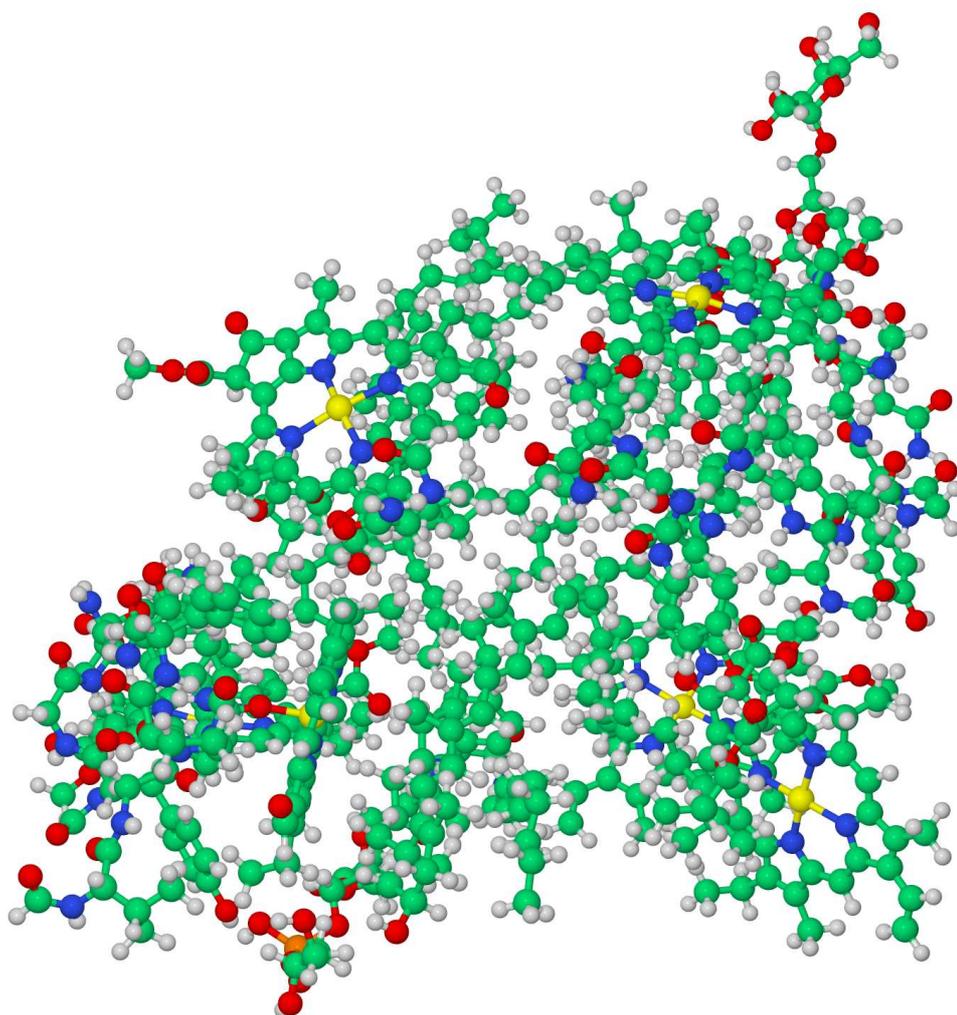


# Info Theoretische Chemie

– April 2013 –



## Inhaltsverzeichnis

|   |           |
|---|-----------|
| <b>1 Editorial</b>  | <b>3</b>  |
| <b>2 Arbeitsgruppen stellen sich vor</b>                              | <b>4</b>  |
| 2.1 AG Computerchemie an der Universität Potsdam . . . . .            | 4         |
| 2.2 Theoretische Chemie an der Goethe-Universität Frankfurt . . . . . | 8         |
| <b>3 Stand des Genealogieprojekts Theoretische Chemie</b>             | <b>11</b> |
| <b>4 Tagungskalender</b>  | <b>14</b> |
| <b>5 Klatsch und Tratsch</b>  | <b>16</b> |

## 1 Editorial

Liebe Freunde der Theoretischen Chemie,

mit der folgenden Aprilausgabe der INFO THEORETISCHE CHEMIE verabschiedet sich das Redaktionsteam aus Potsdam. Wir bedanken uns ganz herzlich für die Zuarbeiten, den Zuspruch und das Interesse – der Erfolg der INFO steht und fällt mit dem Engagement und der Mitarbeit ihrer Leser.

Die INFO THEORETISCHE CHEMIE geht in ihr 21. Lebensjahr, ist also nun faktisch, nicht nur rechtlich, erwachsen. Auch das Symposium für Theoretische Chemie kommt in die Jahre und feiert im nächsten Jahr den 50. Geburtstag. Die beiden Beispiele zeigen, dass die Theoretische Chemie im deutschsprachigen Raum ein reifes Fach geworden ist, mit Wurzeln, die freilich noch tiefer in die Vergangenheit reichen. Über Aspekte der historischen Entwicklung unseres Fachs berichtet Herr Professor Jug aus Hannover, in seinem Artikel zum Stand des “Genealogieprojekts Theoretische Chemie”. Im Genealogieprojekt, das Herr Jug vor einigen Jahren dankenswerterweise aus der Taufe gehoben hat, werden Querverbindungen und Lehrer-Schüler-Beziehungen zwischen im akademischen Bereich tätigen, deutschsprachigen Theoretischen Chemikern dargestellt. Es macht Spaß und eröffnet unterhaltsame Aha-Erlebnisse, sich unter der Web-Adresse <http://genealogy.theochem.uni-hannover.de> durch die Seiten zu klicken. Ähnlich wie die INFO selbst, lebt das Genealogieprojekt von der ständigen Erneuerung und Aktualisierung durch ihren Kundenstamm, also uns. Herrn Jugs Beitrag ist somit auch eine Aufforderung, an der dynamischen Entwicklung des Projekts mitzuwirken. Wir freuen uns ferner auf

ein Buchprojekt von Herrn Jug zu “Zweihundert Jahre Entwicklung der Theoretischen Chemie im deutschsprachigen Raum (1800-2000)” – offenbar gab es eine solche schon lange vor Heitler und London.

