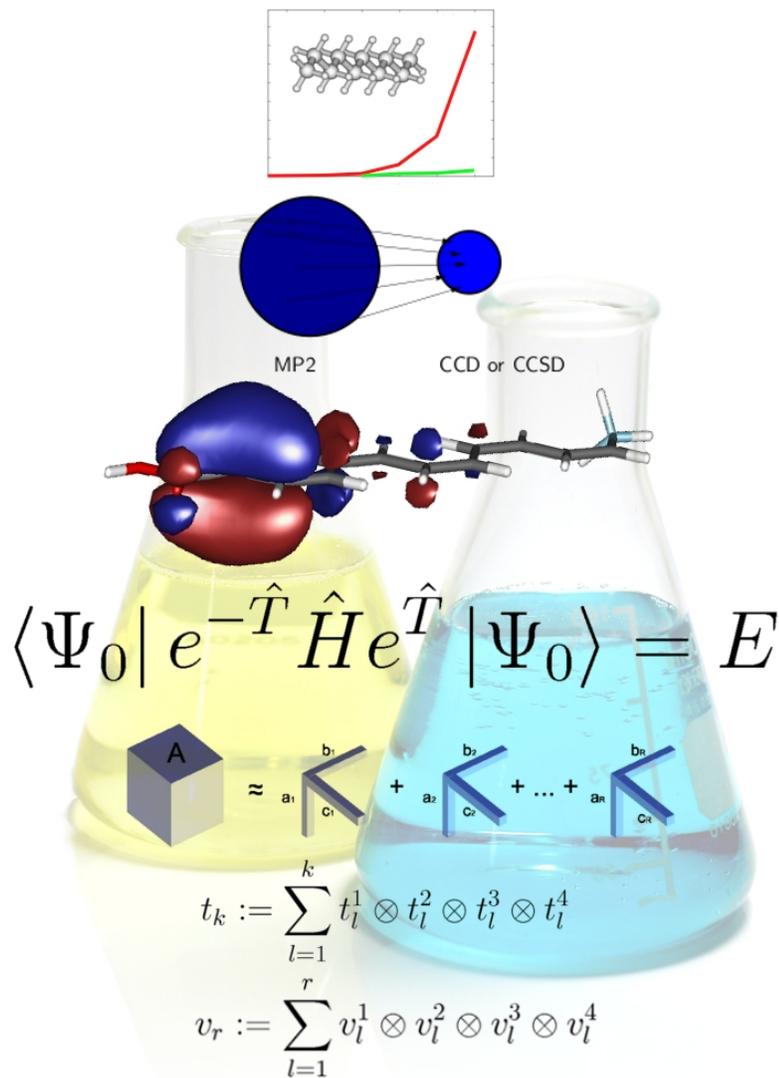


Info

Theoretische Chemie

April 2010



Niedrig skalierende post-HF *ab-initio* Methoden:
 Lokale Näherungen und Tensorzerlegung -
 welche Zutat führt zum Ziel ?

1 Inhaltsangabe

Inhalt:

Editorial	Seite	3
Arbeitsgruppen stellen sich vor	Seite	4
Mitgliederversammlung der AGTC	Seite	11
Nachrichten	Seite	16
Berichte	Seite	19
Tagungsvorschau	Seite	20
Mitteilungen der DFG	Seite	22

Titelbild:

Das Titelbild wurde von Herrn Dr. Alexander A. Auer gestaltet.

2 Editorial

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

diese und die folgenden drei Ausgaben des „Info Theoretische Chemie“ werden von den Arbeitsgruppen für Theoretische Chemie der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn herausgegeben.

Wir bedanken uns herzlich bei der Gruppe von Frau Prof. Vlasta Bonačić-Koutecký für die hervorragende Betreuung der letzten drei Ausgaben. Die Redaktion bedankt sich des Weiteren herzlich für die eingesendeten Beiträge für die aktuelle Ausgabe und bittet um Zusendung weiterer Beiträge für die November-Ausgabe an neese@thch.uni-bonn.de oder bredow@thch.uni-bonn.de.

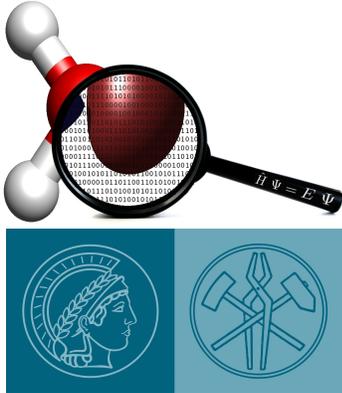
Bonn, im April 2010

Frank Neese und Thomas Bredow

Impressum:

Prof. Dr. Frank Neese und Prof. Dr. Thomas Bredow
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie,
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
Wegelerstraße 12, 53115 Bonn
Redaktion: Dr. Werner Reckien und Dr. Christian Kollmar

3 Arbeitsgruppen stellen sich vor



Alexander A. Auer

Atomistic Modelling Group

Department of Interface
Chemistry and Surface
Engineering

MPIE GmbH Düsseldorf



3.1 Institut und Arbeitsgruppe

Unter den Max-Planck-Instituten in Deutschland nimmt das Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE GmbH) eine Sonderstellung ein. Gegründet vom Verein Deutscher Eisenhüttenleute (VDEh) im Jahre 1917, ist das Institut in seiner heutigen Form eine gemeinsame Einrichtung des VDEh und der Max-Planck-Gesellschaft. Derzeit hat das Institut ca. 230 Mitarbeiter und ist in vier Abteilungen gegliedert: Computer-Gestütztes Material-Design (Prof. J. Neugebauer), Grenzflächenchemie und Oberflächentechnik (Prof. M. Stratmann), Mikrostrukturphysik und Umformtechnik (Prof. D. Raabe) und eine Abteilung, deren Leitung derzeit neu besetzt wird.

Wissenschaftlicher Schwerpunkt am MPIE ist Forschung im Bereich von Eisen, Stahl und verwandten Werkstoffen. Zielstellung der breit gefächerten experimentellen und theoretischen Arbeiten ist ein tieferes Verständnis der komplexen physikalischen und chemischen Prozesse und Reaktionen dieser Systeme. Zudem besteht am MPIE unter anderem Anbindung an die International Max Planck Research School for Surface and Interface Engineering in Advanced Materials (IMPRS-SurMat), das Interdisciplinary Centre for Advanced Materials Simulation (ICAMS) und das Center for Electrochemical Sciences (CES) der Ruhr Universität Bochum.

