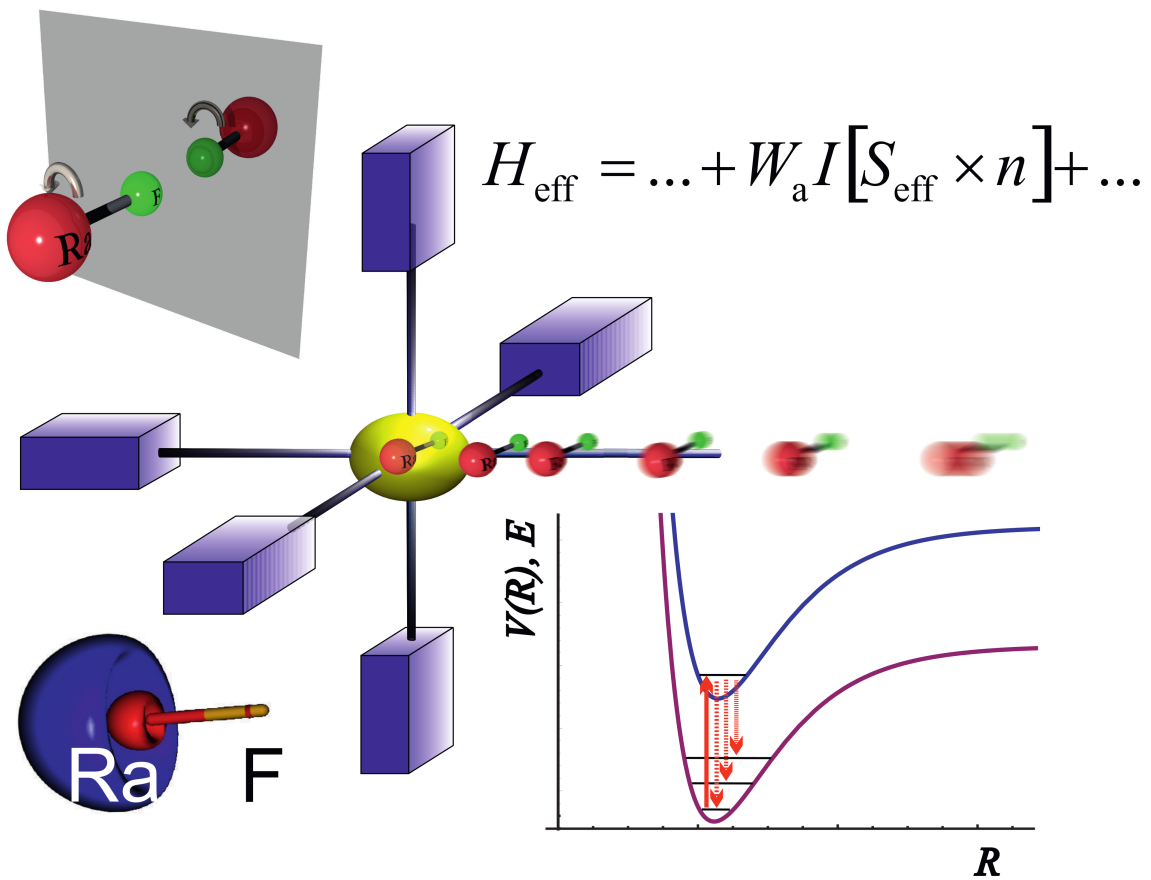


Info Theoretische Chemie

April 2011



1 Inhaltsangabe

Inhalt:

Editorial	Seite	3
Theoretische Chemie an der TU Darmstadt	Seite	4
Nachrichten	Seite	11
Tagungsvorschau	Seite	12

Titelbild:

T.A. Isaev, S. Hoekstra and R. Berger
Lasercooled RaF as a promising candidate to measure molecular parity violation
Phys. Rev. A, **2010**, *82*, 052521
Die Abbildung wurde von Christian Krekeler und Timur A. Isaev erstellt.

