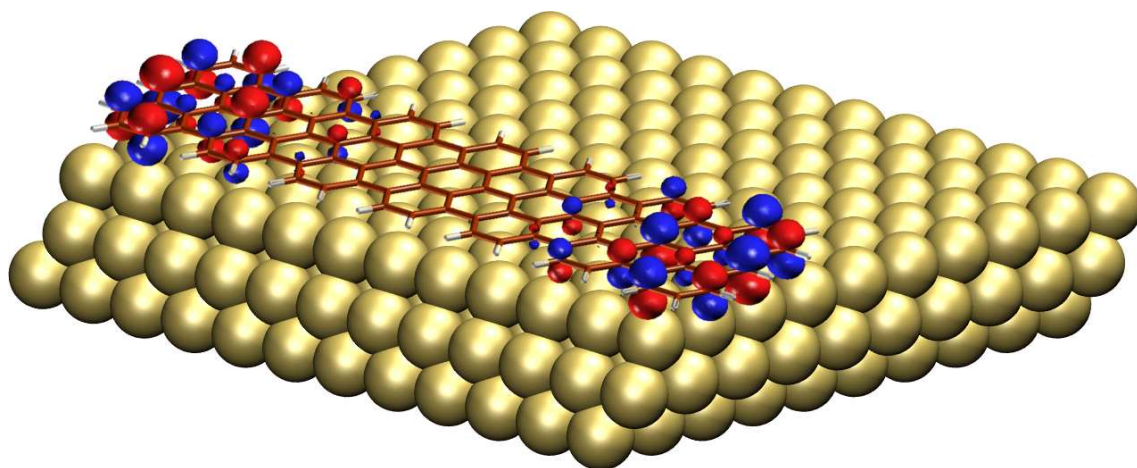


# Info Theoretische Chemie

– November 2012 –



## Inhaltsverzeichnis

<b>1 Editorial</b>	<b>3</b>
<b>2 Bericht über das 48. Symposium für Theoretische Chemie</b>	<b>4</b>
<b>3 Hellmann-Preis 2012</b>	<b>12</b>
<b>4 Mitteilungen der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie</b>	<b>13</b>
<b>5 Arbeitsgruppen stellen sich vor</b>	<b>17</b>
5.1 „Theoretische Chemie / Organometallchemie“ an der Universität Hamburg . . . . .	17
5.2 Theoretische Chemie an der TU Berlin . . . . .	21
<b>6 Themenkomplex: Forschungsförderung</b>	<b>26</b>
6.1 Ein Brief und seine Geschichte . . . . .	26
6.2 Forschungsförderung durch die DFG . . . . .	30
<b>7 Verschiedenes</b>	<b>32</b>
7.1 Trauernachricht . . . . .	32
7.2 Bunsentagung 2013 in Karlsruhe . . . . .	32
<b>8 Tagungskalender</b>	<b>35</b>
<b>9 Klatsch und Tratsch</b>	<b>36</b>

## 1 Editorial

Liebe Freunde der Theoretischen Chemie,

bitte finden Sie nachfolgend die Novemberausgabe der INFO THEORETISCHE CHEMIE aus Potsdam. Die Herbstausgabe ist traditionell etwas länger, weil darin vom Symposium für Theoretische Chemie (diesmal vom 48. Symposium in Karlsruhe) zu berichten ist, sowie – im Schlepptau – von der Hellmann-Preisverleihung und der Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie.

Der Herbst ist auch eine Zeit, in der die Blätter fallen und dadurch manch schmutzige Ecke sichtbar wird, die im Sommer noch gnädig durch saftiges Grün bedeckt war. So mag es in diesen Tagen auch manchem Theoretischen Chemiker gehen, wenn er mit feuchten Augen auf sein leeres Drittmittelkonto blickt. Liegt es vielleicht an der Exzellenzinitiative, die das knappe Geld mancherorts zugunsten anderer, oft schon gesegneter Forschungseinrichtungen noch knapper werden lässt? Stirbt gar der gute alte DFG-Einzelantrag im Angesicht der wachsenden Bedeutung prestigeträchtiger Verbundprojekte, die mit allerlei Hochglanzpapier, salbungsvollen Worten, Jahrmarktsgelächere und medialer Präsenz emporgehoben werden? Oder ist das nur das Gejammer der Besitzlosen, bei denen es statt zum Exzellenzcluster wieder nur zum Demenzcluster gereicht hat? Diesen und ähnlichen Fragen geht Gernot Frenking in einem sehr lesenswerten Beitrag nach, der sich an einen Artikel der „Blauen Blätter“ und einem Leserbrief an führende Tageszeitungen orientiert. Frau Dr. Kowol-Santen von der Deutschen Forschungsgemeinschaft komplettiert unser Miniforum zum Themenkomplex „Forschungsförderung“ indem sie gleich im Anschluss aktuelle Zahlen und Fak-

ten zur Drittmittelstatistik der DFG [unter besonderer Berücksichtigung der (Theoretischen) Chemie] präsentiert.

Zu erfreulicheren Themen: Wie üblich stellen wir in der INFO Arbeitsgruppen aus den Bereichen Theoretische Chemie und Computerchemie vor. Diesmal gelang es, Carmen Herrmann von der Universität Hamburg, sowie die theoretisch-chemischen Arbeitsgruppen an der Technischen Universität Berlin (Martin Kaupp, Martin Schoen und Maria Andrea Mroginski) für Kurzpräsentationen zu gewinnen. Neben den alteingessenen „Tagungskalender“ gesellt sich ein gesonderter Aufruf von Wim Klopper, sich lebhaft an der Bunsentagung 2013 in Karlsruhe mit dem (ebenfalls erfreulichen) Thema „Theory meets Spectroscopy“ zu beteiligen. Den Abschluss bilden wie immer „Klatsch und Tratsch“.

Alle Beiträge tragen zu einer Herbst-INFO bei, die mit etwa 35 Seiten in der Tat etwas lang geworden ist – die „wahrscheinlich längste INFO THEORETISCHE CHEMIE der Welt“. Aber die kommenden langen Wintermonate sind ja für dicke Schmöcker geradezu gemacht. Die Redaktion der INFO dankt allen Autoren und Nachrichtenlieferanten herzlich. Und wir (Dr. Gernot Fuchsel und ich selbst) freuen uns bereits auf Eure / Ihre Beiträge für die (schlanke) Frühjahrsausgabe im April nächsten Jahres, bis zum 31. März 2013.

Mit den besten Wünschen verbleibe ich, Euer/Ihr

Peter Saalfrank

Potsdam, im November 2012

Verantwortlich: Peter Saalfrank  
Institut für Chemie der Universität Potsdam  
Karl-Liebnecht-Straße 24-25  
D-14476 Potsdam-Golm  
Redaktion: Gernot Fuchsel

## 2 Bericht über das 48. Symposium für Theoretische Chemie

### Organisation

**Prof. Dr. Wim Klopper**  
**PD Dr. Karin Fink**  
**PD Dr. Florian Weigend**  
 Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
 Institut für Physikalische Chemie  
 Abteilung für Theoretische Chemie  
 Fritz-Haber-Weg 2  
 D-76131 Karlsruhe

### Allgemeine Info

- 48. Symposium für Theoretische Chemie
- 23.–27. September 2012
- Motto: „Electron Spin, Molecular Magnetism, and Relativity“
- 324 Teilnehmer von Institutionen aus 20 Ländern
- 16 eingeladene Vorträge + 23 eingereichte Vorträge
- 211 Poster
- Verleihung des Hans G. A. Hellmann-Preises für Theoretische Chemie an Jun.-Prof. Dr. Johannes Kästner
- Posterpreise:
  - 3 von Springer an Elke Faßhauer, Benjamin Helmich, Franziska Heß
  - 3 von der AGTC an Katrin Ledermüller, Philipp Pleßow, Jan Wenzel
- Rahmenprogramm:
  - Stadtführungen in Karlsruhe
  - (Geführte) Wanderungen in den Rheinauen
  - Konferenzdinner im Brauhaus „Kühler Krug“
- Familienzuschüsse und Kleinkindbetreuung vor Ort

### Wissenschaftliches Programm

Das wissenschaftliche Vortragsprogramm der Tagung verteilte sich auf insgesamt dreizehn Sitzungen. Die Themen der eingeladenen Vorträge orientierten sich dabei stark am vorgegebenen Motto des Symposiums. Bei den eingereichten Vorträgen waren die Inhalte hingegen breit gefächert und entsprechend der ursprünglichen Idee der Veranstaltung waren hier vorwiegend jüngere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler vertreten. Darüber hinaus boten zwei Postsitzungen die Möglichkeit zur Präsentation eigener Arbeiten sowie zum regen wissenschaftlichen Austausch. Im Folgenden wird ein Überblick über die Verleihung des Hellmann-Preises sowie der Posterpreise gegeben und es wird näher auf die Inhalte der einzelnen Vorträge eingegangen.

### Hellmann-Preis

Einen Höhepunkt des Symposiums stellte die traditionelle Verleihung des Hellmann-Preises für hervorragende wissenschaftliche Leistungen aus dem Gesamtbereich der Theoretischen Chemie dar. Dieser wird an jüngere Nachwuchswissenschaftler(innen) verliehen, die noch keine Lebenszeit-Professur innehaben und die der deutschsprachigen Forschungslandschaft verbunden sind.



Verleihung des Hellmann-Preises an Johannes Kästner durch den AGTC-Vorsitzenden Jürgen Gauß. Foto: Nele Ziegler, KIT

Als Preisträger im Jahr 2012 wurde Jun.-Prof. Dr. Johannes Kästner von der Universität Stuttgart „für die Entwicklung und Anwendung quantenchemisch basierter Methoden zur Behandlung biomolekularer Systeme, insbesondere zur Simulation enzymatischer Reaktionen“ ausgezeichnet. Weiter heißt es in der Laudatio: „Johannes Kästner hat durch seine Arbeiten zur Geometrieoptimierung, zur Berechnung freier Energien und zur Bestimmung von Tunnelraten in komplexen biomolekularen Systemen das QM/MM Methodenarsenal wesentlich verbessert und durch entsprechende exemplarische Anwendungen zur Aufklärung biochemischer Reaktionsmechanismen beigetragen.“

In seinem anschließenden Vortrag, der in deutscher Sprache gehalten wurde, gab Kästner einen eindrucksvollen Überblick über seine wissenschaftlichen Arbeiten und veranschaulichte an zahlreichen Anwendungen die Leistungsfähigkeit seiner Entwicklungen.

### Eingeladene Vorträge

Christoph van Wüllen eröffnete das Symposium mit einem Vortrag zur Berechnung der Nullfeldaufspaltung mehrkerniger Übergangsmetallkomplexe unter Verwendung von Dichtefunktionalmethoden. Er illustrierte, wie die Ergebnisse durch Diagonalisierung eines Spin-Hamilton-Operators abgeleitet werden können, dessen Parameter aus DFT-Rechnungen stammen. Zudem wies er auf die Wichtigkeit des auf Spin-Bahn-Kopplung beruhenden anisotropen Austausches hin und stellte Berechnungen für den bekannten Einzelmolekülmagnet „Mn<sub>12</sub>“ vor, für den die magnetische Anisotropie erstmals in konsistenter Weise mit DFT berechnet wurde.

Nicola Magnani befasste sich in seinem Vortrag mit experimentellen Untersuchungen an Lanthanoidkomplexen, welche aufgrund hoher Anisotropiebarrieren von Interesse sind. Speziell ging er auf die Frage ein, welche Faktoren die uniaxiale Anisotropie von Dy(III) in Einzelmolekülmagneten beeinflussen. Neben Verzerrungen der Struktur, welche die uniaxiale Anisotropie zer-

stören können, wurde am Beispiel von Fe<sub>2</sub>Dy<sub>2</sub> der Einfluss verschiedener Liganden auf die Ausrichtung der Anisotropieachse erläutert.

Mit einem Überblick zur Berechnung magnetischer Eigenschaften mit wellenfunktionsbasierten Methoden begann der Vortrag von Volker Staemmler. Im Weiteren ging er genauer auf die Nachteile des konventionellen CAS-CI-Ansatzes ein und stellte die in Bochum entwickelte Modifikation vor, welche auch auf vergleichsweise große Systeme anwendbar ist. Die Qualität des Verfahrens wurde anschließend anhand der Berechnung von Austausch-Kopplungskonstanten für Übergangsmetallkomplexe, Ferredoxine und Metalloxide demonstriert.

Im Mittelpunkt des Vortrags von Jens Kortus stand der Übergang von molekularem Magnetismus zu molekularer Spintronik. Im ersten Teil seiner Präsentation zeigte er die Bedeutung von DFT-Berechnungen für die Synthese von Molekülen mit hohen Anisotropiebarrieren auf. Der zweite Teil befasste sich mit Metallphthalocyaninen, welche interessant für Anwendungen im Bereich der Spintronik sind. Insbesondere ging er auf Transportberechnungen am Spin-Transfer-Material F<sub>16</sub>CoPc/MnPc ein, für welches ein Ladungstransfer und damit verbunden auch ein Spintransfer gefunden wurde.

Experimentelle Studien zur Spintronik von Einzelmolekülen standen im Mittelpunkt des Vortrags von Wulf Wulfhekel. Er erklärte anschaulich die Untersuchung von Spintransportprozessen mit spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie und stellte Ergebnisse für Phthalocyaninmoleküle vor. Zudem demonstrierte er eindrucksvoll, dass Spin-Crossover-Moleküle elektrisch reversibel zwischen High- und Low-Spin-Zustand geschaltet werden können, was einem digitalen Spin-Speicher mit einem Bit pro Molekül entspricht.

Markus Reiher berichtete über Spindichteverteilungen von offenschaligen Molekülen. Er erläuterte, dass mit DFT erhaltene Spindichten stark variieren können, selbst wenn die Aufspaltung

der Spinzustände im Einklang mit dem Experiment ist. Referenzspindichten aus CASSCF-Verfahren seien jedoch aufgrund der Einschränkungen hinsichtlich der Größe des aktiven Raumes nur schwer zugänglich. Als Alternative stellte Reiher den DMRG-Algorithmus vor und präsentierte damit erhaltene Referenzspindichten für einen Eisennitrosyl-Komplex.

Ria Broer trug über die Berechnung isotroper und anisotroper magnetischer Wechselwirkungen in Festkörpern vor. Das von ihr vorgestellte Verfahren beruht auf einem Embedded-Cluster-Modell, welches mit wellenfunktionsbasierten Methoden wie CASSCF und DDCI behandelt wird. Die Anwendung wurde am Beispiel von CuO und  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$  illustriert.

Relativistische Elektronenkorrelationsmethoden waren Gegenstand des Vortrags von Timo Fleig. Nach einem Überblick über verschiedene Ansätze ging er genauer auf die Entwicklung vierkomponentiger GAS-CI und GAS-CC-Verfahren ein und demonstrierte deren Leistungsfähigkeit. Als Anwendung in der Teilchenphysik präsentierte er Berechnungen zum elektrischen Dipolmoment des Elektrons, welches Grundlage vieler Theorien ist, die über das Standardmodell hinausgehen.

