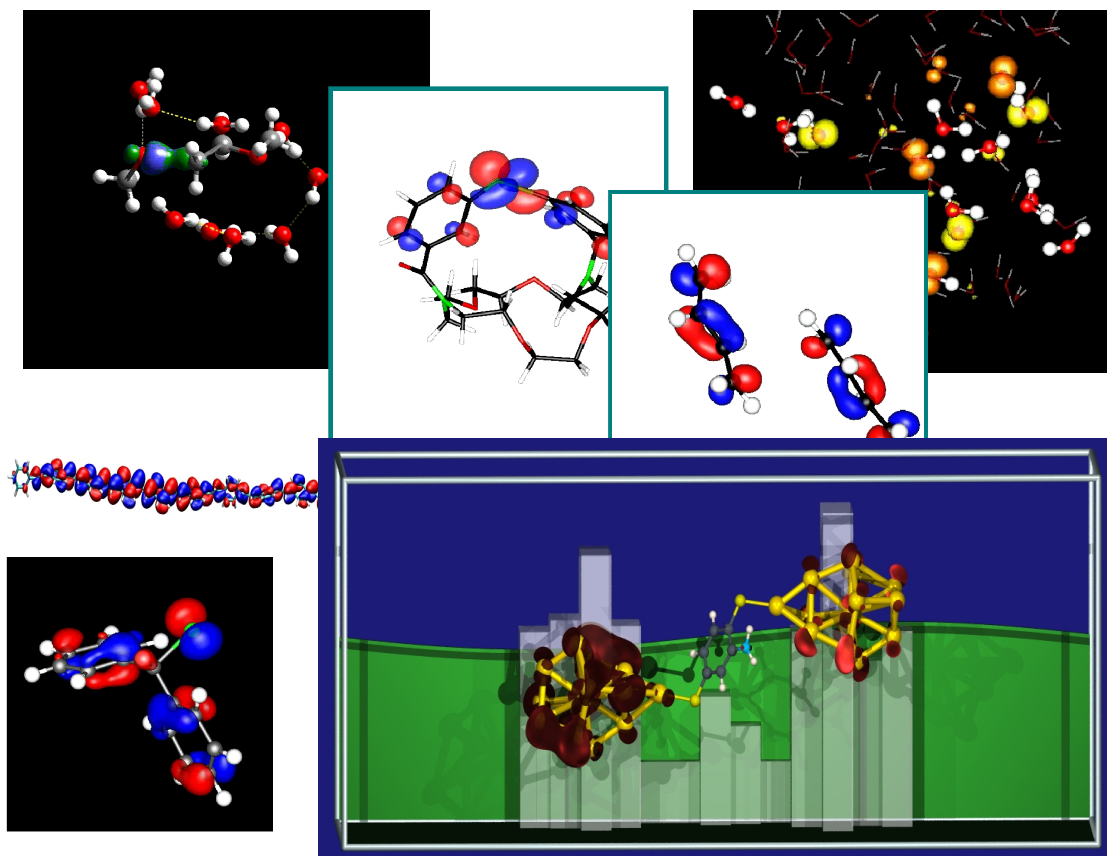


Info
Theoretische Chemie
November 2011



1 Inhaltsangabe

Inhalt:

Editorial	Seite	3
Theoretische Chemie an der Leibniz-Universität Hannover	Seite	4
47th Symposium on Theoretical Chemistry 2011	Seite	11
Hellmann Preis 2011	Seite	27
Mitgliederversammlung der AGTC	Seite	30
Nachrichten	Seite	34
Tagungsvorschau	Seite	36
Mitteilungen der DFG	Seite	39

2 Editorial

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

wir bedanken uns recht herzlich für die eingesendeten Beiträge. Dies ist das letzte INFO TC, das von unseren Gruppen betreut wird. Prof. Saalfrank ist für die nächsten Ausgaben verantwortlich. Schicken Sie aktuelle Meldungen für die Rubriken Klatsch und Tratsch, Tagungsankündigungen, Stellenanzeigen und sonstige Beiträge in Zukunft bitte an peter.saalfrank@uni-potsdam.de.

Mühlheim an der Ruhr und Bonn, im November 2011

Frank Neese und Thomas Bredow

Impressum:

Prof. Dr. Frank Neese¹ und Prof. Dr. Thomas Bredow²

¹ Max-Planck-Institut für Bioanorganische Chemie
Stiftstrasse 34-36, 45470 Mühlheim an der Ruhr

² Mulliken Center for Theoretical Chemistry,
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie,
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn,
Berlingstr. 4-6, 53115 Bonn

Redaktion: Dr. Werner Reckien und Dr. Christian Kollmar

3 Theoretische Chemie an der Leibniz-Universität Hannover

Die Theoretische Chemie hat in Hannover eine lange Tradition mit prominenten Vertretern wie Hans Hellmann. Dennoch wurde erst 1974 nach längerer Pause wieder eine Professur für Theoretische Chemie eingerichtet. Diese hatte ab 1975 Karl Jug inne. Sein Name ist insbesondere mit dem Lehrbuch 'Mathematik in der Chemie', das zu den Standardwerken für Chemiker gehört, sowie mit der semiempirischen Methode SINDO verbunden. SINDO zeichnet sich durch eine breite Parametrisierung und die Anwendbarkeit sowohl auf Moleküle als auch auf Festkörper aus. Entwicklung und Anwendung der Methode wurden auch nach dem Ausscheiden von Karl Jug im Jahr 2004 noch von Thomas Bredow fortgeführt. Dieser hatte bis 2006 eine Privatdozentur inne, bevor er nach Bonn berufen wurde. Die Theoretische Chemie wurde dann 2008 mit Irmgard Frank wieder neu besetzt.

3.1 Forschung

Die Arbeitsgruppe Frank beschäftigt sich mit der Simulation chemischer Reaktionen. Idealerweise ist das Ziel, ein molekulares System unter bestimmten Bedingungen (Temperatur, Druck, etc.) zu konstruieren und dann darin Reaktionen direkt zu beobachten. Die Methodik, die hierbei zum Einsatz kommt, ist Car-Parrinello-Moleküldynamik (CPMD, [1]), oder, genereller, First-Principles-Moleküldynamik unter Verwendung des CPMD-Codes [2]. Der Ansatz besteht darin, die elektronische Struktur mit Dichtefunktionaltheorie zu behandeln, während die Kerne klassisch bewegt werden. Da für jeden einzelnen Zeitschritt (typischerweise im Bereich von 0.1 bis 1 Femtosekunden) die Kohn-Sham-Gleichungen gelöst werden müssen, ist der Rechenaufwand sehr hoch. Die gute Programmierung und insbesondere die ausgezeichnete Parallelisierung des CPMD-Codes ermöglichen allerdings einen sehr effizienten Einsatz auf Clustern, auch auf Höchstleistungsrechnern. Die volle Leistungsfähigkeit von CPMD kann man auf dem Gebiet der Simulation von Reaktionen ausnutzen, wo Phänomene auftreten, die mit klassischer Moleküldynamik allenfalls teilweise beschrieben werden. Die Schwierigkeit dieser Simulationen liegt in der geeigneten Konstruktion hochreaktiver Systeme, um auf der Pikosekundenzeitskala tatsächlich Bindungsbrüche, Bindungsbildungen oder Elektronentransfers zu beobachten. Einerseits darf das System nicht zu reaktiv sein, da zu Beginn der Simulation nach Möglichkeit eine gute Äquilibration durchgeführt werden sollte. Andererseits besteht die Gefahr, Systeme aufzusetzen, die auch nach vielen Monaten Simulationszeit noch keine Reaktion zeigen, so dass man ein Resultat erhält, für das eine deutlich weniger aufwändige Rechnung mit klassischer Moleküldynamik auch ausgereicht hätte. Es bedarf einiger Übung,

bis man ein Gefühl dafür bekommt, wie ein geeignetes Simulationsprotokoll auszusehen hat. Wenn es dann tatsächlich gelungen ist, eine Reaktion zu beobachten, muss in geeigneter Weise Statistik erzeugt werden. Schon kleine Änderungen der Anfangsbedingungen können unter Umständen zu einem völlig anderen Reaktionsverlauf und eventuell anderen Reaktionsprodukten führen. Da es unmöglich (und auch unsinnig) ist, den gesamten Konfigurationsraum aus Anfangsgeometrien und Anfangsgeschwindigkeiten abzutesten, muss eine geeignete Auswahl getroffen werden, um die Chemie des Systems vernünftig abzubilden. Mit dem Dichtefunktionalansatz wird zumeist eine erstaunlich zuverlässige Information über den Mechanismus und die wichtigsten Reaktionsprodukte erhalten. Reaktionszeiten und Produktverteilungen können meist nur qualitativ beurteilt werden. Seit Jahren benutzt die Gruppe nach Möglichkeit durchgängig das BLYP-Funktional [3, 4], das in seiner Eigenschaft als GGA-Funktional ein einzigartig gutes Preis-Leistungsverhältnis besitzt. Höhere Genauigkeit könnte hier in Zukunft das genauere B3LYP-Funktional bieten, das aber aufgrund des Hartree-Fock-Austausches bei den verwendeten großen Plane-Wave-Basisätzen etwa zwei Größenordnungen teurer ist.

Nach der Art und Weise, wie die hochreaktiven Systeme erstellt werden, unterteilen sich die Projekte in Photochemie, mechanisch induzierte Chemie und reaktive Mischungen. In letzter Zeit werden zudem äußere Felder benutzt, um dynamische Phänomene in molekularen Systemen auszulösen.

3.1.1 Photoreaktionen

Zur Simulation von Photoreaktionen verwendet die Arbeitsgruppe Restricted-Open-Shell-Kohn-Sham-Theorie (ROKS) [5–7]. In Analogie zu den Restricted-Closed-Shell- und Unrestricted-Formalismen verwendet ROKS den einfachst möglichen Ansatz, um offenschalige Situationen zu beschreiben. Um Zustände mit korrektem Spin zu erhalten, muss die Kohn-Sham-Theorie dabei von einer Ein-Determinanten-Theorie auf eine Ein-Konfigurationen-, also Mehr-Determinanten-Theorie erweitert werden. Das resultierende SCF ist komplizierter, aber die Methode ist dennoch einfach und stabil genug, um viele tausend Punkte während einer Moleküldynamiksimulation weitgehend automatisch rechnen zu können. Wir untersuchen mit ROKS seit Jahren diverse kleinere Systeme (Aldehyde, Ketone, Polyene, Imine, Pyrrole). Dort, wo ein direkter Vergleich zum Experiment möglich ist, hat sich im Normalfall eine schöne, zum Teil auch sehr schöne Übereinstimmung sogar bei den Reaktionszeiten ergeben. Oftmals erweist sich dabei gar nicht die quantenchemische Methode, sondern vielmehr das Simulationsprotokoll als relevant. Die Berücksichtigung aller Kernfreiheitsgrade bei endlicher Temperatur, wie dies durch die Moleküldynamik geleistet wird, spielt offensichtlich gerade auch bei Photoreaktionen eine große Rolle. Dies gilt ganz besonders bei Reaktionen in Lösung (Fig. 1) oder auch bei Reaktionen in Biosystemen

(Rhodopsin, DNA).

