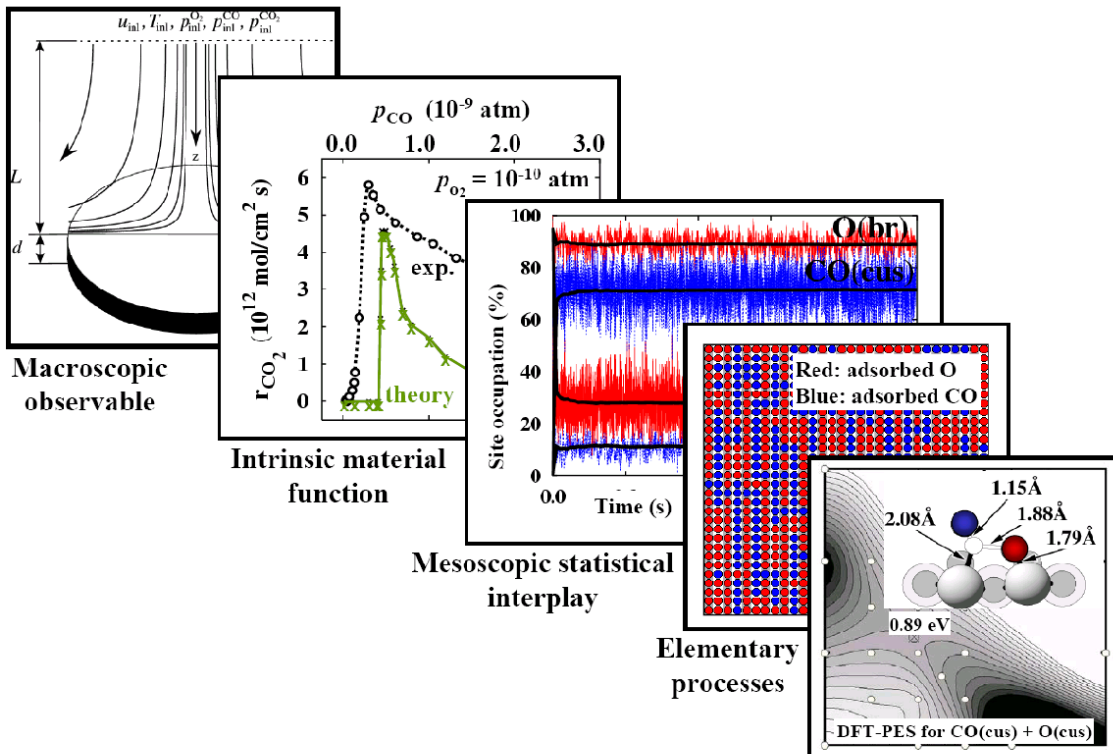


Info

Theoretische Chemie

November 2010



1 Inhaltsangabe

Inhalt:

Editorial	Seite	3
Arbeitsgruppen stellen sich vor	Seite	4
Bericht von der STC 2010	Seite	10
Hellmann Preis 2010	Seite	19
Mitgliederversammlung der AGTC	Seite	22
Nachrichten	Seite	27
Genealogieprojekt Theoretische Chemie	Seite	28
Tagungsvorschau	Seite	30
Mitteilungen der DFG	Seite	35

Titelbild:

Das Titelbild wurde von Herrn Prof. Dr. Karsten Reuter gestaltet.

2 Editorial

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

die Redaktion bedankt sich sehr herzlich für die eingesendeten Beiträge für die vorliegende Ausgabe des InfoTC. Des Weiteren möchten wir Sie bitten, aktuelle Meldungen für die Rubrik Klatsch und Tratsch, Tagungsankündigungen, Stellenanzeigen und sonstige Beiträge, die in der nächsten Ausgabe erscheinen sollen, an neese@thch.uni-bonn.de oder bredow@thch.uni-bonn.de zu schicken.

Bonn, im November 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

Prof. Dr. Karsten Reuter
Lehrstuhl für Theoretische Chemie
Technische Universität München



3.1 Das neue Umfeld

Zum 1. Oktober 2009 wurde ich als vorgezogene Nachfolge von Prof. Wolfgang Domcke auf einen Lehrstuhl für Theoretische Chemie an der TU München berufen. Verbunden mit diesem Ruf sind Mitgliedschaften in der Fakultät für Physik und im Zentralinstitut für Katalysatorforschung der TUM (Catalysis Research Center, CRC).



Ersteres reflektiert die stark interdisziplinäre Ausrichtung meiner Arbeitsgruppe, die sich aktuell zu ca. 40% aus Physikern, ca. 40% aus Chemikern und ca. 20% aus Chemieingenieuren zusammensetzt. Letzteres reflektiert den aktuellen Forschungsschwerpunkt meiner Gruppe im Bereich der Multiskalenmodellierung heterogen katalytischer Prozesse. Meine Berufung ist somit Teil der vor allem auch durch die Gründung des CRC dokumentierten Strategie, die TU München konsequent zu einem Zentrum für Katalysatorforschung in Europa auszubauen.

Mit dieser Ausrichtung finde ich an der TUM natürlich ein ideales Umfeld vor. Ohne in einer Fakultät der Größe wie des Departments Chemie auch nur den Anspruch von Vollständigkeit erheben zu können, nenne ich hier einfach exemplarisch die Kollegen Johannes Lercher und Kai-Olaf Hinrichsen aus der Technischen Chemie, den Kollegen Klaus Köhler aus der anorganischen Chemie, sowie die Kollegen Sebastian Günther und Ueli Heiz aus der Physikalischen Chemie. Aber auch für meine Forschungsinteressen jenseits der Katalyse habe ich schnell Ansprechpartner gefunden. Mit Johannes Barth aus dem Physik Department werde ich an supramolekularen Ensembles an Oberflächen arbeiten, und motiviert durch die Berufung von Hubert Gasteiger auf einen Lehrstuhl für Technische Elektrochemie plane ich meine Aktivitäten in den nächsten Jahren verstärkt auch in diesen Bereich auszuweiten. Nimmt man nun noch die TUM Standorte in Weihenstephan und Straubing, sowie das weitere Umfeld in München mit LMU, MPIs etc hinzu, ist es so, dass ich auch nach knapp einem Jahr noch kontinuierlich neue Kollegen kennenlerne, bei denen ich sofort gemeinsame Interessen und Möglichkeiten der Zusammenarbeit sehe. Wenn ich bedenke, dass mir das in meinem vorherigen Berliner Umfeld auch nach knapp 10 Jahren noch so ging, freue ich mich schon auf die Vielzahl von Überraschungen und Entdeckungen, die München noch für mich bereithalten wird.

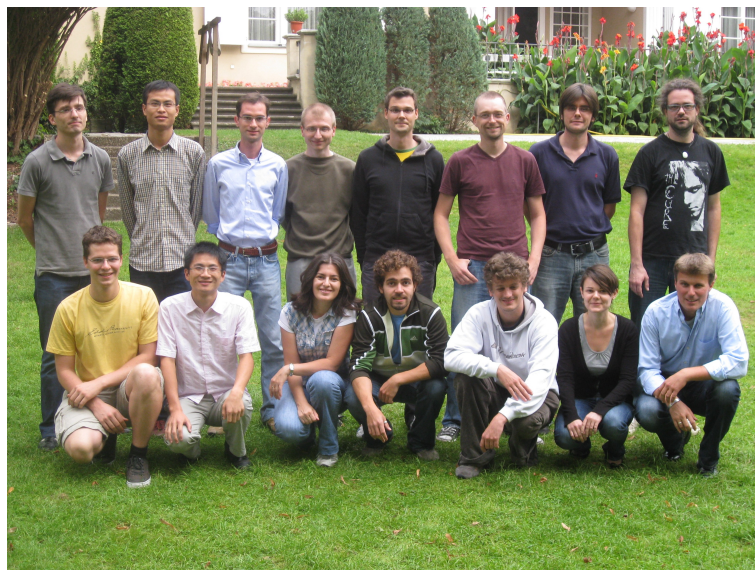


Abb. 1: Die Arbeitsgruppe kurz vor dem Umzug nach München

Nicht mehr entdecken muss ich natürlich meine direkte Umgebung im Bereich der Theoretischen Chemie an der TUM. Wolfgang Domcke und ich erfahren hier Verstärkung durch Notker Rösch als fungierenden Direktor des CRC, sowie durch Mathias Nest, der eine in den Exzellenzcluster "Munich-Centre of Advanced Photonics" integrierte Arbeitsgruppe leitet. Mit dieser breiten personellen Aufstellung planen wir, die Lehre im Bereich der Theoretischen Chemie weiter auszubauen. Neben der traditionell starken Ausrichtung auf die Quantenchemie, Dynamik und Spektroskopie möchte ich gerne auch verstärkt atomistische und statistische Simulationstechniken im Kanon reflektiert sehen, um die Studenten mit der ganzen Breite moderner computergestützter Theorie vertraut zu machen. In dieser Hinsicht muss ich als ausgebildeter Physiker sagen, dass ich es als Unding empfinde, dass an der TUM bislang Theorie nicht als Hauptfach im Chemie Masterstudium gewählt werden kann. Mal sehen, wie viele Türen man einrennen muss, um das zu verändern?

