei ist die gezielte chemische Veränderungen von Molekülen über geeignete Puls-Sequenzen. Neuere Arbeiten, motiviert durch die experimentelle Realisierung immer kürzerer Laserpuls

im sub-Femtosekunden-Bereich, zielen auf die Manipulation von Elektronen, z.B. die Induktion von Ringströmen in Molekülen, was extrem hohe lokale magnetische Felder zur Folge hätte. Darüberhinaus sind auch auf diesem Wege gezielte chemische Veränderungen von Molekülen denkbar.

Eine wichtige Rolle bei photophysikalischen und photochemischen Prozessen spielen sogenannte konische Durchschneidungen (conical intersections). Dies sind Bereiche im molekularen Konfigurationsraum, in welchem Born-Oppenheimer Flächen verschiedener elektronischer Zustände energetisch entartet sind. Das Konzept konischer

Durchschneidungen ist vor allem wichtig zum Verständnis ultraschneller Relaxationsprozesse und war dementsprechend auch in allen Vorträgen mit dieser Thematik präsent, so auch im Vortrag von Andrzej Sobolewski (Polnische Akademie der Wissenschaften, Warschau) über die Photophysik von intra- und intermolekularen Wasserstoffbrückenbindungen.

In Person von Michael Robb (Imperial College, London) war auch einer der Pioniere auf dem Gebiet konischer Durchschneidungen auf dem Symposium vertreten. Er sprach über neue Konzepte zur systematischen Suche und Charakterisierung von Extrema im Durchschneidungsraum, was für das Verständnis der Kinetik von photoinduzierten Prozessen eine ähnliche Rolle spielt wie die Suche und Charakterisierung von Übergangszuständen für thermische Reaktionen.

Solarzellen auf der Basis organischer Halbleitermaterialien bildeten den Hintergrund des Beitrages von Irene Burghardt (Ecole Normale Supérieure, Paris). Hauptpunkt war das Verständnis der Bildung und Dissoziation von Ladungspaaren (in Anlehnung an die Festkörperphysik als Excitonen bezeichnet) an der Grenzfläche zwischen verschiedenen organischen Halbleitern. Von großer Bedeutung ist hierbei die Kopplung an die Bewegungen des Kerngerüsts (Phononen), was über ein lineares vibronisches Kopplungsmodell modelliert wurde.

Einblicke in die industrielle Forschung gab der Vortrag von Christian Lennartz (BASF SE, Ludwigshafen), welcher sich (formal gesehen) mit der Umkehrung des Prozesses in Solarzellen beschäftigte, nämlich der Lichterzeugung in organischen Leuchtdioden (OLEDs). Eine der Herausforderungen ist hierbei die Synthese eines optimalen blauen Emitter-Farbstoffs, wobei Rechnungen mit Dichtefunktionaltheorie (DFT) als hilfreiche Screening-Methode eingesetzt werden konnten. Ein noch ungelöstes Problem ist die Optimierung

der Lebensdauer von blauen OLEDs, ein erster Schritt hierzu sind atomistische Simulationen der Leitfähigkeit in organischen Halbleitern.

Anne-Marie Kelterer (TU Graz) zeigte ebenfalls einige Beispiele (pH-Sensoren, Fluoreszenz-Marker Ind Phosphoreszenz in Europium-Komplexen), in denen quantenchemische Rechnungen zur Unterstützung experimenteller Arbeiten eingesetzt werden konnten.

Einer Mehrheit der auf der Konferenz gezeigten Anwendungen lagen Dichtefunktionalmethoden zugrunde, aber dank effizienter Implementierungen konnten auch korrelierte Verfahren wie Multi-Reference Configuration-Interaction (MR-CI), und Coupled-Cluster (CC) für recht große Systeme zum Einsatz kommen. Einen ganz anderen Zugang diskutierte William Lester, Jr. (University of California, Berkeley), nämlich die Verwendung von Quanten-Monte-Carlo-Techniken.