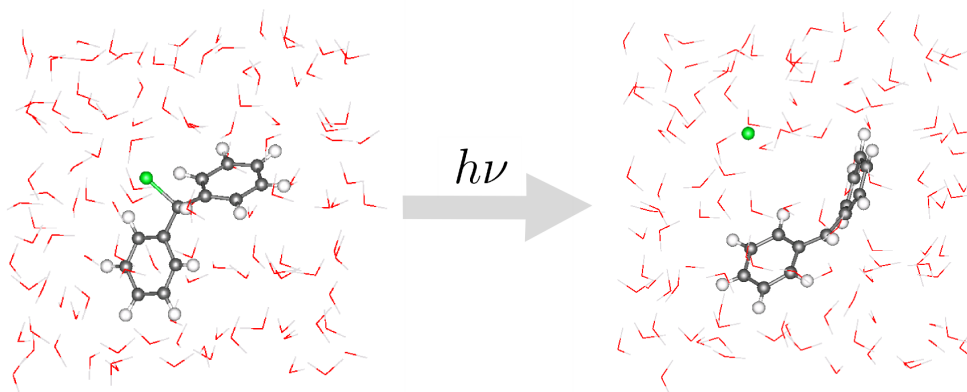


Abbildung 1: Diphenylmethylchlorid dissoziiert in der Gasphase in Radikale. Auch in wässriger Lösung werden im angeregten Zustand (ROKS-Simulation) zunächst Radikale gebildet. In der anschließenden Grundzustandssimulation (UKS-Simulation) kann ein Elektronentransfer beobachtet werden, der zur Bildung von Ionen führt.

3.1.2 Mechanisch induzierte Chemie

Die quantenmechanische Beschreibung von chemischen Reaktionen, die durch mechanische Belastung ausgelöst werden, ist in neuerer Zeit besonders durch AFM-Einzelmolekül-Experimente interessant geworden. Diese Experimente erlauben es, die Kräfte zu messen, die zum Bruch einer einzelnen chemischen Bindung benötigt werden. Neuerdings ist es auch möglich, gezielt komplexere Reaktionen auszulösen. Die eleganteste Art der theoretischen Beschreibung solcher Prozesse ist reaktive Moleküldynamik, und besonders Car-Parrinello-Moleküldynamik erweist sich hier als hervorragend geeignet. Die genaue Beschreibung mit Moleküldynamik ist in diesem Bereich besonders wichtig, da zumeist viele Freiheitsgrade involviert sind, die durch die mechanische Belastung in verschiedener Art beeinflusst werden. Es zeigt sich, dass viele Faktoren die Abrißkräfte und auch die Reaktionsprodukte beeinflussen können. Hierzu zählen insbesondere die Zuggeschwindigkeit und die chemische Umgebung der relevanten Bindung. In Simulationen an verschiedenen Systemen konnten die wesentlichen Reaktionsmechanismen herausgearbeitet werden, die unter mechanischer Belastung von Bedeutung sind. An einem Benzocyclobutenderivat (Fig. 2) konnte demonstriert werden,

wie durch mechanische Belastung die Woodward-Hoffmann-Regeln außer Kraft gesetzt werden können.

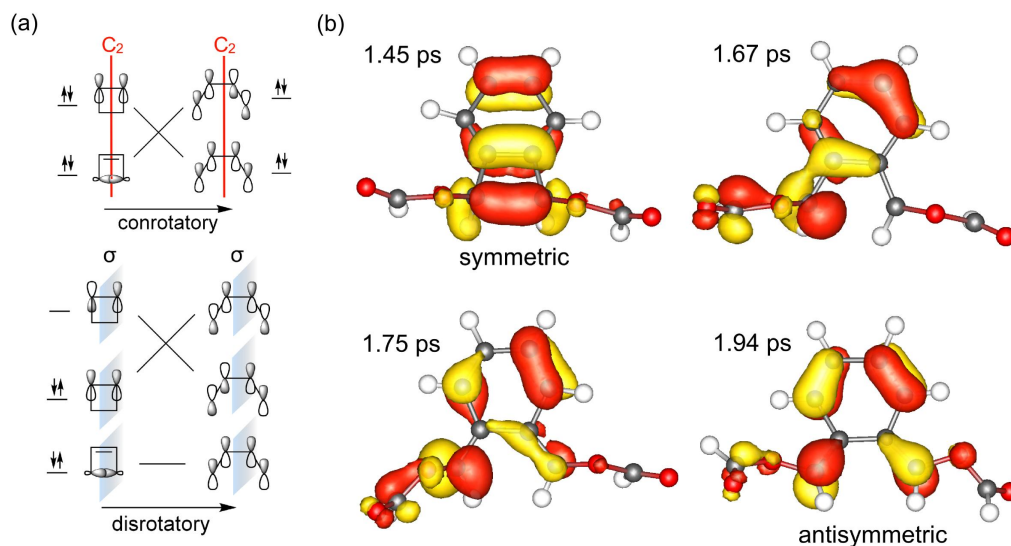


Abbildung 2: a) Woodward-Hoffmann-Regeln für Cyclobuten. b) Unter mechanischer Belastung können die Grenzorbitale in Benzocyclobuten lokalisieren und dadurch die Woodward-Hoffmann-Regeln umgangen werden (CPMD/BLYP-Simulation). Dadurch sind unter Zugspannung sowohl die kon- als auch die disrotatorische Ringöffnung möglich. (J. Friedrichs, M. Lüßmann and I. Frank, *ChemPhysChem*, 11, 3339 (2010))

3.1.3 Reaktive Mischungen

Chemische Reaktionen können natürlich auch in einfacher Weise durch das Zusammengeben von zwei Reaktionspartnern ausgelöst werden. Dies läßt sich ebenfalls mit Car-Parrinello-Moleküldynamik simulieren. Im Gegensatz zu Photoreaktionen oder mechanisch induzierten Reaktionen, wo der Zeitpunkt der Reaktion durch die Anregung bzw. die mechanische Belastung zumeist gut gesteuert werden kann, bedarf es im Fall von reaktiven Mischungen einiger Erfahrung, geeignete Systeme zu konstruieren. Bei bimolekularen Reaktionen spielt oft die Entropie eine große Rolle, da eine ganz bestimmte Anordnung notwendig ist, um die Reaktion stattfinden zu lassen. Selbst bei einer kleinen energetischen Barriere kann dies zu langen Simulationszeiten führen. Die Möglichkeit, den Zeitpunkt genauer festzulegen, zu dem eine Reaktion beginnt, besteht zum Beispiel durch Variation der Temperatur oder Einschränkung der Geometrie während der Äquilibrierungsphase. Elektrochemische Reaktionen können durch Änderung der Zahl der Elektronen im System nach der Äquilibrierung simuliert werden. Mit diesem

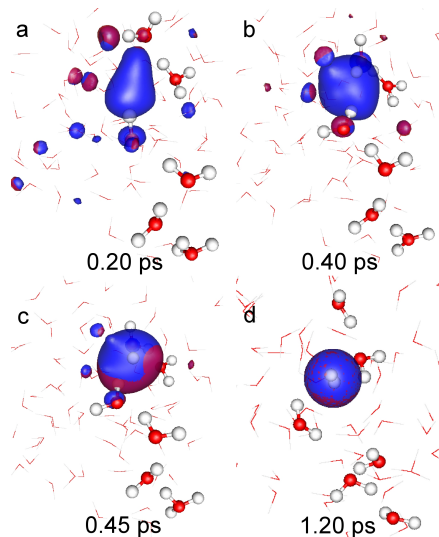


Abbildung 3: Bildung von molekularem Wasserstoff unter elektrochemischen Bedingungen (CPMD/BLYP-Simulation). Die Orbitale der beiden überschüssigen Elektronen sind blau und rot dargestellt. Im Laufe der Reaktion lokalisieren sie auf zwei Wasserstoffatomen, die in Folge konsekutiver Protontransfers ein Molekül bilden. (F. Hofbauer and I. Frank, Chem. Eur. J., accepted (2011))

sehr einfachen Ansatz konnten die anodische Bildung von molekularem Sauerstoff und die kathodische Bildung von molekularem Wasserstoff (Fig. 3) bei der Wasserelektrolyse gezeigt werden.

3.1.4 Äußere Felder

Auch durch das Anlegen äußerer Felder können chemische Reaktionen ausgelöst werden. Speziell Elektronen- und Ionenwanderungen können unter solchen Bedingungen beobachtet werden. Ein äußeres Potential kann in einfacher Weise zu der Kohn-Sham-Energie addiert werden, allerdings stellt sich die Frage, wie dies bei Verwendung von periodischen Randbedingungen in der Praxis konkret zu realisieren ist. Ein lineares Potential würde zu schwer handhabbaren Sprüngen führen. Wir benutzen daher ein sinusförmiges Potential. Die Implementierung erlaubt verschiedene Möglichkeiten, dieses äußere Potential orts- und zeitabhängig zu variieren. In ersten Rechnungen wurde beispielsweise die Ionenwanderung in einem Zeolithen und den Elektronentransfer entlang eines Einzelmolekülkontakts (Fig. 4) untersucht.