In der Abteilung Grenzflächenchemie und Oberflächentechnik gibt es derzeit fünf Gruppen: Atomistic Modelling (A. A. Auer), Elektrokatalyse (K. J. J. Mayrhofer), Grenzflächenspektroskopie (A. Erbe), Grenzflächenstrukturen und Hochtemperaturreaktionen (F. Renner), Molekulare Strukturen und Oberflächendesign und Christian Doppler Labor Diffusion und Segregation (M. Rohwerder) sowie das Christian Doppler Labor Polymer/Metall Grenzflächen (G. Grundmeier). Die Aufgabe der Atomistic Modelling Gruppe ist die Entwicklung und Anwendung quantenchemischer Methoden auf Probleme der Oberflächen-, Grenzflächen- und Elektrochemie, wobei der Synergie zwischen experimentellen und theoretischen Arbeiten eine besondere Bedeutung zukommt.



Abbildung 1: Atomistic Modelling Gruppe (v.l.n.r.) Anatoly Berezkin, Udo Benedikt, Ulrich P. Biedermann, Faycal Riad Hamou, Alexander A. Auer

Derzeit befindet sich die Gruppe nach dem Umzug von Chemnitz nach Düsseldorf im Oktober 2009 noch im Aufbau, aber alle Rahmenbedingungen tragen dazu bei, dass aus dem Wechsel von der Juniorprofessur an der TU Chemnitz ans MPIE ein schneller Start wird. Momentan gehören der Gruppe zwei Doktoranden, die aus Chemnitz nach Düsseldorf umgezogen sind, sowie drei Mitarbeiter, die aus Projekten am MPIE übernommen wurden, an.

3.2 Arbeitsgebiete

Das Spektrum der Arbeitsgebiete unserer Gruppe umfasst die gesamte Bandbreite von der Entwicklung neuer Methoden, Näherungen und Algorithmen über extensive Benchmarkstudien und Basissatzentwicklung bis hin zu Anwendungen von Standardmethoden auf chemische und materialwissenschaftliche Fragestellungen. Zu den unten beschriebenen Schwerpunkten entwickelt sich derzeit die Expertise im Bereich Oberflächen- und Elektrochemie.

3.2.1 Entwicklung neuer post-HF Näherungen

Ein Schwerpunkt der Arbeitsgruppe ist die Entwicklung von neuen lokalen Coupled-Cluster-Ansätzen, die die Berechnung von Eigenschaften großer molekularer Systeme mit hoher Genauigkeit ermöglichen. Ziel dabei ist es, die Vorteile bestehender lokaler Ansätze in einer neuen Methode zu vereinen und gleichzeitig die Vorzüge der konventionellen Methoden zu bewahren. Diesem Prinzip folgend wurde ein neuartiger Ansatz entwickelt, der *Dynamical Thresholding Algorithmus*, der auf einem *a posteriori* Screening-Schema beruht. [1]

Erste Benchmarks zeigen, dass auf diesem Wege eine systematische Näherung erhalten wird, wobei die Möglichkeit besteht, über einen einzigen Parameter von der exakten Lösung zu einer Näherungslösung überzugehen. [2] Ein zentraler

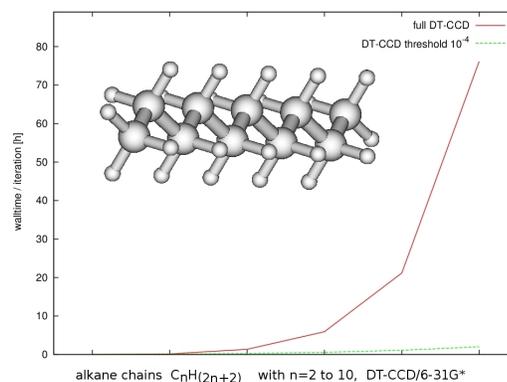


Abbildung 2: Skalierungsverhalten des DT-CCD Algorithmus am Beispiel von Alkanketten

Punkt ist dabei, dass sich gleichzeitig eine Aussage über den durch die Näherung eingeführten Fehler machen lässt. Durch die Wahl von lokalen Orbitalen, deren Form weitgehend systemunabhängig ist, wird auch für Moleküle mit stark unterschiedlicher Elektronenstruktur eine balancierte Beschreibung erhalten. Ein weiterer Vorteil dieses Ansatzes ist die allgemeine Anwendbarkeit des Schemas auf beliebige Coupled-Cluster- oder störungstheoretische Methoden sowie auf analytische Ableitungen der Energie. Erste Untersuchungen von Effizienz und Genauigkeit belegen ein gutes Skalierungsverhalten im Rahmen von robusten Näherungen der CCD und BCCD Methode. [3]

Ein weiteres, besonders vielversprechendes Projekt ist eine Kooperation mit den Arbeitsgruppen von Prof. W. Hackbusch (MPI für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig) und Prof. R. Schneider (Institut für Mathematik, TU Berlin) bei der der Einsatz von Tensor-Zerlegungsmethoden für die Wellenfunktionsparameter getestet wird. Diese Methoden sind in der Mathematik wohlbekannt und werden z.B. sehr erfolgreich in den Ingenieurwissenschaften eingesetzt. Derzeit wird das Potential unterschiedlicher Näherungsansätze für Coupled-Cluster-Methoden evaluiert. Im Gegensatz zu den gängigen Methoden wie Cholesky-Zerlegung, Dichtefitting/RI oder Eigenwertzerlegungen liefert die Tensorzerlegung von hochdimensionalen Objekten Repräsentantenvektoren, deren Dimension $orb \cdot k$ ist, wobei orb die Länge des Orbitalindexes und k der Zerlegungsrang des Tensors ist. [4]

Wird die Tensorzerlegung konsequent auf alle Größen von post-HF Methoden angewendet (Integrale, Wellenfunktionsparameter und Intermediate) und mit Nennerzerlegungstechniken kombiniert, so sollte der Speicheraufwand der neuen

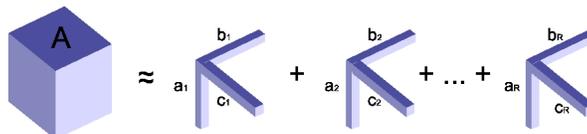


Abbildung 3: Prinzip der Tensorzerlegung am Beispiel eines dreidimensionalen Tensors (A), der in drei eindimensionale Objekte (a_k, b_k, c_k) mit Rang k zerlegt wird

Näherung mit $orb \cdot k$ und der Rechenaufwand mit $orb \cdot k^2$ skalieren. Erste Benchmarks zeigen, dass der Zerlegungsrang von Integralen ca. mit N^3 und der der Amplituden mit N^2 (N als Maß für die Systemgröße) oder besser skaliert.