Neben diesem Artikel enthält die INFO altbekannte Sparten. Diesmal stellen sich zwei Arbeitsgruppen vor, nämlich diejenige von Thomas Körzdörfer an der Universität Potsdam, sowie die von Irene Burghardt an der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt. Der “Tagungskalender”, ebenfalls ein dynamisches Objekt, gibt wie üblich Auskunft über für unsere Community interessante Veranstaltungen. In diesem Zusammenhang ein herzliches Dankeschön an Herrn Prof. Klaus Helfrich, der sich seit vielen Jahren um die Pflege der Konferenzliste kümmert. Den Abschluss bilden wie immer “Klatsch und Tratsch”.

Insgesamt ist die INFO, wie erwartet, deutlich kürzer als beim letzten Mal. Wir danken allen Beitragslieferanten und hoffen, dass auch in Zukunft genügend Berichtenswertes von Euch / von Ihnen eingehen wird. Die nächste Ausgabe soll wie üblich im November erscheinen – Zuarbeiten bitte gleich an die neuen Macher der INFO TC. Diese sind zum Zeitpunkt des Redaktionsschlusses noch nicht bekannt, werden Ihnen / Euch aber noch rechtzeitig nachgereicht.

In diesem Sinne: Beste Grüße und “Adieu” aus Potsdam, Euer/Ihr

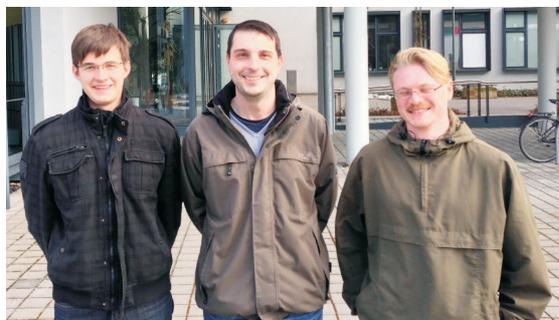
Peter Saalfrank

Potsdam, im April 2013

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

## 2 Arbeitsgruppen stellen sich vor

### 2.1 AG Computerchemie an der Universität Potsdam



JProf. Dr. Thomas Körzdörfer  
 Institut für Chemie  
 Universität Potsdam  
 Karl-Liebknecht Str. 26  
 D-14476 Potsdam-Golm

#### Einführung

Die AG Computerchemie am Institut für Chemie der Universität Potsdam wurde zum 1. August 2012 mit der Berufung von Thomas Körzdörfer (Georgia Institute of Technology, Atlanta) eingerichtet. Die neu geschaffene W1-Professur verstärkt seitdem das Fach Theoretische Chemie an der Universität Potsdam um die Arbeitsgruppe von Prof. Peter Saalfrank (W3). Thematisch liegt der Schwerpunkt der AG auf der Entwicklung und Anwendung moderner Elektronenstrukturmethoden auf Fragestellungen der organischen Elektronik. Damit verstärkt die AG Computerchemie den Forschungsschwerpunkt Weiche Materie an der Universität Potsdam und übernimmt inhaltlich eine Brückenfunktion zwischen Chemie und Physik. Methodisch konzentriert sich die Arbeit der AG auf die Dichtefunktionaltheorie (DFT), ihre zeitabhängige Erweiterung (TDDFT) sowie die Vielteilchenstörungstheorie in *GW*-Näherung. Neben der Untersuchung elektronischer Eigenschaften von organischen Halbleitermaterialien steht dabei vor allem die Methodenentwicklung im Zentrum ihrer Arbeit.

#### Forschung

Ziel unserer Forschungsarbeit ist es, mit Hilfe quantenchemischer Methoden ein besseres Verständnis über die grundlegenden elektronischen Prozesse der organischen Elektronik zu

gewinnen. Die Größe der dabei zu untersuchenden Systeme (einige zehn bis einige hundert Atome) erschwert die Verwendung sehr genauer Wellenfunktions-Methoden wie etwa *coupled cluster* oder *configuration interaction* erheblich und macht Sie häufig sogar unmöglich. DFT (für Grundzustandseigenschaften) und TDDFT (für optische Anregungen) gelten daher typischerweise als die Methoden der Wahl.

#### Zur Person:

*Thomas Körzdörfer studierte Physik und Macromolecular Science an der Universität Bayreuth. Im Jahr 2009 promovierte er bei Prof. Stephan Kümmel zum Thema "Self-interaction and charge transfer in organic semiconductors". Von 2010 bis 2012 arbeitete er mit Prof. Jean-Luc Brédas am Georgia Institute of Technology. Körzdörfer ist Alumnus der Studienstiftung des dt. Volkes, des Elitenetzwerks Bayern sowie der Alexander-von-Humboldt Stiftung.*

Die allen DFT Rechnungen zugrunde liegenden Näherungen für das sog. Austausch-Korrelations (XC) Funktional zeigen chronische Schwächen bei der Beschreibung einiger elektronischer Eigenschaften, welche für die organische Elektronik von fundamentaler Bedeutung sind. Zu den Problemfällen zählen neben der Beschreibung von Ladungstransferprozessen (Leitfähigkeit, CT-Anregungen, lineare und nicht-lineare Polarisierbarkeit) auch spektroskopische

(Ionisationsenergien, Elektronenaffinitäten, Bandlücken) und strukturelle Eigenschaften (Peierls Instabilität, Mixed-Valence Systeme) sowie nicht-lokale Korrelationseffekte (van-der-Waals Wechselwirkungen in organischen Kristallen). Die Arbeitsgruppe Computerchemie macht es sich zur Aufgabe, die diesen Fehlbeschreibungen zugrunde liegenden Schwächen der XC-Funktionale aufzuklären und ggfs. abzustellen. Im Folgenden sollen kurz einige Beispiele für diese Vorgehensweise aufgezeigt werden.

## Methoden

### a) DFT / TDDFT

Für einen Großteil der oben genannten Schwächen der gewöhnlich verwendeten XC-Funktionale ist der sog. Selbstwechselwirkungsfehler verantwortlich.[1] In den häufig verwendeten lokalen und semilokalen Dichtefunktionalen zeigen einzelne, freie Elektronen eine endliche Wechselwirkungsenergie. Die Folgen sind u.a. zu niedrige Ionisationsenergien und Bandlücken, das Fehlen einer Rydberg-Serie, die Instabilität vieler experimentell stabiler Anionen, dramatisch überschätzte Polarisierbarkeiten, zu niedrige Ladungstransferenergien, überschätzte Delokalisierung von Elektronendichten, und vieles mehr.