3.2 Lehre

In der Lehre bietet die Theoretische Chemie in Hannover die Vorlesungen Quantenchemie I - III an. Quantenchemie I und II bilden zusammen ein Wahlmodul im

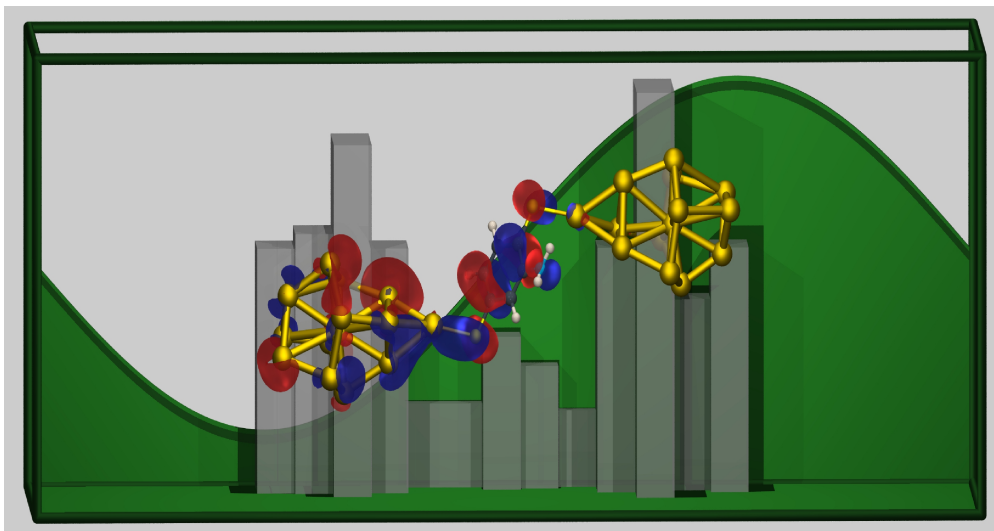


Abbildung 4: Einzelmolekülkontakt zwischen zwei Goldclustern in einem sinusförmigen Feld. Im Bereich des verbindenden Aromaten ist das Feld näherungsweise linear. Die negative Ladung bewegt sich vorwiegend entlang des aromatischen Systems (grau: Elektronenverteilung entlang der Verbindung).

Bachelorstudiengang Chemie. In der ersten Vorlesung im Wintersemester werden die Grundlagen der Quantenmechanik und die dafür benötigten mathematischen Voraussetzungen behandelt sowie auf Einteilchenprobleme (Teilchen im Kasten, Harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom) angewendet. In Zusammenhang mit dem Wasserstoffatom werden die Drehimpulsoperatoren sowie dann, unter Verwendung von Leiteroperatoren, der Spin eingeführt. Mit dem Pauliprinzip wird der Übergang zur Vielteilchentheorie geschaffen. Die Vorlesung, die durch Übungen ergänzt wird, baut auf der Physikalischen Chemie II auf und vertieft sie. In Quantenchemie II werden Slaterdeterminanten und ihre Erwartungswerte behandelt und Hartree-Fock-Theorie abgeleitet. Davon ausgehend werden semiempirische Methoden, Störungstheorie und Konfigurationswechselwirkung eingeführt. Im Masterstudiengang 'Material- und Nanowissenschaften' wird die Vorlesung Quantenchemie III angeboten, in der Dichtefunktionaltheorie (Funktionalvariation, Thomas-Fermi-Theorie, Hohenberg-Kohn-Theoreme, Kohn-Sham-Theorie, Dichtefunktionale) und Moleküldynamik behandelt werden. Die Vorlesung bildet zusammen mit einem Programmierpraktikum (Fortran) ein Wahlmodul. Zusätzlich zu diesen Veranstaltungen der Theoretischen Chemie wird zusammen mit der Anorganischen Chemie die Veranstaltung Computational Chemistry (Vorlesung und Blockpraktikum) in den beiden Masterstudiengängen 'Material- und Nanowissenschaften' sowie 'Wirk- und Naturstoffchemie' angeboten. Darin wird die praktische Anwendung von Computerchemieprogrammen eingeübt und es werden ansatzweise die Möglichkeiten und Grenzen theoretischer Methoden diskutiert.

In dieser Pflichtveranstaltung für alle Studenten der beiden Masterstudiengänge wird auch hier nur Physikalische Chemie II vorausgesetzt, also keine speziellen theoretischen Vorkenntnisse. Eine weitere Vertiefung ist möglich in einem Schwerpunktspraktikum in der Arbeitsgruppe. Insgesamt bietet sich für Studenten die Möglichkeit im Bachelor- und in den Masterstudiengängen einen großen Teil der Bandbreite der Theoretischen Chemie kennenzulernen: Mathematischer Hintergrund, physikalische Grundlagen, Methodenentwicklung, Programmierung und Anwendung.

Literatur

- [1] R. Car und M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **55**, 2471 (1985).
- [2] CPMD, Version 3.13, J. Hutter et al., <http://www.cpmc.org/>, Copyright IBM Corp 1990-2008, Copyright MPI für Festkörperforschung Stuttgart 1997-2001.
- [3] A. D. Becke, Phys. Rev. A **38**, 3098 (1988).
- [4] C. Lee, W. Yang und R. G. Parr, Phys. Rev. B **37**, 785 (1988).
- [5] I. Frank, J. Hutter, D. Marx und M. Parrinello, J. Chem. Phys. **108**, 4060 (1998).
- [6] S. Grimm, C. Nonnenberg und I. Frank, J. Chem. Phys. **119**, 11574 (2003).
- [7] J. Friedrichs, K. Damianos und I. Frank, Chem. Phys. **347**, 17 (2008).
- [8] M. Schulte und I. Frank, Chem. Phys. **373**, 283 (2010).

4 47th Symposium for Theoretical Chemistry

Introduction

The 47th Symposium for Theoretical Chemistry (STC 2011) took place in Switzerland in August 2011. The conference site was Campus Sursee near Lake Sempach in the beautiful Swiss countryside. The modern conference center (Fig. 1) offered comfortable accommodation for the 211 participants.



Abbildung 1: The conference center: Campus Sursee, Switzerland.

The conference was devoted to theoretical and computational methods for the design of molecules and materials with specific properties and functionality at a molecular level. It brought together experts with a background in quantum chemistry and molecular dynamics. Relevant areas of method development and applications were discussed in 39 lectures in 13 sessions. There were also two poster sessions with a total of 141 posters (Fig. 4), where the participants presented their research. Toru Shiozaki, Axel Schild and Udo Benedikt were awarded prizes for their posters (Fig. 5). Topics covered molecular properties, catalysis, molecular electronics and materials design, among others. The Hellmann Award 2011, whose winner is traditionally announced at the STC, was given to Daniel Sebastiani. He was honored for his contributions to the theoretical characterization of structure and dynamics in disordered supramolecular systems (Fig. 6). In addition to the scientific program there was an excursion to mount Pilatus on the third conference day from where one could take in the marvelous view over the Alps and Lucerne (Fig. 2). Also the conference dinner, on the boat ‘Wilhelm Tell’ in Lucerne Harbor, was a good occasion for stimulating discussions. The conference was sponsored by IBM, the Swiss National Science Foundation, the Swiss Chemical Society, Novartis, Syngenta, Merck Serono, Roche, BASF and the Swiss Academy of Sciences. Support came also from Campus Sursee, Wiley-VCH and Eichhof. In the following sections a detailed overview on all sessions and talks will be given.

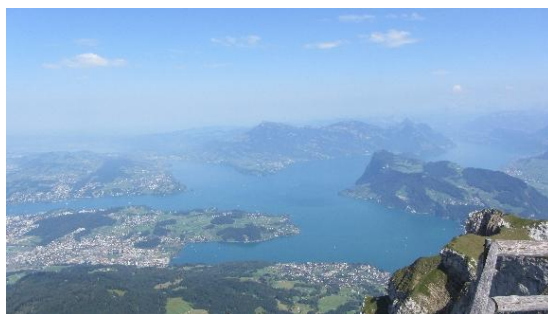


Abbildung 2: Impressions from the excursion: View from Mount Pilatus across Lake Lucerne.

Session 1

Starting with a welcome and a short introduction by Markus Reiher, the organizer of the conference and chairman of the first session, the meeting opened with the experimental keynote lecture by **François Diederich**, ETH Zürich. His talk ‘Opto-Electronic Organic Materials by Novel Acetylene Chemistry’ reported novel compounds with opto-electronic properties which were recently synthesized in his laboratory. In the first part of his talk, he illustrated that macro-cyclization of di-*tert*-butyl-diethynylallene building blocks yielded conformationally stable, all-carbon macro-cycles which show strong absorption intensities in circular dichroism (CD) spectra and a pronounced Cotton effect. Spectra of these compounds could be reproduced by semi-empirical ZINDO calculations. In the second part allenacetylenic oligomers were introduced which show strong chiroptical effects. He obtained an unprecedented ‘amplification of chirality’ in electronic CD spectra which Diederich rationalized with a helical superstructure that can be adopted with these acyclic compounds. In the last part, electronic ‘super acceptors’ were introduced which had been obtained by a formal [2+2] cycloaddition and successive retro-cyclization of donor-substituted alkynes and electron-accepting olefins. These D- π -A chromophores exhibit efficient intramolecular charge transfer (CT) with absorption bands expanding far into the near infrared and show high third-order optical nonlinearities. Reproduction of properties and spectra of such novel compounds is a challenge for theory, and the lecture was followed by a lively discussion on properties of the compounds presented like conformational flexibility and on molecular features which determine the extraordinary non-linear optical properties.

The second talk was given by **David N. Beratan**, Duke University (Durham, NC), on ‘Theoretical Guidance for Chemical Synthesis’. The question Beratan addressed in his talk was how to design new molecules by theory. Most of the vast chemical space is as yet unexplored and new strategies to discover molecular structure with optimal properties are needed. The methods Beratan outlined were the variation of the molecular Hamiltonian and the variation of the ex-

ternal potential to generate molecules with distinct properties. He lectured on diversity-oriented molecular libraries as a representation of molecular space. A broad sampling and a map of structure to chemical functionality is necessary here. Evolutionary algorithms can be a solution to create molecular diversity and to sample molecular space.



Abbildung 3: Coffee break between the lectures.

Session 2

The second session which covered new methodological developments in density functional theory (DFT), started on Monday morning with the talk by **Alàn Aspuru-Guzik**, Harvard University (Cambridge), on ‘Approaches for the Simulation of Open Quantum Systems and Quantum Computation with Time-Dependent Density Functional Theory’. As an introduction to the topic, Aspuru-Guzik stated that every quantum system interacts with its environment. Therefore, simulation of molecular systems as energy-conserving, closed quantum mechanical objects is an idealization. Hence, most of the conventional approaches cannot exhibit relaxation or dissipation dynamics. Aspuru-Guzik recently developed a framework for simulating the time-evolution of an open quantum system utilizing an auxiliary closed Kohn-Sham system evolving under a unitary propagation. He presented a linear-response time-dependent DFT (TDDFT) approach which incorporates both effects via a Görling-Levy type perturbative formalism developed in his group. Aspuru-Guzik’s final remarks were on a description of the connection between TDDFT and quantum-computing.