3.2.2 Entwicklungstools und Algorithmen

Ein erhebliches Problem bei der Neuentwicklung von Coupled-Cluster-Methoden und Algorithmen stellt die hohe algebraische Komplexität der zugrunde liegenden Gleichungen dar. Moderne Codes zur Berechnung von molekularen Eigenschaften auf Coupled-Cluster-Niveau haben nicht selten Längen von mehreren hunderttausend Zeilen. So ist der zeitaufwändigste Teil von Entwicklungsarbeiten häufig die fehlerfreie Implementierung. Sollen neue Ideen und Konzepte schnell in einen ef-

fizienten Code umgesetzt werden, liegt es nahe, bei der Programmentwicklung selbst neue Wege zu beschreiten.

Im Rahmen eines Projekts, an dem sowohl theoretische Chemiker als auch Computerwissenschaftler beteiligt sind, wurde in Zusammenarbeit mehrerer Gruppen (Quantenchemie: S. Hirata, M. Nooijen, A. A. Auer, Informatik: P. Saddyappan, G. Baumgartner) ein Programmpaket zur vollautomatischen Generierung von Quantenchemie-Computercodes entwickelt. Der Ansatz der automatischen Programmgenerierung ist, dass nahezu alle Schritte des Entwicklungsprozesses eines Programms von einem übergeordneten Programm durchgeführt werden können. Ergebnis dieses interdisziplinären Projekts ist der sogenannte Tensor Contraction Engine (TCE). [5–7]

So konnten mit Hilfe des Programmgenerators effiziente, parallele und speicheroptimierte *ab-initio*-Methoden generiert werden. Dabei wurde sowohl auf massiv parallelen Rechnern als auch auf Clusterarchitekturen gute Skalierbarkeit erreicht. Im Rahmen meiner Arbeiten am Programmgenerator wurde dessen Funktionalität unter anderem auf die Generierung lokaler Coupled-Cluster-Methoden erweitert und die generierten Programmteile in ein Quantenchemie-Programmpaket integriert. Auf diesem Wege wird nicht nur ein Code für lokale Coupled-Cluster Näherungen erhalten, sondern gleichzeitig der durch die hohe Komplexität der Methode bedingte Programmieraufwand auf ein Minimum reduziert. So war es in kürzester Zeit möglich, Testimplementierungen für parallele, integral-direkte, lokale Algorithmen für die Møller-Plesset-Störungstheorie zweiter Ordnung, Coupled-Cluster-Doubles-, Singles-Doubles- und eine Näherung der Coupled-Cluster-Singles-Doubles-Triples- (CCSDT-1 und CCSD(T)) Methode zu generieren.

Im Gegensatz zu vielen Methoden, deren programmtechnische Umsetzung aus voneinander unabhängigen Teilen besteht, basieren im Falle der nichtlinearen, iterativ gelösten Coupled-Cluster-Gleichungen viele Teilschritte auf jeweils vorangegangenen Schritten. Aus diesem Grund stellt die parallele Implementierung eine große Herausforderung dar, insbesondere wenn über die Berechnung von Energien und Gradienten hinausgegangen werden soll, wie es für Eigenschaften höherer Ordnung der Fall ist. In den letzten Jahren wurden in enger Kooperation mit der Gruppe von Prof. J. Gauss (Universität Mainz) die zeitbestimmenden Schritte der CCSD- und CCSD(T)-Methode zur Berechnung von Energien, analytischen Gradienten und zweiten Ableitungen parallelisiert. Benchmarks und aktuelle Anwendungen zeigen, dass auf PC-Clusterarchitekturen CCSD(T) Berechnungen auch für größere Systeme in akzeptabler Zeit durchführbar sind. [8,9]

3.2.3 Berechnung von Parametern der NMR Spektroskopie

Durch die gemeinsame Arbeit als Doktorand bei Prof. J. Gauss haben sich zahlreiche Projekte im Bereich der Berechnung von Parametern der NMR Spektro-

skopie ergeben. So wurde beispielsweise in einer Reihe von Benchmarkstudien die Genauigkeit von *ab-initio*-Methoden zur Vorhersage von ^{13}C -, ^{19}F -, ^{17}O -, ^{15}N - und ^{31}P -chemischen Verschiebungen untersucht. [10–14] Dabei wurden die unterschiedlichen Einflüsse von Methode, Basissatz, Geometrie sowie Nullpunktschwingungs- und Temperaturkorrekturen dokumentiert.

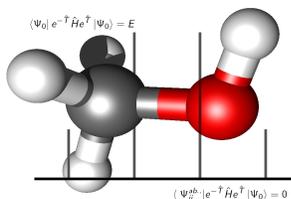


Abbildung 4: Im Rahmen der Berechnung von Temperaturkorrekturen sind auch Isotopenverschiebungen von NMR Shifts mit hoher Genauigkeit zugänglich. Abb: *Chem. Phys. Lett.*, **467** (4-6), 230 (2009)

Ein Anwendungsprojekt, bei dem Ergebnisse der Benchmarkrechnungen von unmittelbarem Nutzen sind, ist die Berechnung der ^{13}C - und ^{15}N -chemischen Verschiebungen von Ethin- und Azidoethinverbindungen im Rahmen einer Zusammenarbeit mit Prof. K. Banert (Organische Chemie, TU-Chemnitz). In diesem Fall haben die Ergebnisse von *ab-initio* Rechnungen nicht nur zur Auflösung von Widersprüchen in der Literatur beigetragen, sondern auch Impulse für neue Untersuchungen in der organischen Synthese gegeben. [15]

Neben den NMR-chemischen Verschiebungen stellen auch die indirekten Spin-Spin-Kopplungskonstanten eine wichtige Informationsquelle zur Strukturbestimmung dar. Im Rahmen vorangegangener Arbeiten auf diesem Gebiet wurden erstmals Berechnungen von Spin-Spin-Kopplungskonstanten auf CC3, CCSDT, CCSDTQ und FCI Niveau durchgeführt. [16–18] Derartige Benchmarkrechnungen dienen unter anderem der Kalibrierung von DFT-Methoden. [19] In Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. F. Jensen (Århus, Dänemark) und Prof. S. Sauer (Kopenhagen, Dänemark) arbeiten wir derzeit an speziell für die Berechnung von indirekten Spin-Spin-Kopplungskonstanten optimierten Basissätzen. Die Resultate belegen, dass sich auf diese Weise mit geringfügig mehr Basisfunktionen erheblich bessere Ergebnisse erhalten lassen. [20]