Die Korrektur von Selbstwechselwirkungsfehlern ist ein von uns seit einigen Jahren verfolgtes Ziel bei der Verbesserung der existierenden Dichtefunktionale. Im Rahmen der Kohn-Sham Theorie ermöglicht die SIC-OEP Methode [2, 3] die vollständige Korrektur der sog. Einteilchenwechselwirkung. Dieser vielversprechende Ansatz erwies sich als sehr erfolgreich bei der Beschreibung von den Eigenschaften organischer Halbleiter mithilfe von DFT [4, 5, 6, 7] und TDDFT.[8]

Eine weitaus häufiger verwendete Alternative stellt die Nutzung von Hybrid-Funktionalen dar, in welchen den semilokalen Funktionalen nicht-lokaler Hartree-Fock Austausch beigemischt wird. Hier beschäftigen wir uns vor allem mit der Fragestellung, wie Selbstwechselwirkungsfehler

im Rahmen der hier typischerweise verwendeten generalisierten Kohn-Sham Methode [9] beschrieben und korrigiert werden können.[10] Ein vielversprechender Weg ist die Nutzung von sog. *long-range corrected (LRC) hybrids*,[11] in welchen eine korrekte  $1/r$ -Asymptotik des Potentials durch die Trennung des Coulomb-Operators in kurz- und langreichweitige Anteile erreicht wird. Die charakteristische Länge der Trennung wird durch den sog. *range-separation (RS)* Parameter bestimmt; Selbstwechselwirkungsfehler werden durch die geeignete Wahl des RS-Parameters korrigiert.[12, 13, 14, 15] Die auf diese Art erreichte Minimierung von Vielteilchen-Selbstwechselwirkung führt zu erfolgreichen Anwendungsmöglichkeiten in DFT [13] und TDDFT.[16] Die nicht-Größenkonsistente Beschreibung führt allerdings auch zu einer Reihe von Problemen.[14, 15] Neben der Flexibilisierung des RS-Parameters und der Berücksichtigung von langreichweitigen Korrelationseffekten gehört daher auch die Herstellung von Größenkonsistenz zu unseren mittelfristigen Zielsetzungen.

### b) GW

Vielteilchenstörungstheorie in der GW-Näherung ermöglicht die Berechnung von Quasiteilchenenergien wie Ionisationspotential und Elektronenaffinität in Molekülen, Festkörpern, und an Oberflächen.[17, 18] Besonders die Beschreibung von organisch-anorganischen Grenzflächen profitiert von der Berücksichtigung von Vielteilcheneffekten wie etwa der Abschirmung der langreichweitigen Coulombwechselwirkung in polarisierbaren Medien. Im Bereich der organischen Elektronik erfreut sich die GW-Methode daher steigender Beliebtheit.

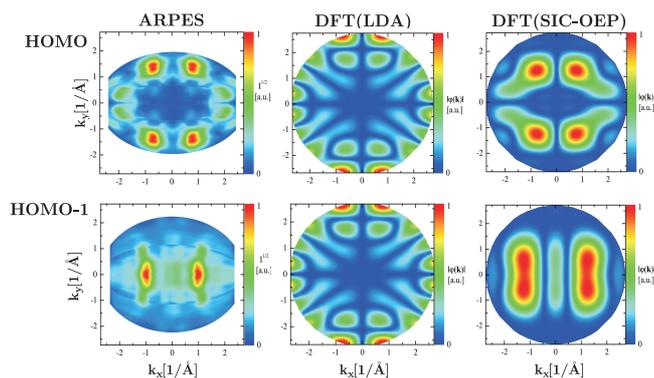
Die im Vergleich zu DFT Rechnungen relativ hohen numerischen Kosten erschweren vollständig selbstkonsistente GW-Rechnungen beträchtlich. Der Großteil der in der Praxis verwendeten GW-Rechnungen wird daher nicht-selbstkonsistent, basierend auf den Eigenwerten und Orbitalen einer vorausgehenden DFT-Rechnung, durchgeführt. Dabei stellt sich das

in der zugrunde liegenden DFT-Rechnung verwendete Funktional als entscheidend für die Zuverlässigkeit der *GW*-Rechnung heraus.[19] Die Suche nach einem zuverlässigen Startpunkt für nicht-selbstkonsistente *GW*-Rechnungen gehört daher zu unseren primären Zielen.[20]

## Anwendungen

### a) Photoelektronenspektren und ARPES

Häufig erleichtern DFT Rechnungen die Interpretation von experimentellen Photoelektronenspektren sowie winkelaufgelösten Messungen der Photointensität (ARPES). Theoretische ARPES Spektren können dabei über die Fouriertransformation von Molekülorbitalen berechnet werden.[21] Wie am Beispiel des organischen Halbleiters NTCDA in Grafik 1 gezeigt, kann die Verwendung von semilokalen Dichtefunktionalen wie LDA dazu führen, dass sich die erhaltenen Kohn-Sham Orbitale nicht mit dem Experiment in Einklang bringen lassen.[7] Die Ursache für das Versagen semilokaler Funktionale ist ihr inhärenter Selbstwechselwirkungsfehler.[4, 5, 6, 15] Selbstwechselwirkungsfreie Funktionale wie SIC-OEP liefern dagegen zuverlässige Vorhersagen für ARPES Messungen (siehe Grafik 1).[7]