Markus Pernpointner stellte Propagatormethoden zur konsistenten Behandlung von relativistischen Effekten und Elektronenkorrelation in ein- oder mehrfach angeregten oder ionisierten Spezies vor. Er ging auf die Entwicklung vierkomponentiger Propagatoren basierend auf algebraisch diagrammatischer Konstruktion ein und legte dar, dass diese für die Charakterisierung elektronischer Zerfallsreaktionen wie ICD oder ETMD geeignet sind. Die Wichtigkeit der relativistischen Beschreibung wurde anhand der Zerfallswege von Ar/Kr- und Ar/Xe-Clustern anschaulich erklärt.

Über hochgenaue relativistische Berechnungen berichtete Grzegorz Pestka und ging auf die Probleme ein, die speziell bei explizit korrelierten Methoden auftreten. Den Fokus legte

er auf die auftretende Kopplung diskreter Zustände des Dirac-Coulomb-Hamilton-Operators an das Brown-Ravenhall-Kontinuum, was dazu führt, dass alle Lösungen Resonanzen sind. Die Vor- und Nachteile der üblicherweise verwendeten Projektion auf den Unterraum positiver Energie wurden dargelegt und der Complex-Coordinate-Rotation-Ansatz wurde als alternatives Verfahren diskutiert.



Impression aus dem Hörsaal. Foto: STC 2012-Team

Nathalie Guihéry sprach über die magnetische Anisotropie in ein- und zweikernigen Übergangsmetallkomplexen und deren Beschreibung mit wellenfunktionsbasierten Methoden und mit der Theorie effektiver Hamilton-Operatoren. Anhand einkerniger trigonaler Ni(II)-Komplexe wurde die Konkurrenz zwischen Spin-Bahn-Kopplung und Jahn-Teller-Verzerrung untersucht. Für die komplizierteren zweikernigen Komplexe wurden verschiedene Modell-Hamilton-Operatoren vorgestellt und bewertet, und es wurde gezeigt, dass der Giant-Spin-Hamilton-Operator das Verständnis von Spin-Mixing erlaubt.

Die Charakterisierung von Singulett-Triplett-Übergängen in phosphoreszierenden OLEDs stand im Mittelpunkt des Vortrags von Christel M. Marian. Für die typischen Ir- und Ru-Komplexe besteht die Herausforderung in der Behandlung der Elektronenkorrelation für angeregte Zustände. An ausgewählten Beispielen wurden DFT/MRCI-Ergebnisse für Anregungsenergien und Übergangsdipolmomente illustriert, ebenso wie Übergangsraten und Le-

bensdauern.

Coen de Graaf präsentierte eine Studie zum Mechanismus des lichtinduzierten Spin-Crossover im  $[\text{Fe}(\text{biph})_3]^{2+}$ -Komplex. Die Berechnung der Intersystem-Crossing-Raten erfolgte mit einer Kombination aus genauen Elektronenstrukturmethoden und zeitabhängigen Methoden. Mit Hilfe der erhaltenen Erkenntnisse konnten die bisher vorgeschlagenen Zerfallsprozesse des angeregten Singulettzustands ausgeschlossen werden. Stattdessen wurde ein neuer Mechanismus vorgeschlagen, dessen Relaxationszeit in guter Übereinstimmung mit dem Experiment ist.

Einen Überblick über die Entwicklung relativistischer Pseudopotentiale und die gängigen Parametrisierungen gab Michael Dolg. Speziell ging er auf neue Entwicklungen wie die Berücksichtigung von QED-Beiträgen für superschwere Elemente ein. Zudem diskutierte er die Vorteile der „f-in-core“-Pseudopotentiale anhand von Berechnungen zur Trennung von Am(III) und Eu(III) mittels Flüssig-Flüssig-Extraktion. Die aus Hartree-Fock abgeleiteten Pseudopotentiale, wie die „f-in-core“-Potentiale für Lanthanoide und Actinoide, könnten ohne Bedenken in DFT-Berechnungen eingesetzt werden, so Dolg.

Anna I. Krylov befasste sich in ihrem Vortrag mit der Beschreibung metastabiler selbstionisierender Zustände, wie sie beispielsweise bei angeregten Zuständen anionischer Chromophore auftreten. Sie veranschaulichte die Schwierigkeiten der theoretischen Behandlung dieser Resonanzen mit herkömmlichen Vorgehensweisen und präsentierte mit dem im Rahmen des EOM-EE-CCSD-Verfahrens implementierten Complex-Scaling-Formalismus eine elegante Methode, um die im Kontinuum liegenden Zustände zu beschreiben. Erste Ergebnisse deuten darauf hin, dass ausgewogene Basissätze für die korrekte Beschreibung der Korrelation wichtig sind.

Die theoretische Beschreibung offenschaliger Übergangsmetalle war Gegenstand des Vortrags von Frank Neese. Zunächst erläuterte er die

Grundlagen von Elektronenspin und magnetischen Eigenschaften und gab dann einen umfassenden Überblick über die theoretischen Methoden, deren Spektrum von DFT bis zu Multikonfigurationsansätzen reichte. Er stellte die eigenen Beiträge zur Weiterentwicklung existierender Modelle heraus und diskutierte ausführlich die Vor- und Nachteile der einzelnen Methoden.

### Eingereichte Vorträge

Kai K. Lange befasste sich in seinem Vortrag mit Bindungsmechanismen zweiatomiger Moleküle in Gegenwart starker Magnetfelder ( $B \approx 10^5$  T), wie sie auf der Oberfläche von weißen Zwergen vorherrschen. Er stellte mit dem paramagnetischen Bindungsmechanismus eine neue Art starker chemischer Bindung vor, die auf der Stabilisierung antibindender Orbitale beruht. Dies wurde am Beispiel der Potentialkurven von  $\text{H}_2$  in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke veranschaulicht.

Michael Bühl berichtete über die Berechnung von Spin-Spin-Kopplungskonstanten für perinaphthalintelluride mit DFT-Methoden. Neben der Kopplung über die freien Elektronenpaare des Tellurs wurden auch Beiträge der Te-C-Bindungen identifiziert und insgesamt resultiert eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Werten. Bühl wies insbesondere auf die starke Abhängigkeit der Te-Te-Kopplungskonstanten von der Molekülkonformation hin, was diese zu einem sehr empfindlichen Werkzeug zur Strukturaufklärung mache.

Die theoretische Beschreibung frustrierter Lewis-Paare zur Aktivierung von  $\text{H}_2$  war Gegenstand des Vortrags von Birgitta Schirmer. Die Berechnung von Geometrien und Energien erfolgte dabei mit bereits etablierten Methoden wie TPSS-D3 und SCS-MP2. Um zuverlässige Werte für Reaktionsenthalpien zu erhalten, ist die Berücksichtigung von Dispersionswechselwirkungen und Lösungsmittelleffekten unabdingbar.

Theoretische Untersuchungen der Grenzfläche



zwischen Graphen und Metallen wurden von Elena Voloshina präsentiert. Das Aufbringen von Graphen auf eine Ni(111)-Oberfläche führt zur Veränderung der charakteristischen elektronischen Bandstruktur des Graphens und zur Induktion eines magnetischen Moments. Der Einfluss der Interkalation anderer Metalle zwischen Graphen und Ni(111) wurde ebenfalls untersucht und ergab einen geringen Einfluss von Al, so dass sich Graphen auf der Oberfläche wie eine freie Schicht verhält.

Heike Fliegl stellte die Berechnung magnetisch induzierter Stromdichten mit der GIMIC-Methode vor. Sie erläuterte, wie mittels Integration über die Stromdichte Informationen über Strompfade und den Grad der Aromatizität erhalten werden können. Die Anwendung wurde anhand mehrerer Beispiele anschaulich illustriert. Für die Strompfade in Porphyrinen konnte Fliegl zeigen, dass bisherige Vorstellungen nicht korrekt sind, da alle Bindungen am Stromtransport beteiligt sind und sich der Stromfluss an den Pyrrolringen teilt.

Mit der Extraktion von lokalen Spins aus Wellenfunktionen beschäftigte sich Pedro Salvador. Da die Spindichte in vielen Fällen nicht ausreichend für die Charakterisierung eines Systems ist, wird meistens der Erwartungswert  $\langle S^2 \rangle$  herangezogen und in Ein- und Zweizentrenbeiträge aufgeteilt. Salvador stellte eine neue Methode für diese Zerlegung vor und illustrierte die Leistungsfähigkeit des Verfahrens anhand ausgewählter Übergangsmetallkomplexe und Radikale.

Denis Usvyat trug über neue Entwicklungen bei der periodischen Behandlung von Festkörpern mit lokalen post-Hartree-Fock-Methoden vor. Für die Berechnung von Grundzuständen stellte er die im Programm CRYSCOR implementierten LMP2- und LPM2-F12-Methoden und deren Leistungsfähigkeit vor. Erste Schritte hinsichtlich der Beschreibung angeregter Zustände in Festkörpern wurden bereits mit der Implementierung der periodischen lokalen CIS-Methode gemacht.

Dmitrij Rappoport behandelte in seinem Vortrag die Exzitonendynamik in Chromophoragregaten. Aufgrund der Systemgröße, nicht zu vernachlässigbaren intermolekularen Kopplungen und einer Vielzahl von Schwingungsfreiheitsgraden stellt deren theoretische Beschreibung eine große Herausforderung dar. Rappoport präsentierte seinen Ansatz, der auf Ehrenfest-Dynamik und expliziter Behandlung von Schwingungen in der harmonischen Näherung beruht. Elektronische Freiheitsgrade werden im Rahmen eines lokalen Exziton-Bildes beschrieben und anhand Potentialflächen und Übergangsdipolmomenten aus quantenchemischen Berechnungen parametrisiert. Die Anwendung des Verfahrens wurde am Beispiel eines Systems aus vier I<sub>2</sub>-Molekülen illustriert.

Die Entwicklung universaler interatomarer Potentiale zur Beschreibung unterschiedlichster Wechselwirkungen war zentrales Thema des Vortrags von Jörg Behler. Er verdeutlichte, dass dies durch die Verwendung künstlicher neuronaler Netzwerke (NN) erreicht werden kann und erläuterte die Berechnung der Gesamtenergie eines Systems ausgehend von den einzelnen Atomen. Mit auf Elektronenstrukturberechnungen basierenden NN-Potentialen können sehr genaue Energien und Kräfte berechnet werden, wie Behler anhand der Anwendung für Wassercluster, Metalloberflächen und Metalloxide demonstrierte. Zudem seien damit effiziente MD-Simulationen für große Systeme realisierbar.

Thomas-C. Jagau berichtete über die Anwendung linearer Antworttheorie im Rahmen des Mk-MRCC-Ansatzes zur Beschreibung molekularer Eigenschaften. Er illustrierte die Berechnung von Anregungsenergien sowie statischen und dynamischen Polarisierbarkeiten an ausgewählten Beispielen. Dabei zeigte sich, dass die Anwendung für frequenzabhängige Eigenschaften mit grundlegenden Problemen verbunden ist. So ergibt sich im Fall abgebrochener Cluster-Operatoren eine falsche Polstruktur, was auf Redundanzen innerhalb der Mk-MRCC-Wellenfunktion zurückzuführen ist.





Diskussion zwischen zwei Vortragsitzungen. Foto: STC 2012-Team

Über die Vor- und Nachteile der ic-MRCC-Methode referierte Matthias Hanauer. Er fokussierte sich im Weiteren auf eigene Arbeiten zur Entwicklung von Verfahren, die Dreifachanregungen berücksichtigen. Die Genauigkeit der kürzlich entwickelten ic-MRCCSD(T)-Methode, ebenso wie deren hohe Effizienz, wurden unter anderem an der Ringöffnungsreaktion von Azirin demonstriert. Hanauer betonte insbesondere, dass die hohe Genauigkeit bereits mit minimalen aktiven Räumen erreicht werden kann.

Maria Belén Ruiz präsentierte eine Studie zum  $\beta$ -Zerfall leichter Atome. Die exakte Beschreibung solcher Prozesse erfordert Hylleraas-artige Wellenfunktionen und ist dementsprechend aufwendig. Für den  $\beta$ -Zerfall von He und Li wurden Übergangswahrscheinlichkeiten in den Grundzustand sowie in die angeregten Zustände von  $\text{Li}^+$  und  $\text{Be}^+$  berechnet. Die vorgestellten Arbeiten sind Ausgangspunkt für weitere Anwendungen in der Astrophysik (Spektrum von Wolf-Rayet-Sternen) und in der Krebstherapie (Bor-Neutroneneinfangtherapie).

Embedding-Methoden in der Quantenchemie standen im Mittelpunkt des Vortrags von Gerald Knizia. Nach einem kurzen Überblick über die gängigen Verfahren stellte er seinen neuen Ansatz, das sogenannte Dichtematrix-Embedding vor. Dieser erlaubt die Unterteilung eines Systems in frei wählbare Fragmente wie beispielsweise Sätze von Atomorbitalen. Dadurch ist das Schneiden kovalenter Bindungen pro-

blemlos möglich. Die Kombination aus hochgenauen Methoden für die Fragmente (MRCI, CC) und einer Mean-Field-Rechnung für das Gesamtsystem (DFT) erlaubt dann die Behandlung sehr großer Systeme mit komplexer elektronischer Struktur.

Letizia González befasste sich mit Intersystem-Crossing-Prozessen in organischen Molekülen. Da die Spin-Bahn-Kopplung hier schwach ist, wird im Allgemeinen angenommen, dass diese Prozesse sehr langsam ablaufen. Unter Verwendung des kürzlich entwickelten ab initio MD-Algorithmus SHARC konnte González jedoch zeigen, dass Intersystem-Crossing selbst in organischen Systemen ultraschnell erfolgen und somit mit innerer Konversion konkurrieren kann. Exemplarisch wurden ISC-Prozesse auf der Femtosekunderskala für DNA-Nukleobasen nachgewiesen.

Wolfgang Eisfeld stellte mit der ERCAR-Methode einen neuen Ansatz zur Generierung Spin-Bahn-gekoppelter Potentialflächen vor. Dieser beruht auf einer asymptotischen Darstellung der Feinstruktur-niveaus und einer entsprechenden Diabatisierung. Speziell für Systeme mit einem einzigen Schweratom sei die Methode sehr effizient, wie Eisfeld am Beispiel von HI demonstrierte.

Annika Bande sprach über die Elektronendynamik des anregungsinduzierten interatomaren Coulomb-Zerfalls in Quantenpunkten. In diesem Rahmen stellte sie ihre Untersuchungen zur Anregung und zum Zerfall in eindimensionalen Modellsystemen unter Verwendung des Heidelberger MCTDH-Programms vor. Die Realisierung des interatomaren Coulomb-Zerfalls in Quantenpunkten könnte für die Entwicklung von IR-Photodetektoren von Bedeutung sein.

Die Analyse angeregter Zustände in Systemen mit mehreren Chromophoren waren Thema des Vortrags von Felix Plasser. Seine vorgestellte Strategie zur Klassifizierung der Anregungen in exzitonische und Charge-Transfer-Zustände basiert auf der Auswertung der Einteil-

chen-Übergangsdichtematrix. Die vorgestellten Anwendungen reichten vom Naphthalin-Dimer über Polyphenylenvinyl bis hin zu DNA-Duplexen.