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 April 2011

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 Theoretische Chemie an der TU Darmstadt

3.1 Einleitung

Die Theoretische Chemie ist an der Technischen Universität Darmstadt sowohl in der Forschung als auch in der Lehre in drei Instituten beziehungsweise Bereichen verankert: im Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie, im Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie sowie im Center of Smart Interfaces. Letzteres wurde im Zuge der Exzellenzinitiative ins Leben gerufen.

3.2 Historisches

Die gegenwärtige Einbindung der Theorie ist im wesentlichen historisch begründet. An der Technischen Hochschule Darmstadt, die 1997 in Technische Universität Darmstadt umbenannt wurde, bemühte sich insbesondere der Organiker Klaus Hafner Ende der 1960er Jahre, eine physikalisch/theoretisch-organische Thematik am Institut für Organischen Chemie zu etablieren. Rudolf Zahradnik aus Prag wirkte beispielsweise 1966 für einige Monate als Gastprofessor und kehrte auch in der Folgezeit mehrfach an die THD zurück. Mit Hans-Jörg Lindner, der sich Anfang der 1970er Jahre an der TH Darmstadt habilitierte und sehr früh Kraftfeldmethoden mit semi-empirischen π -Elektronenstrukturmodellen kombinierte, um Kristallstrukturen vorherzusagen, wurden am Institut für Organische Chemie theoretisch-methodische Aspekte auch personell dauerhaft verankert und in der Lehre abgebildet. Ferner wurde Rolf Gleiter zum H4-Professor für Theoretische Organische Chemie an der TH Darmstadt berufen, in dessen Umfeld Michael C. Böhm, heute außerplanmäßiger Professor am Eduard-Zintl-Institut der TUD, sich zunächst verstärkt mit quantenchemischen Fragestellungen befaßte. Nach Gleiters Berufung als C4-Professor in Heidelberg setzten Bernd Giese (1977-1988, anschließend Basel) und Herbert Mayr (1991-1996, anschließend LMU München) die physikalisch-organische Tradition in der Darmstädter Chemie fort. Parallel zu dieser Entwicklung entstand in der Physikalischen Chemie ein zweiter Bereich der Theoretischen Chemie. Der Physiker Peter C. Schmidt kam Anfang der siebziger Jahre mit Alarich Weiss von Münster nach Darmstadt und setzte frühzeitig theoretische Festkörpermethode für seine Forschung ein. Als außerplanmäßiger Professor am Eduard-Zintl-Institut blieb er der Theorie über seine Pensionierung im Jahr 2006 hinaus treu. Ebenso wie K. Hafner in der organischen Chemie hatte auch A. Weiss in der Physikalischen Chemie ein großes Interesse, theoretische Methoden zur Analyse physikalisch-chemischer Experimente heranzuziehen. Dies führte während der 1970er und 1980er Jahre auch in der Physikalischen Chemie zu Gastaufenthalten von Theoretikern (T.P. Das und K.D. Sen aus Indien). Jürgen Brickmann wurde 1979 Nachfolger des Physikochemikers Helmut Witte (Chemische und Physikalische Röntgenkunde) und verankerte als C4-Professor

den zweiten Bereich der Theoretischen Chemie nachhaltig in der Physikalischen Chemie der TUD.

Florian Müller-Plathe trat 2005 dann die Nachfolge Brickmanns (2004 pensioniert) an und wurde zum Professor für Theoretische Physikalische Chemie ernannt. Robert Berger wurde 2009 der Nachfolger von Lindner (2004 pensioniert) und Professor für Quantenchemie und Theoretische Organische Chemie. Seine Stelle ist verknüpft mit der Verantwortung für die massenspektrometrische Abteilung des Clemens-Schöpf-Instituts (MS-Abteilung vormals geleitet von apl-Prof. Johannes Veith). Wenige Monate vor Berger besetzte Nico van der Vegt die neu geschaffene Professur für Computergestützte Physikalische Chemie im Rahmen des Exzellenzclusters Center of Smart Interfaces.

Damit verfügt die Chemie an der TU Darmstadt über einen apl.-Professor und drei hauptamtliche Professoren, die sich der Theoretischen Chemie verschrieben haben. Deren thematische Ausrichtung wird im folgenden vorgestellt.