3.2.4 Anwendung quantenchemischer Methoden zur Berechnung von Struktur und Eigenschaften komplexer Systeme

Hybridpolymere aus Siliziumoxid-Strukturen und Kohlenwasserstoff-Polymeren mit hohem Anwendungspotential in den Materialwissenschaften sind Gegenstand einer intensiven Kooperation mit Prof. S. Spange (Polymerchemie, TU Chemnitz). Hierbei geht es um einen neuen Synthesansatz für vernetzte Polymere von unterschiedlichem Grundgerüst und herausragenden Materialeigenschaften. [21] Die Arbeitsgruppe beteiligt sich an diesem Projekt mit der Berechnung von Strukturen und Energetik von Monomeren, Oligomeren und reaktiven Spezies der Polymerisation. Des weiteren sollen im Rahmen von vergrößerten Modellen

die Dynamik des Systems und Einflüsse auf den Strukturbildungsprozess untersucht werden. Auf diesem Wege sollen nicht nur Informationen über den genauen Reaktionsverlauf erhalten, sondern auch Beiträge zur Synthesepaltung und Optimierung geleistet werden.

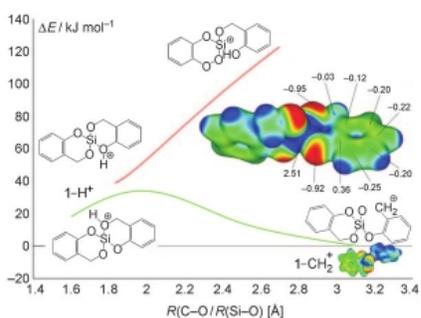


Abbildung 5: Erste Schritte der Zwillingspolymerisation einer Silizium-Spiroverbindung. Abb: Angew. Chemie **48**, 8254-8258 (2009)

Der Fokus eines Gemeinschaftsprojektes mit Prof. M. Mehring (Koordinationschemie, TU Chemnitz) ist die Berechnung der molekularen Eigenschaften von Verbindungen der schweren Hauptgruppenelemente, insbesondere Bismut-Verbindungen. Hier konnte in ersten Arbeiten gezeigt werden, dass im Bereich spezieller Koordinationsverbindungen von Bismut Dispersionswechselwirkungen eine strukturbildende Komponente sein können. [22] In weiteren Arbeiten sollen mittels quantenchemischer Verfahren für schwere Hauptgruppenelemente ungewöhnliche Reaktionsmechanismen aufgeklärt werden.

3.2.5 Ausblick

Im Bereich der Methodenentwicklung wird angestrebt, Black-Box Näherungen von post-HF Verfahren zu entwickeln, die Ergebnisse mit robusten Fehlern und wenigen Eingabeparametern liefern und durch eine entsprechende Wahl der Softwareplattform einer breiten Schicht von Nutzern zur Verfügung stehen. Dafür ist es erforderlich, die computerwissenschaftlichen Werkzeuge (Programmgenerierung), neu quantenchemischen Methoden (neue Coupled-Cluster-Näherungen) sowie die Ausrichtung auf moderne Hardwarekomponenten (Parallelisierung und GPU-Adaptierungen) zusammenzubringen.

Des weiteren wird auch die Einbettung der Gruppe in das hervorragende Arbeitsumfeld am MPIE zahlreiche neue Fragestellungen mit sich bringen. Hier liegen die Herausforderungen im Rahmen der Arbeiten an Systemen mit Relevanz für Materialwissenschaften und Elektrochemie vor allem in der Berechnung von Strukturen und Reaktionsmechanismen auf Oberflächen unter Berücksichtigung von Solventmolekülen und dem Potential der Elektrode sowie im Design neuer Materialien durch skalenübergreifende Simulationen.

Literatur

- [1] A. A. Auer and M. Nooijen, *J. Chem. Phys.*, **125**, 024104 (2006)
- [2] A. A. Auer, "A Critical Evaluation of the Dynamical Thresholding Algorithm in Coupled Cluster Calculations", *Z. Phys.* - *accepted* (2010)
- [3] A. A. Auer, "Dynamical Thresholding CCD and BCCD", *to be submitted* (2010)
- [4] U. Benedikt, M. Espig, A. A. Auer and W. Hackbusch, "A new Approach for Tensor Decomposition in Electronic Structure Theory" ,*to be submitted* (2010)
- [5] A. A. Auer et al., *Mol. Physics*, **104**, 211 (2006)
- [6] G. Baumgartner et al.,*Proceedings of the IEEE*, **93**, 276 (2005)
- [7] S. Hirata, P.-D. Fan, A. A. Auer, M. Nooijen, P. Piecuch, *J. Chem. Phys.*, **121**, 12197 (2004)
- [8] M. Harding, T. Metzroth, A. A. Auer and J. Gauss, *J. Chem. Theory Comput.*, **4**, 64 (2008)
- [9] G. Bucher et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 9971-9974 (2009)
- [10] E. Prochnow and A. A. Auer, *J. Chem. Phys.*, **132**, 064109 (2010)
- [11] A. A. Auer, *J. Chem. Phys.*, **131**, 024116 (2009)
- [12] A. A. Auer, *Chem. Phys. Lett.*, **467** (4-6), 230 (2009)
- [13] M. E. Harding, M. Lenhart, A. A. Auer and J. Gauss, *J. Chem. Phys.*, **128**, 244111 (2008)
- [14] A. A. Auer, J. Gauss and J. F. Stanton, *J. Chem. Phys.*, **118**, 10407 (2003)
- [15] E. Prochnow, A. A. Auer and K. Banert, *J. Phys. Chem. A*, **111**, 9945 (2007)
- [16] A. A. Auer and J. Gauss, *Chem. Phys.*, **356**, 7-13 (2009)
- [17] A. A. Auer and M. Pecul, *Chem. Phys. Lett.*, **368** (1-2), 172 (2003)
- [18] A. A. Auer and J. Gauss, *J. Chem. Phys.*, **115**, 1619 (2001)
- [19] A. Wu, D. Cremer, A. A. Auer and J. Gauss, *J. Phys. Chem. A*, **106**, 657 (2001)
- [20] U. Benedikt, F. Jensen and A. A. Auer, *J. Chem. Phys.*, **129**, 064111 (2008)
- [21] S. Spange et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 8254-8258 (2009)
- [22] A. A. Auer et al., *Organometallics*, **28**, 5405-5411 (2009)

4 Mitgliederversammlung der AGTC

4.1 Mitgliederversammlung, 45. Symposium für Theoretische Chemie Neuss am Rhein, 11. September 2009

Beginn: 18:10 Uhr
Ende: 19:00 Uhr
Sitzungsleitung: C. Marian (Düsseldorf)

Tagesordnung:

- 1) Genehmigung der Tagesordnung
- 2) Protokoll der Mitgliederversammlung 2008 in Ramsau
- 3) Bericht des Vorsitzenden
- 4) Bericht und Wahl des Kassenprüfers
- 5) Wahl der Hellmann-Jury
- 6) STC 2010 (Grimme)
- 7) Verschiedenes

4.2 Protokoll

4.2.1 TOP 1

Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Änderung angenommen.