Edit Mátyus beschäftigte sich mit Molekülstrukturberechnungen ohne die Born-Oppenheimer-Näherung. Sie gab einen Überblick über die Theorie und die Implementierung des entwickelten Algorithmus und stellte ausgewählte Anwendungen vor. Zudem wies sie darauf hin, dass das Verfahren bereits auf die Berechnung von Resonanzen mit Hilfe der Complex-Coordinate-Rotation-Technik erweitert wurde.

Asbjörn M. Burow trug über die Entwicklung analytischer Gradienten für die RPA-Methode und deren effiziente Implementierung im Programm TURBOMOLE vor. Er legte dar, dass die Kosten für die Berechnung in der Größenordnung einer Single-Point-Energieberechnung liegen. Weiterhin demonstrierte er die Genauigkeit der RPA-Methode anhand der Berechnung von Dipolmomenten ausgewählter Moleküle. Im Vergleich mit experimentellen Werten schneide die RPA-Methode besser ab als PBE oder MP2, so Burow.

Theorie und Implementierung der  $G_0W_0$ -Methode in TURBOMOLE waren Thema des Vortrags von Michiel van Setten. Dieser Ansatz soll verglichen mit DFT-Methoden eine bessere Beschreibung von Charge-Transfer, langreichweitigen Wechselwirkungen, Bandlücken und damit der Transporteigenschaften von Molekülen ermöglichen. Neben der effizienten Auswertung der auftretenden Matrixelemente wurden erste Ergebnisse für einen Testsatz präsentiert. Es zeigte sich, dass Ionisierungsenergien und Elektronenaffinitäten mit PBE- $G_0W_0$  genauer berechnet werden können als mit HF, B3LYP oder PBE. Die Abhängigkeit der  $G_0W_0$ -Ergebnisse vom zugrunde liegenden Funktional ist dabei gering.

Jörn Manz sprach in seinem Vortrag über Elektronenflüsse bei chemischen Reaktionen. Er erläuterte, dass die Flussdichte von auf der Born-

Oppenheimer-Näherung beruhenden elektronischen Wellenfunktionen null beträgt. Als Ausweg präsentierte er die Berechnung von Flusswahrscheinlichkeiten über das Gauß-Theorem und die Kontinuitätsgleichung unter Verwendung der quantenchemisch erhaltenen Elektronendichte. Veranschaulicht wurde das Verfahren anhand eines schwingenden  $H_2^+$ -Moleküls und der Cope-Umlagerung von Semibullvalen.

Anastasia Borschevsky untersuchte den Einfluss starker relativistischer Effekte auf chemische Eigenschaften für das Element 120, dessen Herstellung Gegenstand aktueller Forschung ist. Ihre Benchmarkrechnungen erfolgten unter Verwendung eines relativistischen vierkomponentigen Ansatzes und RCCSD(T)- oder Fock-Space-CC-Verfahren zur Beschreibung der Elektronenkorrelation. Die Zuverlässigkeit dieser Methoden wurde durch den Vergleich theoretischer und experimenteller Ergebnisse für die Atome Ba und Ra sichergestellt. Für das Element 120 wurden die erste und zweite Ionisierungsenergie, die Elektronenaffinität, Anregungsenergien sowie die statische Polarisierbarkeit berechnet.

Ulrich Wedig berichtete über Strukturen und Bindungsverhältnisse von Tl-Clustern in Festkörperverbindungen. Dabei ging er speziell auf Cluster ein, die nicht das Zintl-Klemm-Busmann-Konzept befolgen. Er verdeutlichte an ausgewählten Beispielen, dass zur korrekten Beschreibung der elektronischen Struktur relativistische Berechnungen unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung erforderlich sind. Die Spin-Bahn-Kopplung kann durch die Aufhebung der Orbitalentartung dazu führen, dass hochsymmetrische Strukturen abgeschlossene Schalen besitzen und damit stabil sind.

## Posterpreise

Während des Symposiums wurden an zwei Abenden über 200 Poster präsentiert und sorgten somit für reichlich Gesprächsstoff. Von jeder Sitzung wurden die drei besten Poster von einer Kommission ausgewählt und mit Bücher-

gutscheinen ausgezeichnet.



Eindruck von der Postersitzung. Foto: STC 2012-Team

Die Preisträger waren Elke Faßhauer von der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (Arbeitsgruppe Pernpointner, „Relativistic Lifetimes of Innervalent Ionized States“), Benjamin Helmich von der Ruhr-Universität Bochum (Arbeitsgruppe Hättig, „Low scaling second-order methods for excited states using Pair Natural Orbitals“), Franziska Heß von der Justus-Liebig-Universität Gießen (Arbeitsgruppe Over, „DFT-based kinetic Monte Carlo simulations for the CO oxidation on RuO<sub>2</sub>(110): Concepts and limitations“), Katrin Ledermüller von der Universität Regensburg (Arbeitsgruppe Schütz, „Laplace transform based local CC2 response method: Orbital relaxed first-order properties

and gradient“), Philipp Pleßow von der BASF SE, Ludwigshafen („Quasi-Second-Order Reaction Path Optimization“) und Jan Wenzel von der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (Arbeitsgruppe Dreuw, „Charge and Energy Transfer in a Bisthiophene Perylenediimide Based Donor-Acceptor-Donor System with Application to Photovoltaics“).

Die Posterkommission bestand aus Christel M. Marian, Uwe Manthe, dem AGTC-Vorsitzenden Jürgen Gauß und den STC 2012-Organisatoren.

### Sponsoren

Deutsche Forschungsgemeinschaft, Center for Functional Nanostructures, SFB/TRR 88 „3MET“, Fonds der Chemischen Industrie, Karlsruher Institut für Technologie, Turbomole GmbH, COSMOlogic GmbH & Co. KG, cynora GmbH, TechniData IT-Service GmbH, Brauhaus Kühler Krug GmbH & Co. KG, Molpro (Univ. College Cardiff Consultants Ltd), PC-CP (Royal Society of Chemistry), Theoretical Chemistry Accounts (Springer), Molecular Physics (Taylor & Francis Group), ChemPhysChem (Wiley-VCH).

Angela Bihlmeier, Karlsruhe

### 3 Hellmann-Preis 2012

Der Hellmann-Preis 2012 wurde Johannes Kästner (Universität Stuttgart) zuerkannt „für die Entwicklung und Anwendung quantenchemisch basierter Methoden zur Behandlung biomolekularer Systeme, insbesondere zur Simulation enzymatischer Reaktionen“.



Johannes Kästner (Jahrgang 1978) hat technische Chemie an der TU Wien studiert, mit einer Diplomarbeit zur ab initio Molekulardynamik bei Karlheinz Schwarz. In seiner Doktorarbeit bei Peter Blöchl an der TU Clausthal hat er mittels DFT Rechnungen unter Verwendung der projektoraugmentierten Wellen (PAW) an Nitrogenase-Modellen den Mechanismus der enzymatischen Stickstofffixierung untersucht. Seine Promotion erfolgte im Alter von 26 Jahren mit „summa cum laude“.

Johannes Kästner hat danach (2004-2006) für 16 Monate als Postdoc in der Gruppe von Walter Thiel am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim an der Ruhr gearbeitet. Er hat sich dort mit QM/MM Methoden zur Berechnung freier Energien beschäftigt und dabei insbesondere ein neues Analyseverfahren für Umbrella Sampling entwickelt (Umbrella Integration), welches der gängigen WHAM-Prozedur hinsichtlich Konvergenzverhalten und Fehlerkontrolle deutlich überlegen ist. Darüber hinaus hat er QM/MM adaptierte Methoden zur Free Energy Perturbation Theory und ein ver-

bessertes Verfahren zur mikroiterativen Geometrieoptimierung implementiert.

Johannes Kästner hat 2006 eine Dauerstelle am Daresbury Laboratory (UK) angetreten. Im Rahmen seiner Zuständigkeit für das ChemShell Programmpaket hat er dort die verfügbaren Optimierungsmethoden wesentlich verbessert (Stichworte: Dimer-Methode, DL-FIND). Er ist dann 2008 dem Ruf auf eine Juniorprofessur an die Universität Stuttgart gefolgt. Methodisch hat er sich seither insbesondere mit der Instantontheorie zur Berechnung von Tunnelraten befasst und diese effizient implementiert (auch auf QM/MM Niveau), verbunden mit entsprechenden Untersuchungen zu Tunneleffekten in ganz verschiedenen Bereichen (Astrophysik, enzymatische Reaktionen). Sein zweites methodisches Standbein ist die Weiterentwicklung von Umbrella Integration. In mehreren Dimensionen erlaubt die Methode, einen Pfad kleinster freier Energie mit Hilfe der Molekulardynamik zu berechnen. Daneben hat er in Stuttgart eine Vielzahl auch kooperativer Projekte auf dem Gebiet chemischer und biomolekularer Simulationen in Angriff genommen (Beispiele: QM/MM Rechnungen zur Glutamat-Mutase, MD Untersuchungen zum TNF Rezeptor).

Bei seinem Vortrag auf dem Symposium für Theoretische Chemie 2012 in Karlsruhe anlässlich der Verleihung des Hellmann-Preises ist deutlich geworden, dass Johannes Kästner in Stuttgart eine dynamische junge Arbeitsgruppe aufgebaut hat, die spannende Projekte auf dem Gebiet Computational Biochemistry verfolgt, mit starken Aktivitäten sowohl in der Methodenentwicklung als auch bei den Anwendungen. Er ist am Exzellenzcluster SimTech (Simulation Technology) und am SFB 716 (Dynamische Simulation von Systemen mit großen Teilchenzahlen) beteiligt.





- 3) Bericht des Vorstands
- 4) Kassenbericht 2011
- 5) Wahl des Kassenprüfers für 2012
- 6) Vorstandswahl 2013
- 7) STC 2013/2014
- 8) Verschiedenes

### **TOP 1**

Die vorgeschlagene Tagesordnung wurde ohne Einschränkungen angenommen.

### **TOP 2**

Das Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC anlässlich des 47. Symposiums für Theoretische Chemie in Sursee (Schweiz) wurde im Info TC 11/2011 veröffentlicht. Es sind keine Anmerkungen eingegangen. Das Protokoll wird ohne Gegenstimme genehmigt.

### **TOP 3**

#### **Bericht des Vorstands**

##### 1. Mitgliederstand

Ende 2011 hatte die AGTC 214 Mitglieder, was eine leichte Zunahme gegenüber 2010 darstellt. Der Mitgliederstand ist damit stabil. Wichtig ist dennoch, vor allem bei Nachwuchswissenschaftlern/Innen für die AGTC zu werben.

##### 2. Hellmann-Preis

Dieses Jahr wurde der Hellmann-Preis an Herrn Johannes Kästner, Universität Stuttgart verliehen. Die Mitglieder der AGTC werden aufgefordert, auch für das nächste Jahr Vorschläge zu unterbreiten. Der Stichtag für die Nominierungen ist der 15.3.2013, die Vorschläge sind an den Vorsitzenden der AGTC zu richten. Wünschenswert ist, dass viele Vorschläge eingehen. Es ist besser aus einer größeren Anzahl Nominierungen wählen zu können, als am Ende keine/n geeignete/n Kandidatin/en zu haben.

##### 3. Hellmann-Fonds

Als Vorgriff auf den Kassenprüfungsbericht wird erwähnt, dass die Fehlbuchungen des letzten Jahres korrigiert wurden und die Spende von 10.000,00 € des Fonds der Chemischen Industrie jetzt korrekt dem Stiftungsvermögen des Hellmann-Fonds zugerechnet wurde. Das Stiftungsvermögen liegt damit bei über 50.000,00 €. Dennoch wird auch weiterhin zu Spenden aufgerufen, die zur Erhöhung des Stiftungsvermögens führen.

##### 4. Jahresrückblicke

Die Jahresrückblicke für 2012 werden von Herrn Johannes Neugebauer (Braunschweig, jetzt Münster), Herrn Michael Hanrath (Köln) und Herrn Roland Mitric (Berlin) verfasst.

## 5. INFO-TC

Ab April 2012 hat die Gruppe von Herrn Saalfrank (Potsdam) die Aufgabe übernommen, drei Ausgaben zu editieren. Die Mitglieder der AGTC werden ermutigt, Beiträge wie z.B. zur Vorstellung einzelner Arbeitsgruppen oder zu sonstigen interessanten Themen einzureichen.

## TOP 4

### Bericht des Kassenprüfers 2011

Nach Vorstellung des Kassenberichtes für das Jahr 2011 durch Herrn Mark wird dieser von der Mitgliederversammlung entgegengenommen und der Vorstand entlastet.

#### 1. Kassenstand der AGTC:

AGTC Konto am 31.12.2011:	34610,89 €
Einnahmen aus Mitgliedsbeiträgen:	2782,00 €
Umbuchungen aus dem Hellmann-Fonds:	8071,16 €
Ausgaben:	110,00 €

#### 2. Hellmann-Fonds

Gesamtvermögen des Hellmann-Fonds am 31.12.2011:	52866,32 €
Einnahmen aus Spenden:	810,00 €
Zinserträge:	2201,41 €
Entnahme aus Rücklagen aufgrund von Wertpapierverlusten:	207,00 €
Ausgaben Preisgeld:	1300,00 €
Umbuchungen auf das Konto der AGTC:	8071,16 €

Das Gesamtvermögen des Hellmann-Fonds ist, betrachtet man den Stand am Ende des Jahres 2011 von 52866,32 € gegenüber jenem am Ende von 2010 von 59433,07 €, um 6566,75 € gesunken.

Anmerkung des Vorsitzenden:

- Die für das letzte Jahr angemerkten Korrekturen wurden von der DBG vorgenommen; dies ist der Grund, warum das Gesamtvermögen des Hellmann-Fonds dieses Jahr niedriger ist als im Vorjahr.
- Der Vorstand hat beschlossen, dass ab der STC 2012 die AGTC jedes Jahr drei Posterpreise zu 100,00 Euro (als Büchergutscheine) sponsert. Herrn Mark wird an dieser Stelle der Dank der AGTC und des Vorstands ausgesprochen.

## TOP 5

### Wahl des Kassenprüfers 2012

Der Vorsitzende schlägt vor, Herrn Mark auch für 2012 als Kassenprüfer zu benennen. Die Zustimmung erfolgt per Akklamation.



## TOP 6

### Vorstandswahl 2013: Kandidatenliste

Turnusgemäß endet die Legislaturperiode des Vorstandes Ende Juni 2013, der neue Vorstand wird per Briefwahl bestimmt. Die entsprechenden Unterlagen werden den Mitgliedern im Dezember 2012 zugesandt.