Gemäß der Tradition in Darmstadt sind in der Chemie weiterhin mehrere experimentell ausgerichtete Gruppen angesiedelt, die ein ausgesprochenes Faible für Theoretische Chemie oder Computerchemie besitzen. Als Dach für die Theoretische Chemie an der TU Darmstadt wurde daher das *Theoriwerk* (*Theory works*) gegründet, das sich zum Ziel gesetzt hat, zum einen die Theorieausbildung an der TUD zu strukturieren und koordinieren, um langfristig Theoretische Chemie als eigenständige Säule im Chemiestudiengang zu etablieren (siehe *Lehre* weiter unten), und zum anderen die Vernetzung der theorieorientierten Gruppen untereinander sowie zu den experimentellorientierten Gruppen in Darmstadt und Umgebung zu verstärken.

3.3 Arbeitskreise

3.3.1 Michael C. Böhm

Der dienstälteste in Darmstadt aktive Theoretiker in der Chemie, Michael C. Böhm, gehört seit April 2008 zum Arbeitskreis von Florian Müller-Plathe. Er ist seit dieser Zeit mit Themen aus dem Bereich der Molekulardynamik (MD) beschäftigt. In den ersten Jahren seiner wissenschaftlichen Arbeit hat er sich mit quantenchemischen Problemen befaßt. Es entstanden semiempirische Methoden zur Berechnung molekularer Eigenschaften sowie Ansätze zur Elektronen-Theorie des Festkörpers. Vor 20 Jahren hat er in Zusammenarbeit mit Metallphysikern aus Stuttgart (MPI für Metallforschung) MD-Simulationen mit Methoden der relativistischen Quantenchemie kombiniert, um das magnetische Verhalten amorpher Festkörper zu verstehen. Seit vielen Jahren interessieren ihn auch die Eigenschaften organischer π -Systeme. Diese Verbindungen wurden sowohl mit quantenchemischen Verfahren als auch Quanten-Monte-Carlo-(QMC)-Ansätzen analysiert. In den letzten 15 Jahren entstand eine Reihe von Arbeiten, in denen der Quantencharakter der Kerne bei der Berechnung spektroskopischer Daten (NMR, EPR,

PE, UV-vis) explizit berücksichtigt wird. Quantenchemische Erwartungswerte hängen hier sowohl von der Temperatur als auch von den Atommassen ab. Auf Basis quantenstatistischer Überlegungen entstanden Arbeiten, die sich mit der Definition der Eigenschaft „Aromatizität“ beschäftigen ebenso ein Ansatz, der Supraleitung als direkten elektronischen Paarungsmechanismus beschreibt. Im Arbeitskreis von Florian Müller-Plathe ist M. C. Böhm unter anderem an der Entwicklung reaktiver MD-Modelle zur Beschreibung von Polymerisations-Prozessen in Gegenwart von Oberflächen sowie MD-Studien von Nanosystemen beteiligt. Bei diesen Materialien interessiert die Änderung von Polymereigenschaften in Gegenwart von Nanoteilchen. Wie schon in Arbeiten vor über 20 Jahren versucht M. C. Böhm auch jetzt, quantenchemische Rechnungen an MD-Ansätze anzukoppeln. Im Fall von Kohlenstoff-Nanoröhren wurde zum Beispiel untersucht, welchen Einfluss eine Alternanz der Bindungen (elektronischer Input) auf die thermische Leitfähigkeit des Systems (Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik) hat. Studien, in denen theoretische Methoden aus verschiedenen Gebieten kombiniert werden, finden nach wie vor das Interesse von M. C. Böhm. Dazu gehören auch laufende Arbeiten auf dem Gebiet der Nanoteilchen. Hier werden MD-Verfahren mit Methoden der Kontinuumsmechanik kombiniert, um makroskopische Materialeigenschaften mithilfe atomarer Informationen zu berechnen.