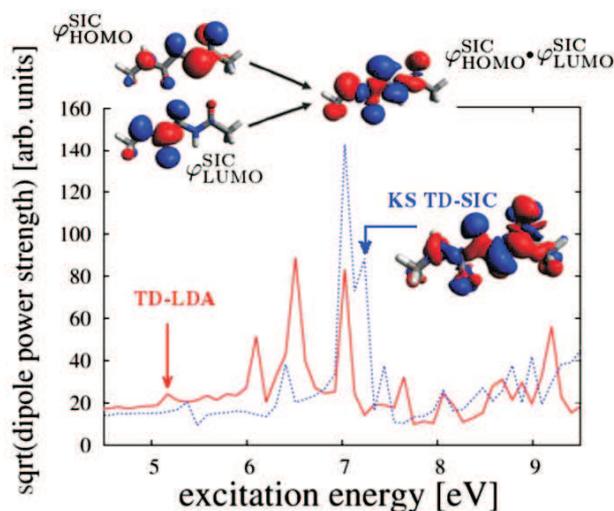


**Grafik 1:** ARPES Messung für NTCDA.[7]

### b) Ladungs- und Energietransfer

Die Effizienz des intra- und intermolekularen Energie- und Ladungstransfers ist von entscheidender Bedeutung für die organische Elektronik. Während sich der resonante Energietransfer im Rahmen der TDDFT typischer-

weise sehr gut beschreiben lässt,[22, 23] stellt die Beschreibung von Ladungstransfer traditionell eine große Herausforderung für genäherte XC Funktionale dar. Im Gegensatz zu den gewöhnlich verwendeten Funktionalen erlauben selbstwechselwirkungskorrigierte Funktionale wie SIC-OEP oder LRC Hybride die Berechnung von Polarisierbarkeiten [2] und Ladungstransfer-Anregungen [8] mit hoher Genauigkeit (siehe Grafik 2).



**Grafik 2:** Ladungstransferanregung in einem Dipeptid.[8]

### c) Peierls Instabilität

Häufig werden die elektronischen Eigenschaften von organischen Halbleitern durch strukturelle Eigenschaften bestimmt. Ein prominentes Beispiel hierfür ist die Peierls Instabilität, welche zur Alternanz der Bindungslängen (BLA) in konjugierten Molekülketten wie Polyacetylen führt. Tatsächlich ist der Grad der BLA für die Verwendung von Polymeren in der organischen Elektronik von fundamentaler Bedeutung, da er entscheidende Faktoren wie etwa das Absorptionsspektrum und die Leitfähigkeit bestimmt. Die Berechnung des BLA mit quantenchemischen Methoden stellt jedoch selbst für vermeintlich einfache Molekülketten wie Polyacetylen eine große Herausforderung dar. Zuverlässige Wellenfunktionsmethoden sind für lange Molekülketten numerisch zu teuer, DFT

und HF dagegen liefern große Fehler bei der Beschreibung der BLA. Selbstwechselwirkungsfehler stellen in diesem Fall allerdings nur einen Teil des Problems dar.[14] Um eine korrekte Beschreibung der Peierls Instabilität im Rahmen der DFT zu ermöglichen ist daher eine Weiterentwicklung der existierenden Dichtefunktionale dringend nötig.

## Literatur

- [1] J. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
- [2] T. Körzdörfer, M. Mundt, and S. Kümmel, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 133004 (2008).
- [3] T. Körzdörfer, M. Mundt, and S. Kümmel, *J. Chem. Phys.* **129**, 014110 (2008).
- [4] T. Körzdörfer, S. Kümmel, N. Marom, and L. Kronik, *Phys. Rev. B, Rapid Communications* **79**, 201205 (2009).
- [5] T. Körzdörfer, *J. Chem. Phys.* **134**, 094111 (2011).
- [6] Ferdinand Rissner, David A. Egger, Amir Natan, T. Körzdörfer, Stephan Kümmel, Leeor Kronik, and Egbert Zojer, *JACS* **133**, 18634 (2011).
- [7] M. Dauth, T. Körzdörfer, S. Kümmel, J. Ziroff, M. Wiessner, A. Schöll, F. Reinert, M. Arita, and K. Shimada, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 193002 (2011).
- [8] D. Hofmann, T. Körzdörfer, and S. Kümmel, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 146401 (2012).
- [9] A. Seidl, A. Görling, P. Vogl, J. A. Majewski, and M. Levy, *Phys. Rev. B* **53**, 3764 (1996).
- [10] T. Körzdörfer and S. Kümmel, *Phys. Rev. B* **82**, 155206 (2010).
- [11] A. Savin and H.-J. Flad, *Int. J. Quantum Chem.* **56**, 327 (1995).
- [12] T. Stein, L. Kronik, and R. Baer, *JACS* **131**, 2818 (2009).
- [13] T. Körzdörfer, C. Sutton, J. Sears, and J.-L. Brédas, *J. Chem. Phys.* **135**, 204107 (2011).
- [14] T. Körzdörfer, R. M. Parrish, J. S. Sears, C. D. Sherrill, and J.-L. Brédas, *J. Chem. Phys.* **137**, 124305 (2012).
- [15] T. Körzdörfer, R. M. Parrish, N. Marom, J. S. Sears, C. D. Sherrill, and J.-L. Brédas, *Phys. Rev. B* **86**, 205110 (2012).
- [16] J. S. Sears, T. Körzdörfer, C.-R. Zhang, and J.-L. Brédas, *J. Chem. Phys.* **135**, 151103 (2011).
- [17] L. Hedin, *Phys. Rev.* **139**, A796 (1965).
- [18] M. S. Hybertsen and S. G. Louie, *Phys. Rev. B* **34**, 5390 (1986).
- [19] N. Marom, F. Caruso, X. Ren, O. Hofmann, T. Körzdörfer, J.R. Chelikowsky, A. Rubio, M. Scheffler, and P. Rinke, *Phys. Rev. B* **86**, 245127 (2012).
- [20] T. Körzdörfer and Noa Marom, *Phys. Rev. B Rapid Communications* **86**, 041110 (2012).
- [21] P. Puschnig, S. Berkebile, A. J. Fleming, G. Koller, K. Emtsev, T. Seyller, J. D. Riley, C. Ambrosch-Draxl, F. P. Netzer, and M. G. Ramsey, *Science* **326**, 702 (2009).
- [22] T. Körzdörfer, S. Tretiak, and S. Kümmel, *J. Chem. Phys.* **131**, 034310 (2009).
- [23] D. Hofmann, T. Körzdörfer, and S. Kümmel, *Phys. Rev. A* **82**, 012509 (2010).