Die Vertreter der Trägergesellschaften sind: Herr Thiel (Mülheim) für die Bunsengesellschaft, Herr Frenking (Marburg) für die GdCH und Herr Marx (Bochum) für die DPG. Unter Berücksichtigung der Vorbedingung, dass der Vorstand wie auch die Kandidatenliste möglichst breit das Gebiet der Theoretischen Chemie abdecken sollten, beschließt die MGV folgende Kandidatenliste:

- 1) S. Grimme (Bonn)
- 2) C. Marian (Düsseldorf)
- 3) D. Marx (Bochum)
- 4) C. Ochsenfeld (LMU München)
- 5) B. Paulus (FU Berlin)
- 6) J. Neugebauer (Münster)
- 7) U. Manthe (Bielefeld)
- 8) W. Klopper (Karlsruhe)
- 9) R. Fink (Tübingen)

## TOP 7

### STC 2013 und 2014

Die STC 2013 wird von der Theoretischen Chemie in Erlangen (22. bis 26. September 2013) unter der Federführung von Herrn Görling organisiert. Für 2014, im übrigen das 50. Symposium der Theoretischen Chemie, wird Frau González, Universität Wien, das Symposium vom 14. bis 18. September organisieren. Für 2015 laufen schon erste Gespräche, aber es ist noch zu früh, hier konkrete Angaben zu machen.

## TOP 8

### Verschiedenes

Es wird auf zwei Tagungen hingewiesen

- a) Bunsentagung in Karlsruhe 2013: „Theory meets Spectroscopy“
- b) „7th Quantum Molecular Mechanics“ in Lugano 2013

Mainz, den 08.10.2012

Prof. Dr. Jürgen Gauß

## 5 Arbeitsgruppen stellen sich vor

### 5.1 „Theoretische Chemie / Organometallchemie“ an der Universität Hamburg

Prof. Dr. Carmen Herrmann

Institut für Anorganische und Angewandte Chemie,  
Universität Hamburg,  
Martin-Luther-King-Platz 6,  
20146 Hamburg, Germany



#### Einführung

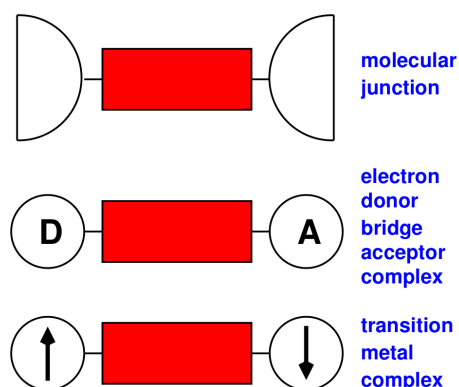
Die Arbeitsgruppe „Theoretische Chemie / Organometallchemie“ am Institut für Anorganische und Angewandte Chemie der Universität Hamburg wurde im Mai 2011 eingerichtet. Während in Hamburg schon seit langem von Arbeitsgruppen mit experimentellem Schwerpunkt sehr gute theoretische Arbeiten durchgeführt wurden und werden, ist dies der erste ausschließlich der Theorie gewidmete Arbeitskreis im Fachbereich Chemie. Damit wurden auch die Module Quantenchemie I und II in den Studienplänen für Chemie und Nanowissenschaften etabliert. Im September 2011 kam Tobias Schwabe als Juniorprofessor für Theoretische Chemie am Zentrum für Bioinformatik hinzu, der sich vorrangig mit Umgebungseffekten und der Entwicklung von Doppelhybridfunktionalen beschäftigt. Hier sollen die Aktivitäten des Arbeitskreises Herrmann vorgestellt werden, die sich auf molekulare Elektronik und molekularen Magnetismus konzentrieren, mit Schwerpunkt auf dem Konzept der „elektronischen Kommunikation“ als verbindendem Element zwischen beiden.

#### Forschungsziele

Ziel unserer Forschung ist es, elektronische Kommunikation durch molekulare Brücken zu verstehen und klar zu definieren. Der Begriff der elektronischen Kommunikation wird oft verwendet, um verschiedene Klassen von molekularen Systemen und Phänomenen zu beschreiben (siehe Abbildung 1):

- Leitfähigkeit durch molekulare Brücken („Molecular Junctions“)
- Elektronentransferreaktionen in Donor–Brücke–Akzeptor-Komplexen
- Austausch-Spinkopplung in mehrkernigen verbrückten Übergangsmetallkomplexen
- Verbrückte Mixed-Valence-Systeme
- Singlet Fission
- ...

Die Eigenschaften dieser Systeme hängen sowohl von der molekularen Brücke ab als auch von



**Abb. 1:** Schematische Darstellung dreier Systeme, in denen elektronische Kommunikation eine Rolle spielt: Eine molekulare Brücke zwischen makroskopischen Elektroden (Molecular Junction, oben), eine Brücke zwischen Donor- und Akzeptoreinheiten, wie sie zum Beispiel in Elektronentransferexperimenten untersucht wird (mitte), und ein verbrückender Ligand zwischen zwei Spinzentren (zum Beispiel in einem Übergangsmetallkomplex oder Diradikal, unten).

deren Umgebung (Spinzentren, Elektroden, ...), und die molekulare Brücke wird ihrerseits von der Umgebung beeinflusst. Man findet aber gemeinsame Trends, zum Beispiel neigen stärker leitfähige Brücken dazu, die Kopplung gleicher Spinzentren zu verstärken. So weiß man aus experimentellen und theoretischen Studien, dass *meta*-verbrückte Benzolringe deutlich weniger leitfähig sind als *para*-verbrückte, was Interferenzeffekten zugeschrieben wird [1, 2]. Gleichzeitig sind über *meta*-verbrückte Benzolringe verbundene Spinzentren meist ferromagnetisch gekoppelt, und die *para*-verbrückten Analoga meist stark antiferromagnetisch [3]. Ebenso führt das Schließen eines diarylethenbasierten Photoschalters sowohl zu höherer Leitfähigkeit als auch zu stärkerer (antiferromagnetischen) Kopplung [4, 5].

Es ist davon auszugehen, dass diese gemeinsamen Trends nicht beliebig übertragbar sind. Wo sie es aber sind, könnten Konzepte und Ergebnisse zwischen traditionell getrennten Forschungsfeldern übertragen werden. Ziel unserer Forschung ist daher, die Bedingungen herauszuarbeiten, unter denen elektronische Kommuni-

kation als Eigenschaft der Brücke definiert werden kann, und dies mithilfe chemischer Konzepte zu verstehen. Zu diesen Konzepten zählen insbesondere lokale Beiträge, also zum Beispiel Partialladungen, lokale Spins und lokale Ströme. Ausgewählte erste Schritte auf dem Weg zu diesem Ziel sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden.

### Verständnis des Elektronentransports durch molekulare Brücken: lokale Beiträge und MO-Analysen

In sogenannten Molecular Junctions werden Einzelmoleküle von zwei Seiten durch makroskopische Elektroden kontaktiert, so dass Strom-Spannungskurven aufgenommen werden können. Dieser Elektronentransport durch molekulare Brücken kann nach verschiedenen Mechanismen ablaufen. Bei relativ kurzen Brücken, deren Molekülorbitale (MOs) energetisch hinreichend weit von der Fermi-Energie der Elektroden entfernt sind, dominiert meist ein Tunnelmechanismus. In diesem Fall kann der Strom  $I$  als Funktion der Spannung  $V$  mithilfe des Landauer-Imry-Büttiker-Formalismus [7, 8] beschrieben werden,

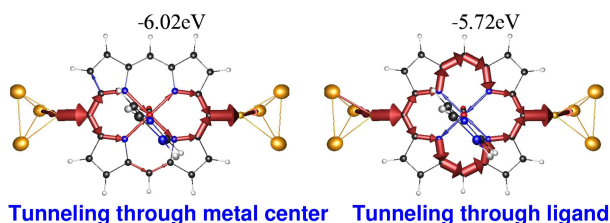
$$I_s(V) = \frac{e}{h} \int_{E_F - \frac{eV}{2}}^{E_F + \frac{eV}{2}} dE T_s(E, V), \quad (1)$$

wobei  $s \in \{\alpha, \beta\}$  den Spin der Elektronen kennzeichnet,  $E$  die Energie,  $E_F$  die Fermi-Energie der Elektroden im Gleichgewicht,  $e$  die Einheitsladung,  $h$  das Plancksche Wirkungsquantum und  $T_s$  die Transmissionsfunktion. Die Transmissionsfunktion kann grob als die Wahrscheinlichkeit verstanden werden, dass ein Elektron einer gegebenen Energie durch die Brücke tunnelt.  $T_s$  kann in lokale (zum Beispiel atomare) Beiträge zerlegt werden [9, 10, 11],

$$T(E) = \sum_{A \in L, B \in R} T_{AB}(E). \quad (2)$$

Wir konnten mithilfe dieser Zerlegung einen Zusammenhang zwischen Interferenzerscheinungen und Kreisströmen zeigen [11] und haben

den Ansatz erstmals auf einen Metallkomplex angewendet, um zu verstehen, ob Elektronen direkt durch das Metallzentrum oder durch Liganden tunneln (siehe Abbildung 2). Dabei



**Abb. 2:** Lokale Zerlegung der Transmission bei verschiedenen Energien des tunnelnden Elektrons [6].

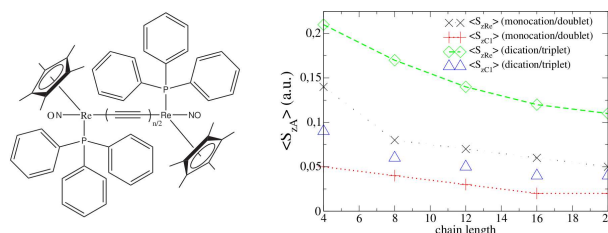
zeigte sich, dass bei allen Energien außerhalb sehr scharfer Bereiche um die Energien der auf dem Metallatomen lokalisierten MOs das Elektron immer den „längerer“ Pfad durch den Porphyrinliganden nimmt. Dies legt nahe, dass man, um die Leitfähigkeit des Systems zu beeinflussen, vorrangig die Energien der porphyrinartigen MOs direkt oder indirekt manipulieren sollte.

Eine besonders interessante Art von Brücke sind solche, die für Elektronen verschiedene Spins verschiedene Durchlässigkeit aufweisen. Wir fanden, dass zum einen diese „Spinfilter“-Eigenschaften in organischen Radikalen durch chemische Substitution stark beeinflusst werden können [12], und dass sie zum anderen deutlich mit der Spindichte auf dem Teil des Radikals korrelieren, durch den das Elektron tunnelt [13].

Diese Transportrechnungen und Analysen führen wir mit einem in Zusammenarbeit mit Gemma Solomon, Universität Kopenhagen, entwickelten Programm durch, das den Output verschiedener Quantenchemieprogramme nachbearbeiten kann [14, 15].

## Lokale Spins in verbrückten Übergangsmetallkomplexen

Lineare Kohlenstoffketten sind ein prototypisches Beispiel für molekulare Drähte. Sie werden intensiv als Vermittler elektronischer Kommunikation zwischen Metallzentren untersucht [17, 18].



**Abb. 3:** Lewisstruktur der neutralen Verbindung  $[\text{Re}]-\text{C}_n-[\text{Re}]$ , wobei  $[\text{Re}] = \eta^5-(\text{C}_5\text{Me}_5)\text{Re}(\text{NO})(\text{PPh}_3)$  (links), und lokale Spinwertungswerte  $\langle \hat{S}_{zA} \rangle$  als Funktion der Kohlenstoffkettenlänge (rechts) [16].

Auf Grundlagen einer lokalen Zerlegung der Spindichte [19, 20] in verschiedenen Ladungs- und Spinzuständen fanden wir, dass die Spindichte überraschenderweise stärker auf den Kohlenstoffketten als auf den Metallzentren lokalisiert ist (siehe Abbildung 3), und dass die Energieaufspaltung zwischen Spinzuständen aus Orbitalenergiedifferenzen abgeschätzt werden kann [16].

## Schwingungsspektroskopie

Bewegungen des Kerngerüsts können einen wichtigen Einfluss auf die elektronische Kommunikation einer Brücke haben. Wir haben großes Interesse an schwingungsspektroskopischen Eigenschaften und sind Mitentwickler des Schwingungsspektroskopieprogramms MOVIPAC (vormals SNF und AKIRA) [21].

## Literatur

- [1] M. Mayor, H. B. Weber, J. Reichert, M. Elbing, C. von Hänisch, D. Beckmann, M. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 5834-5838.
- [2] G. C. Solomon, D. Q. Andrews, T. Hansen, R. H. Goldsmith, M. R. Wasielewski, R. P. Van Duyne, M. A. Ratner, *J. Chem. Phys.* **2008**, *129*, 054701.
- [3] F. Paul, A. Bondon, G. da Costa, F. Malvolti, S. Sinbandhit, O. Cador, K. Costuas, L. Toupet, M.-L. Boillot, *Inorg. Chem* **2009**, *48*, 10608-10624.
- [4] K. Matsuda, M. Irie, *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 7195-7201.
- [5] S. J. van der Molen, J. Liao, T. Kudernac, J. S. Agustsson, L. Bernard, M. Calame, B. J. van Wees, B. L. Feringa, C. Schönberger, *Nano Lett.* **2009**, *9*, 76-80.
- [6] C. Herrmann, G. C. Solomon, M. A. Ratner, *J. Phys. Chem. C* **2010**, *114*, 20813-20820.
- [7] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1957**, *1*, 223-231.
- [8] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas, *Phys. Rev. B* **1985**, *31*, 6207-6215.
- [9] T. N. Todorov, *J. Phys.: Condens. Matter* **2002**, *14*, 3049-3084.
- [10] A. Pecchia, A. D. Carlo, *Rep. Prog. Phys.* **2004**, *67*, 1497-1561.
- [11] G. C. Solomon, C. Herrmann, T. Hansen, V. Mujica, M. A. Ratner, *Nat. Chem.* **2010**, *2*, 223-228.
- [12] C. Herrmann, G. C. Solomon, M. A. Ratner, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 3682-3684.
- [13] C. Herrmann, G. C. Solomon, M. A. Ratner, *J. Chem. Phys.* **2011**, *134*, 224306.
- [14] C. Herrmann, G. C. Solomon, "ARTAIOS — a transport code for postprocessing quantum chemical electronic structure calculations", 2008-2012.
- [15] C. Herrmann, G. C. Solomon, J. E. Subotnik, V. Mujica, M. A. Ratner, *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 024103.
- [16] C. Herrmann, J. Neugebauer, J. A. Gladysz, M. Reiher, *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 6174-6182.
- [17] S. Szafert, J. A. Gladysz, *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 4175-4206.
- [18] F. Paul, C. Lapinte, Magnetic Communication in Binuclear Organometallic Complexes Mediated by Carbon-Rich Bridges. In *Unusual Structures and Physical Properties in Organometallic Chemistry*; M. Gielen, R. Willem, B. Wrackmyer, (Eds.), Wiley: New York, 2002.
- [19] A. E. Clark, E. R. Davidson, *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 7382-7392.
- [20] C. Herrmann, M. Reiher, B. A. Hess, *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*, 034102.
- [21] T. Weymuth, M. P. Haag, K. Kiewisch, S. Lubner, S. Schenk, C. R. Jacob, C. Herrmann, J. Neugebauer, M. Reiher, *J. Comput. Chem.* **2012**, *33*, 2186-2198.