3.3.2 AK Müller-Plathe

Die Gruppe Müller-Plathe beschäftigt sich überwiegend mit molekularen Simulationen im Bereich weicher Materialien (Polymere, Nanoverbundmaterialien, Grenzflächenphänomene, Suspensionen, Flüssigkristalle, biologische Membranen, aber auch immer wieder einfache Flüssigkeiten, Kohlenstoffnanoröhren, etc.). Der Fokus verschiebt sich momentan von reinen Strukturmaterialien (d.h. der sprichwörtliche Plastikbecher) zu Funktionsmaterialien, die zusätzlich zur Strukturgebung weitere Funktionen wie Superhydrophobie, Leitfähigkeit, oder Stofftrennung übernehmen, oder deren Eigenschaften mittels externer Stimuli wie Licht, Temperatur oder elektrischen Feldern schaltbar sind.

Zu den anwendungsorientierten Rechnungen an bestimmten Systemen, die meist in Forschungsverbänden (Exzellenzcluster Center of Smart Interfaces, SFBs, Schwerpunktprogramme, LOEWE-, BMBF- und EU-Verbünde) erfolgen, kommt ein erheblicher Anteil Methoden-, Modell- und Software-Entwicklung. Dieser betrifft molekulardynamische Methoden, bzw. Varianten davon und liegt vor allem in drei Bereichen.

(i) Erzeugung systematisch vergrößerter Kraftfelder für Polymere und andere weiche Materialien. Hier werden vereinfachte Kraftfelder generiert, indem ca. 10 Atome zu größeren Einheiten, so genannten Superatomen zusammengefasst werden. Die Herausforderung besteht darin, dass diese Modelle trotz Vereinfachung immer noch wesentliche Eigenschaften des simulierten Polymers wiedergeben sollen. Dies ist möglich durch eine iterative Boltzmanninversion, die sicherstellt, dass

die vergrößerten Polymermodelle die gleichen Strukturverteilungen besitzen, wie detailliert atomistische Beschreibungen. Solche vergrößerten Modelle liegen inzwischen für ein gutes Dutzend Polymere im Bulk und in Lösung vor, ebenso für Dendrimere, Biopolymere (Cellulose), Graphit- und Nanoröhrenoberflächen, und diverse niedermolekulare Flüssigkeiten.

(ii) Methoden zur Beschreibung von Grenzflächen- und Interphasenphänomenen. Dazu gehören einerseits die Behandlung von Benetzung, z.B. neue Methoden zur Berechnung von Grenzflächenspannungen und Kontaktwinkeln, einschließlich dynamischer Kontaktwinkel, sowie Flüssigkeiten an Grenzflächen, die sich weit entfernt vom Gleichgewicht befinden („Tropfen auf der heißen Herdplatte“). Andererseits gehören hierher auch Methoden zur Analyse der molekularen Struktur und Morphologie von Polymerphasen an oder in der Nähe einer Grenzfläche. Es ist bekannt, dass Polymere auf den ersten Nanometern oder Mikrometern an einer Grenzfläche andere Eigenschaften haben als im Bulk. Die Untersuchung solcher Interphasen ist Ziel des am Lehrstuhl domizilierten DFG-Schwerpunkts 1369 „Polymer-Festkörperkontakte“.

(iii) Neue Verfahren zur Berechnung von Transportprozessen. Hier geht es um Stofftransport (Diffusion, Permeation, Auftrennung), Impulstransport (Viskosität) und Energietransport (Wärmeleitung). Vor allem so genannte Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik-Verfahren werden entwickelt, um Transportkoeffizienten effektiv berechnen zu können. Arbeiten der letzten Jahre bezogen sich beispielsweise auf die Thermodiffusion (Soret-Effekt) in Lösungen und die ungewöhnlichen Wärmeleiteigenschaften von Kohlenstoffnanoröhren, wie z.B. die Verletzung des Fourier-Gesetzes oder den thermischen Gleichrichtereffekt.

Zur Arbeitsgruppe Müller-Plathe gehört auch Dr. Frédéric Leroy, der sich mit Arbeiten zur statischen und dynamischen Benetzung habilitiert.