Lucas Visscher, VU University Amsterdam, reported on ‘A Subsystem Approach for the Quantum Mechanical Description of Large Biomolecules’. One approach to describe large (bio)molecules quantum mechanically is to use chemical knowledge and treat a macromolecule and molecules with which it interacts as a set of well-defined subsystems which are calculated individually. The speaker reported on the coupling between the subsystems that is based on the frozen-density embedding method. Here the total density in a DFT calculation is constructed by

adding the subsystem densities. Visscher reviewed that this approach works well for organic molecules and biomolecules but transition-metal complexes prove to be difficult. The exact reproduction of the density and thus the accuracy of the description is dependent on the kinetic energy functional, which he demonstrated at the example of the ArAuF molecule. Moreover, he discussed a partitioning scheme for biomolecules.

‘Unambiguous Optimization of Effective Potentials in Finite Basis Sets’ was the title of **Christoph R. Jacob’s** (Karlsruhe Institute of Technology) presentation. As an introduction to the topic Jacob explained that, given an electronic target density $\rho_0(\vec{r})$, numerical procedures for reconstructing the local potential $v_s(\rho_0)(\vec{r})$ that yield $\rho_0(\vec{r})$ as its ground state density are important for fundamental developments in DFT and subsystem DFT (e.g. within the frozen-density embedding schemes). The introduction of a finite basis set turns this into an ill-posed problem because multiple v_s can yield the same ρ_0 . In his talk he presented a new approach to the optimized effective potential problem. He showed that it unambiguously selects the potential, also within an infinite basis set, and thus systematically approaches the exact numerical solution. It is also numerically stable and allows for independent variation of orbital and potential basis set. Unphysical oscillations of the potential could be overcome by regularization of the density in the Lagrangian with a parameterized penalty function.

Session 3

Session 3 chaired by *Johannes Neugebauer*, Technical University of Braunschweig, was devoted to bio-molecular simulations. **Wilfred van Gunsteren**, ETH Zurich, lectured on ‘Methodological Advances in the Computation of Relative Free Energies’. Van Gunsteren started by pointing out that free energy is the central quantity in the computer simulation of the dynamics of bio-molecular systems. Relative free energies are computable but there are limits for time and spatial scale due to finite computing capabilities. After a short review of available methods for free energy difference calculations with thermodynamic integration (TI) as a benchmark, van Gunsteren reported on the so-called enveloping distribution sampling (EDS) method developed recently in his group. EDS can rapidly compute many free energies from a single simulation or find paths between different states of a system. The influence of the two parameters (energy offset and smoothness parameter) which are important for the performance was demonstrated and many examples on performance and applications were shown. Van Gunsteren stated that EDS is faster than TI and the accuracy is comparable to TI so it can become a standard method for the computation of free energies.

Brian Kuhlman, University of North Carolina at Chapel Hill, reported on the ‘Computational Design of Protein Structures and Interfaces’. The challenging topic of protein design requires the identification of low energy conformations and sequences. The approach Kuhlman followed is based on iterating sequence

design and structure refinement using the Rosetta program. He presented three different design studies. Starting with the redesign of a protein core to have zero sequence identity with the starting protein he continued with the design of a novel binding conformation for a protein binding peptide. The *de novo* design of symmetric homodimers was achieved by metal mediated protein-protein interactions. In most cases close agreement between design and experimental structures was found. Kuhlman concluded that a comparison between failed and successful designs shows that, while the design and refinement of hydrophobic interactions are often successful, the design of novel hydrogen bond networks is still challenging and often fails. The lecture ended with an impressive example of a redesigned photo-activable protein which worked as a photo-switch in living cells.

The following talk was given by **Milan Ončák**, Institute of Chemical Technology (Prague), with the title ‘Modeling the UV Absorption Spectra in Solution Using the Path Integral Molecular Dynamics’. The speaker started with an introduction on molecular spectroscopy and the problems with simulating spectra for highly anharmonic flexible systems. His approach for calculations of spectra is to use path integral molecular dynamics (PIMD) techniques. UV absorption and photoionization spectra are modeled with the reflection principle approximation and PIMD sampling of the ground state combined with various quantum chemical methods. After this introduction the speaker presented two case studies to demonstrate the capabilities of this approach. The experimental absorption and photoelectron spectra of liquid water can be reproduced. Theoretical analysis of the experimental photoionization spectra of hydrogen peroxide in water helped to determine the structure of the solvated species.



Abbildung 4: The scene at a busy Wednesday poster session.

Session 4

Christian Ochsenfeld, University of Munich, chaired the fourth session which started with a lecture on ‘The Well-Tempered Ensemble’ by **Michele Parrinello**,

ETH Zurich and Università della Svizzera Italiana. As already mentioned by van Gunsteren, sampling of complex systems is one of the most important issues in molecular dynamics simulations. To improve the sampling Parrinello introduced well-tempered metadynamics. Parrinello demonstrated that at intermediate scaling factors the average energy is close to its canonical value but fluctuations are strongly enhanced which can be used to enhance sampling, especially in combination with parallel tempering. Collective variables are chosen to represent the desired movement. With a recently developed re-weighting scheme canonical ensemble averages can be recovered. In the last part of the talk he showed how the dimension of the collective variables could be reduced by projection on a lower dimensional space for better visualization.

Philippe H. Hünenberger's (ETH Zurich) talk on 'The Representation of Ions, a Challenge for Classical Simulations' started with an emphasis on the importance of ions as ubiquitous species in nature and common targets or participants in classical simulation studies concerning (bio)molecular systems. Unfortunately, due to the long-range nature and large magnitude of the Coulomb interaction, accurately representing the electrostatic interactions between charged species and their solvation properties is a true challenge. For force-field parameterization, as was pointed out by the speaker, there is a lack of unambiguous experimental thermodynamical data. An intrinsic solvation free energy (ΔG_{solv}^0) would be needed for chemical purposes. Single-ion solvation free energies are determined in reference to $\Delta G_{\text{solv}}^0(H^+)$ which is only known within the range of 1050 – 1100 kJ/mol. Predicting $\Delta G_{\text{solv}}^0(H^+)$ from theory is difficult, too. The Born model is inaccurate and molecular dynamic (MD) simulations fail because the system sizes are too small. Finally, P-sum and M-sum methods were discussed where he made clear that the M-sum method is the method of choice and which yields an estimate of $\Delta G_{\text{solv}}^0(H^+) = 1100$ kcal/mol, based on MD simulations with different ion radii.

O. Anatole von Lilienfeld, Argonne National Laboratory (Illinois), closed the first afternoon session with his lecture entitled 'From Electronic Structure Theory to Rational Compound Design'. Referring to the lecture given by D. Beratan in the very first session, he introduced the topic of computational design of compounds and the screening of chemical compound space. He stressed that there exists no analytical map between compound space and property space. In the next part of his lecture he discussed DFT-based property derivatives in chemical compound space, which are necessary to describe properties that can only be calculated from first principles. In this context, he mentioned the alchemical potentials which is used to calculate the response of the system to changes in atom type. In the final part he showed how machine learning can be used to rapidly predict molecular potential energies.

Session 5

The last session of the day, chaired by *Michael Hanrath*, University of Cologne, covered methodological developments for DFT and TDDFT for excited states. It started with a talk by **Paul W. Ayers**, McMaster University (Canada) on ‘Two-Point Weighted Density Approximations for the Kinetic Energy and Exchange-Correlation Energy’. The concept that Ayers explained is that many problems in DFT can be mitigated by carefully designing an exchange-correlation hole with the proper mathematical properties. The solution he presented is a generalized and extended version of the weighted density approximation (WDA). Here the exchange hole is constructed from the uniform electron gas and also correlation is introduced. Ayers showed that the new WDA functional works well for the kinetic energy, exchange energy, and exchange-correlation energy. It is also able to deal with fractionally occupied sites and is variationally stable compared to, e.g., kinetic energy functionals (H_2 dissociation is correctly described with WDA). The method is costly but the speaker presented algorithms using a limited-memory quasi-Newton method which render the method comparable to other modern methods.

In the following talk **Andreas Dreuw**, Ruprecht-Karls University Heidelberg, presented ‘Quantum Chemical Methods for Electronic Excited States of Large Molecules: From TDDFT to ADC’. The speaker started by discussing linear response TDDFT as one of the current standard methods to study excited states. However, TDDFT has problems in particular with charge transfer (CT) states where excitations are predicted too low in energy and unphysical asymptotic behavior with respect to the distance coordinate can also be observed. TDDFT results are also sensitive to the proportion of exact exchange. To overcome these problems, Dreuw introduced a long-range exact-exchange-corrected potential and an orbital-overlap-dependent empirical energy shift. In the second part of his talk he reported on the algebraic diagrammatic construction scheme of second order (ADC(2)) which is a wavefunction-based method that correctly handles double excitations and CT. He presented a recently implemented unrestricted ADC scheme, which allows for calculation of medium sized radicals with an error of ~ 0.3 eV, and a local ADC(2) scheme.

The next talk was delivered by **Mathias Nest**, Technical University of Munich, on ‘TDDFT as a Tool for Coherent Control of Valence Electrons’. Nest began by noting that TDDFT as he applies it is not considered in the linear response frame but to describe the real-time dynamics of many electron systems. A recent challenge, he explained, is the combination of TDDFT with quantum control theory. He then compared TDDFT and time-dependent CI approaches to achieve various control tasks like switching the dipole moment of a molecule by state-to-state transitions or creating an electronic wave packet. Whereas the frequencies and amplitudes are reproduced well for wave packets, state-to-state transitions (single electron excitation) are a challenge. Interestingly, the TDDFT results

turned out to be independent of the functional chosen.

The last presentation on Monday was given by **Tobias Schwabe**, Aarhus University, on ‘Environmental Effects on Electronic Excitations: Recent Advances for the Polarizable Embedding Method’. To understand environmental effects on electronic excitation properties in large systems, Schwabe presented a hybrid QM/MM approach as an efficient way to apply sophisticated electronic structure methods. He introduced polarizable embedding as an accurate method to describe the interface between the two regions. The performance was demonstrated at the example of acrolein in water. The method also works well for solvents other than water.