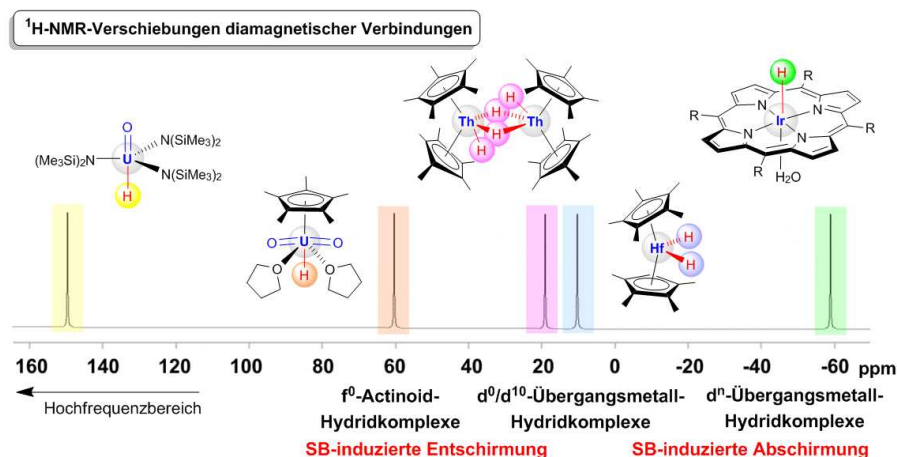
## 5.2 Theoretische Chemie an der TU Berlin

Seit dem Wintersemester 2010/2011 ist mit Prof. Dr. Martin Kaupp, der von der Universität Würzburg kam, die Quantenchemie am Institut für Chemie der TU Berlin wieder mit einer Vollprofessur vertreten. Prof. Dr. Martin Schoen repräsentiert dagegen die mesoskopische Dynamik und die statistische Thermodynamik weicher Materie. Im Rahmen einer Juniorprofessur bearbeitet Prof. Dr. Maria Andrea Mroginski das Gebiet „Biomolekulare Modellierung“ mit MD- und QM/MM-MD-Simulationen. Die Theoretische Chemie ist dabei bezüglich der Lehre in die Fachgruppe für Physikalische und Theoretische Chemie am Institut eingebettet.

### 1. Forschung im AK Kaupp

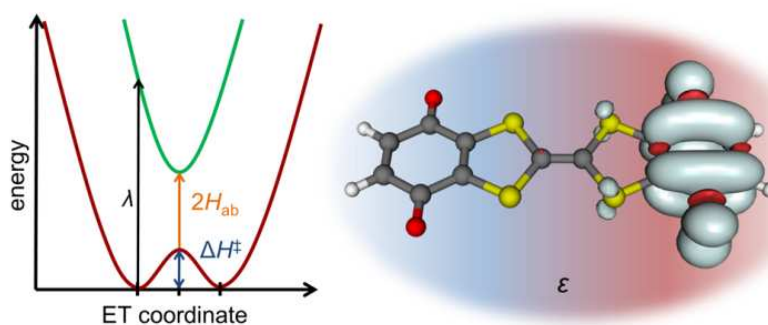
Die Einrichtung einer Vollprofessur für Quantenchemie wurde nicht unerheblich durch die Existenz des DFG-Exzellenzclusters „Unifying Concepts in Catalysis“ (UniCat) begünstigt, und der AK Kaupp ist seit der Ankunft in Berlin stark im Cluster engagiert. UniCat vereint die Katalyse-Aktivitäten aller drei Berliner Universitäten, der Universität Potsdam sowie des Fritz-Haber-Institutes, des Max-Planck-Institutes für Kolloid- und Grenzflächenforschung in Golm und weiterer außeruniversitärer Institute (siehe [www.unicat.tu-berlin.de/](http://www.unicat.tu-berlin.de/)). Dabei stehen übergreifende Einblicke im Vordergrund, die ein Verständnis biologischer Katalyse mit homogener und heterogener chemischer Katalyse verbinden. Die Aufgaben der Quantenchemie hierbei sind vielseitig. Der AK Kaupp trägt insbesondere im Bereich der Aktivierung kleiner Moleküle durch Metalloenzyme und durch synthetisch im Cluster generierte Modellsysteme zu einem besseren Verständnis bei. Es wird eng mit den Synthetikern, Spektroskopikern und Strukturbiologen zusammengearbeitet. Dabei werden Reaktionsmechanismen durch quantenchemische Charakterisierung von Intermediaten, Übergangszuständen und Produkten untersucht. Neben Strukturen und Energien liefert die Theorie hier

insbesondere spektroskopische Daten, welche die Verbindung zum Experiment herstellen, wobei die Berechnung von NMR- und vor allem EPR-Parametern einen Schwerpunkt darstellt. Insbesondere mehrkernige Spin-gekoppelte offenschalige Fe-S oder Mn-O Cluster spielen eine wichtige Rolle und stellen eine große Herausforderung für die Theorie dar. Letztlich müssen broken-symmetry DFT-Ansätze und Spin-Projektionsverfahren eingesetzt werden um u.a. die EPR-Parameter zu extrahieren. Als prominentes Anwendungsbeispiel seien hier kürzliche Arbeiten zum „oxygen-evolving complex“ (OEC) im Photosystem II genannt, der in Berlin sehr intensiv untersucht wird: Durch Berechnung der  $^{55}\text{Mn}$ -Hyperfeinkopplungen und insbesondere der  $^{14/15}\text{N}$ -Kopplungen eines gebundenen Histidinliganden konnten zahlreiche der bis dahin kontrovers diskutierten Strukturmodelle ausgeschlossen werden, und es ergab sich starke Unterstützung für ein 2009 von Siegbahn basierend auf quantenchemischen Optimierungen vorgeschlagenes Modell<sup>1</sup>, was nachfolgend durch eine neue, verbesserte kristallographische Untersuchung bestätigt wurde. Diese und weitere Anwendungsarbeiten basieren auf methodischen Entwicklungen zu störungstheoretischen Methoden im Bereich NMR- und EPR-Parametern, die im AK bereits seit Jahren in Zusammenarbeit mit der Gruppe von V. G. Malkin in Bratislava betrieben werden. Hierbei standen zuletzt relativistische Ansätze im Vordergrund, u.a. vierkomponentige DFT-Berechnungen elektronischer g-Tensoren<sup>2</sup> und chemischer Verschiebungen.<sup>3</sup> Ein besonders spektakuläres kürzliches Anwendungsbeispiel ist die Vorhersage gigantischer Spin-Bahneffekte auf die  $^1\text{H}$ - und  $^{13}\text{C}$ -Verschiebungen an Uran(VI)-Komplexe gebundener Liganden.<sup>4</sup> Es wurde ein noch nie dagewesener hochfrequenter Verschiebungsbereich für Uran(VI)-Hydridkomplexe zur Charakterisierung vorhergesagt.



Noch aus dem Würzburger GRK1221 motiviert hat der AK in den letzten Jahren ein quantenchemisches Protokoll zur genauen Behandlung des lokalisierten/delokalisiertes Charakters sowie der Strukturen und Eigenschaften gemischtvalenter Verbindungen und ihres Elektronen-Transfers entwickelt.<sup>5–8</sup> Erstmals kann damit eine Klassifizierung nahe der Grenzen des Robin-Day-Ansatzes quantenchemisch durchgeführt werden. Die Kontrolle der Balance zwischen Selbstwechselwirkungsfehlern und Korrelationseffekten in spezifischen Hybriddichtefunktionalen sowie die Beschreibung

von Solvenseffekten spielen die entscheidenden Rollen. Zunächst wurden Kontinuumsolvens-Modelle verwendet. Kürzlich konnte jedoch gezeigt werden, dass mit Hilfe des neuen D-COSMO-RS-Ansatzes auch der Einfluß protischer Lösungsmittel auf die Elektronentransferparameter ohne die Notwendigkeit aufwändiger Molekulardynamiksimulationen beschrieben werden kann.<sup>7,8</sup> Während die ersten Arbeiten sich mit rein organischen gemischtvalenten Systemen beschäftigten, stehen nun auch gemischtvalente mehrkernige Übergangsmetallkomplexe im Fokus der Anstrengungen.



Ein weiterer methodischer Schwerpunkt befasst sich mit der Entwicklung sogenannter lokaler Hybridfunktionale, bei denen die positionsabhängige Beimischung exakten Austausches zum Funktional durch eine geeignete lokale Mischfunktion (LMF) kontrolliert wird. Lokale Hybride weisen erhebliches Potential für eine verbesserte Genauigkeit bei zahlreiche Eigenschaften, inklusive für TDDFT-Berechnungen, auf. Neben der Optimierung guter LMFs<sup>9</sup> stehen derzeit das

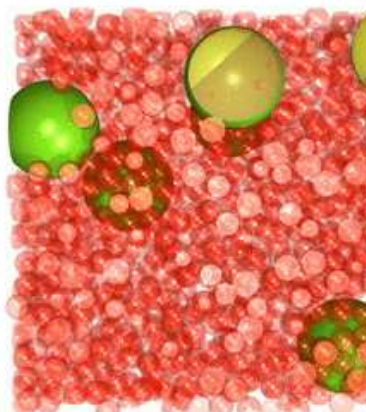
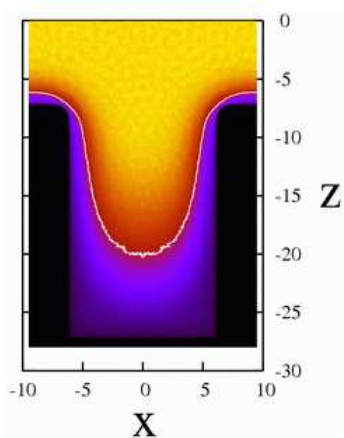
zu kombinierende Korrelationsfunktional,<sup>10</sup> die Frage des Eichsprungs der Austauschenergie-dichten sowie eine effizientere Implementierung im Vordergrund der Untersuchungen. Zahlreiche weitere Fragestellungen werden mit Hilfe quantenchemischer Methoden gelöst. Als Beispiel seien hier nur kürzliche Vorhersagen neuer Spezies und Oxidationsstufen der Übergangsmetalle genannt.<sup>11,12</sup>



## 2. Forschung im AK Schoen

Ein Schwerpunkt der Forschung der Arbeitsgruppe liegt auf der Untersuchung fluider Phasen in begrenzten Geometrien.<sup>13</sup> Hierbei handelt es sich zumeist um mesoporöse Materialien, bei denen typische Porenweiten im Bereich weniger Nanometer liegen. Die Größenordnung der Porenweite liegt damit im Bereich der Reichweite typischer intermolekularer Wechselwirkungen. Durch das Wechselspiel zwischen räumlicher Begrenzung auf nanoskopische Volumina und die intermolekularen Wechselwirkungen kommt es zu ungewöhnlichen Materialeigenschaften der Fluide.<sup>14</sup> Das wohl prominenteste Beispiel ist dabei eine Verschiebung des kritischen Punktes des Fluids relativ zur Lage des kritischen Punktes einer entsprechenden Volumenphase, deren Ausmaß vom Grad der räumlichen Begrenzung abhängt.<sup>15</sup> Je nach Beschaf-

fenheit der begrenzenden Festkörperoberflächen kann es außerdem zur Ausbildung thermodynamischer Phasen kommen, die aufgrund ihrer inneren Struktur und ihren Transporteigenschaften keine Entsprechung im Volumen haben.<sup>16</sup> Diese Phasen sind unter anderem wegen ihrer ungewöhnlichen Materialeigenschaften faszinierend. Hier konnte in den vergangenen Jahren unter anderem nachgewiesen werden, dass Fluide in begrenzter Geometrie ein rheologisches Verhalten zeigen, das denen eines Festkörpers im Volumen ähnelt, gleichzeitig jedoch Diffusionseigenschaften aufweisen, die typisch für flüssige Phasen im Volumen sind. Ein breites Spektrum moderner Methoden der Statistischen Physik wird hier eingesetzt. Es reicht von einfachen, störungstheoretischen Ansätzen über Dichtefunktionaltheorie bis hin zu Monte Carlo und Molekulardynamiksimulationen.



Ein relativ neues Forschungsgebiet befasst sich mit fluiden Phasen, in denen verschiedene Längen- und Zeitskalen und deren Verbindung für spezifische Materialeigenschaften relevant sind.<sup>17</sup> Beispiele für solche Systeme sind etwa Kolloidteilchen oder super- bzw. supramolekulare Aggregate (z.B. Polymere) in Lösungsmitteln aus kleineren, schnellen Molekülen. Bei der theoretischen Untersuchung solcher Systeme möchte man in der Regel von der aufwändige Berücksichtigung der (physikalisch irrelevanten) hohen Zahl von Freiheitsgraden des Lö-

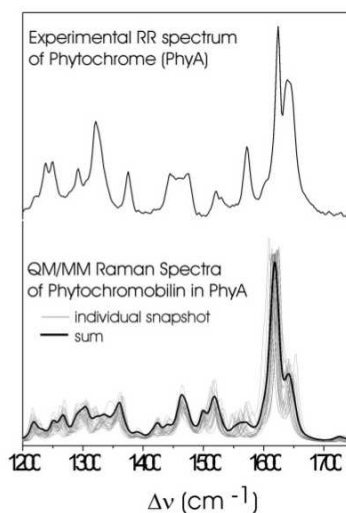
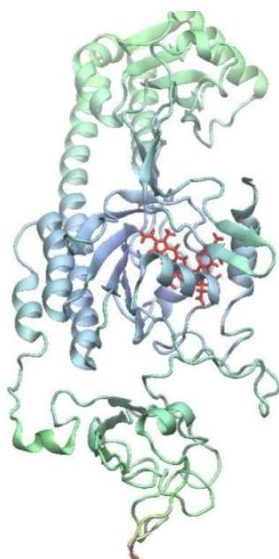
sungsmittels absehen. Hierzu werden seit einigen Jahren Strategien einer „Grobrasterung“ (engl.: coarse graining) entwickelt, die es gestatten, eine physikalisch sinnvolle Beschreibung von Struktur und Dynamik des interessierenden Makromoleküls zu erhalten ohne eine explizite Berücksichtigung des nicht weiter interessierenden Lösungsmittels. Eine angemessene Berücksichtigung des Lösungsmittels kann durch die Einführung so genannter effektiver Potentiale (anstelle atomistischer Wechselwirkungspotentiale) erreicht werden, deren genaue Form von der Wahl

des thermodynamischen Zustands abhängt. Die Bestimmung dieses Potentials gelingt am besten mit Hilfe der so genannten Boltzmann-Inversion auf numerischem Wege aus Strukturdaten. Die Dynamik grobgerasterter Systeme wird mit Hilfe Brown'scher Computersimulationen, herkömmlicher Molekulardynamik-Simulationen oder auch durch die numerische Lösung einer verallgemeinerten Langevin-Gleichung untersucht. Im letzteren Fall werden die Freiheitsgrade des Lösungsmittels durch stochastische Kräfte summarisch berücksichtigt. Einige dieser Arbeiten werden im Rahmen des Internationalen Graduiertenkollegs „Self assembled soft matter nanostructures at interfaces“ durchgeführt, dessen Sprecher Prof. Schoen ist.