3.3.3 AK van der Vegt

Die Arbeitsgruppe Computergestützte Physikalische Chemie (Gruppe Van der Vegt) ist im Fachbereich Chemie angesiedelt. Sie ist Teil des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unterstützten Exzellenz-Clusters Smart Interfaces und wurde im März 2009 gegründet. Die Gruppe Van der Vegt beschäftigt sich mit molekularen Simulationen im Bereich komplexer Flüssigkeiten und Fest-Flüssig Grenzflächen. Untersucht werden Polymere in Lösung, Polyelektrolyte, wässrige Lösungen, spezifische Ioneneffekte, Solvatationsthermodynamik, Benetzung von (weichen) Polymeroberflächen, Wasser und hydratisierte Biomoleküle in Kontakt mit hydrophilen bspw. metallischen Oberflächen, funktionalisierte und schaltbare Oberflächen, Polyelektrolyte auf Mineraloberflächen, und Stofftransport in Polymermaterialien. Dazu werden sowohl atomistische Kraftfelder entwickelt als auch vergrößerte Kraftfelder auf Basis effektiver Wechselwirkungen zwischen Einheiten, die aus mehreren Atomen („Superatomen“) bestehen. Ein wichtiger Teil der Forschung bezieht sich auf Methoden- und Modell-Entwicklung im systemati-

schen Vergrößerungsverfahren, freie Energie-Berechnungen, und automatisierte Optimierung von Kraftfeldern für molekulare Wechselwirkungen an festen Oberflächen:

- *Modellentwicklung.* Die Arbeitsgruppe entwickelt atomistische und systematisch vergrößerte Kraftfelder für molekulare Flüssigkeiten, Flüssigkeitsmischungen, und Polymere. Der Fokus liegt auf der Entwicklung neuer Methoden zur systematischen Vergrößerung detaillierter (quantenchemischer und atomistischer) Systeme. Im Vordergrund steht die Genauigkeit mit der das vergrößerte Modell die Systemeigenschaften wie z.B. Strukturverteilungen beschreibt, die nicht in die Modellparametrisierung eingeflossen sind, sowie auch die Übertragbarkeit des Modells auf unterschiedliche chemische Systeme und thermodynamische Bedingungen. Die Weiterentwicklung systematischer Vergrößerungsmethoden ist erforderlich zur Modellierung schaltbarer makromolekularer Systeme, Strukturbildung und Selbstorganisation in Lösung, sowie auch zur Modellierung von (Bio)Polymeren in Kontakt mit festen Oberflächen, wobei Kraftfeldentwicklung basierend auf quantenchemischem Input eine wichtige Rolle spielt.

Zurzeit werden systematische Vergrößerungsansätze angewendet auf:

1. reine molekulare Flüssigkeiten und wässrige Lösungen von organischen Molekülen, Elektrolytlösungen, usw. Hier werden Methoden der Freien Energie-Berechnung und die thermodynamische Fluktuationstheorie für Mischungen benutzt.
 2. Wasser und organische Moleküle an fest-flüssig-Grenzflächen. Hierzu werden Kraftfeld-Modelle iterativ optimiert basierend auf quantenchemischen und klassischen Samplingmethoden.
- *Methodenentwicklung.*
 1. Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsmethoden zur Berechnung freier Energien in komplexen molekularen Systemen. Hier werden Methoden der thermodynamischen Störungstheorie mit optimierten Referenzzuständen sowie der thermodynamischen Integration (fast-growth TI) untersucht, um Systeme mit komplexen Energie-Oberflächen, zum Beispiel Additive in Polymermaterialien, zu untersuchen.
 2. Iterative quanten-klassische Optimierungsverfahren zur Entwicklung von Kraftfeldmodellen. Hier werden automatisierte Methoden zur Parametrisierung von Kraftfeld-Modellen für organische Moleküle, Polymere, und Flüssigkeiten in Kontakt mit festen Oberflächen entwickelt.
 3. Methoden zur Beschreibung der Dynamik mit vergrößerten Modellen.