In diesen Rahmen von eingeladenen Vorträgen fügten sich 31 weitere Kurzvorträge ein. Eine ganze Reihe von Beiträgen beschäftigten sich mit methodischen Weiterentwicklungen. Verbesserte QM/MM Schemata stellten z.B. Marius Wanko (San Sebastian) und Tomáš Kuba (Braunschweig) vor, neue Elektronenstrukturmethoden waren das Thema der Vorträge von Lars Goerigk (Münster: Doppelhybridfunktionale), Andreas Köhn (Mainz: Explizite Elektronenkorrelation), Lasse Sørensen (Düsseldorf: relativistische Coupled-Cluster-Theorie), Alexander Auer (Chemnitz: Niedrigskalierende Coupled-Cluster-Methoden), Denis Usvyat (Regensburg: Periodisches MP2) und Zhenggang Lan (Mühlheim: Verbesserte semiempirische Methoden). Strukturen großer Systeme standen im Mittelpunkt der Vorträge von Jörg Behler (Bochum), welcher über die Anwendung von neuronalen Netzwerken zur Strukturvorhersage berichtete, und von Johannes Kästner (Stuttgart), der einen neuen Algorithmus zur Übergangszustandsuche vorstellte.

Nicht-adiabatische Dynamiksimulationen mit

MRCI und QM/MM Kopplung wurden von Matthias Ruckebauer (Wien) vorgestellt, mit den komplexen Spektren von Radikalen beschäftigte sich Susanta Mahapatra (Hyderabad). Eine neue Propagatormethode zur Untersuchung ultraschneller Ladungstransportvorgänge brachte Anthony Dutoi (Heidelberg) anschaulich zum Vortrag.

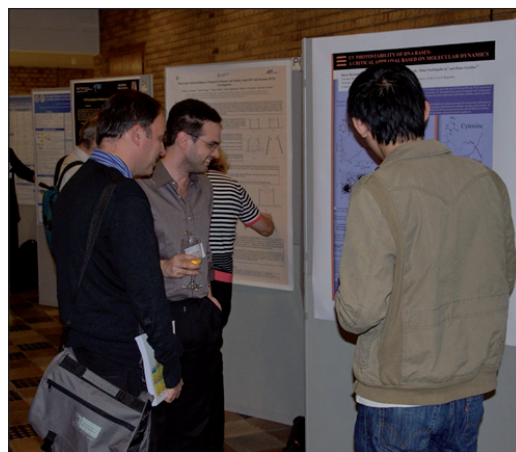
Einen Ausflug in die Festkörperphysik gab es in den Vorträgen über die Behandlung komplexer Spinsysteme von Sibylle Gemming (Dresden) und über Hochtemperatursupraleitung von Itai Panas (Göteborg). Mit der Beseitigung von Widersprüchlichkeiten im Verständnis der Polarisierung von Festkörpern beschäftigte sich Michael Springborg (Saarbrücken) und über die korrekte Berechnung magnetischer Anisotropien mit Hilfe von Dichtefunktionalrechnungen klärte Christoph van Wüllen (Kaiserslautern) auf. Eine Reihe formaler Betrachtungen zur Elektronendichte am Kernort lieferte K. D. Sen (Hyderabad).

Zahlreiche Vorträge gab es auch zu mehr angewandten Themen. Die Bedeutung der Topologie des konischen Durchschneidungsraumes (vgl. oben) wurde von Lluis Blancafort (Girona) und Artur Nenov (München) an den Beispielen von Nucleobasen bzw. von Fulgiden vorgeführt. Der Farbübergang in fluoreszenten Proteinen wurde von Petra Imhof (Heidelberg) erläutert, Oliver Weingart (Essen) beschäftigte sich mit der Simulation zeitaufgelöster Spektren von Rhodopsin. DNA-Reparaturmechanismen waren das Thema von Tatiana Domratcheva (Heidelberg), über die korrelierte Protonendynamik von Adenin-Uracil Paaren berichtete Oliver Kühn (Rostock). Anna Stradomska (Groningen) zeigte einen Ansatz zur Behandlung der Exciton-Phonon-Kopplung in einem selbstassemblierten System aus zwitterionischem Porphyrin.

Drei Vorträge hatten im weitesten Sinne Vorgänge auf Oberflächen zum Gegenstand. Jean Christophe Tremblay (Potsdam) beschäftigte sich mit der

Dämpfung von Adsorbatschwingungen am Beispiel von Wasserstoff an Palladium, Oscar Rubio-Pons (Garching) zeigte Rechnungen zu angeregten Zuständen von auf TiO₂-Oberflächen adsorbierten Molekülen und Milan Onák (Prag) berichtete über die Simulation photochemischer Vorgänge in der Atmosphäre, wobei nicht nur Gasphasenreaktionen betrachtet wurden, sondern auch Reaktionen in kleinen Wassertropfen oder auch z.B. an der Oberfläche von Eiskristalliten.