4.2.2 TOP 2

Das Protokoll der Mitgliederversammlung 2008 in Ramsau war im Info TC (11/2008) abgedruckt. Es wird ohne Änderung genehmigt.

4.2.3 TOP 3

Bericht des Vorsitzenden

1. AGTC-Vorstand

Im Dezember 08/Januar 09 fand die Briefwahl zum AGTC-Vorstand statt. Gewählt wurden: J. Gauss (68 Stimmen), G. Frenking (64), C. Marian (56), H.-J. Werner (55) und S. Grimme (53). Der Vorstand wird ergänzt durch

M. Schreiber (DPG) und W. Thiel (Bunsengesellschaft); G. Frenking ist auch Vertreter der GDCh.

Der Vorstand hat dann im Juni einen neuen Sprecher und Stellvertreter bestimmt: J. Gauss ist seit 1.7. Sprecher, C. Marian stellvertretende Sprecherin.

Der Sprecher dankt im Namen des gesamten Vorstands W. Domcke für seine Tätigkeit im Vorstand und vor allem für seine Tätigkeit als Sprecher während der letzten 4 Jahre.

2. Zukünftige Symposien

Das STC 2010 wird von S. Grimme (Münster) organisiert. S. Grimme wird unter TOP 6 weitere Details zu Ort und Termin vorstellen. Die Organisation der STC 2011 hat M. Reiher (ETH Zürich) zugesagt. Ort (in der Schweiz) und Termin stehen aber noch nicht fest.

3. Trendberichte

Die Trendberichte Theoretische Chemie werden für 2009 von R. Berger (letztjähriger Hellmann-Preisträger), U. Kleinekathöfer und C. Ochsenfeld verfasst.

4. Hellmann-Preis

Die Hellmann-Jury hat dieses Jahr beschlossen, den Hellmann-Preis nicht zu verleihen. Die Jury hat keinen der vorgeschlagenen Kandidaten als preiswürdig angesehen. Die nicht erfolgte Verleihung ist im Einklang mit den Grundsätzen zum Hellmann-Preis, soll aber eher die Ausnahme als die Regel sein. Deswegen kann nur die Aufforderung erfolgen, im nächsten Jahr, Stichtag: 15. April 2010, entsprechende Kandidaten vorzuschlagen. Entsprechend der Anforderungen an die Kandidaten sollte man sich an den auf der Webpage vorgestellten Preisträgern orientieren, d.h. Kandidaten sollten bereits ein eigenständiges Profil entwickelt haben. Die Kandidaten sollen unter 40 Jahre alt sein und noch keine Lebenszeitstellung innehaben. Eine erneute Einreichung ist möglich.

Zur Frage der Lebenszeitstellung bittet die Mitgliederversammlung den Vorstand zu prüfen, ob tatsächlich eine Lebenszeitstellung oder eine Lebenszeitprofessur gemeint ist. Weiterhin spricht sich die Mitgliederversammlung dafür aus, auch Kandidaten mit Tenure-Track-Professuren zuzulassen.

(nachträgliche Anmerkung: entsprechend den Richtlinien für die Verleihung des Hellman-Preises darf der Kandidat noch keine Lebenszeit-Professur innehaben.)

5. Mitgliederstand

Der Mitgliederstand ist leicht ansteigend, 2008 waren es 217 Mitglieder gegenüber 203 im Jahr 2007 (siehe auch Bericht des Kassenprüfers).

4.2.4 TOP 4

Bericht des Kassenprüfers

F. Mark (Mülheim) berichtet über die erfolgte Kassenprüfung 2008 und die aktuelle finanzielle Situation bei der AGTC und beim Hellmann-Fonds.

1. Kassenstand AGTC:

AGTC Konto am 31.12.2008:	18627,73 €	
Einnahmen aus Mitgliedsbeiträgen :	2821,00 €	(2007: 2639 €)
Ausgaben für Porto und EDV/Internet:	108,00 €	(2007: 58 €)

Die Summe der Mitgliedsbeiträge 2008 entspricht 217 Mitgliedern gegenüber 203 Mitgliedern im Jahr zuvor. Die Ausgaben setzen sich aus 58 € Portokosten und 50 € „sonstige Kosten“ zusammen.

2. Hellmann Fonds:

Gesamtvermögen des Hellmann Fonds am 31.12.2008:	34937,56 €
Einnahmen aus Spenden:	580,00 €
Zinserträge:	648,39 €
Ausgaben (Hellmann-Preisgeld):	1000,00 €

Das Gesamtvermögen des Hellmann Fonds ist 2008 um 228,39 € gewachsen.

Es bestehen keine Einwände des Kassenprüfers gegen die Abschlüsse 2008 für das Konto der AGTC und das Konto des Hellmann Fonds.

J. Manz (Berlin) beanstandet die Aussage des Kassenprüfers, dass 2008 nur eine einzige Spende eingegangen sei, da er 2008 selbst eine Spende überwiesen habe, die kleiner als der von der Bunsengesellschaft ausgewiesene Betrag gewesen sei. Der Kassenprüfer erwidert, dass er von der Bunsengesellschaft nur eine summarische Aufstellung der Spendenbeiträge erhalten habe.

Die Mitgliederversammlung bittet den Kassenprüfer, bei der Bunsengesellschaft eine detaillierte Aufstellung einzuholen und dem Vorstand darüber zu berichten. In der nächsten INFO TC soll über das Ergebnis der Prüfung informiert werden. Darüber hinaus wird angeregt, dass Spender zukünftig dem Vorsitzenden der AGTC und dem Kassenprüfer eine Mitteilung über die Höhe ihrer Spenden machen.