3.2 Arbeitsgebiet

Grundlegendes Ziel unserer Untersuchungen ist eine quantitative Modellierung von Materialeigenschaften und Funktionalitäten, mit einem aktuellen Hauptanwendungsgebiet im Bereich der Oberflächenphysik und der heterogenen Katalyse. Entsprechende Funktionalitäten ergeben sich oft aus dem komplexen Zusammenspiel einer größeren Anzahl molekularer Prozesse. Während die Eigenschaften der einzelnen Elementarprozesse auf der Ebene der elektronischen Struktur bestimmt werden, entwickelt sich das statistische Wechselspiel erst auf mesoskopischen Längen- und Zeitskalen, siehe Abb. 2 [1]. Die Arbeiten unserer

Gruppe konzentrieren sich daher auf eine genaue ab initio Beschreibung der Einzelprozesse und darauf, diese geeignet im Rahmen thermodynamischer und statistisch-mechanischer Behandlungen zu verknüpfen. Betont wird dabei die Entwicklung von allgemeinen Multiskalenmodellierungs-Ansätzen mit Vorhersagecharakter und einem breiten Anwendungsspektrum auf materialwissenschaftliche Fragestellungen. Kritisch für die erwünschte Vorhersagekraft unserer Simulationen ist die Etablierung robuster Verknüpfungen zwischen den verschiedenen eingesetzten Theorien mit einer Kontrolle der Fehlerpropagation über die Skalen hinweg.

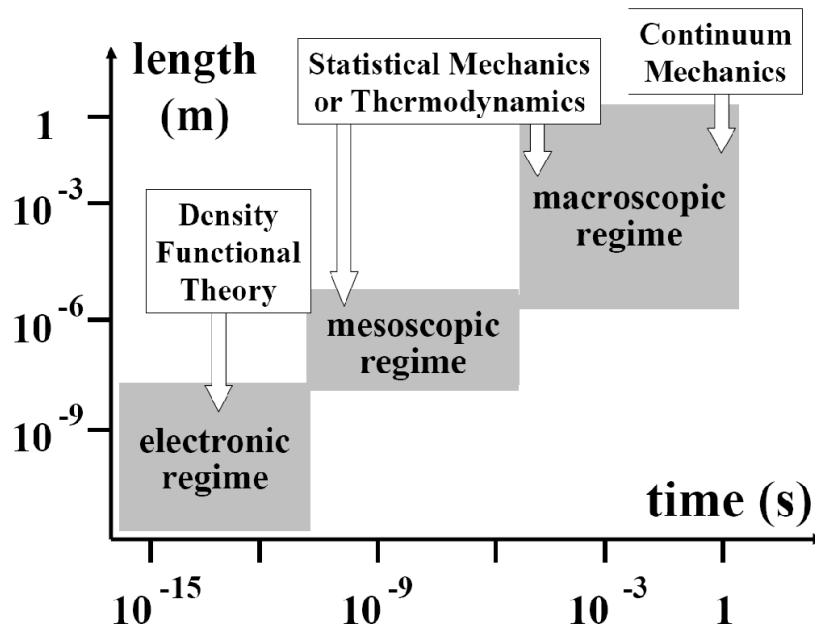


Abb. 2: Die Spielwiese für Multiskalensimulationen

Auf jeder Skala führen Näherungen zu Unsicherheiten, und die Überbrückung zwischen den Skalen (und Methoden) liefert weitere Fehlerquellen. Eine unserer zentralen methodischen Zielsetzungen ist es daher, anstelle der gegenwärtigen, meist ad hoc-artigen Verknüpfungskonzepte robuste Verschränkungen zwischen den Methoden zu etablieren, die es erlauben, die ab initio Genauigkeit über die verschiedenen eingesetzten Methoden zu zunehmend größeren Längen- und Zeitskalen zu propagieren. Eine derartige Beschreibung beinhaltet dann insbesondere die sogenannte "reverse mapping" Fähigkeit, d.h. die Möglichkeit im Detail zu analysieren, wie die elektronische Struktur die resultierenden makroskopischen Eigenschaften, Funktionen und Leistung bestimmt.

Innerhalb dieses Zugangs lassen sich unsere gegenwärtigen und geplanten methodischen Arbeiten in drei Gebiete einteilen:

- i) Verbesserte Beschreibung auf der Ebene der Elektronenstruktur, insbesondere im Hinblick auf Genauigkeit und numerische Effizienz, aber auch im

Hinblick auf elektronisch nicht-adiabatische Effekte.

- ii) Verbesserte Anknüpfung zur statistisch-mechanischen Modellierung, worunter speziell auch der Themenbereich eines systematischen coarse-grainings fällt.
- iii) Verbesserte Lösungen der statistisch-mechanischen Problemstellungen, also z.B. effizientes Abtasten der riesigen Konfigurationsräume.

In diese letzte Kategorie fallen auch unsere neueren Arbeiten, die die atomistisch statistischen Beschreibungen in nochmals vergrößerte Kontinuumsbeschreibungen überführen und so unsere Multiskalenmodellierungsaktivitäten über den gesamten Bereich von elektronischen bis makroskopischen Skalen ausdehnen [2]. Bevorzugt gehen wir dabei problemorientierte, interdisziplinäre Herausforderungen an, die es erfordern, Wissen aus der Chemie, der Physik, den Materialwissenschaften und den Ingenieurwissenschaften zu verknüpfen und zu erweitern, und die die konzentrierte Anstrengung eines engagierten Teams über einen mittleren Zeitrahmen hinweg benötigen.

Ein Anwendungsschwerpunkt entsprechender Arbeiten beschäftigte sich in den vergangenen Jahren mit katalytischen Oxidationsreaktionen an späten Übergangsmetallen oder Legierungsoberflächen. Unter technologisch relevanten Bedingungen sind diese Oberflächen Sauerstoffdrücken im Atmosphärenbereich ausgesetzt, weshalb auch die O_2 -Dissoziationsdynamik [3], die Oxidbildung und Oxidoberflächen in diesem Themenbereich behandelt werden [4]. Während wir durch den gekoppelten Einsatz von ab initio-Rechnungen und Methoden der Nichtgleichgewichts-Statistischen Mechanik wie kinetischen Monte Carlo-Simulationen [5] in bestimmten Fällen bereits erstmalig eine quantitative Modellierung der makroskopisch gemessenen katalytischen Aktivität bzw. Umsatzzahlen erreichen konnten [6, 7], zielen wir in aktuellen Arbeiten insbesondere auf die Behandlung des hydrodynamischen Transports des Reaktandenstromes über der Katalysatoroberfläche und auf die korrekte Beschreibung der Wärmedissipation in unseren Modellen ab [2]. Die methodische Herausforderung liegt hier unter anderem in der systematischen Kopplung der atomistisch statistischen Beschreibung der Reaktionen und Prozesse an der Festkörperoberfläche mit einer Kontinuumsbeschreibung des hydrodynamischen Flusses.

Ein zweiter Themenschwerpunkt konzentriert sich momentan auf die Beschreibung der untersten Skala in der Modellierungshierarchie, der elektronischen Struktur, sowohl mittels dichtefunktionaltheoretischer, als auch ab initio quantenchemischer Verfahren. Wenn die erforderliche Genauigkeit in der Beschreibung dieser Basisskala fehlt, gibt es offensichtlich wenig Hoffnung auf verlässliche Vorhersagen auf jedem anschließenden Modellierungslevel. Für polyatomare Systeme hat sich hierbei die Dichtefunktionaltheorie mit gegenwärtigen Austausch-Korrelationsfunktionalen vielfach als exzellente, und numerisch handhabbare Technik erwiesen. Die große Anzahl an Energieauswertungen, die zum Beispiel für

das Abtasten großer Konfigurationsräume notwendig ist, bedingt jedoch eine weitere Reduktion des numerischen Aufwandes. Probleme ergeben sich auch bei der Beschreibung von starken elektronischen Korrelationen, von van der Waals-Wechselwirkungen, oder elektronisch angeregten Zuständen. Ersteres ist für uns besonders relevant aufgrund laufender Projekte zur Untersuchung der Struktur und Reaktivität kleiner atomarer Cluster [8]. Letztere Punkte sind z.B. von Relevanz für unsere Arbeiten zur Wechselwirkung organischer Moleküle mit Festkörperoberflächen [9]. Laufende Aktivitäten zielen daher auf die Formulierung und Implementierung von höchsteffizienten dichtefunktionaltheoretischen Ansätzen [10], sowie auf die Entwicklung eines lokalen Austausch-Korrelations-Korrekturschemas, um Unzulänglichkeiten gegenwärtiger Funktionale durch hochgenaue quantenchemische Rechnungen an kleinen Clustern zu beheben [11]. Diese Anstrengungen werden von der Erkenntnis begleitet, dass nicht alle molekularen Prozesse zwingend mit derselben (hohen) Genauigkeit behandelt werden müssen. Insbesondere für ein grobes Abtasten von hochdimensionalen Konfigurationsräumen sind daher auch Ansätze für eine numerisch weniger intensive, semiquantitative Energetik von Interesse, wie sie zum Beispiel durch semiempirische Potentiale geliefert wird.