## 2.2 Theoretische Chemie an der Goethe-Universität Frankfurt

Der Arbeitskreis “Theoretical Chemistry of Complex Systems” (AK Burghardt, <http://www.theochem.uni-frankfurt.de>) am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Goethe-Universität Frankfurt besteht seit Mai 2011. Die übergreifende Thematik des Arbeitskreises ist die Untersuchung der mikroskopischen Dynamik und Kinetik elementarer Energie- und Ladungstransferprozesse in hochdimensionalen molekularen Systemen. Einen Schwerpunkt bilden insbesondere lichtinduzierte Prozesse, die eine quantenmechanische Beschreibung der Kerndynamik in elektronisch angeregten Zuständen erfordern; solche Prozesse lassen sich i. Allg. nicht anhand klassischer Molekulardynamik (MD)-Simulationen erfassen. Während sich unsere Methodenentwicklung daher auf die quantendynamische Seite konzentriert, wenden wir auch eine breite Palette von Methoden aus der elektronischen Strukturtheorie, statistischen Mechanik und Modellierung biologischer Systeme an. Die Projekte des AK fügen sich über verschiedene Kollaborationen in die Frankfurter Forschungslandschaft ein, wobei insbesondere der Sonderforschungsbereich SFB 902 (“Molecular Principles of RNA-based Regulation”) hervorzuheben ist. Des Weiteren besteht eine Zusammenarbeit mit der von Dr. Lars Schäfer geleiteten Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe an unserem Institut, die sich mit MD-Simulationen an Biomembranen befasst.

Die derzeitigen Forschungsprojekte des AK konzentrieren sich auf folgende Bereiche:

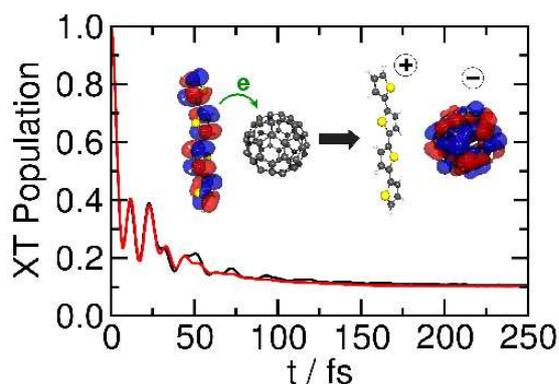
- Charakterisierung der in der organischen Photovoltaik auftretenden Elementarprozesse anhand einer Kombination von elektronischen Strukturrechnungen mit hochdimensionaler Quantendynamik;
- Untersuchung lichtsensitiver RNA und DNA, wobei der Einfluss kovalent oder nicht-kovalent gebundener Photoschalter mit Hilfe gemischt quanten-klassischer Methoden simuliert wird;
- Entwicklung und Anwendung quantendynamischer Multikonfigurationsmethoden, insbesondere unter Einsatz zeitabhängiger Gaussbasen;
- Entwicklung reduzierter Darstellungen und gemischt quanten-klassischer Methoden sowie deren Anwendung zur quantenmechanischen Propagation und dissipationstheoretischen Behandlung großer Systeme.

Diese Themenbereiche werden im Folgenden näher skizziert.

### Elementarprozesse der organischen Photovoltaik

Das theoretische Verständnis elementarer Energie- und Ladungstransferprozesse in neuen organischen Halbleitermaterialien kann wesentliche Kriterien für das Design und die Optimierung solcher Materialien liefern. Neuere experimentelle Untersuchungen unterstreichen die quantenmechanische, kohärente Natur der relevanten Primärprozesse [1, 2], die eine quantenmechanische Behandlung der konzentrierten elektronischen und kerndynamischen (“vibronischen”) Prozesse erforderlich macht.

In diesem Kontext beziehen sich unsere neueren Arbeiten insbesondere auf die Untersuchung (i) der Übertragung von Anregungsenergie – Exzitonenmigration – in Poly-Phenylen-Vinylen (PPV) und verwandten Materialien [5] und (ii) der Ladungstrennung – Exzitonen dissoziation – in sog. Bulk Heterojunction (BHJ)-Materialien [3, 4, 6]. Beide Prozesse sind ultraschnell und führen zu einer kohärenten Transferdynamik. Zur Analyse auf molekularem Level verwenden wir eine Kombination von (i) elektronischen Strukturrechnungen an geeigneten Fragmenten [7], (ii) effektiven Hamiltonoperatoren, die anhand von (i) parametrisiert werden, und (iii) hochdimensionalen Quantendynamiksimulationen mit Hilfe effizienter Multikonfigu-



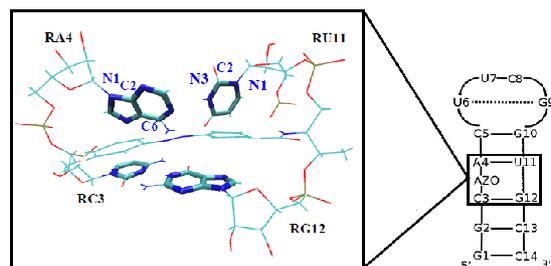
**Abb. 1:** *Quantendynamische Simulation des ultraschnellen Ladungstransfers in einem Oligothiophen-Fulleren-Komplex (MCTDH-Rechnungen mit 2 elektronischen Zuständen und 61 Moden) [3, 4]. Der transiente oszillatorische Zerfall des exzitonen (XT)-Zustands spiegelt die Rolle elektronischer Kohärenz wider.*

rationsverfahren (siehe unten). Eine analoge Strategie wird zur Zeit zur Charakterisierung alternativer Donor-Akzeptormaterialien, die etwa in geordneten Flüssigkristallphasen vorliegen [8, 9] (DFG/ANR-Projekt mit S. Haacke, Strasbourg), sowie von Komplexen von Donor-Chromophoren und Kohlenstoff-Nanoröhren (Zusammenarbeit mit C. Voisin, ENS Paris) verfolgt.

### Lichtsensitive RNA und DNA

Lichtinduzierte Konformationsänderungen von Nucleinsäuren eröffnen einen hochspezifischen Weg zur Kontrolle der Funktionalität von DNA und RNA [10, 11]. Im Rahmen des oben erwähnten Sonderforschungsbereichs SFB 902 untersuchen wir maßgeschneiderte Komplexe von RNA mit Photoschaltern wie Azobenzol oder Spiropyran, die kovalent an das Backbone gebunden sind [11].