### 3. Forschung im AK Mroginski

Wichtige Forschungsschwerpunkte sind die Untersuchung von strukturellen und spektroskopischen Eigenschaften von Modellverbindungen und Biomolekülen mit Hilfe

quantenmechanischer (QM) und quantenmechanisch/molekularmechanischer (QM/MM) Hybrid-Methoden und Molekulardynamik-Simulationen (MD). Zur detaillierten Interpretation experimenteller spektroskopischer Daten werden Berechnungen durchgeführt, vor allem zur Bestimmung von Infrarot (IR)-, Raman- und Resonanz-Raman (RR)-Spektren. Während Berechnungen der IR- und Raman-Intensitäten isolierter Moleküle unter Verwendung von kommerziell erhältlichen Programmen durchgeführt werden können, wurde zur Berechnung von RR-Intensitäten ein Programm auf quantenchemischer Basis entwickelt und an organischen Molekülen und Übergangsmetall-Komplexen validiert.<sup>18–21</sup> Es wurde die von Hizhnyakov und Tehver entwickelte Transformtheorie verwendet. In diesem Ansatz werden experimentelle und theoretische Informationen miteinander verknüpft, und das Vielmodenproblem wird durch die Einführung der Kramers-Kronig-Transformierten des elektronischen Anregungsspektrums umgangen.



Für die Berechnung von Raman-Spektren für Moleküle in kondensierter Phase, z.B. in einer komplexen Proteinumgebung, sind reine QM-Verfahren aufgrund ihres großen Rechenaufwandes nicht geeignet. Verbesserte Ansätze zur Untersuchung solcher komplexer Systeme bilden QM/MM-Verfahren, die sich zu einem immer

wichtiger werdenden Werkzeug für die Beschreibung von Proteinen entwickelt haben.<sup>22</sup> Dabei wird der Kofaktor mit QM-Methoden und die umgebende Proteinmatrix mit empirisch gewonnenen MM-Kraftfeldern beschrieben. Verschiedene Verfahren für die QM/MM-Berechnung der Ramanspektren von Kofaktoren in Proteinen

wurden in den vergangenen Jahren im AK entwickelt und erfolgreich auf verschiedene proteingebundene Kofaktoren und katalytische Zentren in Enzymen angewendet.<sup>22–24</sup> Weiterhin werden reine MM-MD-Verfahren zur effizienten Modellierung sehr komplexer Systeme angewendet, insbesondere für die Simulation von Proteinen und für die Untersuchung adsorptionsinduzierter Strukturänderungen von Makromolekülen auf verschiedenen Oberflächen. Beispiele sind i) die Adsorption der Sulfite Oxidase auf „self-assembled monolayers“ und ii) die Adsorption von Bone Morphogenetic Protein auf TiO<sub>2</sub>- und Graphit-Oberflächen. Viele dieser Arbeiten tragen ebenfalls zu UniCat bei (s.o.).<sup>25,26</sup>

#### 4. Lehre

Die Theoretische Chemie ist an der TU in Zusammenarbeit mit den Kollegen von der Physikalischen Chemie im Kanon des Bachelorstudienganges mit einer Pflichtvorlesung mit Übungen ThC-1 (Quantenchemie 1), mit den Vorlesungen/Übungen Mathematik für Chemiker 1 und 2 sowie mit verschiedenen Wahlmodulen, sowohl zur Quantenchemie als auch zur statistischen Thermodynamik, vertreten und an verschiedenen Veranstaltungen zur Spektroskopie beteiligt. Im Masterstudiengang wird eine integrierte Pflichtlehrveranstaltung zur Anwendung von Computern in der Chemie sowie ebenfalls diverse Wahlmodule aus den unterschiedlichen Forschungsgebieten (Quantenchemie, Molekulare Thermodynamik) angeboten. Das Pflichtmodul beinhaltet u.a. Einführungen in Computeralgebra-Softwareprogramme, in die statistische Datenanalyse, in die Molekulardynamik sowie in diverse weitere Aspekte. Im Masterstudiengang besteht die Möglichkeit, die Theoretische Chemie als Vertiefungsfach zu wählen. In jedem Fall haben die Studenten die Möglichkeit, die Theoretische Chemie in großer Breite sowohl im Bachelor- als auch im Masterstudiengang zu erfahren. Neben dem mathematisch-physikalischen Hintergrund beinhaltet dies explizit auch praktische quantenchemische Rechnungen, unterschiedliche Programmierkurse sowie die Modellbildung bei verschie-

denen chemischen Fragestellungen. Die neu hinzugekommenen Angebote im Bereich der Quantenchemie wurden von den Studenten bislang sehr positiv rezipiert.

#### Literatur

1. S. Schinzel, J. Schraut, A. V. Arbuznikov, P. E. M. Siegbahn, M. Kaupp *Chem. Eur. J.* **2010**, 16, 10424.
2. P. Hrobárik, M. Repiský, S. Komorovský, V. Hrobáriková, M. Kaupp *Theor. Chem. Acc.* **2011**, 129, 715.
3. P. Hrobárik, V. Hrobáriková, F. Meier, M. Repiský, S. Komorovský, M. Kaupp *J. Phys. Chem. A* **2011**, 115, 5654.
4. P. Hrobárik, V. Hrobáriková, A. H. Greif, M. Kaupp *Angew. Chem.* **2012**, 124, 11042.
5. M. Renz, K. Theilacker, C. Lambert, M. Kaupp *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 16292.
6. M. Kaupp, M. Renz, M. Parthey, C. Lambert, M. Stolte, F. Würthner *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, 13, 16973.
7. M. Renz, M. Kess, M. Diedenhofen, A. Klamt, M. Kaupp *J. Chem. Theor. Comput.*, DOI: 10.1021/ct300545x.
8. M. Renz, M. Kaupp *J. Phys. Chem. A* **2012**, 43, 10629.
9. A. V. Arbuznikov, M. Kaupp *J. Chem. Phys.* **2012**, 136, 014111.
10. H. Bahmann, A. V. Arbuznikov, M. Kaupp *J. Phys. Chem. A* **2009**, 113, 11891.
11. X. Wang, L. Andrews, S. Riedel, M. Kaupp, *Angew. Chem.* **2007**, 119, 8523.
12. Y. Gong, M. Zhou, M. Kaupp, S. Riedel *Angew. Chem.* **2009**, 121, 8019.
13. Nanoconfined fluids. Soft matter between two and three dimensions. M. Schoen, S. H. L. Klapp, (Wiley-VCH, Hoboken, 2007).
14. M. Mazza, M. Greschek, R. Valiullin, J. Kärgner, M. Schoen *Phys. Rev. Lett.* **2010**, 105, 227802. M. G. Mazza, M. Greschek, R. Valiullin, M. Schoen *Phys. Rev. E* **2011**, 83, 051704.
15. M. Schoen, D. J. Diestler *J. Chem. Phys.* **1998**, 109, 5596.
16. M. Schoen *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, 10, 223.
17. S. H. L. Klapp, D. J. Diestler, M. Schoen *J. Phys.: Cond. Mat.* **2004**, 16, 7331. J. R. Silbermann, S. H. L. Klapp, M. Schoen, N. Chennamsetty, H. Bock, K. E. Gubbins *J. Chem. Phys.* **2006**, 124, 074105. S. H. L. Klapp, J. R. Silbermann, M. Schoen *Mol. Phys.* **2007**, 105, 1039.
18. M. A. Mroginiski, C. Kneip, P. Hildebrandt, F. Mark *J. Mol. Struct.* **2003**, 661, 611.
19. M. A. Mroginiski, P. Hildebrandt, F. Mark *J. Comp. Meth. Sci. Eng.* **2002**, 2, 97.
20. M. A. Mroginiski, K. Nemeth, I. Magdo, M. Müller,

- U. Robben, C. Della Védova, P. Hildebrandt, F. Mark *J. Phys. Chem. B* **2000**, 104, 10885.
21. N. Tschirner, M. Schenderlein, K. Brose, E. Schlodder, M.A. Mroginski, P. Hildebrandt, C. Thomsen *Phys. Stat. Solidi B* **2008**, 245, 2225.
22. M. A. Mroginski, F. Mark, W. Thiel, P. Hildebrandt *Biophys. J.* **2007**, 93, 1885.
23. M. A. Mroginski, D. von Stetten, S. Kaminski, F. Escobar, N. Michael, G. Daminelli-Widany, P. Hildebrandt *J. Mol. Struct.* **2011**, 993, 15.
24. Y. Rippers, M. Horch, P. Hildebrandt, I. Zebger, M. A. Mroginski *ChemPhysChem*, DOI: 10.1002/cphc.201200562.
25. T. Utesch, M. Sezer, I. Weidinger, M. A. Mroginski *Langmuir* **2012**, 28, 5761. 26. T. Utesch, G. Daminelli, M. A. Mroginski *Langmuir* **2011**, 27, 13144.

## 6 Themenkomplex: Forschungsförderung

Die Entscheidungen zur zweiten Runde der Exzellenzinitiative sind in diesem Frühsommer gefallen. Nicht überall findet die Initiative Wohlwollen, auch weil Auswirkungen auf die „üblichen“ Förderinstrumente der DFG befürchtet werden. In den folgenden beiden Beiträgen von Herrn Prof. Gernot Frenking (Marburg) und Frau Dr. Kowol-Santen von der DFG werden verschiedene Aspekte zum Komplex Forschungsförderung angesprochen. Diese sind als Anstoß und Hintergrundinformationen zur allgemeinen Diskussion gedacht. Die Redaktion dankt den Autoren und wünscht uns allen vertiefte Einsichten beim Lesen.

### 6.1 Ein Brief und seine Geschichte

Im Septemberheft der „Blauen Blätter“ (Nachrichten aus Chemie und Technik) erschien ein Interview mit mir zum Thema Exzellenzinitiative, in dem ich mich sehr kritisch zu den Auswirkungen dieses Programms auf die Forschungsförderung und die Wissenschaftskultur in Deutschland geäußert habe. Das Interview hatte eine Vorgeschichte, die ich hier gerne weitergeben möchte. Ich beobachte seit einigen Jahren mit wachsender Sorge die Art der Forschungsförderung in Deutschland, die in steigendem Maße in den Sog von speziellen Programmen gerät, was zu einem ungesunden Druck zur Einrichtung von Verbundforschung geführt hat. Als der Zeitpunkt der Verkündung der Ergebnisse der dritten Stufe der Exzellenzinitiative näher rückte und die Berichterstattung darüber in den Gazetten zu einem öffentlichen Spannungsszenario mit Boulevardcharakter geriet, habe ich im Juli 2012 einen Artikel verfasst und an die Wissenschaftsredaktionen einiger Zeitungen (SZ, FAZ, Zeit) geschickt mit der Bitte um Abdruck und evtl. Stellungnahme. Der Brief wurde nirgendwo gedruckt, was mit seiner Länge begründet wurde. Ich habe ihn daraufhin an die Blauen

Blätter geschickt, wo er wohlwollend begrüßt wurde mit dem Vorschlag, an Stelle des Briefes ein Interview zum Thema Exzellenzinitiative durchzuführen. Dies ist geschehen und daraus ist das o. g. Interview entstanden. Mein Brief ging aber in seiner Thematik über die Exzellenzinitiative hinaus und er enthielt einige Punkte, die dort nicht zur Sprache kamen. Daher möchte ich die Gelegenheit nutzen, den vollen Wortlauf meines Briefes im „TC-Info“ zu veröffentlichen in der Hoffnung, einen Anstoß zu aktiver kritischer Stellungnahme zur Forschungsförderung in Deutschland zu geben.

Es folgt der Briefftext:

In der letzten Ausgabe von „Angewandte Chemie“ 2011 wurde in einem eindringlichen Editorial des Präsidenten und der Vorstandsreferentin der Alexander-von-Humboldt-Gesellschaft auf die Gefahren für die Grundlagenforschung hingewiesen, die durch eine zunehmende Einnengung der Freiräume für kreative Wissenschaftler entsteht, deren Forschung nicht in den Bereich von großzügig geförderten Verbundprojekten

ten und Exzellenzinitiativen fallen. Ich möchte aus meiner langjährigen Erfahrung als antragstellender Forscher in Verbund- wie auch Einzelprojekten, als Gutachter und Fachkollegiat der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und nicht zuletzt als Dekan des Fachbereichs Chemie der Philipps-Universität Marburg das Thema aufgreifen und konkretisieren. Mich treibt eine tiefe Sorge um die Entwicklung der kreativen und innovativen Wissenschaft in Deutschland, die in beängstigendem Maße unter politischen Druck gerät, ihre Forschungsziele vorab im Rahmen von „Zielvereinbarungen“ nach vorgegebenen Richtlinien normiert zu präsentieren und eine Erfolgsaussicht zu fixieren, deren Kriterien sich allein an finanziellen und politischen Gesichtspunkten orientieren. Das paradoxe an der Situation ist dabei, dass die Probleme in erster Linie nicht etwa auf die mangelnde Finanzierung der Wissenschaft zurückzuführen sind. Das derzeitige Problem der deutschen Wissenschaft liegt nicht primär an der unzureichenden Höhe der Finanzierung, sondern an dem Verteilungsmuster der Mittel, das sich in steigendem Maße nicht nach wissenschaftlichen Kriterien sondern nach denen der politischen Verwertbarkeit von Wissenschaft ausrichtet.

Der Start für diese Entwicklung kann mit dem steigenden Einfluss von Forschungsprogrammen der DFG in Verbindung gebracht werden, mit denen Verbundprojekte von Wissenschaftlern (Sonderforschungsbereiche (SFB), Graduiertenkollegs (GK), Forschergruppen (GK)) gefördert werden. Deren Einführung in den 1980er Jahren wurde seinerseits begrüßt, da mit der Finanzierung von fächerübergreifenden Kooperationen auch unterschiedlicher Disziplinen sinnvolle Ergänzungsprogramme zu den Einzelförderungen geschaffen wurden, um die Zusammenarbeit von Wissenschaftlern in größeren Forschungsvorhaben zu unterstützen. Die Programme haben aber eine unerwartete Eigendynamik entwickelt, die nicht bedacht wurde. Naturgemäß ist das Antragsvolumen etwa eines SFBs mit 15 – 20 Wissenschaftlern sehr viel größer als

das eines Einzelantrags. Erfolgreich eingeworbene SFBs bringen nicht nur der Forschergruppe sehr viel Geld und Prestige, sie sind auch für die zugehörige Universität eine wichtige Geldquelle, da mit einem SFB häufig auch die Anschaffung von Großgeräten und seit einigen Jahren auch eine Programmpauschale in Höhe von 20% der Projektausgaben verknüpft ist. Dies kann sich zu einem zweistelligen Millionenbetrag summieren, der für die notorisch unterfinanzierten Universitäten eine wichtige Einnahmequelle darstellt. Die als Ergänzungsausstattung akquirierten Personal- und Sachmittel gestatten eine Umschichtung universitätsinterner Mittel und werden so zu einem wichtigen Bestandteil der Finanzierung von Forschung und Lehre.

Die Bedeutung der Verbundprojekte - insbesondere der SFBs - ist in den vergangenen 20 Jahren aus der Rolle einer nützlichen Ergänzungsförderung in den Status eines Vorzeigekriteriums für erfolgreiche Forschung mutiert, deren unverhältnismäßige Bedeutung zu einer Gefährdung für die wirklich innovative und kreative Forschung geworden ist. Diese entsteht nämlich fast immer durch die Leistung einzelner Wissenschaftler, deren Forschungsgebiete und Ideen sich aus anfänglich oft exotischen Fragestellungen allein durch Neugier getrieben nur dem Erkenntnisgewinn als Ziel widmen. Genau dies ist aber Aufgabe und Zweck des akademischen Wissenschaftsbetriebs, der ähnlich wie die Kunst primär eine Kulturleistung und nicht eine wirtschaftliche Leistung ist.