Karsten Reuter

<http://www.th4.ch.tum.de>

Literatur

- [1] " *Ab initio Atomistic Thermodynamics and Statistical Mechanics of Surface Properties and Functions*", K. Reuter, C. Stampfl, und M. Scheffler, in "Handbook of Materials Modeling, Part A. Methods", p. 149-194, S. Yip (Ed.), Springer, Berlin (2005). ISBN 1-4020-3287-0.
- [2] S. Matera und K. Reuter, Catal. Letters **133**, 156 (2009); Phys. Rev. B **82**, 085446 (2010).
- [3] C. Carbogno, J. Behler, A. Groß, und K. Reuter, Phys. Rev. Lett. **101**, 096104 (2008); Phys. Rev. B **81**, 035410 (2010).
- [4] " *Nanometer and Sub-Nanometer Thin Oxide Films at Surfaces of Late Transition Metals*", K. Reuter, in "Nanocatalysis", p. 343-376, U. Heiz, U. Landman (Eds.), Springer, Berlin (2006). ISBN 978-3-540-32645-8.
- [5] " *First-Principles Kinetic Monte Carlo Simulations for Heterogeneous Catalysis: Concepts, Status and Frontiers*", K. Reuter, in "Modelling Heterogeneous Catalytic Reactions: From the Molecular Process to the Technical System", O. Deutschmann (Ed.), Wiley-VCH, Weinheim (2010).
- [6] K. Reuter, D. Frenkel, und M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **93**, 116105 (2004).

- [7] M. Rieger, J. Rogal, und K. Reuter, Phys. Rev. Lett. **100**, 016105 (2008).
- [8] A. Willand, M. Gramzow, S.A. Ghasemi, L. Genovese, Th. Deutsch, K. Reuter, und S. Goedecker, Phys. Rev. B **81**, 201405(R) (2010).
- [9] G. Mercurio, E.R. McNellis, I. Martin, S. Hagen, F. Leyssner, S. Soubatch, J. Meyer, M. Wolf, P. Tegeder, F.S. Tautz, und K. Reuter, Phys. Rev. Lett. **104**, 036102 (2010).
- [10] V. Blum, R. Gehrke, F. Hanke, P. Havu, V. Havu, X. Ren, K. Reuter, und M. Scheffler, Comp. Phys. Commun. **180**, 2175 (2009).
- [11] Q.-M. Hu, K. Reuter, und M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **98**, 176103 (2007).

(Abdrucke aller Arbeiten sind unter <http://www.fhi-berlin.mpg.de/th/publications> zu finden)

4 STC 2010

4.1 Organisation

Prof. Dr. Stefan Grimme
Dr. Christian Mück-Lichtenfeld
Institut für Organische Chemie
Universität Münster
Corrensstraße 40
48149 Münster

Die traditionsreiche westfälische Stadt Münster war in diesem Jahr Schauplatz des Symposiums für Theoretische Chemie, das von Stefan Grimme und seinem Team organisiert wurde. Unter dem Motto “Quantum Chemistry for Large and Complex Systems: From Theory to Algorithms and Applications” kam ein breites Themenspektrum von angewandten Fragestellungen bis zur Weiterentwicklung hochkomplexer *ab initio* Korrelationsmethoden zur Sprache. Mit mehr als 300 Teilnehmern stieß das Symposium auf regen Zuspruch, wobei auch der nicht-deutschsprachige Raum gut vertreten war. Neben zwölf eingeladenen Vorträgen wurden 28 eingereichte Vorträge ausgewählt. Die Vorträge verteilten sich auf insgesamt dreizehn Sitzungen, die in der Regel jeweils mit einem eingeladenen Vortrag eröffnet wurden. An zwei Abenden wurden außerdem insgesamt mehr als 200 Poster präsentiert. Der Hellmann-Preis ging in diesem Jahr an Andreas Köhn von der Universität Mainz. Am Dienstagnachmittag wurde zudem die Gelegenheit geboten, bei drei verschiedenen Exkursionen die Stadt Münster und das Umland näher kennenzulernen. Den Organisatoren gelang es, für einen reibungslosen Ablauf zu sorgen und ein interessantes und abwechslungsreiches Programm zu bieten, das für reichlich Diskussionsstoff sorgte. Ein Überblick über die Vorträge wird im folgenden gegeben.

4.2 Vorträge

Das Symposium wurde mit einem Vortrag von Martin A. Suhm von der Universität Göttingen eröffnet. Dieser berichtete über Ergebnisse der IR- und Raman-Spektroskopie, die ihm als Prüfstein für quantenchemische Rechnungen dienten. Um den Bedingungen der Gasphasenrechnungen möglichst nahe zu kommen, arbeitete er bei tiefen Temperaturen und im Vakuum. Er präsentierte einige Beispiele, bei denen durch seine Methoden genauere Informationen über Konformation und Bindung z.B. in Alkohol-Clustern erhalten wurden.

Eine Weiterentwicklung des bereits in vielen quantenchemischen Rechnungen Anwendung findenden CONductor-like Screening MOdel (COSMO) wurde von Andreas Klamt vorgestellt. Die Vorteile dieser mit dem Namen COSMO for Realistic

Solvation (COSMO-RS) bezeichneten Methode wurden an Hand zahlreicher Beispiele erläutert.



Eröffnung des STC 2010

Alexander A. Auer beendete die erste Sitzung mit einem mathematisch orientierten Vortrag über die Tensorzerlegung von Integralen und Amplituden und die dadurch mögliche Effizienzsteigerung in post-HF-Rechnungen. Er demonstrierte den Erfolg seiner Methode beispielhaft für Coupled Cluster und MP2. Die durch diese Approximation entstehenden Fehler bei der Berechnung der Energien lagen unter einem milli-Hartree.

Die zweite Sitzung begann mit einem Vortrag von Ulf Ryde, der am Beispiel der [Ni-Fe] Hydrogenasen eine Vergleichsstudie von Clustermodellen und QM/MM-basierten Rechnungen vorstellte. Untersucht wurden die Reaktionsenergien einer Protonübertragung im genannten Enzym. Konvergenz der Energie ergibt sich sowohl im Falle des Clustermodells als auch im Falle der QM/MM-Rechnungen nach 15 hinzugefügten Aminosäureresten. Allerdings konvergierten die Rechnungen jeweils zu Werten, die sich um bis zu 60 kJ/mol unterschieden. Die besten Resultate ergaben sich für ein QM/MM "mechanical embedding scheme", welches folglich einem Clustermodell vorzuziehen sei.

Lukasz Walewski stellte seine Rechnungen zu Molekülen in einer Matrix aus superfluidem Helium vor. In vorangegangenen Untersuchungen waren die eingebetteten Moleküle als starr angenommen oder deren Bewegung mit einfachen Kraftfeldern modelliert worden. Im Gegensatz dazu berücksichtigt die vorgestellte Studie quantendynamische Effekte durch Verwendung von DFT (CP2K).

Über einen neuen DFT-basierten Ansatz für Molekulardynamik-Rechnungen berichtete Thomas D. Kühne. Dabei wurden Elemente von Born–Oppenheimer und

Car-Parrinello Methoden kombiniert. Die Leistungsfähigkeit der Methode wurde durch Rechnungen an Wasser bei Standardbedingungen und am entsprechenden Phasenübergang gasförmig/flüssig überprüft.

Jeremy N. Harvey eröffnete die dritte Sitzung mit einem Vortrag zur organometallischen und bioanorganischen Katalyse. Angesprochen wurden u.a. Untersuchungen zur Kinetik von Hydroborierungsreaktionen und übergangsmetallkatalysierten Kupplungsreaktionen als auch eine Studie zur Selektivitätskontrolle durch die Proteinumgebung in Cytochrom P450. Er ging dabei besonders auf die Schwierigkeiten ein, die bei der quantenchemischen Berechnung von komplexen Systemen mit vielen Atomen und vielen Minima auf der Potentialhyperfläche auftreten können.

Gerhard Taubmann berichtete über seine Arbeiten zu Packungseffekten von Donor-Akzeptor-Komplexen, wobei die Berechnungen mit dem DFT-Code VASP durchgeführt wurden. Untersucht wurden Borverbindungen als Akzeptoren und Donormoleküle mit Sauerstoff, Stickstoff oder Phosphor. Dabei wurde eine Verkürzung der dativen Bindung des Komplexes durch Packungseffekte festgestellt.

Daniel Boese präsentierte seine Arbeiten zu DFT Symmetry Adapted Perturbation Theory (DFT-SAPT). Im Vergleich zu SAPT-basierten post-Hartree-Fock-Methoden zeigt DFT-SAPT ein günstigeres Skalierungsverhalten ($\sim N^5$ statt mindestens $\sim N^7$, N : Anzahl der Elektronen des Systems). Boese stellte einen neuartigen Ansatz zur ab initio Berechnung des Austausch-Korrelations-Potentials durch die Zhao-Morrison-Parr-Methode (ZMP) vor. Erste Ergebnisse dieses BD(ZMP)-SAPT Ansatzes wurden vorgestellt.

Wechselwirkungen, die aus dem Überlapp von geringen Elektronendichten herrühren, werden durch die Dichtefunktionaltheorie nicht richtig beschrieben. Stephan N. Steinmann stellte seinen Ansatz zu einer entsprechenden Dispersionskorrektur vor, der für alle Elemente des Periodensystems verwendbar ist. Die Methode wurde an 145 Systemen getestet und stellt gemäß der vorgestellten Studie eine deutliche Verbesserung gegenüber bekannten Funktionalen dar.