Die lichtinduzierte Faltungsdynamik deckt ein breites Zeitfenster ab – vom Femtosekunden- bis hin zum Sekundenbereich – das mit Hilfe komplementärer spektroskopischer Methoden abgetastet wird. Auf der Theorieseite verwenden wir ebenfalls eine Reihe komplementärer Me-



**Abb. 2:** *RNA-Haarnadelschleife (hairpin loop) mit einem kovalent gebundenen Azobenzol-Photoschalter.*

thoden, insbesondere Quantenmechanik-Molekularmechanik (QM/MM)-Hybridmethoden in Verbindung mit *on-the-fly*-Dynamik, MD-Simulationen, Freie Energie-Methoden sowie kinetische Modelle, die für längere Zeitskalen geeignet sind.

### Hochdimensionale Quantenpropagation mit zeitabhängigen Gausbasen

Variationelle Multikonfigurationsverfahren wie die Multiconfiguration Time-Dependent Hartree (MCTDH)-Methode [12, 13] stellen äusserst effiziente Methoden zur Quantenpropagation hochdimensionaler Systeme dar. Mit Hilfe dieser Methoden lässt sich die Quantenpropagation korrelierter Systeme von bis zu 50 oder 100 Freiheitsgraden im Femto- bis Pikosekundenbereich präzise durchführen – weit über die Möglichkeiten von Standardverfahren hinaus. Wir haben insbesondere eine auf zeitabhängigen Gausbasen beruhende Variante, das G-MCTDH-Verfahren [14, 15], entwickelt, das zwischen der Standardversion der MCTDH-Methode und verschiedenen Näherungsverfahren, die zumeist klassisch-mechanisch evolvierenden Gausbasen verwenden, interpoliert. G-MCTDH ist insbesondere auf hierarchisch strukturierte Systeme – z.B. System-Bad-Komplexe – und *on-the-fly*-Propagation in Verbindung mit elektronischen Strukturrechnungen zugeschnitten. Die neueste Entwicklung auf diesem Sektor betrifft eine mehrschichtige Variante des Verfahrens (multilayer G-MCTDH), die die Konvergenzeigenschaften und/oder Effizienz signifikant verbessert [16].

## Reduzierte Darstellungen: Effektivmoden und mesoskopische Umgebungen

Parallel zur Entwicklung quantendynamischer Verfahren für hochdimensionale Systeme stellen effektive Beschreibungen komplexer Systeme in reduzierter Dimensionalität einen wichtigen komplementären Zugang dar. Solche reduzierten Beschreibungen der Dynamik lassen sich z.B. im Falle vibronisch gekoppelter Zustände durch kollektive Effektivmoden [17] realisieren, die insbesondere die Kurzzeitdynamik präzise erfassen. Darüber hinaus führt die systematische Konstruktion von *Ketten* solcher Effektivmoden auf eine sequentielle zeitliche Entfaltung der Dynamik [6]. Diese Darstellungen lassen sich erfolgreich zur Analyse von spektralen Dichten und Gedächtniseffekten [18, 19] anwenden; dabei stellt die Effektivmodenentwicklung eine direkte Verbindung zwischen "unitärer" Dynamik und einer dissipationstheoretischen Behandlung [20] her.

Ein weiterer Ansatz zur Behandlung der Nichtgleichgewichtsdynamik gekoppelter Molekülsolvens-Systeme beruht auf einer *mesoskopischen* Beschreibung der Umgebung durch zeitlich evolvierende Polarisationsdichten und Stromdichten [21, 22]. Eine entsprechende gemischt quanten-klassische Methode, die die quantenmechanischen molekularen Koordinaten an die mesoskopische Solvensdynamik koppelt, haben wir kürzlich entwickelt und auf einfache Modellsysteme angewandt [23, 24]. Hybridansätze dieser Art sind insbesondere für die Beschreibung von Elementarprozessen in Lösung vielversprechend und knüpfen an das intuitive Konzept effektiver Solvenskoordinaten an.

## Literatur

- [1] E. Collini and G. D. Scholes, *Science*, 2009, **323**, 369.
- [2] C. A. Rozzi, S. M. Falke, N. Spallanzani, A. Rubio, E. Molinari, D. Brida, M. Maiuri, G. Cerullo, H. Schramm, J. Christoffers, and C. Lienau, *Nat. Comm.*, 2013, **4**, 1602.
- [3] H. Tamura, R. Martinazzo, M. Ruckebauer, and I. Burghardt, *J. Chem. Phys.*, 2012, **137**, 22A540.
- [4] H. Tamura, I. Burghardt, and M. Tsukada, *J. Phys. Chem. C*, 2011, **115**, 10205.
- [5] R. Binder, J. Wahl, S. Römer, and I. Burghardt, *Faraday Discuss.*, 2013, **163**, DOI: 10.1039/C3FD20148A, in press.
- [6] H. Tamura, J. Ramon, E. R. Bittner, and I. Burghardt, *Phys. Rev. Lett.* 2008, **100**, 107402.
- [7] A. N. Panda, F. Plasser, A. J. A. Aquino, I. Burghardt, and H. Lischka, *J. Phys. Chem. A*, 2013, **117**, 2181.
- [8] T. Roland, J. Léonard, G. Hernandez Ramirez, S. Méry, O. Yurchenko, S. Ludwigs, and S. Haacke, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2012, **14**, 273.
- [9] J. Wenzel, A. Dreuw, and I. Burghardt, "Charge and energy transfer in a bithiophene perylene-diimide based donor-acceptor-donor system with application to photovoltaics, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2013, submitted.
- [10] G. Mayer and A. Heckel, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2006, **45**, 4900.
- [11] H. Nishioka, X. Liang, and H. Asanuma, *Chem. Eur. J.*, 2010, **16**, 2054.
- [12] M. H. Beck, A. Jäckle, G. A. Worth, and H.-D. Meyer, *Phys. Rep.*, 2000, **324**, 1.
- [13] G. A. Worth, H.-D. Meyer, H. Köppel, L.S. Cederbaum and I. Burghardt, *Int. Rev. Phys. Chem.*, 2008, **27**, 569.
- [14] I. Burghardt, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, *J. Chem. Phys.*, 1999, **111**, 2927.
- [15] I. Burghardt, K. Giri, and G. A. Worth, *J. Chem. Phys.*, 2008, **129**, 174104.
- [16] S. Römer, M. Ruckebauer, and I. Burghardt, *J. Chem. Phys.*, 2013, **138**, 064106.
- [17] L. S. Cederbaum, E. Gindensperger, and I. Burghardt, *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **94**, 113003.
- [18] R. Martinazzo, B. Vacchini, K. H. Hughes, and I. Burghardt, *J. Chem. Phys. (Communication)*, 2011, **134**, 011101.
- [19] R. Martinazzo, K. H. Hughes, and I. Burghardt, *Phys. Rev. E (Rapid Communication)*, 2011, **84**, 030102.
- [20] I. Burghardt, R. Martinazzo, and K. H. Hughes, *J. Chem. Phys.*, 2012, **137**, 144107.
- [21] B. Bagchi, *Molecular Relaxation in Liquids*, Oxford University Press, 2012, Oxford, New York.
- [22] K. H. Hughes and I. Burghardt, *J. Chem. Phys.*, 2012, **136**, 214109.
- [23] K. H. Hughes, S. N. Baxter, D. Bousquet, P. Ramathan, and I. Burghardt, *J. Chem. Phys.*, 2012, **136**, 014102.
- [24] D. Bousquet, K. H. Hughes, D. A. Micha, and I. Burghardt, *J. Chem. Phys.*, 2011, **134**, 064116.