Ein Beitrag aus der Industrieforschung stammte von Peter Deglmann (BASF), welcher zur Vorher-



Diskussion auf der Postersession.

sage von Raten bei radikalischen Polymerisationsreaktionen vortrug. Mit Hinblick auf das Design neuer Brennstoffzellen hatte sich Daniel Sebastiani (Berlin) mit der Protonen-Leitfähigkeit in Polymermembranen beschäftigt. Den abschließenden Vortrag gab Sergei Ivanov (Bochum). Er zeigte die Bedeutsamkeit von Quanteneffekten bei der Simulation der IR-Spektren von CH₃⁺ und dessen teil-deuterierten Isotopologen auf.

An zwei Abenden wurden auf insgesamt 161 Postern weitere aktuelle Projekte gezeigt und angeregt diskutiert. Auch hier war der Trend zu großen Systemen unverkennbar. Die auf der Abschluss-Sitzung verliehenen Posterpreise gingen an Ivana Antol und Tobias Schwabe (beide Münster), Frank

von Horsten (Oxford) und Jan Sielk (Kiel). Zeit zum “networking” blieb nicht nur in den Kaffeepausen und den genannten Postersessions, auch ein Exkursionsnachmittag mit anschließendem Konferenzdinner boten dazu Gelegenheit. Die Exkursionen führten die Teilnehmer je nach Präferenz in die Düsseldorfer Altstadt, in das Neandertal-Museum, oder auf die Insel Hombroich. Das Dinner fand in der heimeligen Atmosphäre des Brauhauses “Zum Schlüssel” in der Düsseldorfer Altstadt statt.

Auf der Abschluss-Sitzung applaudierten die Teilnehmer den Hauptorganisatoren Christel Marian, Martin Kleinschmidt und Andreas Dreuw und ihrem Team (aus Düsseldorf: Klaus Eifert, Karin Schuck, Mihajlo Etinski, Christina Kempen, Stefan

Knecht, Vidisha Rai-Constapel, Susanne Salzmann, Lasse Sørensen, Jörg Tatchen, sowie aus Frankfurt: Philipp Harbach, Stefan Knippenberg, Jürgen Plötner, Dirk Rehn, Jan Hendrik Starcke und Michael Wormit) und dankten damit für den reibungslosen und unkomplizierten Ablauf der Konferenz. Das nächste Symposium über Theoretische Chemie wird im September 2010 in Münster unter der Leitung von Stefan Grimme stattfinden.

Aktuelle Informationen unter:

<http://stc2010.uni-muenster.de>

Andreas Köhn
Universität Mainz

DFG- MITTEILUNGEN

Steigerung der Attraktivität und Wettbewerbsfähigkeit von DFG-Projektstellen

Der Hauptausschuss der DFG hat beschlossen, „...den fachlichen Beratungsgremien zukünftig in allen Fächern die Möglichkeit zu eröffnen, im jeweiligen Verfügungsrahmen für Promovierende Personalmittel für bis zu 100 % einer Stelle vorzuschlagen, soweit es die nationale und internationale Wettbewerbssituation innerhalb und außerhalb des Wissenschaftssystems erfordert.“

http://www.dfg.de/aktuelles_presse/information_fuer_die_wissenschaft/andere_verfahren/info_wissenschaft_28_09.html

Das Fachforum Chemie stellt fest, dass zurzeit in der Chemie ein verschärfter Wettbewerb herrscht, wie ihn der Hauptausschuss für eine Erhöhung der Bezahlung der Promovierenden in DFG-Projekten voraussetzt. Daher wird das Fachforum dem Hauptausschuss zukünftig in der Regel für Promovierende Mittel für 2/3 einer BAT IIa/E13-Stelle zur Bewilligung vorschlagen.