Betrachtet man die Homepages von Universitäten oder hört man Universitätspräsidenten über ihre Alma Mater reden, wird die Zahl der SFBs und Graduiertenkollegs an vorderster Stelle als Zeichen der Leistungskraft der Hochschule herangeführt. Dies hat zu einer Situation geführt, in der Fakultäten und Fachbereiche unter zunehmenden Druck geraten, Verbundprojekte einzurichten. Ein fast immer angeschnittenes Standardthema bei Nachsitzungen an deutschen Universitäten ist die Diskussion von vor-

handenen/geplanten/abgelehnten SFBs und die Überlegung, wie man dem Druck der Universitätsleitung in dieser Richtung begegnet. Das führt dazu, dass bei Neuberufungen von Professoren in erster Linie deren Passfähigkeit in Verbundprojekte betrachtet wird und nicht deren Originalität in der Forschung. Wissenschaftler mit „exotischen“ Forschungsgebieten finden sich bisweilen in der merkwürdigen Situation, dass sie für ihre originelle Forschung gelobt und mit Auszeichnungen versehen, bei Stellenbesetzungen aber nicht berücksichtigt werden, weil sie nicht in das geplante Forschungsgebiet passen, das im Zuge von Zielvereinbarungen mit der Universitätsleitung abgesteckt wurde. Anstatt Köpfe zu berufen werden Felder besetzt – eine Todsünde gegen das wichtigste Prinzip bei der Suche nach den besten Wissenschaftlern als Vertreter der akademischen Forschung! Ich zitiere Prof. Rutger van Santen, der in einem Interview mit der Royal Society of Chemistry (<http://www.rsc.org/chemistryworld/Issues/2012/April/complex-paradox-science.asp>) auf die Problematik von kreativer Wissenschaft mit den Worten hinweist: „*Science can provide solutions for society, but only if it is given the freedom to find the unexpected.*“

Die geschilderte Situation ist in den letzten sechs Jahren durch die Einführung der sogenannten Exzellenzinitiative der Bundesregierung gravierend verschärft worden und treibt nun auf eine ernsthafte Gefährdung der akademischen Grundlagenforschung zu. Liest man die Selbsteinschätzung des BMBF auf deren Homepage (<http://www.bmbf.de/de/1321.php>) findet man den Text: „*Die Exzellenzinitiative hat an den deutschen Universitäten eine große struktur- und profilbildende Wirkung entfaltet, sie schafft neue forschungsfreundliche Strukturen und fördert die interdisziplinäre Zusammenarbeit innerhalb der Universität sowie zwischen Universitäten, den außeruniversitären Forschungseinrichtungen und der Wirtschaft.*“ Gespräche mit Kollegen an Universitäten, die in den Genuss der Förderung durch die Exzellenzinitiative ge-

kommen sind, sprechen eine ganz andere Sprache. Sehr gute Wissenschaftler, die auf Grund ihrer Leistungen auch zuvor schon keine Probleme mit der Finanzierung hatten, sehen sich nun mit zusätzlichen Aufgaben organisatorischer Art zugedeckt, bei denen sie die üppigen Finanzmittel der Exzellenzinitiative in entsprechende Programme zu kanalisieren haben. Dabei geht es weniger um den wissenschaftlichen Kern, sondern um dessen öffentlichkeitswirksame Außendarstellung möglichst als Eliteuniversität. Um es bildhaft darzustellen: Viele Menschen marschieren durch die Wüste und dürsten. Das zuständige Wasseramt spart sich die Mühe, jedem Einzelnen mühsam die für ihn ausreichende Menge Wasser zuzuführen. Stattdessen wird eine zusammenhängende Gruppe herausgenommen, der man in Gegenwart der Presse in einer PR-Veranstaltung eimerweise Wasser über den Kopf schüttet. Dies wird dann als Beweis genommen für die großzügige Versorgung der Menschen mit Wasser. Dabei wird zum einem geflissentlich übersehen, dass die so Bedachten nach der Wasserzufuhr klatschnass sind und nur ein Teil des Wassers seiner eigentlichen Bestimmung zugeführt wurde. Zum anderen werden die vielen Dürstenden übersehen, die dabei auf der Strecke bleiben.

Wie das in der Praxis des wissenschaftlichen Betriebs aussieht, habe ich selber als Dekan des Fachbereichs Chemie der Philipps-Universität Marburg erlebt. Da einige Länder wie etwa Hessen bei der ersten Exzellenzinitiative der Bundesregierung sehr schlecht abschnitten, wurde ein eigenes Landesprogramm nach gleichem Muster aufgelegt. Als es 2010 im Zuge von Sparmassnahmen trotz steigender Studierendenzahlen zu Kürzungen im Etat des hessischen Wissenschaftsministerium kam, wurden die Proteste gegen die schmerzhaften Einschnitte mit dem Hinweis abgeblockt, dass das landeseigene Exzellenzprogramm davon ausgenommen würde. Ich musste daraufhin im Jahr 2011 meinen 18 Kollegen der Chemie einen Einsparplan vorlegen, der u.a. eine Fixierung der jährlichen Ver-



brauchsmittel für Chemikalien und Glasgeräte auf 15.000 Euro enthielt – eine in Anbetracht der anfallenden Kosten völlig unzureichende Höhe. Gleichzeitig habe ich Berufungsverhandlungen für die Besetzung einer Professur geführt, die im Rahmen des landeseigenen Exzellenzprogramms für die Dauer von 5 Jahren eingerichtet wurde. Dem Kandidaten konnte ich eine sehr üppige Ausstattung in Aussicht stellen, die z.B. für Verbrauchsmittel einen Betrag von jährlich 100.000 Euro vorsah. Das ähnelt einem Vorgehen, bei dem man 18 Menschen, die täglich von Brot und Wasser leben, ihre Rationen noch einmal kürzt, damit ein Neuankömmling täglich im Gourmetrestaurant speisen kann. Eine nachhaltige Wirkung ist davon kaum zu erwarten, denn nach den 5 Jahren erwartet den Stelleninhaber den Fall in die Niederungen eines „normalen“ Professors.

Was mich betroffen gemacht hat und mich nach Gesprächen mit Politikern bewog, diesen Brief zu schreiben, ist die ernüchternde und auch wütend machende Erkenntnis, dass ohne starken Druck der betroffenen Wissenschaftler keine Änderung in der Struktur der Finanzierung der Wissenschaft zu erwarten ist. Exzellenzinitiativen und Eliteförderung sind zu wichtigen Statussymbolen und Vorzeigeobjekten von Regierungen und Universitätsverwaltungen geworden – ihre Abschaffung kommt dem Versuch gleich, einem Kind sein Lieblingsspielzeug wegzunehmen. Die Schäden setzen sich wie ein Rostfrass im Fundament der Wissenschaft fest. So können inzwischen viele Einzelanträge der DFG trotz bester Begutachtung nicht mehr gefördert werden, weil die hierfür notwendigen Mittel fehlen. Die Einzelanträge der DFG stellen aber die elementare Grundlage der akademischen Förderung in Deutschland dar! Seit dem Jahr 2011 werden solche Situationen „elegant“ gelöst: Die zuständigen Fachkollegiaten geben bei den 5x im Jahr stattfindenden Treffen nach jeder Diskussion eines Antrags Noten wie Punktrichter beim Eiskunstlauf. Eine Förderung erhalten all diejenigen Anträge, deren Punktezahl oberhalb

des Grenzwertes liegt, der durch das vorhandene Budget bestimmt wird. Dabei fallen viele Anträge durch das Raster der Förderung, die durch sehr positive Gutachten grundsätzlich als förderungswürdig empfohlen wurden. Hier findet unter Ausschluss der Öffentlichkeit eine politisch verursachte Beschädigung der akademischen Forschung statt, deren Auswirkungen sich in immer stärkerem Maße im Hochschulalltag manifestieren.

Es lohnt sich, die Meinung eines renommierten ausländischen Mitglieds der Jury der Exzellenzinitiative zu hören, der bei ihrer Einführung mitgewirkt hat. Prof. Peter Chen von der ETH Zürich erklärte in einem Interview vom 13.4.2009 (<http://www.spiegel.de/unispiegel/jobundberuf/0,1518,618517,00.html>), dass er die erste Runde als einen Startschuss für mehr Wettbewerb zwischen den deutschen Universitäten begrüßte. Er schreibt dann: *„Denselben Prozess kann ich für eine weitere Runde aber nicht empfehlen. Die Evaluation war extrem schwierig. Und es gab keine Überraschung. Dass der Prozess unsere Erwartungen nur bestätigt hat, war enttäuschend, wenn man den Aufwand mitberücksichtigt. Die Vorbereitung hat ungeheure Kräfte gebunden. Für großflächige Projekte von oben herab geht ein Drittel der Mittel für Organisationskosten verloren. Lohnt es sich, ein Drittel des Geldes wegzuzwerfen? Es gibt namhafte deutsche Forscher, die sagen, man sollte das gesamte Geld einfach der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) geben, als Investitionszuschlag für die ganz normale Förderung. Dann fließen die Mittel dahin, wo geforscht wird. Das finde ich richtig.“*

Die politische Seite hat die Kritiken und Hinweise auf verschwendetes Geld ignoriert. Derzeit wird die dritte (!) Runde der Exzellenzinitiative eingeläutet, während gleichzeitig die Budgets der DFG für die existierenden Förderprogramme nicht ausreichen, um die dort gestellten und hervorragend begutachteten Anträge zu finanzieren. Wir werden in der wissen-



schaftlichen Community weltweit um die Existenz der DFG als zentrale Organisation zur Förderung der Forschung an Hochschulen beneidet, weil sie keine Regierungsinstitution ist und sich dadurch ein hohes Maß an Selbständigkeit bewahren konnte. Die DFG hat eine ganze Reihe von Förderprogrammen entwickelt, die sich in der Praxis der wissenschaftlichen Forschung bewährt haben und einer ständigen kritischen Diskussion mit den Wissenschaftlern in der Praxis unterliegen. Dies schließt die Förderung von Spitzenleistungen und exzellenter Wissenschaft ein, wie z.B. durch den Gottfried-Wilhelm-Leibniz-Preis für herausragende deutsche Wissenschaftler und das Emmy-Noether-Programm für Nachwuchswissenschaftler. Neben den zahlreichen Förderprogrammen der DFG gibt es auch die hervorragenden Programme der Alexander-von-Humboldt-Stiftung, die dem Austausch der deutschen Wissenschaft mit dem Ausland dienen. Alle diese bewährten Programme leiden an chronischer Unterfinanzierung, während die sogenannten Exzellenzinitiativen mit dem Füllhorn „strukturfördernde Maßnahmen“ fördern und „Dynamik und Aufbruchstimmung in der Hochschullandschaft“ versprechen.

Wissenschaft eignet sich nicht als Modebetrieb, der den Strömungen der jeweiligen politischen Führung unterliegt und ihrem Drang, sich publikumswirksam zu präsentieren. Der derzeitige Druck, sich in „Strukturen“ und „Profilen“ im Kontext von „Zielvereinbarungen“ zu präsentieren, widerspricht den ureigenen Zielen und dem Antrieb der Wissenschaft, Neuland zu erobern und neue Erkenntnisse zu gewinnen. Wissenschaft ist das, was Wissen schafft. Ich plädiere mit Nachdruck für eine Rückkehr der Kriterien der Mittelverteilung der wissenschaftlichen Forschung zu rein fachlich orientierten Prinzipien, die sich nicht nach Strukturen und Zielvereinbarungen richten, sondern nach Originalität und Kreativität. Wissenschaftliche Förderungs-

programme sollten sich nach den Zielrichtungen der Forscher richten und nicht umgekehrt! Die Abschaffung der Exzellenzinitiative und die Kanalisierung der Mittel in die qualitätsorientierten Programme der DFG und der AvH wären ein wichtiger Schritt in die richtige Richtung.

Prof. Gernot Frenking  
 Fachbereich Chemie  
 Philipps-Universität Marburg

## 6.2 Forschungsförderung durch die DFG

### Bewilligungsquoten und Entscheidungswege: Immer wieder Quellen vieler Fragen und Missverständnisse

In der Chemie wurden in den vergangenen drei Jahren 46% der Anträge und 33% der Mittel bewilligt<sup>1</sup>. Das Fördervolumen für die Chemie ist stetig angestiegen von 85.3 Mio. € im Jahr 2005 auf 110.7 Mio. € im Jahr 2011. Das sind knapp 7% des gesamten Förderetats der DFG<sup>2</sup>. (Zum Vergleich: Für die Physik wurden 2011 159,9 Mio. € aufgewendet (9%) und für die Biologie (einschließlich Biochemie) 211,6 Mio. € (12%)). Entgegen vielen Befürchtungen und trotz der stärkeren öffentlichen Wahrnehmung der koordinierten Programme fließt mit rund 56% nach wie vor der überwiegende Teil des Förderetats der DFG ins Normalverfahren (Einzelförderung und Forschergruppen). In der Chemie sind es sogar rund 63% der Mittel, während 37% auf die koordinierten Programme (Sonderforschungsbereiche, Graduiertenkollegs und Schwerpunktprogramme) entfallen. Zurück zur Bewilligungsquote im Normalverfahren: Die Fragen, die uns hier häufig begegnen lauten:

*Hat mein Antrag im Frühjahr bessere Chancen als im Herbst? Sinkt die Bewilligungsquote im Laufe eines Jahres?* Nein, beides trifft nicht zu. Die sechs Fachkollegien der Chemie tagen als

<sup>1</sup>Beide Quoten beziehen Sonderforschungsbereiche und Graduiertenkollegs nicht mit ein.

<sup>2</sup>Die Mittel der Exzellenzinitiative werden hier nicht mit betrachtet.

Fachforum fünf bis sechs Mal im Jahr und diskutieren vergleichend im Schnitt fünfzig bis sechzig Anträge pro Sitzung. Dabei wird darauf geachtet, dass der Förderentscheidung gleiche Qualitätsmaßstäbe zu Grunde liegen und das zur Verfügung stehende Budget dem Antragsvolumen angepasst wird. Aufgrund der in der Regel sehr guten Qualität der Anträge kommt es allerdings häufiger dazu, dass für Anträge, die in den Gutachten als förderwürdig, aber im Vergleich mit anderen etwas schwächer eingeschätzt werden, keine Mittel mehr zur Verfügung stehen.