Die vierte Sitzung wurde von David J. Tozer mit einem Vortrag über Problemfälle bei der Berechnung von Anregungsenergien mit Hilfe von TDDFT eingeleitet. Er stellte den räumlichen Überlapp von den an elektronischen Anregungen beteiligten Orbitalen als Maß für den Selbstwechselwirkungsfehler in TDDFT vor. Dieser Fehler beeinflusst sowohl die berechnete Anregungsenergie als auch den Charakter des Übergangs. In den meisten gezeigten Beispielen konnte der Fehler durch die Benutzung sogenannter "Coulomb attenuated"-Funktionale deutlich verringert werden.

In seinem Vortrag präsentierte Johannes Neugebauer die "frozen-density"-Näherung als Weiterentwicklung im Bereich der Subsystem-TDDFT zur Beschreibung von Umgebungseffekten. Er zeigte die Anwendbarkeit dieser Methode am Beispiel des Pigments Astaxanthin in Crustacyanin.

Anschließend sprach Dominik Kröner über das Phänomen der enantioselektiven

Photodissoziation mit Hilfe von Femtosekunden-Lasern. Seine Untersuchungen mit Hilfe der TD-CIS(D)-Methode konnten nicht nur die experimentellen Daten reproduzieren, sondern gaben auch Einblick in den Mechanismus des Phänomens. Zu Beginn der fünften Sitzung gab Filipp Furche zunächst einen Überblick über verschiedene Möglichkeiten, die RPA-Methode (RPA: random phase approximation) zur Berechnung von Korrelationsenergien zu verwenden und wies auf die vergleichsweise hohen Kosten der Methode hin. Anschließend berichtete er daher über Techniken, die eine deutliche Effizienzsteigerung ermöglichen. Zur Sprache kamen dabei insbesondere die RI-Näherung und die “imaginary frequency integration”. Auf eine Beziehung zur Laplace-transformierten MP2-Methode wurde hingewiesen. Die vorgestellten Verbesserungen ermöglichten Rechnungen für Moleküle mit mehr als 100 Atomen.

Die anschließende Präsentation von Andreas Heßelmann fügte sich hervorragend in die im vorangegangenen Vortrag behandelte Thematik ein. Hier ging es um orbitalabhängige Korrelationsfunktionale, die auf der RPA-Näherung beruhen. Die Vorteile, die sich durch die Verwendung eines nichtlokalen Austausch-Korrelations-Kernels ergeben, wurden ausführlich beschrieben.



Impression aus dem Hörsaal

Der Vortrag von Robin Haunschild beschäftigte sich mit “range-separated local hybrids”. Da eine konstante Beimischung von Hartree-Fock-Austausch keine konsistente Beschreibung aller möglichen Moleküleigenschaften ermöglicht, liegt die Einführung eines positionsabhängigen Faktors $f(\vec{r})$ nahe. Die Kombination dieses Ansatzes mit “range separation”, d.h. der Aufspaltung des Coulombabstoßungsterms in einen kurz- und langreichweitigen Anteil und die sich dadurch ergebenden Verbesserungen wurden ausgiebig abgehandelt.

Daniel Rohr präsentierte im letzten Vortrag des Tages eine Kombination von Dichtefunktional- und Dichtematrixfunktionaltheorie. Da erstere sich für die Beschreibung der statischen Elektronenkorrelation als ungeeignet erweist, wird sie auf kurze Reichweiten beschränkt und für lange Reichweiten durch ein Dichtematrixfunktional ergänzt. Die Vorteile des Verfahrens im Hinblick auf die Beschreibung statischer Elektronenkorrelation wurden an Hand von Dissoziationskurven einfacher zweiatomiger Moleküle erläutert.

Jay Siegel stellte seine Studien zu komplexen aromatischen Molekularstrukturen zu Beginn der sechsten Sitzung vor. Er zeigte die neuartigen Eigenschaften von molekularen Schalen, Knoten und Rotoren. Diese Eigenschaften lassen sich auf transannulare Wechselwirkungen und stereochemische Effekte zurückführen.

Judith Rommel trug über eine von ihr durchgeführte QM/MM-Studie des Enzyms Glutamate Mutase vor. Mit Hilfe der sogenannten "Instanton"-Methode gelang es ihr, den kinetischen Isotopeneffekt in der vom Enzym katalysierten Umlagerungsreaktion zu berechnen.

Eine genaue Untersuchung des Mechanismus und der Dynamik der photoinduzierten Reaktion von E-iPr-Furylfulgide war Gegenstand des Vortrags von Jan Boyke Schönborn. Der Einfluss von chemischen Änderungen am System wurde anhand der identifizierten Abregungspfade aufgezeigt.

Die siebte Sitzung wurde von David J. Wales eröffnet. Im Hinblick auf die Modellierung mesoskopischer Systeme präsentierte er Techniken zur Untersuchung der Potentialhyperflächen, da eine globale Sicht der Kinetik und Thermodynamik grundlegend für das Verständnis selbst-organisierender Systeme ist. Neue Resultate für selbst-organisierende Strukturen, wie z.B. Helices sowie eine "Nano-Maschine" wurden vorgestellt.

Johannes Hachmann sprach über das "Harvard Clean Energy Projekt", dessen Fokus auf dem Design neuer hocheffizienter organischer Materialien für die Photovoltaik liegt. Im Rahmen dieses Projektes wird durch eine Vielzahl von Rechnungen mit ab initio und semiempirischen Verfahren die Qualität der zugrundeliegenden Strukturen verbessert sowie das Verständnis der Beziehung zwischen Struktur und resultierenden Eigenschaften erhöht.

Ralf Tonner widmete sich der offenen Frage, wie Glycin und Prolin auf einer idealen $\text{TiO}_2(110)$ Oberfläche adsorbieren. In seiner Untersuchung konnten Widersprüche zwischen experimentellen und theoretischen Ergebnissen für Glycin aufgeklärt werden, sowie die ersten theoretischen Vorhersagen über die Struktur des adsorbierten Prolins getroffen werden.

Die Adsorption von Methan auf einer $\text{MgO}(100)$ Oberfläche wurde von Sergio Tosoni mit Hilfe eines Hybrid-QM:QM-Ansatzes untersucht. Hierfür wurden DFT-D-Berechnungen und Optimierungen mit periodischen Randbedingungen, sowie korrelierte ab-initio Rechnungen für kleinere Cluster-Modelle durchgeführt. Nach Anpassung der C_6 -Koeffizienten konnte mit diesem Ansatz chemische Genauigkeit für die Bindungsenergie erreicht werden.



Verleihung des Hellmann-Preises

Die Verleihung des Hellmann-Preises an Andreas Köhn von der Universität Mainz stand am Anfang der achten Sitzung. Der anschließende Vortrag wurde einer langen Tradition folgend in deutscher Sprache gehalten und beschäftigte sich mit erweiterten Konzepten für explizit korrelierte Methoden in der Coupled-Cluster-Theorie. Die rasante Entwicklung dieses Gebiets in den vergangenen Jahren wurde rekapituliert und Erweiterungen im Hinblick auf angeregte Zustände, Response-Eigenschaften und “connected” Dreifachanregungen vorgestellt. Der Vortrag endete mit einer Würdigung der Beiträge seiner Mitarbeiter.

Reinhold Fink trug über die von ihm entwickelte S2-MP-Störungstheorie vor. Ausgangspunkt ist die von Stefan Grimme mit viel Erfolg eingeführte SCS-MP2-Störungstheorie, die auf einer empirischen Skalierung der Beiträge mit parallelem und antiparallelem Spin beruht. Dieser Ansatz kann durch die S2-Störungstheorie mit zwei Parametern (c_{ss} , c_{os}) und einem passend definierten Hamiltonoperator nullter Ordnung unter Zuhilfenahme des Spinoperators $\hat{S}^2$ auf eine solide theoretische Basis gestellt werden. Ziel ist es, den empirischen Charakter des SCS-MP2-Ansatzes zu überwinden, d.h. zu einer systematisch verbesserbaren *ab-initio*-Theorie zu gelangen.

Mit numerischen Problemen bei der Erweiterung der Dichtefunktionaltheorie auf periodische Systeme beschäftigte sich der Vortrag von Marek Sierka. Insbesondere auf die Behandlung der RI-Näherung in periodischen Systemen wurde näher eingegangen. Die Analogie zur molekularen RI-Version konnte durch eine Aufteilung der Elektronendichte in einen geladenen und einen neutralen Anteil hergestellt werden.

Zu Beginn der neunten Sitzung stellte So Hirata effiziente Näherungen vor, die die Berechnung der Elektronenkorrelation und der Bandstrukturen in Festkörpern

dramatisch beschleunigen. Des weiteren erläuterte er die strikt größenextensive Generalisierung der systematischen Viel-Teilchen-Methoden für die Berechnung von Schwingungen. Er endete mit der Schlussfolgerung: “Predictive many-body methods are beginning to be applicable to electronic and vibrational structures on solids!”

Carsten Müller präsentierte die Anwendung korrelierter Methoden im Rahmen eines als “The Method of Increments” bezeichneten lokalen Korrelationsschemas. Die Methode wurde für verschiedene Adsorptionsprobleme angewandt und ermöglicht interessante Einblicke in die Natur der Adsorbat-Adsorbens-Bindung in schwach gebundenen Systemen.

Thomas Bredow präsentierte zwei unterschiedliche Ansätze zur Beschreibung von Dispersionswechselwirkungen mit Standard-DFT in der Festkörpertheorie. Verschiedene Anwendungen wurden vorgestellt und die signifikante Rolle von Dispersionswechselwirkungen, insbesondere bei der Adsorption von organischen Molekülen auf ionischen Oberflächen, herausgestellt.