3.3.4 AK Berger

Die Arbeitsgruppe Berger ist seit Oktober 2009 am Clemens-Schöpf-Institut der TU Darmstadt vertreten. Als Fellow des interdisziplinären Frankfurt Institute for Advanced Studies hatte Robert Berger, unterstützt von der VolkswagenStiftung, die Theoretische Chemie und Theoretische Molekülphysik übernommen. Gegenwärtig ist er mit dem FIAS weiterhin als Adjunct-Fellow verbunden. Nicht zuletzt aufgrund der geringen räumlichen Distanz zwischen Frankfurt und Darmstadt konnte die Umsiedlung des Teams an den neuen Standort ohne nennenswerte Probleme vollzogen werden.

Der Arbeitskreis Berger besitzt einerseits einen methodisch orientierten Schwerpunkt mit den Themen vibronische Strukturmethoden (implementiert im Programmpaket hotFCHT der Gruppe), relativistische und elektroschwache Quantenchemie, molekulare Eigenschaften sowie – als Teil einer Kooperation – Multiskalenmodellierung, mit den Gruppen Christian Holm (ehemals FIAS, nun Uni Stuttgart) und Luigi Delle Site (MPIP Mainz) als den Hauptakteuren. Andererseits widmet sich das Team Anwendungen im Bereich der Photophysik und -chemie, der theoretischen Spektroskopie, fundamentalen Wechselwirkungen, Katalyse und ionischen Flüssigkeiten.

Zum Teil werden diese Arbeiten im Rahmen von Teilprojekten in größeren Forschungsverbänden (Schwerpunktprogramm Ionische Flüssigkeiten gemeinsam mit Holm und Delle Site; Beilstein-Verbundprojekt NanoBiC gemeinsam mit Holthausen, Wagner, Terfort, Valenti, Jeschke, Huth) durchgeführt. Andere Projekte des Teams sind derzeit noch bilateraler Natur wie beispielsweise die NMR in anisotropen Medien gemeinsam mit Christina Thiele oder die komplexe Nichtlinearität und Nichtunitarität gemeinsam mit Dieter Schuch.

Das Team besteht derzeit aus Mitstreiterinnen und Mitstreitern aus Deutschland, Korea und Russland mit variierendem wissenschaftlichen Hintergrund (Chemie, Physik, Mathematik und Computerwissenschaften), die sich auf verschiedenen Stufen der wissenschaftlichen Tätigkeit befinden, angefangen von dem Diplomanden Sascha Brück über die Doktorandinnen und Doktoranden Sophie Nahrwold, Christian Jankowiak und Guido Laubender bis zu den Postdoktoranden Joon-suk Huh, Timur Isaev und Christian Krekeler. Verstärkt wird die Gruppe durch die Sekretärin Marianne Blascak sowie die technischen Mitarbeiterinnen in der Massenspektrometrie Christiane Rudolph und Gül Sahinalp.

Trotz des Wechsels von einem interdisziplinären Theorie-Institut zu einem „konventionellen“ Fachbereich Chemie konnte die Gruppe ihr breitgefächertes Spektrum im wesentlichen erhalten, und neue Teamkolleginnen und -kollegen aus verschiedenen Disziplinen und Staaten haben sich bereits angekündigt, um die erfrischend dynamische Atmosphäre im Team aufrecht zu erhalten.