Abbildung 5: The award winners of the poster prizes together with the organizer of the conference.

Session 6

The study of chemical problems and bonding situations was the topic of the morning session on Tuesday which was opened by chairman *Martin Kaupp* from the Technical University of Berlin. The first lecture by **Paul Geerlings**, Free University of Brussels, entitled ‘Conceptual Density Functional Theory’ gave a short introduction to general density functional theory and then proceeded to his main topic. He discussed the role of the energy functional derivatives of the type $\partial^n E / \delta v^m \partial N^{m'}$, which can be identified as properties like chemical hardness. After that Geerlings pointed out the chemical relevance of the mixed third order derivatives and gave examples such as the dual descriptor as a guide for a density-only interpretation of the Woodward-Hoffmann rules. In the last part of his talk the emphasis was on the linear response function and its relevance in quantifying inductive and mesomeric effects and also aromaticity.

After this lecture, **Gernot Frenking** from the Philipps-University Marburg continued with a talk on ‘Donor-Acceptor Complexes of Main-Group Elements with Unusual Bonds’. In the first part of his talk a new class of molecules was discussed that features enhanced donor-acceptor interactions due to their separation

by spacers. As an example, he described a compound where Xe and BF_3 are separated by a C_6F_4 group. In this compound, the Xe-C bond is unusually short and the bond order is almost one. In the second part he focused on divalent $\text{E}(0)$ compounds EL_2 of group-14 elements ($\text{E} = \text{C} - \text{Pb}$), where L is a σ -donor ligand. In particular, he discussed carbones ($\text{E} = \text{C}$) and the case of carbon suboxide, which is bent at the central C atom with an angle of 156° . The heavier homologues in the same group were also discussed. He then continued in the third part with the group-13 ($\text{E} = \text{B} - \text{Tl}$) and group-15 ($\text{E} = \text{N} - \text{Bi}$) homologues.

The sixth session ended with a talk by **Stefan Knecht**, University of Southern Denmark (Odense), on ‘The Nature of Chemical Bonding in *f*-Elements: U_2 Revisited with Full Treatment of Spin-Orbit Coupling’. He started with an introduction to the 2005 bonding picture of the U_2 molecule, in which the calculated effective bond order is five. After a short presentation of the DIRAC program and its components he outlined the computational approach leading to the 2005 bonding picture. This approach included scalar relativistic effects with a second-order Douglas-Kroll-Hess Hamiltonian and treated spin-orbit coupling *a posteriori* through a spin-orbit state-interaction approach. Applying the recently developed MCSCF code, which allows the use of both 4-component relativistic Hamiltonians as well as the 2-component one-step X2C Hamiltonian, he found a different result for the bond order. He closed his talk stating that not only is the variational treatment of spin-orbit coupling important in the case of U_2 , but a large active space is also necessary to obtain the correct picture.

Session 7

Chairman *Max Holthausen*, Frankfurt University, led the audience through the second morning session on Tuesday. It started with a lecture by **Sason Shaik** from the Hebrew University of Jerusalem entitled ‘Reactivity Patterns of Bond Activation by Metal Oxo Complexes’. In his talk about bio-inorganic reactivity Shaik first described the application of valence bond (VB) theory to bio-inorganic chemistry, using as an example the reactivity of the iron-oxo species of Cytochrome P450 in H-abstraction, sulfoxidation, aromatic hydroxylation and double-bond epoxidation. He also described the way by which VB theory creates order and makes predictions in this complex field. The second part of his lecture concerned the oxy complexes of Myoglobin and Hemoglobin and their bonding features, which were first outlined in 1936 and have remained disputed for 75 years. He illustrated then how VB theory resolves the dispute by transforming the CASSCF wave function to a VB wave function, which shows clearly the bonding mechanism of O_2 to the ferrous heme complex including a negative charge on the O_2 molecule as it was predicted by Weiss. Finally, he argued that VB theory and the VB reading of complex multi-reference wave functions is a fruitful future paradigm in the field.

Franziska Schoenebeck, ETH Zurich, lectured on ‘Catalysis from a Computa-

tional Perspective'. She emphasized the importance of a detailed understanding of catalytic transformations for the design of better catalysts. For the example of Pd catalyzed transmetallations she illustrated how computational chemistry was applied to gain insights into reaction mechanisms, active catalytic species, ligand and additive effects of selected metal-catalyzed transformations. She showed that the different selectivity of a Suzuki coupling reaction in various solvents can be explained by different active species of the catalyst. As a second example she mentioned a Stille-type reaction and the role of the binuclear Pd(I)-Pd(I) precatalyst. Her studies revealed that the precatalyst disproportionates into a Pd(0) and Pd(II), where the former is the catalytically active species. Schoenebeck concluded explaining how computational results and experimental studies can be combined to develop improved applications in catalysis.

The talk held by **Hélène Bolvin** from the University Paul Sabatier Toulouse was on 'Magnetic Properties of Sandwich Complexes of Lanthanides and Actinides'. After an introduction on single-molecule magnets, she presented her work on the magnetic properties of sandwich complexes with lanthanide and actinide atoms. Examples were $[\text{Np}(\text{COT})_2]$ and $[\text{Tb}(\text{pc})_2]^-$, which both show hysteresis. The calculations on these complexes were performed by changing both the nature of the central ion and of the ligand in order to understand the physical mechanisms that determine the crystal field parameters and consequently the ground state. It was found that the nature of the ground state depends strongly on the nature of the sandwich complex ligands.

Session 8

The eighth session started with the announcement of the Hellmann Award winner of 2011 **Daniel Sebastiani**, Free University of Berlin, by chairman *Jürgen Gauss*, Johannes Gutenberg University Mainz. After receiving the award Daniel Sebastiani presented his lecture on 'Theoretische Chemie ungeordneter Systeme: Die Herausforderungen der strukturellen Komplexität', which was delivered in German. In his talk he discussed the theory and applications of computational approaches to disordered systems, touching a wide range of topics, from theoretical spectroscopy and general density functional theory to nuclear quantum effects (proton momentum distribution), supramolecular systems, liquids, solutions and finally protonation in proteins.



Abbildung 6: The Hellmann Award winner of 2011, Daniel Sebastiani (right), and chairman Jürgen Gauss (left).

Afterwards, **Trond Saue** from the University Paul Sabatier Toulouse talked about ‘4-Component Relativistic Calculations of the Magnetically Induced Current Density in Aromatic Systems’. After a short definition of the current density and how it is calculated in theoretical chemistry, he focused on the magnetically induced ring current density, which is a property closely related to the aromaticity of molecular systems. Saue reported on the first implementation of the calculation of magnetically induced ring current density in a 4-component relativistic framework, including the recent extension to gauge including atomic orbitals and the calculation of individual orbital contributions.

Closely related to the talk of Trond Saue was the talk given by **Dage Sundholm** from the University of Helsinki. He lectured on the ‘Calculation of Magnetically Induced Current Densities for Designing Molecular Functionality’. In his introduction Sundholm stated that the magnetically induced current strengths are not only used as aromaticity indicators, but also for providing information about molecular electron and spin transport properties. Diatropic strong ring currents are an indicator of aromaticity, such as for benzene, and paratropic strong ring currents indicate anti-aromaticity like in cyclobutadiene. The applications he discussed were Hückel and also Möbius aromatic compounds like 16-annulene, coronene and circumcoronene as graphene models, polycyclic anti-aromatic hydrocarbons and hydrocarbon nanorings. He closed his lecture with a perspective on molecular conductivity and spintronics as applications.

Session 9

The ninth session of the STC 2011 was led by chairman *Robert Berger*, Technical University of Darmstadt. The opening lecture was held by **Jochen Autschbach** from the State University of New York at Buffalo with the title ‘Calculating and Analyzing Response Properties’. He gave a brief overview of methods for calculating electric and magnetic response properties of molecules in the framework of

DFT and discussed various applications at the example of androstadienone and a Co complex. Among the response properties he discussed were magnetic resonance parameters, optical activity, magnetizability, dynamic polarizability and some higher order properties. The analysis of such properties in terms of local or orbital contributions can be useful for the design of new materials.

The lecture was followed by another one on molecular properties delivered by **Kenneth Ruud** from the University of Tromsø. He entitled his lecture ‘Relativistic Calculations of Molecular Properties’. In the talk, a quasi-energy derivative formalism for self-consistent field approaches (including Kohn-Sham density-functional theory) for calculating molecular properties using two- and four-component relativistic wave functions was discussed. Various aspects related to recent improvements such as the evaluation of corrections due to the dependence of the basis sets on the applied perturbations or the evaluation of two-electron integrals using restricted kinetic or magnetic balance was given. In the applications part, he focused on the higher-order molecular properties and on properties that involve structural or magnetic perturbations, such as NMR and EPR parameters, nonlinear birefringence as well as relativistic calculations of Raman Optical Activity Spectra.

The session was closed by **Christoph van Wüllen** from the TU Kaiserslautern with a talk about ‘Density Functional Calculation of Zero Field Splittings—Towards a Consistent Theory’. After an introduction to the topic of zero field splittings the speaker explained how these splittings and the **D** tensor (one of the Spin-Hamiltonian parameters) can be calculated in DFT, which resolved discrepancies existing in the recent literature. Christoph van Wüllen lucidly explained to the audience the problem and how it can be solved.

Session 10

The first afternoon session on Wednesday was chaired by *Peter Botschwina* from the University of Göttingen and had an emphasis on the calculation of molecular properties. The session started with a lecture on coupled cluster theory given by **Hans-Joachim Werner** from the University of Stuttgart entitled ‘Explicitly Correlated Local Coupled-Cluster Methods for Large Molecules’. In the first part he reviewed explicitly correlated local coupled-cluster methods for closed- and open-shell systems as implemented in MOLPRO. He presented two ways to span the virtual orbital space: By orbital specific virtuals or by projected atomic orbitals. The impact of these local approximations was discussed in detail. Werner identified the simplified treatment of weak and distant electron pairs in the local approximations. To reach the intrinsic accuracy of the method, the classes of strong and close pairs (explicitly treated in LCCSD) must be larger than it was previously assumed. In the end he illustrated his statements with benchmark applications which demonstrated that results of near CCSD(T)/CBS quality can be obtained for molecules with up to 90 atoms and over 2600 basis functions.