Die “Covalent Organic Frameworks” repräsentieren eine neue Klasse von möglichen Wasserstoff-Speichern. Dies veranlasste Thomas Heine, in einem Zwei-Stufen-Ansatz zuerst Struktur und Stabilität der Cluster mit DFT-Methoden zu untersuchen, um dann auf der Basis von “Quantized Liquid DFT” die Kapazität, Wasserstoff zu speichern, abzuschätzen.



Impression von den Postersessions

Die zehnte Sitzung war wieder den hochgenauen post-HF-Korrelationsmethoden gewidmet. Den Anfang machte Martin Schütz, der über lokale Korrelationsmethoden für periodische Systeme auf MP2-Niveau vortrug. Im ersten Teil wurde die in CRYSCOR implementierte DF-LMP2-Methode vorgestellt und gezeigt, dass diese auch dann noch gute Resultate liefert, wenn DFT-Rechnungen versagen. Der

zweite Teil des Vortrags befasste sich mit der Behandlung angeregter Zustände, d.h. mit der Bestimmung des Bandgaps und exzitonischen Anregungen.

K. R. Shamasundar berichtete über ein neues intern kontrahiertes Multireferenz-CI Verfahren. Dieses beruht auf einem neuen Kontraktionsschema, das auch auf interne Kontrahierung zurückgreift. Für die Bearbeitung der hochkomplexen Gleichungen wurde das “virtual tensor framework” (VTF) herangezogen. Es konnte gezeigt werden, dass der Effizienzgewinn durch die interne Kontrahierung nicht mit einem Genauigkeitsverlust bezahlt werden muss.

Mit einem intern kontrahierten Multireferenz-Coupled-Cluster-Verfahren befasste sich Francesco A. Evangelista. Dabei wurde insbesondere auf die Nachteile des Jeziorski-Monkhorst-Ansatzes hingewiesen: (1) fehlende Orbitalinvarianz gegenüber Orbitaltransformationen innerhalb des aktiven Raumes und (2) ungünstiges Skalierungsverhalten mit der Größe des aktiven Raumes. Möglichkeiten zur Überwindung dieser Defizite wurden diskutiert.

Michael Hanrath berichtete zu Beginn der elften Sitzung über eine effiziente Implementierung von Coupled-Cluster-Methoden beliebiger Ordnung basierend auf Formelgenerierung und Vereinfachung mittels Graphtransformationen, vollständig optimierter Faktorisierung durch genetische Algorithmen und einer hocheffizienten Tensorkontraktionsmaschinerie. Erste numerische Rechnungen ergaben, dass annähernd die Effizienz von handoptimierten Coupled-Cluster-Implementierungen erreicht wird und auch Coupled-Cluster-Rechnungen mit hohen Anregungsgraden und großen Basissätzen für kleine Moleküle ermöglicht werden.

Im Rahmen dieser Sitzung gab es schließlich noch zwei Vorträge, die nicht direkt mit den Inhalten quantenchemischer Forschung zu tun hatten, nämlich von Miriam Dierker von der Alexander-von-Humboldt-Stiftung und von Karl Jug, der ein historisches Projekt zur Genealogie der Quantenchemie vorstellte.

Die zwölfte Sitzung wurde von Jürgen Gauss mit einem Vortrag über das HEAT-Protokoll (“high level extrapolated ab initio thermochemistry”) eröffnet, welches hochgenaue thermochemische Berechnungen (Fehler < 1 kJ/mol gegenüber sehr genauen experimentellen Daten aus den “Active Thermochemical Tables”) durch effiziente Parallelisierung auch an Molekülen wie Benzen erlaubt. Dazu müssen Korrelationsrechnungen mit hohen Anregungsgraden (über CCSD(T) hinaus), Basissatzextrapolation, Korrelation der Rumpfelektronen, relativistische Effekte, diagonale Born-Oppenheimer Korrekturen und anharmonische Nullpunktschwingungsenergien berücksichtigt werden.

Wim Klopper berichtete über hochgenaue Berechnungen (Fehler < 1 meV) von Ionisierungsenergien und Elektronaffinitäten von Molekülen mit bis zu 10 Atomen. Neben Korrelationsrechnungen mit hohen Anregungsgraden (bis zu verbundenen Fünfachanregungen) am Basissatzlimit, Spin-Bahn-Kopplung, skalar-relativistischen Effekten und diagonalen Born-Oppenheimer Korrekturen spielen bei einer so hohen Genauigkeit auch quantenelektrodynamische Effekte wie der Lamb-Shift eine Rolle (> 1 meV für IPs).

Martin Korth sprach über eine modernere FNDMC (fixed node diffusion Monte

Carlo) Implementierung, welche soft-core Pseudopotentiale und optimierte Basissätze für alle Elemente sowie DFT-Trialwellenfunktionen vom Slater-Jastrow-Typ benutzt. Die effiziente parallele Implementierung in das Casino-Programm erlaubt verlässliche und genaue Berechnungen auf Coupled-Cluster-Niveau an größeren Molekülen, da der Rechenzeitaufwand höchstens mit der fünften Potenz der Molekülgröße steigt.

Die dreizehnte und letzte Sitzung des Symposiums begann mit einem Vortrag von Peter M. W. Gill, in dem verschiedene Zweielektronensysteme wie das Heliumatom, das "Hookium" (Elektronen im harmonischen Parabelpotential), das "Ballium" (Elektronen innerhalb eines Balls eingesperrt) und das "Spherium" (Elektronen bewegen sich auf der Oberfläche einer Kugel) diskutiert und zum Teil exakt gültige Bedingungen für die Korrelationsenergie im Limit großer Dichten bewiesen wurden. Insbesondere das "Glome"-Modell (Oberfläche eines vierdimensionalen Balls) stellt eine mathematisch einfachere aber physikalisch äquivalente Realisierung des freien Elektronengases ("Jellium") dar und kann somit hilfreich bei der Entwicklung und dem Verständnis neuer Dichtefunktionale sein.

Joachim Friedrich berichtete über eine effiziente, vollständig automatisierte und parallele Implementierung der Methode der Inkremente, welche sowohl Molekülsymmetrie als auch explizit korrelierte Korrekturen behandeln kann. Es wurde demonstriert, dass damit akkurate lokale Elektronenkorrelationsrechnungen auf CCSD(T)-Niveau an größeren Molekülen durchgeführt werden können.

Der Vortrag von Ricardo Mata befasste sich mit einer Erweiterung der Methode der Inkremente, die es erlaubt, effizient elektronische Anregungsenergien zu berechnen. Der Ansatz basiert auf einer Analyse der CIS-Übergangsdichtematrix und lokalen Fragmenten, deren EOM-CCSD-Anregungsenergien berechnet werden.

Andreas Hansen, Mario Kampa, Christian Kollmar, Simone Koßmann, Oliver Krahe, Michael Römelt

Die Photographien wurden freundlicherweise vom Organisationskomitee der STC zur Verfügung gestellt.

4.3 Sponsoren

COSMOlogic GmbH & Co. KG, sysGen, Wiley-VCH, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Scientific Computing & Modelling

5 Hellmann-Preisträger 2010: Dr. Andreas Köhn

Es ist gute Tradition auf der STC, im Sommer auch den Hellmann-Preisträger vorzustellen und ebenso gute Tradition, die Identität des Preisträgers bis zum Tag der Verleihung geheim zu halten. Nachdem es im Jahre 2009 keinen Preisträger (oder Preisträgerin) gegeben hat, war die Spannung in diesem Jahr um so größer. Ausgezeichnet wurde Dr. Andreas Köhn, der die Ehrung aus Händen des AG-TC Vorsitzenden Prof. Jürgen Gauß erhielt und in seinem Vortrag eindrücklich bewies, warum er in diesem Jahr der erwählte Preisträger war.



Dr. Andreas Köhn

Wie üblich soll der Preisträger an dieser Stelle vorgestellt werden. Andreas Köhn hat in Karlsruhe Chemie studiert und sich frühzeitig durch Wahl seines Nebenfaches „Theoretische Physik“ in Richtung der Theorie orientiert. Seine Diplomarbeit hat er auf dem Gebiet der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie für offenschalige Moleküle unter Leitung von Prof. Reinhart Ahlrichs angefertigt. In seiner Doktorarbeit hat sich Andreas Köhn dann den Wellenfunktions-basierten *ab initio*-Verfahren zugewendet. Seine Arbeit wurde von Christof Hättig (Hellmann-Preisträger 2004 und jetzt Professor für Theoretische Chemie in Bochum) betreut und beschäftigte sich mit der RI-CC2-Methode. Die Doktorarbeit von Andreas Köhn hat sicherlich dazu beigetragen, diese Methode fest in der Theoretischen Chemie zu verankern. Er hat dort die analytischen Gradienten für angeregte Zustände sowie die Behandlung offenschaliger Moleküle ausgearbeitet. Die Arbeit besticht bereits durch gedankliche Tiefe und theoretische Präzision. Das daraus entstandene Programm ist ein wichtiger Bestandteil des RI-CC2-Moduls im wohlbekannten TurboMole-Programmpaket geworden und stellt eines der wichtigen Alleinstellungsmerkmale dieses Programmpaketes dar (Mittlerweile sind andere Entwickler, sicherlich auch motiviert durch den Erfolg der Karlsruher Gruppe, diesem Beispiel gefolgt).