3.4 Lehre

Die Theoretische Chemie existiert bis dato nicht als eigenständiges Fach im Rahmen des Chemiestudiums an der TU Darmstadt, sondern findet sich vielmehr als prominent wiederkehrendes Element in der Chemieausbildung wieder. Dennoch gibt es im Rahmen der Bachelorausbildung mit der Wahlpflichtveranstaltung „Computermethoden in der Chemie“, die gemeinsam von Müller-Plathe, van der Vegt und Berger gelesen wird, eine ausgewiesene Lehrveranstaltung der Theoretiker. Weniger theorieaffine Studierende belegen alternativ die Veranstaltung „Spezielle instrumentelle Analytik/Röntgenkurs“. Damit ist für einen Großteil der Studierenden die Theorie bereits auf Bachelorniveau sichtbar. Ansonsten finden sich theoretische Konzepte in Rahmen der Ausbildung in der Mathematik, Physikalischen Chemie und Organischen Chemie wieder. In Darmstadt hat man just in diesem Wintersemester das Studienkonzept durch Reduzierung von Interdependenzen flexibilisiert, sodass Erstsemesterstudierende auf die Anorganische Chemie, Organische Chemie und Physikalische Chemie verteilt werden können. Auf diese Weise hofft man, die Studierendenzahlen in den Bereichen etwas angleichen zu können. Ob dies aber den Preis der thematischen Isolierung der verschiedenen Lehrveranstaltungen rechtfertigen kann, muss sich erst beweisen. Im Masterstudiengang existiert ein reichhaltiges Vorlesungs- und Übungsangebot in der Theorie, welches formal teils der Physikalischen Chemie und teils der Organischen Chemie zugerechnet wird. Die Vorlesungen „Physikalische Chemie der weichen Materie“, „Statistische Mechanik“ und „Theoretische Chemie“ werden von der Physikalischen Chemie ausgerichtet, die Vorlesungen „Theoretische Organische Chemie“, „Quantenchemie I“ und „Quantenchemie II“ findet im Rahmen der Ausbildung in der Organischen Chemie statt. Dazu begleitend werden Arbeitskreispraktika als Element des Fortgeschrittenenpraktikums Organische Chemie durchgeführt. Damit ist es heute schon möglich, durch geschickte Kombination von Veranstaltungen ein weitgehend theoriezentriertes Chemie-Masterstudium an der TU Darmstadt zu absolvieren.

Das langfristige Ziel ist es, die Theoretische Chemie als eigenständige Säule im Masterprogramm zu verankern. Bisher wird eher ein evolutionärer Weg zur Modifizierung der Lehre beschritten, aber das *Theoriewerk* an der TU Darmstadt wird seinen Beitrag dazu leisten, eine dauerhafte Verankerung Theoretischer Chemie im Curriculum zu bewirken.

<http://www.chemie.tu-darmstadt.de/tw>

Michael C. Böhm, Florian Müller-Plathe, Nico van der Vegt und Robert Berger

4 Nachrichten

4.1 Klatsch und Tratsch

Prof. Dr. Bernd Engels, Julius-Maximilians-Universität Würzburg, ist vom bayrischen Wissenschaftsministerium mit dem mit 5000 Euro dotierten „Preis für gute Lehre an Universitäten“ ausgezeichnet worden.

Prof. Dr. Gernot Frenking, Universität Marburg, ist vom Lise Meitner Minerva Center for Computational Quantum Chemistry der Hebräische Universität Jerusalem mit dem „Lise-Meitner-Lectureship Award 2011“ ausgezeichnet worden.

Prof. Dr. Peter Schwerdtfeger, Massey Universität, Auckland, Neuseeland, ist mit dem Humboldt-Forschungspreis der Alexander-von-Humboldt-Stiftung ausgezeichnet worden. Des Weiterem wurde ihm von der Asia-Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists (APATCC) die „Fukui Medal“ verliehen.

5 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

5.1 Tagungen 2011

International Conference on Computational Science (ICCS 2011),
Nanyang Technological University, Singapur, 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

RSC Theoretical Chemistry Group Conference 2011, University of Nottingham, Großbritannien, 27. – 29. Juni 2011

besley.chem.nottingham.ac.uk/RSC/index.html

DFT and beyond: Hands-on Tutorial Workshop 2011, Berlin, 12. – 21. Juli 2011

www.fhi-berlin.mpg.de/th/Meetings/DFT-workshop-Berlin2011/index.php

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, 21. – 25. August 2011

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

5.2 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, Joel Eaves, Casey Hynes, 25 – 30 Juni 2012

<http://www.colorado.edu/chemistry/icqc2012/>

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

5.3 Hinweise auf weitere Tagungskalender

Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie

www.theochem.de/agt.c.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