Antonio Rizzo from the CNR in Pisa continued with a lecture on ‘Nonlinear Spectroscopies and Chirality’. He started with an introduction to nonlinear properties and external fields mentioning many effects which can be measured spectroscopically. He then introduced the audience to the two photon circular dichroism spectroscopy which is the nonlinear analogue to electronic CD spectroscopy. Rizzo then explained how the corresponding spectra can be calculated based on a modern analytical response theory, within a TDDFT approach. After illustrating the techniques with some examples he also discussed other nonlinear optical properties exhibited by chiral assemblies like the excited state electronic CD and pump-probe chiral spectroscopies.

The session ended with a lecture given by **T. Daniel Crawford** from Virginia Tech with the title ‘Through the Looking Glass and What the Quantum Chemist Found There’ also on chiral spectroscopy. In his talk Crawford introduced the audience to property tensors and optical activity. He then demonstrated how these tensors can be calculated employing coupled cluster theory. Using the examples of carvone and norbornenone, he illustrated the methods by analyzing different influences like vibrations, solvent and liquid phase effects. Then he discussed Gauge invariance on coupled cluster response theory. At the end of his lecture he talked about the calculation of optical rotation, electronic CD and vibrational Raman optical activity.

Session 11

The last session on Wednesday, chaired by *Irmgard Frank* from the University of Hannover started with a lecture held by **Haibin Su** from the Nanyang Technological University in Singapore entitled ‘Versatile Character of Carbon’. After an introduction to carbon nanotubes and fullerenes and two fascinating hybrid structures of them—peapod and NanoBuds—Su described the reaction dynamics of C₆₀ dimerization and the more challenging complex tubular fullerene formation process in the peapod structures. Both DFT and the recently developed Reactive Force Field (ReaxFF) were applied. In the second part Su presented a study of electron transport employing non-equilibrium Green’s function theory. The last part of the lecture was on optics in nanotubes. He discussed excitation effects calculated employing first-principles Green’s function theory and the GW approximation.

Following Haibin Su, **Gemma C. Solomon**, University of Copenhagen, gave a talk on ‘Describing Local Currents in Molecular Electronic Transport’. To introduce the topic she pointed out that local descriptions are a cornerstone in understanding the properties of a system. She then presented her research on electron transport through single molecules bound between two metallic electrodes. A Green’s function description for local currents is utilized to map out these parts of the molecule that participate in coherent electron transport. With this methodology she discussed σ - and π -transport. The latter usually does not

result in substantial electron transport because destructive interference induced by cyclic π -systems hinder π -transport. This results in the unexpected behavior of π -stacking systems, where reduced orbital overlap leads to an increasing transmission. She accompanied this with the theoretical design of mechanically activated molecular switches where the orbital overlap controls the transmission. The last talk of the session was given by **Carmen Herrmann**, University of Hamburg. In her talk with the title ‘Designing Molecular Spintronic Devices in the Coherent Tunneling Regime’ Herrmann presented her research on spin transport through single molecules to understand and design spintronic devices. This emerging topic is important for biological processes and nanotechnology, for example, for heatless information transport. DFT and the Green’s function techniques are used to describe transport. With this methodology she showed examples of *ortho*- or *para*-substituted benzenes as organic spin filters and demonstrated that one can determine whether the electron tunnels through the iron center or through the porphyrin in a heme junction. In both cases the transport properties can be influenced by the choice of ligands or heme substituents.

Session 12

The first session of the last conference day was chaired by *Christel Marian*, Heinrich Heine University of Düsseldorf, and covered methodological developments in DFT and wavefunction methods. She introduced **Stefan Grimme**, University of Münster, as the first speaker who gave his talk on the ‘Importance of London Dispersion Interactions for Chemical Functions’. In his introduction, Grimme stated that London dispersion interaction is a many-particle electron correlation effect which is not covered by standard approximate density functionals over long- and medium-range. Although representing only a small effect per individual atom, they can be substantial for larger systems as Grimme illustrated with several examples. As a solution to this problem he presented his dispersion correction to standard DFT (with DFT-D3 as the most recent variant) which corrects the medium- to long-range behavior of most modern density functionals. The improvement on thermochemical data was demonstrated with his GMTKN30 testset and 45+ different density functionals. Then the speaker introduced dispersion energy donors as a concept for the stabilization of large molecules, presented a binuclear Rhodium complex with huge dispersion effects, and discussed the hexaphenylethane riddle. Finally he showed the activation of small molecules by so-called frustrated Lewis pairs concluding that dispersion interactions are omnipresent and cannot be omitted for larger systems.

In the next presentation **Roland Lindh**, University of Uppsala, addressed ‘Analytic CD Gradients for HF, DFT, MP2 and CASSCF’. He presented the implementation of Cholesky Decomposition (CD) analytic gradients for the above mentioned methods. Lindh started by introducing the CD approach. He showed that the separate treatment of the effective two-particle density matrices in connection

with the Coulomb, exchange and active space terms of the 2-center and 3-center two-electron integral derivatives is the key to an efficient implementation. The performance was illustrated with examples that showed that the Coulomb part performs very well, whereas the exchange part is not significantly faster. Lindh concluded that the method is fast, robust and automatically applicable for any method.

The session ended with the talk of **Martin Korth**, MPI for Coal Research (Mülheim an der Ruhr), who reported on ‘Third-Generation Hydrogen-Bonding Corrections for Semiempirical QM Methods and Force Fields’. For large biomolecules, extensive sampling is required which calls for fast methods like semiempirical QM (SQM) methods. The speaker presented a hydrogen-bond correction scheme for the poor performance of non-covalent interactions in SQM methods. This third generation correction scheme relies on an energy correction which is dependent on the hydrogen bond donor, the acceptor strength and a geometry factor. The geometry factor is symmetric with respect to donor and acceptor in the third generation. The speaker demonstrated the improved performance for AM1, PM6, OM3 and SCC-DFTB and force field methods for standard benchmarks. He emphasized that SQM methods will be improved for many applications like docking or scoring and can reach the accuracy of DFT-D in certain cases.

Session 13

The thirteenth and last session, which covered theoretical bio-inorganic chemistry, was chaired by *Hans Martin Senn*, University of Glasgow. **Walter Thiel**, MPI for Coal Research (Mülheim an der Ruhr) opened the session with his talk on ‘Theoretical Studies of Enzymatic Reactions’. The speaker started with a theoretical and methodological review on the QM/MM method which is the method of choice to study large molecules like enzymes or other biomolecules. He then introduced a three layer approach (QM/MM/continuum solvent) which is currently being developed in his group as possible improvement to the standard QM/MM approach. Generalized solvent boundary potential and solvated macromolecule boundary potential methods were introduced as three layer approaches and are implemented in ChemShell. He showed that the energetics of reactions with charge transfer can be influenced by the third layer. In the second part of the talk Thiel described recent work on biocatalysis by enzymes, namely on the Lewis acid/base mechanism of aldehyde oxidoreductase and on the role and structure of the cofactor in xanthine oxidase. Both demonstrated that QM/MM calculations can give detailed and accurate insights into biocatalysis. Finally he discussed the case of *P. aeruginosa* lipase modified by directed evolution to increase enantioselectivity. With the help of MD and QM/MM calculations the important mutations could be identified and a less strongly mutated form was suggested which turned out to be as enantioselective as the variant obtained with directed evolution.

In the second talk of the session **Claudio Greco**, Humboldt University of Berlin, lectured about ‘New Perspectives for the Computation of Electronic and Vibrational Properties in Metalloproteins: The Case of [FeFe] Hydrogenase’. [FeFe] hydrogenases, are the most efficient hydrogen evolving enzymes and thus understanding their mechanism is of great interest. The speaker first presented a study where IR spectra of different active site models and oxidation states were calculated with DFT and compared to experimental spectroscopic results. 32 experimentally known model clusters were investigated to calibrate the methods, and reproduce the experimental results. Furthermore he reported on QM/MM calculations where, in addition to the active site’s H-cluster, two Fe₄S₄ cubanes were included into the QM part. Insight into oxidation states of the active site and the interplay between the cubanes could be captured in these calculations. In the last part of the talk the connection to the experimental design of biomimetic complexes was established.

The last presentation of the conference was the talk of **Matthias Stein**, MPI for Dynamics of Complex Technical Systems, Magdeburg, which was related to Claudio Greco’s talk. ‘Structural and Functional Mimics of Hydrogenase’ was the title. The speaker presented a theoretical study on cluster models of the [NiFe] hydrogenase’s active site. From calculation of EPR spectra and comparison to experiments, hints on the identity of the ligands were obtained. Then, he reported DFT studies of two biomimetic models of [FeFe] hydrogenase. For a structural active site model, calculations assisted in the spectral assignments to elucidate the conformation of the complex. From the obtained structure the speaker concluded that an azadithiolate ligand is also the ligand present in the natural enzyme. The second model complex was a functional model for which Stein studied a reaction mechanism which can aid the design of further monoiron functional models of the [FeFe] hydrogenase’s active site.

Moritz P. Haag and Arndt R. Finkelmann
ETH Zurich, Switzerland

5 Hellmann Preis 2011

Wie so häufig stellte auch in diesem Jahr die Verleihung des Hellmann-Preises den Höhepunkt des Symposiums für Theoretische Chemie dar. Nach PD Dr. Andreas Köhn ging der diesjährige Preis mit PD Dr. Daniel Sebastiani an einen ausgewiesenen Vertreter für ungeordnete supramolekulare Systeme. Der Tradition folgend möchte ich an dieser Stelle den Preisträger kurz vorstellen.



PD Dr. Daniel Sebastiani

Daniel Sebastiani hat zuerst in Karlsruhe und danach an der ENS Lyon Physik studiert. Anschliessend hat er unter der Leitung von Prof. Michele Parrinello am Max-Planck Institut für Festkörperforschung seine Doktorarbeit angefertigt. In dieser Arbeit beschäftigte er sich mit der Entwicklung einer neuen Methode zur Berechnung magnetische Suszeptibilitäten sowie der chemischen Verschiebung in der Kernspinresonanz für periodische Systeme. Neben dem bekannten Eichursprungsproblem muß für periodische Systeme zusätzlich das Problem des nicht definierten Positionoperators explizit behandelt werden, da andernfalls der gestörte Hamiltonoperator, der das Magnetfeld repräsentiert, keine Periodizität aufweist. Die dazu von Daniel Sebastiani vorgeschlagene Lösung (*J. Phys. Chem. A*, **105**, 1951 (2001)), basierend auf so genannten maximal lokalisierten Wannier-Orbitalen, ist wegweisend und wurde folglich mit der prestigeträchtigen Otto-Hahn Medaille der Max-Planck Gesellschaft ausgezeichnet.