In seiner Zeit als Postdoktorand in der Arbeitsgruppe von Jeppe Olsen in Aarhus, Dänemark, hat sich Andreas Köhn dann ganz der Coupled-Cluster-Theorie gewidmet, woraus einige fundamentale Publikationen entstanden sind. Z.B. stammt die Erkenntnis, dass Orbital-Optimierte Coupled-Cluster-Theorie nicht auf den Full-CI-Referenzwert konvergiert aus dieser Zusammenarbeit. Andreas Köhn ist in dieser Zeit auch mit der Entwicklung von String-basierten Algorithmen in Berührung gekommen, welche in seinen späteren, unabhängigen Arbeiten eine zentral wichtige Rolle spielen.

Seit 2005 ist Andreas Köhn Leiter einer Nachwuchsgruppe für Theoretische Chemie an der Universität Mainz, welche aus den Mitteln des Gottfried-Wilhelm Leibniz Preises finanziert wird, den Prof. Jürgen Gauß im Jahre 2005 erhalten hat. Er hat sich seit Beginn dieser Zeit thematisch stark weiterentwickelt und vielbeachtete Publikationen in internationalen Journalen veröffentlicht. Am bekanntesten sind sicherlich seine Beiträge zur explizit korrelierten Coupled-Cluster-Theorie, die Andreas Köhn an seiner jetzigen Wirkungsstätte etabliert hat. Diese Arbeiten bieten auch die Grundlage für die Verleihung des Hellmann-Preises.

Eine der ersten Arbeiten befasste sich mit konischen Durchschneidungen und der Frage, ob diese mit Coupled-Cluster Response-Methoden beschrieben werden können (*J. Chem. Phys.* **127**, 044105 (2007)). Es wurde theoretisch und numerisch gezeigt, dass auf Grund der nicht hermiteschen Formulierung der CC-Resonsetheorie Artefakte im Bereich der Durchschneidungen auftreten. Darüber hinaus wurde eine einfache Korrektur vorgeschlagen, mit deren Hilfe physikalisch sinnvolle Potentiale erhalten werden können. Eine weitere schöne Arbeit beschreibt die Implementierung einer CC2-Methode zur Berechnung von Übergangsmomenten zwischen elektronisch angeregten Zuständen (*J. Chem. Phys.* **129**, 214101 (2008)).

Sein großes wissenschaftliches Potential hat Herrn Köhn insbesondere mit einer Serie von ausgezeichneten Arbeiten zu explizit korrelierten Coupled-Cluster-Methoden bewiesen. Grundlage für diese Arbeiten bildet sein Programm GEC-CO, das einen symbolischen Algebra Teil zur Herleitung der Formeln und einen string-basierten allgemeinen Algorithmus für numerische Berechnungen auf der Basis der automatisch erzeugten Gleichungen beinhaltet. Als erstes wurde dieses Programm zur Erzeugung eines „exakten“ CCSD-F12 Programms angewendet (*J. Chem. Phys.* **129**, 201103 (2008)). Exakt bedeutet hier, dass im Gegensatz zu den meisten anderen Implementierungen im Rahmen des vorgegebenen Ansatzes und der CABS-Näherung (Complementary Auxiliary Basis Set) keine weiteren Näherungen eingeführt werden. Ebenfalls mit automatischen Programmierungstools wurde unabhängig eine analoge Methode von Shiozaki et. al. entwickelt und fast gleichzeitig publiziert (*J. Chem. Phys.* **129**, 071101 (2008)). Die Methode von Köhn unterscheidet sich davon durch eine Umformulierung der Theorie, die es erlaubt, RI-Näherungen in einigen Termen zu vermeiden. Dies führt zu einer deutlich schnelleren Konvergenz der Resultate mit der Qualität der RI-Basis. Die genannten und alle anderen vorherigen F12-Methoden berücksichtigten nur explizit

korrelierte Doppelanregungen. Damit bleiben die Basissatz-Fehler der Dreifach- und Höheranregungen erhalten. Herr Köhn hat bisher als einziger eine Theorie vorgeschlagen, in der im Rahmen der störungstheoretischen (T)-Näherung auch die Dreifachanregungen explizit korreliert werden (*J. Chem. Phys.* **130**, 131101 (2009)). Er konnte zeigen, dass damit die Konvergenz des (T)-Energiebeitrags mit der Basisgröße drastisch verbessert wird. Zum Beispiel wurde für eine Reihe kleiner Moleküle (HF, H₂O, N₂, F₂) gezeigt, dass mit einer double-zeta Basis (aug-cc-pVDZ) 91-93% des Basissatzlimits erhalten werden, während mit der konventionellen (T)-Methode und dem gleichen Basissatz nur 47-56% erreicht werden. Diese Arbeit, bei der Herr Köhn alleiniger Autor ist, hat international hohe Aufmerksamkeit und Anerkennung gefunden.

Eine Reihe weiterer Arbeiten befasst sich mit explizit korrelierten Response-Methoden zur Berechnung von angeregten Zuständen. Frühere Arbeiten von Hättig et al. hatten gezeigt, dass die Berechnung von Anregungsenergien mit herkömmlichen F12-Methoden problematisch ist, da die F12-Korrektur überwiegend den Grundzustand verbessert und daher u. U. viel zu große Anregungsenergien erhalten werden. In einer eigenständigen Arbeit (A. Köhn, *J. Chem. Phys.* **130**, 104104 (2009)) schlägt Herr Köhn einen neuen explizit korrelierten Ansatz vor, der dieses Problem vermeidet. Er demonstriert überzeugend, dass mit diesem Ansatz das Basissatzlimit systematisch und schnell erreicht wird, ohne willkürliche Annahmen machen zu müssen. Dies wird nicht nur für Anregungsenergien sondern auch für Gleichgewichtsgeometrien und Schwingungsfrequenzen demonstriert. In einer weiteren Arbeit (*J. Chem. Phys.* **131**, 124118, (2009)) wird die Methode auf Response-Eigenschaften (Dipolmomente, Polarisierbarkeiten, statische und dynamische Hyperpolarisierbarkeiten, optische Rotation) erweitert. In einer seiner neuesten Arbeiten beschreibt Herr Köhn neue iterative Ansätze zur Berücksichtigung von Einfachanregungen in die CABS Orbitale (*J. Chem. Phys.* **132**, 024101 (2010)). Im Gegensatz zu früheren nicht-iterativen Ansätzen zur Verbesserung der Hartree-Fock-Energie eignet sich seine neue Methode auch für die Berechnung von Response-Eigenschaften.

Herr Köhn hat in seinen Arbeiten sicherlich sein großes wissenschaftliches Potenzial bewiesen. Neben seinen methodischen Arbeiten hat er sich auch immer für die Anwendung der Quantenchemie interessiert und sich mit den angeregten Zuständen von großen Molekülen auseinandergesetzt. Er hat in Mainz eine eigenständige Arbeitsgruppe mit derzeit vier Mitgliedern aufgebaut. Mit der Verleihung des Hellmann-Preises ist ein wichtiger weiterer Baustein zu seinem wissenschaftlichen Werdegang hinzugekommen. Wir wünschen Andreas Köhn alles Gute für seine weitere wissenschaftliche Entwicklung.

Frank Neese und Hans-Joachim Werner

6 Mitgliederversammlung der AGTC

6.1 Mitgliederversammlung

Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie beim 46. Symposium für Theoretische Chemie in Münster

Beginn: 29.09.2010, 18:00

Ende: 29.09.2010, 18:45

Sitzungsleitung: Prof. Dr. Jürgen Gauß (Universität Mainz)

Tagesordnung:

- 1) Genehmigung der Tagesordnung
- 2) Protokoll der Mitgliederversammlung 2009
- 3) Bericht des Vorstands
- 4) Kassenprüfung 2008, Nachtrag
- 5) Bericht des Kassenprüfers 2009
- 6) Wahl des Kassenprüfers 2010
- 7) Vorstandswahl 2011: Kandidatenliste
- 8) Symposien 2011 bis 2013
- 9) Verschiedenes

6.2 Protokoll

6.2.1 TOP 1

Die vorgeschlagene Tagungsordnung wurde ohne Änderungen angenommen.

6.2.2 TOP 2

Das Protokoll der Mitgliederversammlung des 45. Symposiums für Theoretische Chemie in Neuss am Rhein am 11. September 2009 wurde im Info TC 4/2010 veröffentlicht. Es wird ohne Änderungen genehmigt.

6.2.3 TOP 3

Bericht des Vorsitzenden

1. Mitgliederstand

Die Zahl der Mitglieder der AGTC ist leicht rückgängig. Waren es im Jahr 2008 noch 217 Mitglieder, so ist die Zahl im Jahr 2009 auf 209 gesunken. Alle Mitglieder werden daher aufgefordert, Nachwuchswissenschaftler und Nachwuchswissenschaftlerinnen zu ermutigen, der AGTC beizutreten.

2. Hellmann-Preis

Der Hellmann-Preis wurde in diesem Jahr verliehen. Es ist wichtig, auch für das nächste Jahr geeignete Kandidaten / Kandidatinnen zu nominieren, da es besser ist, wenn die Jury aus einer größeren Anzahl von Nominierungen auswählen kann als wenn kein geeigneter Kandidat gefunden werden kann. Stichtag für die Nominierungen ist der 15.3.2011 (Vorverlegung).