(Nachträgliche Anmerkung: Die detaillierte Überprüfung des Spendenaufkommens 2008 durch F. Mark bei der Bunsengesellschaft ergibt, dass die Gesamtsumme korrekt ist, sich der Spendenbetrag in Höhe von 580 € jedoch aus 3

Einzelspenden zusammensetzt. Des Weiteren wird in Zukunft die Bunsengesellschaft dem Kassenprüfer immer die vollständige Liste aller Spenden vorlegen, so dass die Information des Vorsitzenden und des Kassenprüfers über Spenden auch in Zukunft nicht erforderlich ist.)

Die Mitgliederversammlung bestellt Herrn F. Mark per Handzeichen ohne Gegenstimme zum Kassenprüfer für 2009.

4.2.5 TOP 5

Wahl der Hellmann-Jury

Die letzte Wahl fand 2007 statt. Derzeit sind die Vertreter P. Blaha (A), M. Kaupp (D), F. Neese (D), M. Reiher (CH), A. Görling (D; Vorsitzender), W. Klopper (D), U. Manthe (D).

Die derzeitige Prozedur ist, dass die Mitglieder für 4 Jahre gewählt werden und dies alternierend alle zwei Jahre. Ausscheiden werden dieses Jahr A. Görling, W. Klopper, U. Manthe, die anderen sind 2007 gewählt worden.

Es ist also die Neuwahl von 3 Jurymitgliedern notwendig. Dabei ist darauf zu achten, dass alle Themengebiete der Theoretischen Chemie in der Jury adäquat vertreten sind. Doppelfunktionen im Vorstand und der Hellmann-Jury sind nicht zulässig. A. Görling möchte nicht wieder kandidieren.

Kandidatenvorschläge des Vorstands: P. Saalfrank (D), C. van Wüllen (D), A. Dreuw (D). Weitere Vorschläge aus der Mitgliederversammlung: F. Müller-Plathe (D), M. Thoss (D), R. de Vivie-Riedle (D). Die anwesenden P. Saalfrank, C. van Wüllen und A. Dreuw erklären ihre Bereitschaft zur Kandidatur.

Die Mitgliederversammlung wählt in geheimer Wahl P. Saalfrank (37 Stimmen), A. Dreuw und R. de Vivie-Riedle (jeweils 29 Stimmen) als Mitglieder der Hellmann-Jury. P. Saalfrank und A. Dreuw nehmen die Wahl an, R. de Vivie-Riedle ist bei der Wahl nicht anwesend und muss nachträglich gefragt werden, ob sie die Wahl annimmt. (nachträgliche Anmerkung: Frau de Vivie-Riedle hat die Wahl in der Zwischenzeit angenommen.)

Den 4. bis 6. Platz belegen C. van Wüllen mit 27 Stimmen, F. Müller-Plathe und M. Thoss mit jeweils 20 Stimmen.

4.2.6 TOP 6

STC 2010

Das 46. Symposium für Theoretische Chemie steht unter dem Motto „Quantum Chemistry for Large and Complex Systems: From Theory to Algorithms and Applications“. Es wird von Stefan Grimme und Mitarbeitern in der Zeit vom 26.-30. September 2010 in Münster (Westfalen) organisiert. Weitere Infos unter <http://www.stc2010.uni-muenster.de>

4.2.7 TOP 7

Verschiedenes

A. Auer berichtet über eine Initiative zu einem Schwerpunktprogramm der DFG im Bereich der Theoretischen Chemie und Physik mit dem Thema „Electronic Structure Methods and Algorithms for Large and Complex Systems“. Am 2.9. hat in Frankfurt (Main) das Rundgespräch stattgefunden. Herr Auer bittet diejenigen, die sich an der Initiative beteiligen wollen, bis zum 18. September um einen Projekttitle und einen Satz Kurzbeschreibung.

Düsseldorf, den 19.11.2009

Christel Marian

5 Nachrichten

5.1 Klatsch und Tratsch

Dr. Alexander A. Auer, TU Chemnitz, hat eine Projektleiterstelle am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf zum November 2009 angetreten.

Prof. Dr. Robert Berger, FIAS, Frankfurt, hat einen Ruf auf eine W2-Professur an der TU Darmstadt angenommen.

Dr. Christoph Jacob, ETH Zürich, hat eine Stelle als unabhängiger Nachwuchsgruppenleiter am DFG-Centrum für Funktionelle Nanostrukturen am „Karlsruher Institut für Technologie (KIT)“ zum März 2010 angetreten.

Dr. Thomas D. Kühne wurde zum Juniorprofessor für Theoretische Chemie am Institut für Physikalische Chemie der Universität Mainz berufen. Die Stelle ist gleichzeitig am Schwerpunkt „Rechnergestützte Forschungsmethoden in den Naturwissenschaften“ der Universität angesiedelt.

Prof. Dr. Christian Ochsenfeld, Universität Tübingen, hat einen Ruf auf eine W3-Professur für Theoretische Chemie der LMU München zum Februar 2010 angenommen.

Prof. Dr. Karsten Reuter, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin, hat einen Ruf auf einen Lehrstuhl der TU München zum Oktober 2009 angenommen.

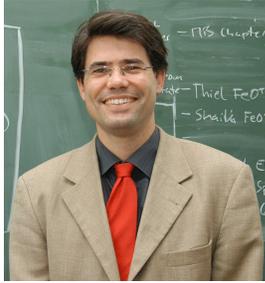
Prof. Dr. Joachim Sauer, HU Berlin, ist zum Mitglied der „Academia Europaea“ gewählt wurden. Des Weiteren wurde ihm die von der Universität Warschau und der Polnischen Chemischen Gesellschaft die „Kolos-Medaille“ für seine herausragenden Beiträge zur Quantentheorie der Katalyse verliehen.

5.2 Nachrufe

Prof. Björn O. Roos, Universität Lund, Schweden, ist am 22. Februar nach langer Krankheit verstorben.

5.3 Leibnizpreis 2010

Frank Neese wurde 2010 mit dem Gottfried Wilhelm Leibniz Preis ausgezeichnet.