### 3 Stand des Genealogieprojekts Theoretische Chemie

Um den Anspruch und den Stand des Genealogieprojekts Theoretische Chemie zu verstehen, möchte ich noch einmal auf die Entstehungsgeschichte dieses Projekts zurückkommen. Wenige Jahre nach dem 100. Geburtstag von Hans Hellmann, der 2003 sowohl in Bonn als auch in Hannover mit einem Kolloquium gefeiert wurde, hatte ich, angeregt durch das weltweit angelegte Genealogieprojekt der Mathematiker (z.B. <http://genealogy.mathematik.uni-bielefeld.de>), den Plan gefasst, ein ähnliches Projekt für den deutschsprachigen Raum zu beginnen. Die Idee war, alle promovierten theoretischen Chemiker samt ihren wissenschaftlichen Vorfahren aus Deutschland, Österreich und der Schweiz, also dem Bereich des Symposiums für Theoretische Chemie und dem Mitgliedskreis der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie, in einer Online-Datenbank zu erfassen und so die Schwerpunkte und Leistungen der Theoretischen Chemie in diesen Ländern für einen größeren Kreis von Chemikern und anderen Interessierten sichtbar zu machen. Auf dem Symposium für Theoretische Chemie in Erkner 2006 besprach ich diesen Plan mit Wolfgang Domcke, dem damaligen Vorsitzenden der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie, und einigen anderen Kollegen. Die positive Resonanz und zugesagte Unterstützung mit der Möglichkeit, das Projekt langfristig durch die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie zu sichern, war der Startpunkt für das weitere Vorgehen. Zunächst wandte ich mich an die Vertreter des Mathematics Genealogy Project und fragte wegen Überlassung des Codes ihres Programms an. Die Mathematiker reagierten sofort positiv und sagten die Überlassung des Codes zu. So konnte ich Anfang Februar 2007 ein Rundschreiben mit Fragebogen über das MPI für Kohlenforschung an die Mitglieder der AGTC versenden und um Information bitten. Schon zwei Tage später trafen die ersten ausgefüllten Fragebögen bei mir ein. Aber es dauerte noch bis Anfang 2008, um die kritische Masse an Informationen zu erreichen. Im März 2008 wandte ich mich an das Re-

chenzentrum der Universität Hannover, um die von den Mathematikern erhaltenen Programmkomponenten zu einem lauffähigen Programm zusammenbinden zu lassen. Leider war dies in kurzer Zeit nicht möglich und ich musste mich selber nach einem geeigneten Studenten umsehen. Zum Glück fand ich einen solchen in der Chemie und stellte ihn als teilzeitbeschäftigte studentische Hilfskraft ein. Das Programm lief Ende 2008 einwandfrei und ich konnte Anfang 2009 die ersten Daten eingeben. Nachdem über 1000 Personen im Projekt enthalten waren, konnte ich im Juli 2009 die Datenbank unter dem Namen "Theoretical Chemistry Genealogy Project" (<http://genealogy.theochem.uni-hannover.de>) öffentlich freigeben. Der Name wurde bewusst auf Englisch gewählt, um internationale Rückkopplung zu erreichen. 2010 habe ich auf dem Symposium für Theoretische Chemie in Münster ausführlich darüber berichtet. Im Info Theoretische Chemie vom November 2010 sind auf Seite 24 Einzelheiten des Vortrags auf einer DIN4-Seite skizziert, die hier nicht alle wiederholt werden sollen. Inzwischen umfasst die Datenbank 2400 Personen.

In der Zeit der Entstehung und bis heute habe ich viel Positives und auch Spannendes erlebt im Zusammenhang mit diesem Projekt. Lange bevor ich die Datenbank veröffentlichen konnte, gab es erste Anfragen aus der Physikalischen Chemie. Ende Dezember 2007 schrieb mir Manfred Zeidler, dass er seit einem Jahr an einem ähnlichen Projekt für die Physikalische Chemie arbeite und dabei auch Theoretische Chemiker angesprochen habe, die in Instituten für Physikalische Chemie tätig seien. Er müsse sich bei der Erfassung allerdings auf die C4-Professuren beschränken, weil er sonst statt über 500 Personen wohl über 1500 Personen recherchieren müsse, was vom Arbeitsaufwand nicht zu schaffen sei. Er bat mich, einen Hinweis auf die geplante Datenbank als Zitat in seinen Artikel aufnehmen zu dürfen, weil ihn einige Kollegen wie Preuß, Manz und Fleischhauer darauf hingewiesen hätten und er auch nicht alle Theoretischen Chemi-