Freier Zugang zu Forschungsergebnissen

Die Deutsche Forschungsgemeinschaft baut ihre Unterstützung des Open-Access-Publizierens konsequent aus. Universitäten können künftig bei der DFG Mittel beantragen, um Publikationen ihrer Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in originären Open-Access-Zeitschriften zu finanzieren. Dies beschloss der Hauptausschuss der DFG in seiner Herbstsitzung. Die DFG setzt mit dem neuen Förderinstrument Anreize für Universitäten, verlässliche und dauerhafte Finanzierungsstrukturen für die Publikation in Open-Access-Zeitschriften zu entwickeln. Solche Strukturen sind noch nicht weit verbreitet, wohingegen die Finanzierung von Fachinformationen im herkömmlichen Subskriptionsmodell längst etabliert ist.

Fortsetzung der Exzellenzinitiative

Der Fahrplan für die neue Phase der Exzellenzinitiative steht: Der Präsident der Deutschen Forschungsgemeinschaft, Professor Matthias Kleiner, stellte im Juli auf der Jahrespressekonferenz der DFG in Berlin den zeitlichen Ablauf für die Fortsetzung des Elite-Wettbewerbs vor. Die Universitäten in Deutschland werden im kommenden Frühjahr dazu aufgerufen, erste Antragsskizzen für neue Projekte in der Spitzenforschung einzureichen. Die Skizzen sollen bis zum Herbst 2010 vorgelegt und anschließend begutachtet werden. Die erste Zwischenentscheidung soll im Frühjahr 2011 fallen; dann wird festgelegt, welche der neuen Skizzen in die Endrunde kommen. Die hier erfolgreichen Universitäten sollen dann bis zum Herbst 2011 Förderanträge für ihre neuen Projekte stellen. Gleichzeitig sollen die bereits geförderten Einrichtungen Anträge auf Weiterförderung stellen. Im Winter 2011/12 werden die Anträge der neuen und der alten Einrichtungen in einem Wettbewerb begutachtet. Im Sommer 2012 wollen Wissenschaft und Politik dann gemeinsam entscheiden, welche Universitäten mit welchen Projekten und Einrichtungen bis Ende 2017 gefördert werden.

Dr. Johanna Kowol-Santen
E-Mail: Johanna.Kowol-Santen@dfg.de

ANKÜNDIGUNGEN UND TAGUNGEN

Tagungen 2010

16. – 19. 2. 2010, Mariapfarr, Österreich

Workshop on Theoretical Chemistry 2010: Dynamics in Excited States

www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr

28. 2. – 2. 3, Mülheim a. d. Ruhr

International Symposium on Theoretical and Computational Chemistry

The symposium will focus on molecular quantum chemistry and cover the full range of contemporary theoretical methods. It will address recent developments in electronic structure theory, multiscale methods, and molecular dynamics, as well as chemical applications in the areas of spectroscopy, reactivity, and catalysis. The symposium will take place in the new conference building of the institute which is scheduled to be finished by the end of 2009. The symposium is held in honor of Walter Thiel who turned 60 in March 2009. The chosen date enables us to make use of the new facility with him still being 60.

Conference Chair:

Prof. A. Fürstner, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung

weitere Informationen:

www.mpi-muelheim.mpg.de/kofo/TCC/symposium/

DPG-Tagungen 2010

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

Bonn, 15. – 19. März 2010

74. Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung der Fachverbände

Hannover, 8. 12. März 2010

DPG Frühjahrstagung der Sektion AMOP (SAMOP)

Regensburg, 22. – 26. März 2010

DPG Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM)

14. 4. - 17. 4. 2010, Bad Herrenalb

International Conference

“First Principles Quantum Chemistry: from Elementary Reactions to Enzymes”

www.fpqc2010.org

13. 5. – 15. 5. 2010, Bielefeld

Bunsentagung 2010

Hauptthema "Interface systems chemistry: Out of the Vacuum - through the Liquid- into the Cell"

www.bunsen.de/Veranstaltungen/Bunsentagungen-p-27.html

29. 8. – 2. 9. 2010, Nürnberg

3rd EuCheMS Chemistry Congress

www.euchems-congress2010.de

29. 8. – 3. 9. 2010, Les Diablerets/Schweiz

Gordon Conference on Computational Chemistry

www.grc.org und chem.iupui.edu/rcc/grcc.html

26. 9. – 30. 9. 2010, Münster

46th Symposium on Theoretical Chemistry

„Quantum Chemistry for Large and Complex Systems: From Theory to Algorithms and Applications“

stc2010.uni-muenster.de

Tagungen 2011

DPG-Tagungen 2011

www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2011.html

13. – 18. 3. 2011, Dresden

75. Jahrestagung der DPG

Frühjahrstagung der Sektion AMOP (SAMOP) und der

Sektion Kondensierte Materie (SKM)