Im Anschluss an seine Dissertation wechselte er als Gruppenleiter für rechnergestützte Chemie an das Max-Planck Institut für Polymerforschung, wo er sich der Gruppe für NMR-Spektroskopie von Prof. Hans W. Spiess anschloss. Seine wichtigsten wissenschaftlichen Beiträge, für die er mit dem diesjährigen Hellmannpreis ausgezeichnet wurde, sind in dieser Zeit entstanden und werden im

folgenden kurz umrissen. Nach seiner Habilitation im Fach Physikalische Chemie wechselte er mit Hilfe des Heisenberg-Stipendiums der DFG an das Institut für Theoretische Physik der FU Berlin.

Daniel Sebastiani hat in zahlreichen Arbeiten dargelegt, wie die Theoretische Chemie durch die Kombination von Dichtefunktional-basierten Molekulardynamiksimulationen mit spektroskopischen Rechnungen einen Zugang zu strukturellen und dynamischen Fragestellungen in komplexen supramolekularen Systemen ermöglichen kann.

Diesbezüglich hat er Wege aufgezeigt, die Problematik der Ungenauigkeit bei der quantenchemischen Berechnung von Potentialflächen großer Systeme mit vielen konkurrierenden nichtkovalenten Wechselwirkungen sowie unter Berücksichtigung endlicher Temperatur anzugehen. Wie bereits erwähnt, gelingt dies einerseits durch den Rückgriff auf berechnete spektroskopische Größen, insbesondere aus der Magnetresonanz, die wesentlich sensibler auf kleine geometrische Änderungen reagieren als die Gesamtenergie. Andererseits hat Daniel Sebastiani durch die Entwicklung neuer Rechenmethoden, welche bei möglichst gleichbleibender Effizienz, um relevante Fragestellungen in Ihrer gesamten Komplexität zu erfassen, eine höhere Genauigkeit aufweisen quantitative Aussagen von ungeordneten supramolekularen Systemen ermöglicht.

Die Entwicklung neuer Methoden zur variationellen Optimierung von Dispersion-korrigierten Kernpotentialen (*Phys. Rev. Lett.* **93**, 153004 (2004), *J. Chem. Phys.* **122**, 014113 (2005)), sowie neuartigen Abschirmpotentialen im Zusammenhang mit QM/MM Simulationen (*J. Chem. Theory Comput.* **5**, 1490 (2010), *J. Chem. Theory Comput.* **7**, 1307 (2011)) sind zwei sehr repräsentative Beispiele für die methodische Arbeit des diesjährigen Preisträgers. In beiden Ansätzen wird versucht durch die Parametrisierung der Projektoren effektiver Kernpotentiale einerseits van der Waals Wechselwirkungen miteinzubeziehen und andererseits die Fehler durch ungesättigte QM Subsysteme zu minimieren, um dadurch auf äußerst effiziente Weise eine Genauigkeitserhöhung zu erreichen.

Beiden Lösungsvorschlägen gemein ist der Versuch die bestehende Problematik nicht durch ad-hoc Korrekturen, sondern durch physikalisch motivierte, elegante und meist auch sehr einfache Lösungsansätze zu beheben. Auf diese Weise ist es ihm gelungen seine Methoden direkt auf elektronische und insbesondere auf spektroskopische Messgrößen anzuwenden.

Mit Hilfe der von Ihm entwickelten Rechenmethoden konnte Daniel Sebastiani gleich in mehreren verschiedenen Anwendungsgebieten quantitativen Aussagen über die Struktur und Dynamik in sehr großen Systemen erzielen. Er hat auf diese Weise dazu beigetragen die Anwendungsfelder der Theoretischen Chemie entscheidend zu erweitern. Hierzu zählen insbesondere die Wasserstoffbrückendynamik in komplexen Flüssigkeiten und kondensierten amorphen Phasen, die Protonenleitung in Flüssigkeiten und Polymeren, aber auch supramolekulare Packungsphänomene in selbstorganisierenden Systemen aus dem Gebiet der molekularen Elektronik.

Mit seinem gleichzeitigen Fokus auf methodische Entwicklungen in der Theoretischen Chemie, und der Bearbeitung relevanter Fragestellungen im Grenzgebiet zwischen Physikalischer Chemie, Biophysik und Materialforschung, hat der Preisträger Daniel Sebastiani inzwischen national wie international ein großes Ansehen erlangt.

Thomas Kühne

6 Mitgliederversammlung der AGTC

6.1 Mitgliederversammlung

Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie beim 47. Symposium für Theoretische Chemie in Sursee

Beginn: 23.08.2011 17:50 Uhr

Ende: 23.08.2011 18:40 Uhr

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

Tagesordnung:

- 1) Genehmigung der Tagesordnung
- 2) Protokoll der Mitgliederversammlung 2010
- 3) Bericht des Vorstands
- 4) Kassenprüfung des Hellmann-Fonds 2010
- 5) Wahl des Kassenprüfers 2011
- 6) Wahlen zur Hellmann-Jury
- 7) STC 2012/2013
- 8) Verschiedenes

6.2 Protokoll

TOP 1

Die vorgeschlagene Tagesordnung wurde ohne Änderungen angenommen.

TOP 2

Das Protokoll der Mitgliederversammlung des 46. Symposiums für Theoretische Chemie in Münster am 29. September 2010 wurde im Info TC 11/2010 veröffentlicht. Nachdem es keine Einwände gab, wird es als genehmigt verabschiedet.

TOP 3

- 3.1 Der neue Vorstand hat sich im Juni konstituiert und im Juli seine Arbeit aufgenommen. Im Vorstand sind als gewählte Mitglieder Jürgen Gauß (Mainz), Stefan Grimme (Münster), Christel Marian (Düsseldorf), Dominik Marx (Bochum) und Christian Ochsenfeld (LMU München) vertreten sowie als Repräsentanten der GDCh und der DBG Gernot Frenking (Marburg) und Walter Thiel (MPI Mülheim). Die DPG plant im November Dominik Marx als ihren Vertreter zu benennen, bis dahin repräsentiert Michael Schreiber (Chemnitz) die DPG im Vorstand. Zum Sprecher wurde Jürgen Gauß bestimmt, Stellvertreter ist Stefan Grimme.
- 3.2 Die Zahl der Mitglieder der AGTC hat von 209 im Jahr 2009 auf 214 im Jahr 2010 leicht zugenommen. Allerdings ist bedauerlicherweise zu vermerken, dass erstmals Mitglieder aufgrund ausstehender Beitragszahlungen ausgeschlossen werden mussten.
- Nachwuchswissenschaftler und Nachwuchswissenschaftlerinnen im Bereich der Theoretischen Chemie werden weiterhin ermutigt der AGTC beizutreten.
- 3.3 Der Hellmann-Preis wurde erfreulicherweise auch in diesem Jahr verliehen. Es wäre wichtig, auch für das nächste Jahr geeignete Kandidaten / Kandidatinnen zu nominieren, da es besser ist, wenn die Jury aus einer Anzahl von Nominierungen auswählen kann als wenn kein geeigneter Kandidat gefunden werden kann. Die Chancen sind in der Regel nicht schlecht. Stichtag für die Nominierungen ist der 15.3.2012.
- 3.4 Erwähnt werden soll an dieser Stelle insbesondere, dass der Fonds der Chemischen Industrie dem Hellmann-Fonds einmalig eine Summe von 10.000,- Euro hat zukommen lassen. Dem Fonds wie auch allen beteiligten Hochschullehrern, die Fondsgelder für diesen Zweck zur Verfügung gestellt haben, wird an dieser Stelle herzlich gedankt.
- Der Hellmann-Fonds umfasst damit derzeit etwa 50.000,- Euro, dennoch ruft der Vorstand der AGTC zu weiteren Spenden (als Zustiftung) auf.
- 3.5 Die Jahresrückblicke 2011 werden in diesem Jahr von B. Kirchner (Leipzig), K. Reuter (TU München) und A. Köhn (Mainz) in den Nachrichten aus Chemie und Technik verfasst.
- 3.6 Die INFO-TC wird derzeit von Frank Neese und Thomas Bredow herausgegeben, Beiträge, wie z. B. die Vorstellung von Arbeitskreisen, sind erwünscht. Ab 2012 wird das INFO-TC von der Gruppe von Peter Saalfrank in Potsdam betreut.
- 3.7 Zur STC 2012 und 2013 siehe unten.

3.8 Die Zusammenarbeit mit der DBG und der GDCh stellt immer wieder ein Thema da. Es geht hier einerseits darum, Präsenz zu zeigen wie auch darum, Möglichkeiten zur Stellungnahme und Einflussnahme auszuschöpfen. Von beiden Gesellschaften wird mehr Sichtbarkeit gewünscht. Um dies zu konkretisieren: Die Bunsentagung wird nächstes Jahr in Leipzig stattfinden (Hauptthema: „Ionische Flüssigkeiten“), 2013 findet sie dann mit einem betont theoretischen Hauptthema „Theoretical Spectroscopy“ in Karlsruhe statt.

TOP 4

Herr F. Mark legt schriftlich, da er selbst an der MGV aus persönlichen Gründen nicht teilnehmen konnte, die Kassenberichte für die AGTC und für den Hellmann-Fonds für das Jahr 2010 vor. Moniert wird vom Vorstand, dass die Spende des Fonds der Chemischen Industrie von der DBG, welche die Konten verwaltet, nicht als Zustiftung aufgelistet wurde sowie, dass eine weitere Spende (Überschüsse der STC 2009) statt der AGTC irrtümlich von der DBG dem Hellmann-Fonds zugewiesen wurde.

Mit diesen beiden Änderungen werden die Kassenberichte angenommen.

TOP 5

Für seine Tätigkeit als Kassenprüfer in den letzten Jahren wird Herrn Mark Dank ausgesprochen. Der Vorsitzende schlägt vor, ihn auch für das Jahr 2011 mit der Aufgabe der Kassenprüfung zu vertrauen. Die Zustimmung erfolgt per Akklamation.

TOP 6

Für die Hellmann-Jury steht turnusgemäß eine Neuwahl eines Teils der Mitglieder an. Die Amtszeiten von Herrn Reiher (ETH Zürich), Herrn Blaha (Wien), Herrn Neese und Herrn Kaupp enden dieses Jahr, während die Amtszeiten von Herrn Dreuw, Frau de Vivie-Riedle und Herrn Saalfrank 2013 auslaufen.