*Spielt bei dieser vergleichenden Bewertung die Höhe der beantragten Mittel eine Rolle? Haben Projekte mit niedrigerem Antragsvolumen eine bessere Chance?* Nein, Anträge mit geringem Finanzbedarf haben, eine sinnvolle Verwendung der Mittel vorausgesetzt, keine besseren Bewilligungschancen. Da die DFG in ihrem „bottom up“-Verfahren keine Inhalte der Forschung bestimmt, folgt das Budget immer dem Antragsvolumen. Dies impliziert, dass eine höhere Zahl gestellter Anträge im jeweiligen Fach auch zu einer höheren Zahl bewilligter Vorhaben führt. Eine selbstauferlegte Zurückhaltung bei der Antragstellung lässt das Budget nicht ansteigen und erhöht keineswegs die Chancen im eigenen Fach. Der oben beschriebene Anstieg der bewilligten Mittel ist nicht nur der steigenden Zahl von An-

trägen zu verdanken, sondern auch der pro Vorhaben höheren Antragssumme. Während das Antragsvolumen in den Jahren 2002 bis 2005 um die 130 Mio. € schwankte, ist seit 2006 ein stetiger Anstieg auf 225 Mio. € im Jahr 2011 zu verzeichnen, dabei stieg die pro Antrag im Durchschnitt bewilligte Summe von 140.000 € auf rund 210.000 €.

*Wie sieht die Verteilung zwischen den einzelnen Fächern der Chemie aus? Werden bestimmte Gebiete nicht benachteiligt? Wie ist es um die Theoretische Chemie bestellt?* Auch innerhalb der Chemie wird die Chancengleichheit der Anträge gewahrt, wie man an den Bewilligungsquoten der Fächer ablesen kann. Es gibt zwar kleine Schwankungen von Jahr zu Jahr, im Mittel über einen 5-Jahreszeitraum stimmen die Bewilligungsquoten jedoch im Wesentlichen überein (die Abweichungen zwischen Antrags- und Bewilligungsvolumen liegen unter 2%). Dies gilt insbesondere auch für die Theoretische Chemie, die mit rund 12% am Budget des Normalverfahrens beteiligt ist und deren Bewilligungsquote in den letzten Jahren sogar stets überdurchschnittlich war.

Dr. Johanna Kowol-Santen  
DFG-Geschäftsstelle  
Bonn

## 7 Verschiedenes

### 7.1 Trauernachricht

Am 2. Oktober 2012 ist Professor Nicolas C. Handy FRS, emeritierter Professor der Universität Cambridge, im Alter von 71 Jahren, verstorben. Er hat in vielen Bereichen der Quantenchemie ganz wesentliche Beiträge und Impulse gegeben. In der Trauernachricht des Department of Chemistry der University of Cambridge heißt es hierzu (<http://www.ch.cam.ac.uk/news/death-professor-nicholas-c-handy-frs>): *„His research was in the field of quantum chemistry, particularly on fundamental understanding and calculations on small molecules. Nick’s work spanned a wide area, from developing the methods for the exact solution of the Schrödinger equation, to theoretical spectroscopy and finally to his development of density functional theory in later years. His work on density functional theory, together with that of his friend John Pople, has been crucial for the acceptance of DFT by theoretical chemists and the development of DFT into a common tool for research in the molecular sciences. Nick has inspired a generation of science and scientists and his loss will be felt keenly across the globe.”* Nick Handy hinterlässt seine Ehefrau Carole, zwei Kinder und sechs Enkelkinder. (Die Red. auf Hinweis von Frau Prof. S. Peyerimhoff.)

### 7.2 Bunsentagung 2013 in Karlsruhe

Vor dem eigentlichen Tagungskalender weist Herr Prof. Wim Klopper besonders auf die Bunsentagung 2013 hin:

Liebe Mitglieder der AGTC,

die Bunsentagung 2013 wird vom 9. bis 11. Mai 2013 in Karlsruhe stattfinden. Ich möchte Sie mit dieser E-Mail daran erinnern, dass PCCP ein Sonderband zum Tagungshauptthe-

ma „Theory meets Spectroscopy“ herausgeben wird. Manfred Kappes und ich würden uns über ein Manuskript von Ihnen zum Thema sehr freuen.

Die Online-Registrierung für die Bunsentagung 2013 wird vom November an möglich sein. Ich würde mich über eine rege Teilnahme aus der AGTC sehr freuen. Es wäre eine gute Gelegenheit, unseren physikalisch-chemischen Kolleginnen und Kollegen zu zeigen, was wir können. Insbesondere Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler möchte ich ermuntern, einen Vortragsbeitrag einzureichen.

Mit freundlichen Grüßen,

W.M. Klopper  
Karlsruher Institut für Technologie

#### Main Topic

The 112<sup>th</sup> General Assembly of the German Bunsen Society of Physical Chemistry will take place at the Karlsruhe Institute of Technology (KIT) on May 9–11, 2013. The main topic of the Bunsentagung 2013 is:

#### Theory meets Spectroscopy

The main topic of the Bunsentagung 2013 focuses on state-of-the-art research in the fields of theoretical spectroscopy as well as molecular characterisation using experimental spectroscopy guided by quantum chemistry. This also includes recent advances in experimental techniques that probe molecules in gas and condensed phases under precisely defined/controlled conditions as well as new developments in describing such systems theoretically at a predictive level.

#### Opening Lecture

Mike Ashfold, University of Bristol  
*Comparing molecular photofragmentation*

*dynamics in the gas and liquid phases*

### Plenary Lectures

Tobias Brixner, University of Würzburg  
*Multidimensional spectroscopy of photophysics  
and photochemistry*

Dominik Marx, Ruhr-University Bochum  
*Theoretical spectroscopy from molecular  
dynamics*

Frank Neese, MPI for Bioinorganic Chemistry,  
Mülheim a. d. Ruhr  
*Insights into transition metal catalysis from a  
combination of spectroscopy and quantum  
chemistry*

Martin Wolf, Fritz Haber Institute, Berlin  
*Interfacial charge transfer dynamics and  
femtochemistry of molecular adsorbates*

### Full Lectures

Bernd Abel, University of Leipzig  
*Ultrafast soft X-ray photoelectron spectroscopy  
at liquid water microjets*

Maki Kawai, University of Tokyo  
*Evolution of Kondo resonance from a single  
impurity molecule to the two-dimensional  
lattice*

Benedetta Mennucci, University of Pisa  
*Modeling environment effects on spectroscopies  
through QM/classical models*

Cristina Puzzarini, University of Bologna  
*Rotational spectroscopy meets theory*

Thomas Rizzo, EPF Lausanne  
*IR and UV spectra of cold, biomolecular ions –  
a challenge for theory*

John Stanton, University of Texas at Austin  
*Twenty years of battle with the NO<sub>3</sub> molecule:  
some things that I have learned*

The main topic of the Bunsentagung 2013 seeks to highlight the growing importance of the synergistic interplay between theory and spectroscopy in advancing the field of molecular chemical physics in the age of Moore's law. As rapidly increasing computational resources become available, some areas of experiment are already being

supplanted by predictive-level theoretical spectroscopy. Other areas of experimental spectroscopy, concerned with more complex molecular systems, can presently help to further develop theory by providing benchmarks. Finally, certain areas of molecular spectroscopy (*e.g.*, under extreme conditions) will remain inaccessible to accurate computational prediction for quite a while yet. Nevertheless, even here useful physical insight will result from quantum-chemical model calculations. The talks of this symposium are intended to illustrate and further encourage this synergy between modern spectroscopy and state-of-the-art quantum-chemical calculations – in terms of examples ranging from molecules in gas-phase, through surface-bound to interacting-in-condensed-phase.

### Abstract Submission

You are invited to submit contributions either to the main topic area or to any other topical area. Submissions of contributions covering fundamental or applied, experimental or theoretical work (and combinations) are equally highly appreciated. The topical areas are:

1. Theory meets Spectroscopy (main topic)
2. Biophysical Chemistry
3. Solid State
4. Liquid State
5. Gaseous State
6. Interfaces
7. Soft Matter
8. Physical-Chemical Methods (experimental or theoretical)
9. Electrochemical Interfaces (special symposium)

Submissions for the main topic should be in English. Submissions to the other topics can be ma-

de in English or German. The authors are expected to present their work in the language of the abstract submitted. Abstract submission is accessible via

[www.bunsentagung.de](http://www.bunsentagung.de)

from November 1, 2012 onwards.

**Deadline for Abstract Submission:  
December 15, 2012**

Abstracts submitted after this deadline will not be reviewed. The Scientific Committee will review the submitted abstracts. Abstracts will either be accepted for oral or poster presentation.

**PCCP Themed Issue**

PCCP will publish the official themed issue to be displayed at the Bunsentagung entitled „Theory meets Spectroscopy” and guest edited by Manfred Kappes and Wim Klopper (both at Karlsruhe Institute of Technology). These two guest editors would be responsible for experiment (Kappes) and theory (Klopper).

**Deadline for Submission: November 30,  
2012**

All authors are invited to submit regular articles of original, unpublished research with a focus on quantum chemical methodology for spectroscopy or on the interplay between theory and experiment in spectroscopic studies in the gas or condensed phase, to PCCP. All submissions will be subject to rigorous peer review against PCCP’s high standard in the regular way. The guidelines for authors and the submission procedure can be found at:

[www.rsc.org/pccp](http://www.rsc.org/pccp)

High-quality submissions of original work in other areas of physical chemistry, chemical physics and biophysical chemistry are of course always welcome for publication in regular issues of PCCP.

**Programme Committee**

Wolfgang Domcke, TU München, Garching  
Marcus Elstner, Karlsruhe Institute of Technology  
Karin Fink, Karlsruhe Institute of Technology  
Jürgen Gauß, University of Mainz  
Manfred Kappes, Karlsruhe Institute of Technology  
Matthias Kling, MPI of Quantum Optics, Garching  
Wim Klopper, Karlsruhe Institute of Technology  
Matthias Olzmann, Karlsruhe Institute of Technology  
Marcell Peuckert, Infraser GmbH & Co. Höchst KG, Frankfurt/Main  
Martin Quack, ETH Zürich  
Dominik Samuelis, MPI for Solid State Research, Stuttgart  
Rolf Schäfer, TU Darmstadt  
Rolf Schuster, Karlsruhe Institute of Technology  
Dusan Velic, International Laser Centre, Bratislava  
Manfred Wilhelm, Karlsruhe Institute of Technology  
Christof Wöll, Karlsruhe Institute of Technology  
Rudolf Zentel, University of Mainz

## 8 Tagungskalender

### Inländische Tagungen

#### DPG-Tagungen 2013

[http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung\\_2013.html](http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2013.html)

**25.2.-1.3.2013**, Jena, DPG-Frühjahrstagung

**4.3.-8.3.2013**, Dresden, 77. Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung

**10.3.-15.3.2013**, Regensburg, DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (u. a. Chemische Physik)

**18.3.-22.3.2013**, Hannover, DPG-Frühjahrstagung der Sektion AMOP (u. a. Atomphysik, Molekülphysik)

**11.3. und 13.3.2013**, Berlin, FU Chemiedozententagung 12. 3. 2013, Berlin, FU, Henry Ford-Bau Festsymposium anlässlich 125 Jahre Angewandte Chemie  
<https://www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen/tagungen-2013/cdt-2013.html>

**9.5.-11.5.2013**, Karlsruhe, Bunsentagung: Theory meets Spectroscopy  
<http://www.bunsen.de/bunsentagung2013.html>

**1.9.-4.9.2013**, Darmstadt, GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2013  
<https://www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen/tagungen-2013/wifo-2013.html>

**22.9.-27.9.2013**, Erlangen, *49. Symposium für Theoretische Chemie*, Organisation: Prof. Göring, E-mail: [Andreas.Goerling@chemie.uni-erlangen.de](mailto:Andreas.Goerling@chemie.uni-erlangen.de)

**10.11.-12.11.2013**, Fulda, *German Conference on Chemoinformatics*

<https://www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen/tagungen-2013/gcc-2013.html>

#### DPG-Tagungen 2014

[http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung\\_2014.html](http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2014.html)

**17.-21.3.2014**, Frankfurt, DPG Frühjahrstagung der Fachverbände Physik der Hadronen und Kerne, Didaktik der Physik

**17.-21.3.2014**, Berlin, DPG-Jahrestagung und Frühjahrstagung der Sektion AMOP

**24.-28.3.2014**, Mainz, u. a. Atomphysik und Molekülphysik DPG Frühjahrstagung des Fachverbands Teilchenphysik

**31.3.-4.4.2014**, Dresden, DPG Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM) u. a. Chemische Physik

### Tagungen im Ausland

**19.2.-22.2.2013**, Mariapfarr (Österreich) *Workshop on Theoretical Chemistry: Electron Correlation in Multireference Systems*  
<http://www.uni-graz.at/tchwww/sax/mariapfarr/>

**2.6.-7.6.2013**, Lugano (Schweiz), *7th Congress of Molecular Quantum Mechanics*  
<http://www.mqm2013.ethz.ch/>

**25.8.-31.8.2013**, Budapest (Hungary), *8th Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics*  
<http://coulson.chem.elte.hu/istcp8/index.php>

Wir danken Herrn Prof. Helfrich für den Tagungskalender. Weitere Informationen können über <http://helfrichtub.de/helfrichhome.html> bzw. über <http://HelfrichTUB.de/tagungen.html> eingesehen werden. Der Leser sei auch auf andere Tagungskalender hingewiesen:

- Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie, Symposien, Tagungen  
[www.theochem.de/agtc.home.html](http://www.theochem.de/agtc.home.html)
- Cecam Workshops  
<http://www.cecarn.org/workshops.html>
- Deutsche Physikalische Gesellschaft, Tagungen  
<http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/kalender.html>
- CONFMENU von Prof. Young S. Kim  
<http://www.ysfine.com>
- Gesellschaft Deutscher Chemiker, Tagungen  
<https://www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen.html>
- Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen  
<http://www.bunsen.de/>
- Konferenzdienst Mandl  
<http://www.conference-service.com>

## 9 Klatsch und Tratsch

**Wolfgang Domcke**, *Prof. Dr.*, Lehrstuhl für Theoretische Chemie der TUM, wurde am 26. 6. 2012 mit der Ehrendoktorwürde der Fakultät für Mathematik und Physik der Karls-Universität Prag ausgezeichnet.

**Kay Hamacher**, *Prof. Dr.*, hat zum 1. April 2012 eine Professur für „Computational Biology & Simulation“ im Fachbereich Biologie der TU Darmstadt angetreten.

**Andreas Klamt**, *Prof. Dr.*, Leverkusen, erhielt im Februar 2012 eine Honorarprofessur für Physikalische Chemie und Theoretische Chemie an der Universität Regensburg.

**Thomas Körzdörfer**, *Jr.-Prof. Dr.*, hat seit dem 1. August 2012 eine Juniorprofessur für Theoretische Chemie an der Universität Potsdam inne.

**Frank Neese**, *Prof. Dr.*, MPI für chemische Energiekonversion, Mülheim / Ruhr, ist als Mitglied in die „International Academy of Quantum Molecular Sciences“ aufgenommen worden.

**W. H. Eugen Schwarz**, *Prof. Dr.*, Universität Siegen, ist seit Mitte 2009 jährlich für 6 Monate Gastprofessor am Theoretical and Computational Chemistry Laboratory der Tsinghua Universität in Peking.

**Walter Thiel**, *Prof. Dr.*, MPI für Kohlenforschung, Mülheim / Ruhr, hat die Liebig-Denkmuende der Gesellschaft Deutscher Chemiker verliehen bekommen.

**Jean Christophe Tremblay**, *Dr.*, Universität Potsdam, hat ein Emmy-Noether-Stipendium erhalten und nimmt zum 1. November seine Arbeit an der Freien Universität Berlin auf.