3. Hellmann-Fonds

Bis zum letzten Jahr gab es steuerrechtliche Unklarheiten bezüglich der Zustiftung für den Hellmann-Fonds. Diese Unklarheit ist nun laut Aussage der DBG beseitigt. Spenden können problemlos getätigt werden mit dem Ziel, das Stiftungsvermögen zu erhöhen. Wichtig ist dabei der Vermerk, dass das Stiftungsvermögen aufgestockt werden soll.

4. Jahresrückblicke

Die Jahresrückblicke für 2010 werden von A. Auer, I. Burghardt und J. Kästner für die „Nachrichten aus Chemie und Technik“ verfasst.

5. INFO-TC

Die INFO-TC wird derzeit von Frank Neese und Thomas Bredow, Universität Bonn, herausgegeben. Beiträge, wie z. B. die Vorstellung von Arbeitskreisen, sind erwünscht.

6. Zusammenarbeit mit DBG und GDCh

Die Zusammenarbeit mit der DBG und der GDCh stellt in Zukunft ein wichtiges Thema dar. Es geht hier einerseits darum, Präsenz zu zeigen wie auch darum, Möglichkeiten zur Stellungnahme und Einflussnahme auszuschöpfen. Von beiden Gesellschaften wird mehr Sichtbarkeit gewünscht. Die Bunsentagung der DBG oder EuChemS von der GDCh bieten solche Möglichkeiten. Bei letzterer gab es zwar eine eigene „Session“ Theoretische Chemie, aber insgesamt war die Präsenz der Theoretischen Chemie eher gering.

6.2.4 TOP 4

Kassenprüfung 2008, Nachtrag

Die DBG hatte 2008 nur die Gesamtsumme der Spenden genannt, was dazu führte, dass Herr Mark irrtümlicherweise nur von einer Spende ausgegangen war. Die Frage hat sich inzwischen geklärt. Es sind laut DBG drei Spenden eingegangen. Der Vorstand hat diese Korrektur, die am Kassenbericht insgesamt nichts ändert, zur Kenntnis genommen und vorgeschlagen, den Kassenbericht anzunehmen.

Ab dem Jahr 2009 und in Zukunft wird die DBG eine detaillierte Liste aller Spenden zur Verfügung stellen. Es ist daher nicht erforderlich, wie im letzten Jahr vorgeschlagen, bei jeder Spende Vorstand und Kassenprüfer zu informieren.

6.2.5 TOP 5

Bericht des Kassenprüfers 2009

F. Mark (Mülheim) berichtet über die erfolgte Kassenprüfung 2009 und die aktuelle finanzielle Situation bei der AGTC und beim Hellmann-Fonds.

1. Kassenstand AGTC:

AGTC Konto am 31.12.2009:	21.286,73 €	
Einnahmen aus Mitgliedsbeiträgen:	2.717,00 €	(2008: 2.821,00 €)
Ausgaben für Porto:	58,00 €	(2008: 108,00 €)

Die Summe der Mitgliedsbeiträge 2009 entspricht 209 Mitgliedern gegenüber 217 Mitgliedern im Jahr zuvor.

2. Hellmann-Fonds:

Gesamtvermögen des Hellmann-Fonds am 31.12.2009:	42.973,13 €
Einnahmen aus Spenden:	6.050,00 €
Zinserträge:	1.985,57 €
Ausgaben (Hellmann-Preisgeld):	keine

Das Gesamtvermögen des Hellmann-Fonds ist 2009 um 8.035,57 € gewachsen.

Es bestehen keine Einwände des Kassenprüfers gegen die Abschlüsse 2009 für das Konto der AGTC und das Konto des Hellmann-Fonds. Der Vorstand wird entlastet.

6.2.6 TOP 6**Wahl des Kassenprüfers 2010**

Für seine Tätigkeit als Kassenprüfer in den letzten Jahren wird Herrn Mark Dank ausgesprochen. Der Vorsitzende schlägt vor, ihn auch für das Jahr 2010 mit der Aufgabe der Kassenprüfung zu betrauen. Die Zustimmung erfolgt per Akklamation.

6.2.7 TOP 7**Vorstandswahl 2011: Kandidatenliste**

Im Januar 2011 stehen neue Vorstandswahlen für die AGTC an. Der neue Vorstand sollte sich zum 01.07. 2011 konstituieren. Die Wahl erfolgt wie bisher üblich über Briefwahl. Der Vorstand hat eine Liste von Kandidaten erstellt. Von Seiten der Mitgliederversammlung gab es keine weiteren Vorschläge.

Als KandidatInnen nominiert wurden:

J. Gauss (Mainz), C. Marian (Düsseldorf), S. Grimme (Münster), T. Heine (Bremen), D. Marx (Bochum), C. Ochsenfeld (München), U. Manthe (Bielefeld)

H.-J. Werner und G. Frenking, bisher im Vorstand, stehen nicht mehr zur Verfügung.

Die Wahlunterlagen werden jedem Mitglied im Dezember 2010 auf dem Postweg zugehen.

6.2.8 TOP 8

Symposien 2011 bis 2013

1. Die STC 2011 wird von M. Reiher (ETH Zürich) organisiert. Die Tagung wird vom 21.8.–25.8.2011 in Sursee bei Luzern stattfinden. Der relativ frühe Termin ergibt sich aus dem früheren Vorlesungsbeginn in der Schweiz. Herr Reiher konnte leider nicht selbst die Ankündigung der STC 2011 vornehmen, ein entsprechender Flyer wurde den Tagungsunterlagen beigelegt.
2. Für 2012 hat sich W. M. Klopper (KIT) bereit erklärt, die STC in Karlsruhe zu organisieren.
3. Für 2013 laufen die entsprechenden Gespräche derzeit noch.

6.2.9 TOP 9

Verschiedenes

1. Es wird angefragt, ob in Zukunft Steuerbescheinigung für Spenden zum Hellmann-Fonds nicht automatisch zugesandt werden können. Der Vorstand wird sich dahingehend mit der DBG in Verbindung setzen.
2. Die AGTC ist im Internet auf folgenden Plattformen vertreten:
 - Facebook (Administrator: Judith Rommel, AK J. Kästner, Stuttgart), rommel@theochem.uni-stuttgart.de
www.facebook.com/pages/Arbeitsgemeinschaft-Theoretische-Chemie/165017070175022?v=info
 - Linked-in (Administrator: Stefan Knippenberg, AK A. Dreuw, Frankfurt), sknippen@theochem.uni-frankfurt.de
www.linkedin.com/groups?mostPopular=&gid=2700797

Mainz, den 25.10.2010

Prof. Dr. Jürgen Gauß

7 Nachrichten

7.1 Klatsch und Tratsch

Dr. Dassia Egorova, TU München, hat einen Ruf an die Universität zu Kiel auf eine Juniorprofessur für Theoretische Chemie angenommen.

Prof. Dr. Markus Elstner, Universität Karlsruhe, hat einen Ruf an die Universität Konstanz auf eine W3-Professur für Theoretische Chemie erhalten.

Prof. Dr. Stefan M. Kast, TU Darmstadt, hat einen Ruf an die TU Dortmund auf eine W2-Professur für Theoretische Physikalische Chemie angenommen.

Prof. Dr. Martin Kaupp, Universität Würzburg, hat einen Ruf an die TU Berlin auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie — Quantenchemie zum Oktober 2010 angenommen.

PD Dr. María Belén Ruiz Ruiz, Universität Erlangen, hat sich in Theoretischer Chemie habilitiert.

Prof. Dr. Joachim Sauer, HU Berlin, ist auf der 126. Versammlung der GDNÄ in Dresden mit der Liebig-Denkmünze der GDCh ausgezeichnet worden. Die GDCh würdigt mit der Auszeichnung „seine bahnbrechenden theoretischen Arbeiten zum Verständnis der Struktur und chemischen Reaktionen an Zeolithen und Übergangsmetalloxidaggregaten“

Dr. Matthias Stein, Heidelberger Institut für Theoretische Studien, hat einen Ruf auf eine W2-Professur für „Molecular Simulations and Design“ an das MPI für Dynamik komplexer technischer Systeme in Magdeburg zum Juli 2010 angenommen.

Prof. Dr. Dirk Zahn, MPI für Chemische Physik fester Stoffe in Dresden, hat einen Ruf an die Universität Erlangen auf eine W2-Professur für Theoretische Chemie angenommen.

8 Genealogieprojekt Theoretische Chemie

Das Genealogieprojekt Theoretische Chemie wurde am 29. September 2010 beim 46th Symposium on Theoretical Chemistry in Münster vorgestellt. Wie schon in meinen Rundschreiben vom 5. Februar 2007 und 6. Juli 2007 ausführlich beschrieben, handelt es sich um die Erfassung der wissenschaftlichen Daten aller Professoren und Dozenten der Theoretischen Chemie und verwandter Gebiete in Deutschland, Österreich und der Schweiz, d. h. dem Bereich der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie. Ebenso erfasst werden sollen die entsprechenden Daten der wissenschaftlichen Vorfahren und Nachkommen dieser Hochschullehrer. Als Nachkommen werden alle promovierten Wissenschaftler auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie berücksichtigt.