In geheimer Wahl bestimmt die Mitgliederversammlung die folgenden Kollegen

F. Neese (MPI Mülheim)

M. Kaupp (TU Berlin)

P. Blaha (Wien)

H.P. Lüthi (ETH Zürich)

als Mitglieder der Hellmann-Jury. Alle vier nehmen die Wahl an und werden der Jury bis 2015 angehören.

TOP 7

7.1 Für die Organisation der STC 2012 konnte die Karlsruher Theoretische Chemie (Wim Klopper, Karin Fink, Florian Weigend) gewonnen werden. Die Tagung wird vom 23.9.-27.9.2012 in Karlsruhe stattfinden; das Thema wird „Electron Spin, Molecular Magnetism, and Relativity“ sein.

Die Tagung wurde kurz von Karin Fink vorgestellt; weitere Informationen finden sich im Internet unter www.ipc.kit.edu/stc2012/

7.2 Bezüglich des STC 2013 hat sich Herr Prof. Görling bereit erklärt, die Tagung in Erlangen zu organisieren.

7.3 Für das STC 2014 laufen die entsprechenden Gespräche derzeit noch.

TOP 8**Verschiedenes**

8.1 Zu erwähnen ist hier, dass dieses Jahr sowohl die Dirac-Medaille der WATOC als auch die Medaille der IAQMS an Nachwuchswissenschaftler aus Deutschland verliehen worden sind. Die Auszeichnung der WATOC ging an Leticia González (Jena), während die IAQMS Andreas Köhn (Mainz) auszeichnete.

8.2 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
- Xing (Administrator: Judith Rommel, AK J. Kästner, Stuttgart),
rommel@theochem.uni-stuttgart.de
www.xing.com/net/agtc

Mainz, den 23.10.2011

Prof. Dr. Jürgen Gauß

7 Nachrichten

7.1 Klatsch und Tratsch

Dr. Ingo Barth wurde 2011 für seine Dissertation „Quantum control of electron and nuclear circulations, ring currents, and induced magnetic fields in atoms, ions, and molecules by circularly polarized laser pulses“ (Freie Universität Berlin, 2009; jetzt am Max-Born-Institut Berlin) mit dem Wilhelm-Ostwald-Nachwuchs-Preis ausgezeichnet. Der Preis wird im zweijährigen Turnus gemeinsam von der Gesellschaft Deutscher Chemiker, der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie und der Wilhelm-Ostwald-Gesellschaft verliehen. Zuvor hatte er bereits den Carl-Ramsauer-Preis der Deutschen Physikalischen Gesellschaft zu Berlin für die beste Dissertation der Hochschulen Berlins und Potsdams erhalten. Dr. Barth ist der erste deutsche gehörlose promovierte Chemiker.

Prof. Dr. Irene Burghardt, Ecole Normale Nationale Supérieure Paris/Frankreich, hat einen Ruf an die Universität Frankfurt am Main auf eine Professur für Theoretische Chemie angenommen.

Prof. Dr. Leticia González, Universität Jena, ist mit der Dirac-Medaille 2011 der World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) ausgezeichnet worden.

Prof. Dr. Stefan Grimme, Universität Münster, hat zum 1. Oktober einen Ruf auf eine W3-Professur an die Universität Bonn angenommen.

Dr. Carmen Herrmann, Yale University New Haven/USA, hat einen Ruf auf eine W2-Professur an die Universität Hamburg angenommen.

PD Dr. Andreas Köhn, Universität Mainz, ist mit der Medaille der International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS) 2011 ausgezeichnet worden.

Prof. Dr. Frank Neese, Universität Bonn, hat zum 1. Juli eine Stelle als Direktor des Max-Planck-Instituts für Bioanorganische Chemie, Mühlheim angetreten.

Prof. Dr. Johannes Neugebauer, Universität Leiden/Niederlande, hat einen Ruf auf eine W2-Professur für Theoretische Chemie an der Technischen Universität Braunschweig angenommen.

Prof. Dr. Beate Paulus, hat einen Ruf auf eine W3-Professur an die Freie Universität Berlin (Nachfolge Jörn Manz) angenommen.

Prof. Dr. Sigrid Peyerimhoff, Universität Bonn, hat am 17.07.2011 von der Fakultät für Naturwissenschaften der Universität Ulm einen Ehrendoktor verliehen bekommen.

Dr. Tobias Schwabe, Universität Aarhus/Dänemark, hat einen Ruf an die Universität Hamburg auf eine Junior-Professur für Theoretische Chemie angenommen.

PD Dr. Sebastiani, Freie Universität Berlin, ist mit dem Hans G. A. Hellmann-Preis für Theoretische Chemie ausgezeichnet worden.

7.2 Neuigkeiten

Die Abteilungen der Theoretischen Chemie der Universität Bonn sind zum November 2011 umgezogen. Die neue Anschrift lautet:
Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Beringstraße 4-6, 53115 Bonn

8 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

8.1 Tagungen 2012

Workshop on Theoretical Chemistry, Explicitly Correlated Methods, Mariapfarr, Salzburg (Österreich), 14. – 17. Februar 2012

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

Advanced Methods and Applications in Quantum Chemistry, International SimTech-CECAM Workshop, Stuttgart, 26 – 30 März 2012

www.amaqc2012.org

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

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

Accurate Methods for Accurate Properties, International Conference in Celebration of the 60th Birthday of Peter Taylor, Zürich, Schweiz, 4. – 6. Juni 2012

www.oci.uzh.ch/diversa/petertaylor60/

ACHEMA 2012, Frankfurt a. M., 18 – 22. Juni 2012

www.Achema.de

14th International Congress of Quantum Chemistry (14th 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/>

Gordon Research Conference: Computational Chemistry, Mount Snow Resort, West Dover, USA, 22. – 27. Juli 2012

www.grc.org/programs.aspx?year=2012&program=compchem

48th Symposium on Theoretical Chemistry (STC 2012), Karlsruhe, 23. – 27. September 2012

www.ipc.kit.edu/stc2012/

DPG-Tagungen 2012:

(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

8.2 Tagungen 2013

GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2013, Darmstadt, 1. – 4. September 2013

www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen/tagungen-2013/wifo-2013.html

DPG-Tagungen 2013:

(www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2013.html)

DPG-Frühjahrstagung, Jena, 25. Februar – 1. März 2013

77. Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung, Dresden, 4. März – 8. März 2013

DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (u. a. Chemische Physik), Regensburg, 10. März – 15. März 2013

DPG-Frühjahrstagung der Sektion AMOP (u. a. Atomphysik, Molekülphysik), Hannover, 18. März – 22. März 2013

8.3 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/veranstaltungen/tagungen

Bunsen-Gesellschaft

www.bunsen.de

Konferenzdienst Mandl

www.conference-service.com

9 Mitteilungen der DFG

9.1 FK-Wahlen

Fachkollegienwahl 2011

Ihre Stimme für die Wissenschaft

Ende 2011 stehen die Mitglieder der Fachkollegien für die Amtsperiode 2012 bis 2015 zur Wahl.

www.dfg.de/dfg_profil/gremien/fachkollegien/fk_wahl2011/index.jsp

9.2 Modularisierung

Ab Mitte Oktober 2011 bietet die DFG mit ihrem überarbeiteten Merkblattportfolio einheitliche Möglichkeiten, Förderung für ihre Projekte passgenau zu beantragen, sich umfassend online auch anhand von neu strukturierten Formularen und Merkblättern zu informieren und zunächst in der Sachbeihilfe den Antrag elektronisch zu stellen.

www.dfg.de/foerderung/antragstellung/index.html



**Fachkollegienwahl
2011** **DFG**

Wählen Sie Ihre Vertreterinnen und Vertreter in die fachlichen Bewertungsgremien der Deutschen Forschungsgemeinschaft

vom **7. November 2011** (14 Uhr)

bis zum **5. Dezember 2011** (14 Uhr)

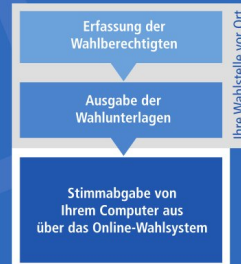
über das **Online-Wahlsystem**

Ihre Stimme für die Wissenschaft

► Wer darf wählen?

Alle promovierten Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die bei Wahlbeginn an einer Einrichtung forschen, die Wahlstelle der Fachkollegienwahl 2011 ist, oder als Einzelwählende erfasst sind.

► Wie kann ich wählen?



Ihre Wahlstelle		
RWTH Aachen	Universität Halle-Wittenberg	Universität Paderborn
Universität Augsburg	Universität Koblenz	Universität Passau
Universität Bamberg	Technische Universität Köln	Universität Potsdam
Universität Bayreuth	Technische Universität München	Universität Regensburg
Universität Bonn	Universität Bonn	Universität Rostock
Technische Universität Berlin	Universität Bonn	Universität des Saarlandes
Brandenburgische Technische Universität Cottbus	Technische Universität Braunschweig	Universität Siegen
Universität Chemnitz	Universität Chemnitz	Universität Stuttgart
Universität Duisburg-Essen	Universität Chemnitz	Universität Tübingen
Universität Erlangen-Nürnberg	Universität Chemnitz	Universität Ulm
Universität Gießen	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Sozialforschung (WZL)
Universität Göttingen	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Politikwissenschaft (WZP)
Universität Hamburg	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Sprachwissenschaft (WZS)
Technische Universität Hamburg	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Wirtschaftswissenschaften (WZW)
Heinrich Heine Universität Düsseldorf	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Konstanz	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Kassel	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Köln	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Leipzig	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Mainz	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Marburg	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Münster	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Nürnberg-Erlangen	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Oldenburg	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Osnabrück	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Regensburg	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Saarbrücken	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Salzburg	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Siegen	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Tübingen	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Universität Ulm	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Wissenschaftszentrum für Sozialforschung (WZL)	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Wissenschaftszentrum für Politikwissenschaft (WZP)	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Wissenschaftszentrum für Sprachwissenschaft (WZS)	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Wissenschaftszentrum für Wirtschaftswissenschaften (WZW)	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)
Wissenschaftszentrum für interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)	Universität Chemnitz	Wissenschaftszentrum für Interdisziplinäre Sozialwissenschaften (WZIS)

Alle Informationen zur Fachkollegienwahl im DFG-Wahlportal:
www.dfg.de/fk-wahl2011