(u.a. Molekülphysik, Chemische Physik und Polymerphysik)

21. – 25. 3. 2011, Münster

DPG-Frühjahrstagung

Hadronen und Kerne

28. 3. – 1. 4. 2011, Karlsruhe

DPG-Frühjahrstagung

Gravitation und Relativitätstheorie, Teilchenphysik,

Theoret. und math. Grundlagen der Physik

4. – 8. 4. 2011, Kiel

DPG-Frühjahrstagung

Kurzzeitphysik, Plasmaphysik

2. 6. – 4. 6. 2011, Berlin

Bunsentagung 2011

„Analyse und Steuerung ultraschneller photoinduzierter Prozesse“

Wissenschaftliche und organisatorische Vorbereitung: Eckart Rühl (Berlin)

www.bunsen.de

4.9. – 7. 9. 2011, Bremen

GDCh-Wissenschaftsforum 2011

www.gdch.de/vas/tagungen.htm

Sept. 2011, Schweiz

Symposium für Theoretische Chemie

Hinweise auf weitere Tagungskalender

Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie, Symposien, Tagungen

www.theochem.de/agt.home.html

Deutsche Physikalische Gesellschaft, Tagungen

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

CONFMENU von Prof. Young S. Kim

www.yfine.com

Gesellschaft Deutscher Chemiker, Tagungen

www.gdch.de/vas/tagungen.htm

Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen

www.bunsen.de

Konferenzdienst Mandl

www.conference-service.com

Prof. Dr.phil.nat. Klaus Helfrich

www.helfrichTUB.de

KLATSCH UND TRATSCH

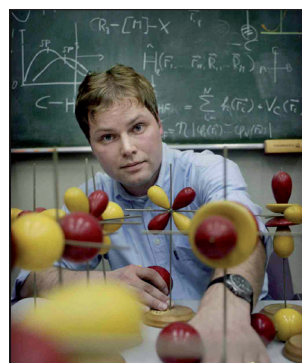
Neuer Vorsitz der AGTC: Prof. Jürgen Gauß

Der im Januar neugewählte Vorstand der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie (AGTC) hat Jürgen Gauß (Universität Mainz) zum Vorsitzenden gewählt sowie Christel Marian (Universität Düsseldorf) zur stellvertretenden Vorsitzenden. Beide werden ihre Funktionen ab 1. Juli 2009 wahrnehmen.



Berufung von Matthias Bickelhaupt

Matthias Bickelhaupt wurde zum 1. Januar 2009 zum „Hoogleraar“, was der deutschen C4-Professur entspricht, Institut für Theoretische Chemie an der Vrije Universiteit in Amsterdam berufen.



STELLENANZEIGEN



The Max Planck Institute for Dynamics of Complex Technical Systems in Magdeburg is the first institute of the Max Planck Society focusing on engineering sciences. It attempts to bridge the gap between basic research and industrial applications in the areas of chemical engineering and bioengineering. Significant activities are devoted to develop new types of reaction and separation processes. In this research field there is an increasing need in developing and applying theoretical concepts to predict chemical and physical properties, phase equilibria and transport coefficients. A specific need is seen in investigating chiral molecules in order to develop and optimize enantioselective crystallization processes and chromatographic separation (["http://www.mpi-magdeburg.mpg.de/research/groups/pcg/"](http://www.mpi-magdeburg.mpg.de/research/groups/pcg/)).

The department "Physical and Chemical Foundations of Process Engineering" seeks to appoint a

W2 Junior Research Group Leader "Molecular Modeling"

The successful candidate should be familiar with modern molecular simulation techniques (MC, MD, MM, QM, ...). Although the further development of these techniques is desirable, a main intention of the appointment is the critical evaluation of their potential with respect to various engineering applications investigated in the institute. Of particular interest are e.g. the prediction of solubilities, adsorption equilibria and diffusivities of chiral molecules. A PhD in the research field outlined is required (e.g. theoretical physics or computational chemistry). Additional research experience as a Postdoc would be beneficial. The position is available for five years and will be supported by funds of the institute to build up a group. There is no deadline for application. Consideration of candidates will start immediately and continue until the position is filled.