Diese Erfassung ist weitgehend abgeschlossen. Als Quellen wurden zunächst direkte Informationen von Kollegen und deren Schülern und Daten aus dem Mathematics Genealogy Project verwendet. Später wurden Daten aus der Deutschen Nationalbibliothek, Wikipedia, Bibliographien, gewidmete Artikel in Zeitschriften, Web of Science und weiteren Online-Quellen hinzugenommen. Das Programmpaket für die dynamische Datenbank wurde von Mitchel T. Keller, Co-Managing Director des Mathematics Genealogy Project zur Verfügung gestellt und bei uns für die Zwecke der Theoretischen Chemie modifiziert.

Die bisher enthaltenen Personen kann man unter

genealogy.theochem.uni-hannover.de

finden. Für jede Person ist eine Seite mit dem akademischen Grad, dem Fachgebiet, dem Promotionsjahr, der Universität, dem Land, dem Dissertationstitel, dem Doktorvater und den eigenen Schülern vorhanden. Dissertationstitel sind soweit bekannt in der Originalsprache und Hochschulen in der Landessprache angegeben. Für Hochschullehrer ist auch ein Lebenslauf auf einer weiteren Seite vorgesehen. Der Rahmentext wurde in Englisch belassen, um eine Nutzung der Daten über den deutschsprachigen Raum hinaus zu ermöglichen, zumal zahlreiche erfasste Personen wissenschaftliche Vorfahren aus nicht deutschsprachigen Ländern haben.

Folgende Punkte sind zu berücksichtigen: Alle unterstrichenen Wörter kann man anklicken, um zu weiteren Seiten oder anderen Anordnungen zu gelangen. Auf der obigen Eingangswebseite kann man nach Anklicken von Search nach Namen, Ländern, Hochschulen oder Fachgebieten suchen. Bei der Namenssuche gibt keine Unterscheidung zwischen Groß- und Kleinschreibung. Auch Teile von Namen sind möglich. Namen mit Akzenten können akzentfrei eingegeben werden. Sie erscheinen dann mit den entsprechenden Akzenten. Ebenso ist für die Buchstaben ä, ö, ü und ß vorgesehen, als weitere Eingabe die Option a, ae, o, oe, u, ue und ss einzuführen, weil dies z. B. bei anderen als deutschen Tastaturen einfacher ist und auch im Web of Science so praktiziert wird.

Einige Missverständnisse gab es bei der Angabe des Betreuers (Englisch: Advisor). Damit ist der offizielle Doktorvater gemeint, nicht der interne Betreuer in Detailfragen. Gewöhnlich gibt es nur einen Betreuer bzw. Doktorvater. Er hatte das Thema der Dissertation gestellt und war erster Gutachter der Dissertation. Dies bedeutet, dass der Doktorvater Prüfungsberechtigung haben muss. Ausnahmen von dieser Regel gibt es, wenn der eigentliche Betreuer vor Abschluss der Promotion verstorben war oder die Universität gewechselt hatte. Eine weitere Abweichung kann sich ergeben, wenn die Dissertation extern z. B. an einem Max-Planck-Institut angefertigt wurde und der dortige Betreuer auch Gutachter der Dissertation war. Zwei Doktorväter sind möglich, wenn das Thema der Arbeit aus einem experimentellen und einem theoretischen Teil oder zwei verschiedenen theoretischen Teilen bestand, die von zwei verschiedenen Hochschullehrern betreut wurden.

Ich bitte um ergänzende Informationen, die in der Datenbank noch nicht vorhanden sind, mit Quellenangabe. Für weitere Fragen stehe ich unter Contact zur Verfügung.

K. Jug, Hannover

9 Tagungsvorschau

Zusammengestellt von

Prof. Dr.phil.nat. Klaus Helfrich

Technische Universität Berlin

Helfrich_TUB@t-online.de

Im WWW finden Sie die aktuelle Fassung unter

HelfrichTUB.de/tagungen.html

9.1 Tagungen 2011

Workshop on Theoretical Chemistry, Explicitly Correlated Methods,
Mariapfarr, Salzburg (Österreich), 15. – 18. Februar 2011

www.uni-graz.at/tchwww/sax/mariapfarr/

Chemiedozententagung, Mainz, 14. – 16. März 2011

www.gdch.de/vas/tagungen.htm

International Conference on Computational Science (ICCS 2011),
University of Tsukuba (Japan), 1. – 3. Juni 2011

www.iccs-meeting.org/

Bunsentagung 2011, Analysis and Control of Ultrafast Photoinduced Reactions, Berlin, 2. – 4. Juni 2011

www.bunsen.de/Veranstaltungen/Bunsentagungen/Bunsentagung+2011.html

International Conference on Simulation Technology (SimTech 2011),
Stuttgart, 14. – 17. Juni 2011

www.contoo.de/c/simtech2011

WATOC, Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, Santiago de Compostella (Spanien), 17. – 22. Juli 2011

www.watoc2011.com/

American Conference on Theoretical Chemistry (ACTC), Telluride Science Research Center, Telluride, CO, USA, 18. – 22. Juli 2011

www.telluridescience.org/reg/workshop_details.php?wid=268

WATOC Satellite Conference, Strongly Correlated Systems, Cooperativity, and Valence-Bond Theory, Coruna (Spanien), 23. – 25. Juli 2011

watoc2011satelliteconferencecoruna.webs.com/

Gordon Research Conferences, Time-Dependent Density-Functional Theory, University of New England, Biddeford, (USA), 14. – 19. August 2011

www.grc.org/programs.aspx?year=2011&program=tddft

47th Symposium on Theoretical Chemistry (STC 2011), Designing Molecular Functionality: Challenges for Theoretical Approaches, Sursee (Schweiz), mromy.isenegger@phys.chem.ethz.ch, 21. – 25. August 2011
in Kürze: www.stc2011.ethz.ch

14th international Density Functional Theory Conference (DFT11), Athen, Griechenland, 29. August – 2. September 2011
www.dft11.org/

7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII), Waseda University, Tokio, Japan, 2. – 8. September 2011
www.chem.waseda.ac.jp/nakai/istcp7/

GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2011, Bremen, 04. – 07. September 2011
www.gdch.de/vas/tagungen.htm

14th Asian Chemical Congress 2011 (ACC 2011), Bangkok (Thailand), 5. – 8. September 2011
www.14acc.org/index.html

Robert Bunsen's 200th Birthday, Frontiers in Physical Chemistry, Organisation U. Grunze (Heidelberg), Heidelberg, 12. Oktober 2011
www.bunsen.de/Veranstaltungen.html

DPG-Tagungen:

75. Jahrestagung der DPG, Frühjahrstagung der Sektion AMOP (SAMOP) und der Sektion Kondensierte Materie (SKM), (u.a. Molekülphysik, Chemische Physik und Polymerphysik) Dresden, 13. – 18. März 2011
dresden11.dpg-tagungen.de/index.html

DPG-Frühjahrstagung, Hadronen und Kerne, Münster, 21. – 25. März 2011
muenster11.dpg-tagungen.de/index.html

DPG-Frühjahrstagung, Gravitation und Relativitätstheorie, Teilchenphysik, Theoret. und math. Grundlagen der Physik, Karlsruhe, 28. März – 1. April 2011
karlsruhe11.dpg-tagungen.de/index.html

DPG-Frühjahrstagung, Kurzzeitphysik, Plasmaphysik, Kiel 28. März – 1. April 2011
kiel11.dpg-tagungen.de/index.html

9.2 Tagungen 2012

Bunsentagung 2012 „Ionische Flüssigkeiten“, Leipzig, 17. – 19. Mai 2012

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

48th Symposium on Theoretical Chemistry (STC 2012), Organisation: Wim Klopper (Karlsruhe), wim.klopper@chemie.uni-karlsruhe.de, September 2012

14th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC), Macky Auditorium, University of Colorado, Boulder, USA, Organisation: Josef Michl, 25 – 30 Juni 2012

www.iaqms.org/congress.php

DPG-Tagungen:

(www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2012.html)

DPG-Frühjahrstagung der Sektion AMOP (u.a. Atomphysik und Molekülphysik), Stuttgart, 12. – 16. März 2012

DPG-Frühjahrstagung Teilchenphysik, Göttingen, 27. Februar – 2. März 2012

DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie, (u. a. Chemische Physik und Polymerphysik), Berlin, 4. – 9. März 2012

DPG-Frühjahrstagung Hadronen und Kerne, Mainz, 19. – 23. März 2012

9.3 Hinweise auf weitere Tagungskalender

Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie

www.theochem.de/agtc.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

10 Mitteilungen der DFG

10.1 Flexibilisierung der Förderung

Seit dem 01.09.2010 gilt für Anträge auf Sachbeihilfe im Normalverfahren eine neue flexiblere Beantragung der Mittel für Personalkosten. Im Gegensatz zu vorher werden die Mittel für Personal nun grundsätzlich in Form von pauschalierten Beträgen, die in Kategorien gestaffelt sind, angesetzt. Die Flexibilität soll dazu beitragen, die Förderung einfacher, schneller und unbürokratischer abzuwickeln. Forscherinnen und Forscher können nun flexibel über Umdispositionen entscheiden und ihre Fördermittel künftig noch freier und ganz an den konkreten Bedürfnissen des geförderten Projekts ausgerichtet verwenden.

Information für die Wissenschaft Nr. 42 — 16. August 2010

www.dfg.de/foerderung/info_wissenschaft/info_wissenschaft_10_42/index.html