Frank Neese

Im Jahre 2010 wurde der Preis zum 25. Mal verliehen. Aus dem DFG-Bericht über den Festakt im Leibniz-Saal der BBAW in Berlin am 10. März 2010 zitieren wir:

„Seit seiner ersten Verleihung im Jahr 1986 ist der Leibnizpreis längst zum wichtigsten deutschen Wissenschaftspreis mit hoher internationaler Ausstrahlung geworden, wie DFG-Präsident Professor Matthias Kleiner im Vorwort zum Jubiläumsband betont. Sechs Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler haben bislang nach dem Leibnizpreis auch den Nobelpreis erhalten. Auch an anderen Stellen in Wissenschaft und Forschung spielen Leibniz-Preisträgerinnen und

-Preisträger herausragende Rollen, sei es an der Spitze von Forschungsorganisationen und Hochschulen oder in Exzellenzinitiativen und anderen großen Forschungsförderprogrammen. Vor allem aber, so Kleiner, sei der Leibniz-Preis „die“ Würdigung der wissenschaftlichen Persönlichkeit. Alle Preisträgerinnen und Preisträger ständen für wissenschaftliche Erkenntnisse und Errungenschaften von höchster Qualität und zeigten vor allem eines: „Auch in der Wissenschaft kommt es besonders auf den Menschen an. Am Ende ist es immer das Individuum, das Wissenschaft und Forschung voranbringt, getrieben vom eigenen Erkenntnisinteresse, von der eigenen Neugier und vom eigenen Mut, neue Fragen zu stellen und neues Terrain zu erkunden.“ ...



Preisträger des Gottfried Wilhelm Leibniz-Preis 2010

Quelle: DFG, Fotostudio Querbach

Seit 2007 haben sich die Bedingungen für die Leibniz-Preisträgerinnen und -Preisträger noch einmal deutlich verbessert: Sie erhalten seitdem in der Regel ein Preisgeld von 2,5 Millionen Euro (zuvor 1,55 Millionen), das sie über einen

Zeitraum von bis zu sieben Jahren (zuvor fünf Jahre) nach eigenem Ermessen für Forschungsprojekte verwenden können. Diesen ungewöhnlich flexiblen Umgang mit dem Preisgeld bezeichnete der damalige DFG-Präsident Professor Hubert Markl bereits bei der ersten Preisverleihung 1986 als „märchenhafte Freiheit“, was seitdem praktisch zum Motto für den Leibniz-Preis — und nun auch zum Titel für den Jubiläumsband — geworden ist.“

Die DFG Laudatio für Frank Neese lautet:

„Mit Frank Neese erhält einer der weltweit führenden theoretischen Chemiker den Leibniz-Preis. Neese verbindet in seinen Forschungen vor allem die Bioanorganische Chemie und die Theoretische Chemie und bearbeitet insbesondere Themen, die zu den komplexesten Problemen der bioanorganischen Chemie gehören. An erster Stelle ist die Beschreibung der Elektronenzustände großer, biologisch relevanter und äußerst komplex aufgebauter Metalloproteine zu nennen. Für diese hat Neese ein quantenchemisches Programm entwickelt, mit dem Molekülberechnungen hundertmal schneller als zuvor erfolgen können. Zudem ermöglicht das Programm eine Interpretation von Spektren, die bis vor kurzem noch als undenkbar galt. Das von Neese entwickelte Programm hat sich schnell weltweit durchgesetzt und wird bereits von Tausenden von Anwendern in der Chemie, Biologie, Pharmazie und den Materialwissenschaften genutzt.

In Konstanz studierte und promovierte Frank Neese zunächst in Biologie, als Postdoktorand forschte er in Stanford, bevor er sich 2001 mit knapp 33 Jahren wiederum in Konstanz für Bioanorganische Chemie und Theoretische Chemie habilitierte und anschließend Gruppenleiter am Max-Planck-Institut für Bioanorganische Chemie in Mülheim/Ruhr wurde. 2006 übernahm Neese den Bonner Lehrstuhl für Theoretische Chemie, den zuvor die Leibniz-Preisträgerin Sigrid Peyerimhoff innehatte. Neese ist international bereits mehrfach ausgezeichnet und gilt auch als hervorragender akademischer Mentor, der immer wieder für sein Fach zu begeistern weiß.“

(Quelle: www.dfg.de)

6 Berichte

International Symposium on Theoretical and Computational Chemistry

Vom 28.02.–02.03.2010 fand am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim ein internationales Symposium mit knapp 200 Teilnehmern statt, anlässlich des 60. Geburtstags von Walter Thiel. Das wissenschaftliche Programm umfasste 21 Vorträge und 86 Poster aus allen Bereichen der Theoretischen Chemie.

Das erste Bild zeigt die Vortragenden (von oben: Harvey, Neese, Bühl, Elstner, Scuseria, Jorgensen, Ahlrichs, Lischka, van Gunsteren, Frenking, Sauer, Hutter, Marian, Shaik, Werner, Head-Gordon, Gauss, Schaefer, Morokuma, Quack) gemeinsam mit den Gastgebern (von links: Reetz, Fürstner, Thiel, Schüth), das zweite Bild gibt einen Eindruck von der Postersession.



7 Tagungsvorschau

7.1 Tagungen 2010

First Principles Quantum Chemistry: from Elementary Reactions to Enzymes, An international conference in honour of Hans-Joachim Werner's 60th birthday, Bad Herrenalb (Germany), 14.-17.4.2010, <http://www.fpqc2010.org>

Molecular Quantum Mechanics 2010, An International Conference in Honor of Professor Henry F. Schaefer III, University of California, Berkeley (USA), 24.5.-29.5.2010, <http://www.theory.chem.vt.edu/mqm2010>

International Workshop Quantum Chemistry beyond the Arctic Circle, Sommarøy-Tromsø (Norway), 23.6.-26.6.2010, <http://www.ctcc.no/polar2010>

7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA), Oviedo (Spain), 29.6.-2.7.2010, <http://www.espa2010.com>

IX Girona Seminar (Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory), Dedicated to Prof. Dr. Ramon Carbo-Dorca on occasion of his 70th birthday, Universitat de Girona (Spain), 5.7.-8.7.2010, <http://stark.udg.edu/gs2010>

17th Canadian Symposium on Theoretical Chemistry (CSTC 2010), University of Alberta, Edmonton, Alberta (Canada), 25.7.-30.7.2010, <http://www.chem.ubc.ca/cstc2010>

8th European Conference on Computational Chemistry, Lund (Sweden), 25.8.-28.8.2010, <http://www.chemsoc.se/sidor/KK/8thECCC>

Gordon Research Conferences, Computational Chemistry, Les Diablerets (Switzerland), 29.8.-3.9.2010, <http://www.grc.org/programs.aspx?year=2010&program=compchem>

XVth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Magdalene College, Cambridge (England), 31.8.-5.9.2010, <http://qscp-xv.ensicaen.fr>

REHE-2010: Exact Relativistic Methods for Electronic Structure and Magnetic Property Calculations, Peking University (China), 25.-29.9.2010, <http://162.105.22.250>

46th Symposium on Theoretical Chemistry (STC2010), Münster (Germany), 26.-30.9.2010, <http://www.uni-muenster.de/STC2010>