The MPI particularly welcomes applications from women.

Candidates should send a detailed resume including an outline of research achievements and interests as well as contact information regarding academic references to:

Prof. Dr.-Ing. Andreas Seidel-Morgenstern
 Max Planck Institute for Dynamics of Complex Technical Systems
 Sandtorstrasse 1
 D-39106 Magdeburg



Am Institut für Chemie der Fakultät für Naturwissenschaften ist zum nächstmöglichen Termin die

Juniorprofessur (W1) „Theoretische Chemie“

zu besetzen.

Bewerberinnen/Bewerber sollen das Gebiet der Theoretischen Chemie in der Lehre in voller Breite vertreten und sich angemessen an der Ausbildung von Studierenden im Bachelor-/Masterstudiengang Chemie, im Studiengang „Computational Sciences“ sowie in der Nebenfachausbildung beteiligen. Die Arbeitsgebiete der Bewerberinnen/Bewerber sollen die vorhandenen Arbeitsgebiete am Institut für Chemie sinnvoll ergänzen. Als Arbeitsschwerpunkt ist die „Dynamik und Struktur komplexer molekularer Systeme“ mit Schwerpunkt Entwicklung und Anwendung quantenchemischer, molekularmechanischer oder -dynamischer Methoden erwünscht.

Fähigkeit und Bereitschaft zur Durchführung von Lehrveranstaltungen in englischer Sprache sowie Aktivitäten zur Einwerbung von Drittmitteln werden erwartet.

Die Einstellungs- und Ernennungsvoraussetzungen ergeben sich aus § 63 Abs. 1 und 3 SächsHSG. Das Dienstverhältnis als Juniorprofessor/in im Beamtenverhältnis auf Zeit oder im privatrechtlichen Dienstverhältnis wird zunächst befristet für die Dauer von drei Jahren begründet und bei positiver Evaluation um weitere drei Jahre verlängert. Eine anschließende Berufung der Juniorprofessorin / des Juniorprofessors auf eine in den kommenden Jahren an der Universität zu besetzende Professorenstelle wird bei Vorliegen der entsprechenden haushaltsrechtlichen Voraussetzungen erwogen.

Die Technische Universität Chemnitz strebt die Erhöhung des Anteils von Frauen in Forschung und Lehre an. Qualifizierte Wissenschaftlerinnen sind deshalb ausdrücklich aufgefordert, sich zu bewerben.

Bewerbungen schwerbehinderter Menschen werden bei gleicher Eignung bevorzugt berücksichtigt.

Interessenten werden gebeten, ihre Bewerbung mit den üblichen Unterlagen (Lebenslauf, wissenschaftlicher Werdegang, Publikationsverzeichnis, bis zu fünf ausgewählte Sonderdrucke, Liste der Lehrveranstaltungen, Qualifikationsnachweise in Kopie) bis zum 30.11.2009 zu richten an:

Technische Universität Chemnitz
Dekan der Fakultät für Naturwissenschaften
09107 Chemnitz

HUMBOLDT-UNIVERSITÄT ZU BERLIN



Postdoc Position

A (Senior)-Postdoc position is available in “Computational Materials Science/Heterogeneous Catalysis” in the Quantum Chemistry group at Humboldt University, Institute of Chemistry (www.chemie.hu-berlin.de/ag_sauer).

- regular temporary university position involving teaching (permanent position will become available within the next years in our group).
- participation in guiding PhD students and running externally funded projects
- development of scientific independence (“Habilitation”) is encouraged
- in-depth knowledge of major quantum codes for periodic structures is expected
- participation in method development is encouraged, but not a condition.
- solving electronic structure problems of complex oxides and their surfaces in heterogeneous catalysis
- excellent cooperation environment within SFB 546 (<http://www.chemie.hu-berlin.de/sfb546>) and UNICAT cluster of excellence (<http://unicat.tu-berlin.de>).

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

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



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

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/Satz: Matthias Wohlgemuth, Humboldt-Universität zu Berlin
Entwurf & Design: Christian Schmelzer

November 2009