7.2 Hinweise auf weitere Tagungskalender

Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie

www.theochem.de/agtch.home.html

Deutsche Physikalische Gesellschaft

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

CONFMENU von Prof. Young S. Kim

www.ysfine.com

Gesellschaft Deutscher Chemiker

www.gdch.de/vas/tagungen.htm

Bunsen-Gesellschaft

www.bunsen.de

Konferenzdienst Mandl

www.conference-service.com

8 Mitteilungen der DFG

8.1 Allgemeines

„Qualität statt Quantität“ — DFG setzt Regeln gegen Publikationsflut in der Wissenschaft

Unter dem Motto „Qualität statt Quantität“ schlägt die DFG Pflöcke gegen die Publikationsflut in der Wissenschaft ein. Am 23. Februar 2010 hat DFG-Präsident Professor Matthias Kleiner in einer Pressekonferenz in Berlin die neuen Regelungen für Publikationsangaben in Förderanträgen und Abschlussberichten vorgestellt. Sie sehen im Kern vor, dass Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in ihren Anträgen und Berichten an die DFG künftig nur noch wenige, besonders aussagekräftige Publikationen als Referenz nennen dürfen. So soll die immer größere Bedeutung von Publikationsverzeichnissen und numerischen Indikatoren verringert werden. Zugleich soll die eigentliche Beschreibung des Forschungsprojekts mehr Gewicht erhalten. Die Regelungen gelten ab dem 1. Juli 2010, Hinweise und Merkblätter zu ihrer Umsetzung sind ab April auf unserer Webseite zu finden.

8.2 Internationales

Unterzeichnung des Abkommens mit der COLCIENCIAS und Treffen in Bogotá (DFG). Neue Möglichkeiten für die Zusammenarbeit zwischen Deutschland und Südamerika

Die DFG verstärkt ihre Zusammenarbeit sowohl mit Kolumbien als auch mit Brasilien und eröffnet so Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern neue Kooperationsmöglichkeiten. Mit dem kolumbianischen Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación (COLCIENCIAS) wie mit der brasilianischen Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) verbinden die DFG nun Absichtserklärungen zur Zusammenarbeit. Für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler heißt das: Zusammen mit kolumbianischen Partnern können sie jederzeit gemeinsame Anträge im Programm „Initiierung und Intensivierung bilateraler Kooperationen“ einreichen. Forschenden aus Deutschland und aus dem brasilianischen Bundesstaat Minas Gerais stehen nun alle DFG-Verfahren offen.

8.3 Gottfried Wilhelm Leibniz-Programm

Leibniz-Preis 2010

Die neuen Leibniz-Preisträger stehen fest. Der Hauptausschuss der Deutschen Forschungsgemeinschaft erkannte am 03.12.2009 in Bonn einer Wissenschaftlerin

und neun Wissenschaftlern den bedeutendsten deutschen Forschungspreis zu. Die Preisverleihung fand in einem festlichen Rahmen am 15.03.2010 in Berlin statt. Zu den Preisträgern gehört Herr Professor Dr. Frank Neese, Theoretische Chemie, Universität Bonn.

8.4 Programminformationen

Einrichtung deutsch-japanischer Forschergruppen

Mit zehn weiteren Forschergruppen intensiviert die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) die interdisziplinäre und ortsübergreifende Zusammenarbeit von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern zu besonderen Fragestellungen und die Etablierung neuer Arbeitsrichtungen. Besondere Bedeutung haben die nun beschlossenen Einrichtungen für die japanisch-deutschen Forschungs Kooperationen. Aufgrund eines Abkommens zwischen der DFG und ihrer japanischen Partnerorganisation JST (Japan Science and Technology Agency) konnten erstmals Forschergruppen aus beiden Staaten bewilligt werden. Nach Abschluss des Abkommens waren dazu im vergangenen Jahr zunächst 19 Konzepte für Kooperationen eingereicht worden, aus denen eine bi-nationale Gutachtergruppe vier in die engere Wahl nahm. Von diesen wurden nun drei bewilligt, mit denen die Zusammenarbeit zwischen japanischen und deutschen Wissenschaftlern weitere Impulse erhalten soll. Die Mittel für die japanischen Teilprojekte stellt dabei die JST zur Verfügung. Die drei ersten japanisch-deutschen Forschergruppen befassen sich allesamt mit Fragestellungen aus der Physik, Chemie und den Ingenieurwissenschaften. So arbeiten z. B. in der Forschergruppe „ASPIMATT: Advanced Spintronic Materials and Transport Phenomena“ Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus Mainz, Kaiserslautern und dem japanischen Sendai an neuen Werkstoffen für die Spintronik, die den Eigendrehimpuls der Elektronen zur Darstellung und Verarbeitung von Informationen nutzen und damit einen vielversprechenden Ansatz für eine hochleistungsfähige Datenspeicherung darstellen. Sprecher der Forschergruppe sind Professor Claudia Felser, Universität Mainz, und Professor Dr. Yasuo Ando, Sendai.

DFG richtet 17 weitere Sonderforschungsbereiche ein

Die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) richtete zum 1. Januar 2010 weitere 17 Sonderforschungsbereiche (SFB) ein. Im SFB 858 „Synergetische Effekte in der Chemie - Von der Additivität zur Kooperativität“ wollen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster den Begriff der Kooperativität als Reaktionsprinzip in der Chemie festigen. In einem interdisziplinären Ansatz sollen kooperative Effekte zur Aktivierung chemischer Systeme genutzt werden. So lässt sich chemische Reaktivität effizienter einsetzen.

zen und der Aufbau chemischer Systeme gezielter gestalten. (Sprecherhochschule: Westfälische Wilhelms-Universität Münster; Sprecher: Professor Dr. Armido Studer)

8.5 Ausschreibungen

Exzellenzinitiative

Neue Phase der Exzellenzinitiative des Bundes und der Länder startet. Die DFG und der Wissenschaftsrat haben jetzt die Ausschreibung für die neue Phase des Programms veröffentlicht, mit dem die Spitzenforschung an den Universitäten in Deutschland weiter gestärkt werden soll. Dies setzt die Vereinbarung um, mit der der Bund und die Länder am 4. Juni 2009 die Fortführung der Exzellenzinitiative beschlossen hatten. Ab sofort können sich zunächst neue Projekte um eine Förderung bewerben, ab Anfang 2011 auch die bereits geförderten Einrichtungen. Die Entscheidungen in diesem rein wissenschaftsgeleiteten Wettbewerb fallen nach einem mehrstufigen Auswahlverfahren im Juni 2012.