ker aus verschiedenen Gründen in seinen Artikel aufnehmen könne. So wurde die Datenbank bereits im Mai 2008 in seinem Übersichtsartikel mit Text und Tabellen zur Physikalischen Chemie im Bunsen-Magazin zitiert. Gewarnt durch den Hinweis auf den Arbeitsaufwand, wurde mir klar, dass ich mir auch viele Daten selbst beschaffen müsse, um das Ziel einer umfassenden Dokumentation zu erreichen. Denn an dem Ziel, alle promovierten, habilitierten und auf Professuren berufenen Theoretischen Chemiker und deren wissenschaftliche Vorfahren in dem Genealogieprojekt zu würdigen, wollte ich festhalten. Dabei war klar, dass auch andere Fachgebiete beteiligt werden müssten. Ich versuchte es also zunächst einmal mit meinen eigenen wissenschaftlichen Vorfahren. Bis Leopold Gmelin war ich schon viel früher gekommen, aber dessen Doktorvater Friedrich Stromeyer war mir gänzlich unbekannt. Zu Hilfe kam mir eine Anfrage meines Kollegen Rolf Manne aus Norwegen, den ich aus der Quantenchemiegruppe von Per Olov Löwdin in Uppsala kannte. Er wollte wissen, ob ein August Stromeyer etwa um 1850 Dozent an der Polytechnischen Schule in Hannover gewesen sei und ob er mit der berühmten Familie Stromeyer aus Göttingen verwandt sei, vor allem mit Friedrich Stromeyer, dem Entdecker des Cadmium. Ich konnte zwar klären, dass August Stromeyer kein Hochschullehrer in Hannover gewesen war, aber seine Verwandtschaft mit Friedrich Stromeyer konnte ich nicht bestätigen. Dass Stromeyer an der Universität Göttingen in Medizin promoviert, sich dann zwar in Chemie und Pharmazie habilitiert und ein chemisches Labor eingerichtet hatte, aber erst Professor für Medizin wurde, bevor er 1810 schließlich eine Professur für Chemie erhielt, erinnerte mich an die Etablierungsversuche der Theoretischen Chemie in Deutschland in den 1960er Jahren. Schließlich fand ich auch heraus, dass mein Vorgänger in Theoretischer Chemie in Hannover, Friedrich Heeren, der bis 1876 wirkte, auch ein Schüler Stromeyers gewesen ist.

Als die Datenbank dann zur Verfügung stand, gab es immer wieder Zuschriften mit Anfragen

oder Korrekturvorschlägen. So hatte sich Bernhard Dick, der als Schüler von Georg Hohlneicher in der Datenbank stand, selbst eine wissenschaftliche Ahnenliste angelegt. Dabei gab es eine Diskrepanz. Als Doktorvater von Adolf von Baeyer hatte ich Robert Bunsen eingetragen, während Dick zu dem Ergebnis gekommen war, dass August Kekulé der Doktorvater gewesen war. Auch Bunsen war ein Schüler von Stromeyer und Nachfolger von Leopold Gmelin in Heidelberg. Baeyer hatte zunächst bei Bunsen, dann im Privatlabor des Privatdozenten Kekulé in Heidelberg gearbeitet. Das Problem war, dass Baeyer in Berlin promoviert hatte, wie Dick herausgefunden hatte, aber dass weder Bunsen noch Kekulé je in Berlin tätig gewesen waren. Eine weitere Quellensuche ergab, dass Baeyers Dissertation vom 4. Mai 1858 datierte, dass sie einen lateinischen Titel hatte und im Bayerischen Bibliothekenverbund vorhanden war. Also bat ich Bernhard Dick, die Dissertation auszuleihen und mir wichtige Teile zugänglich zu machen. Dass die Dissertation vollständig auf Latein abgefasst war, konnte uns nicht davon abhalten, das Wesentliche herauszufiltern. Demnach wurde zuerst Robert Bunsen, dem berühmtesten Mann (*viro illustrissimo*) und dann August Kekulé, dem erfahrensten Mann (*viro expertissimo*) gedankt. Dies legte die Reihenfolge der Doktorväter fest.

Als Edmund Cmiel 2011 einen Professorenstammbaum für die Physikalische Chemie an der TU München anlegte, der bei Günter Scheibe, dem Doktorvater von Hohlneicher, begann, konnte ich ihm helfen, seinen Stammbaum mit Informationen über Kollegen wie Ernst Ruch, Jürgen Brickmann, Wolfgang von Niessen, Gerd Diercksen und Gerhard Stock zu vervollständigen.

Im Laufe der letzten Jahre kamen immer mehr prominente wissenschaftliche Vorfahren hinzu, so dass das Genealogieprojekt jetzt 48 Nobelpreisträger enthält, davon 31 aus der Chemie und 17 aus der Physik. Die meisten sind direkte Vorfahren von Theoretischen Chemikern. Dazu gehören Emil Fischer, Adolf von Baeyer,

Wilhelm Ostwald, Otto Wallach, Alfred Werner, Walther Nernst, Heinrich Wieland, Adolf Windaus, Peter Debye, Richard Kuhn, Leopold Ruzicka und Hermann Staudinger aus der Chemie und Wilhelm Röntgen, Max von Laue, Max Planck, Werner Heisenberg und Max Born aus der Physik. Durch wissenschaftliche Querverbindungen kommen z.B. aber auch Fritz Haber und Otto Hahn bei den Chemikern oder Erwin Schrödinger, Wolfgang Pauli, Felix Bloch und Richard Feynman bei den Physikern hinzu. Bisher gibt es nur einen Theoretischen Chemiker aus dem deutschsprachigen Bereich, nämlich Hans Primas, mit einem Schüler als Nobelpreisträger. Die Verleihung des Nobelpreises in Chemie 1991 an Richard Ernst war allerdings für seine Beiträge zur Entwicklung der hochauflösenden Kernresonanzspektroskopie. Durch theoretische Chemiker, die im nicht deutschsprachigen Bereich promoviert haben, aber hier tätig waren oder sind, kamen viele weitere Nobelpreisträger als direkte Vorfahren hinzu, so Jacobus van't Hoff aus den Niederlanden, William Ramsay und Cyril Hinshelwood aus Großbritannien, Theodore Richards, Linus Pauling und John van Vleck aus den USA. Rechnet man wieder wissenschaftliche Verwandtschaften hinzu, sind auch die Theoretiker William Lipscomb, Roald Hoffmann, Rudolf Marcus und John Pople dabei.

Damit war das Genealogieprojekt durch wissenschaftliche Verwandtschaft weit über den deutschsprachigen Bereich hinausgewachsen und das Interesse war im Ausland gestiegen. Ich hatte Zuschriften nicht nur aus Deutschland, Österreich und der Schweiz, sondern auch aus vielen anderen Ländern, z. B. den Niederlanden, Kanada, Kuba, Russland und den USA, wo um Aufnahme von Personen in das Genealogieprojekt gebeten oder Ergänzung von Informationen angeboten wurde. Ich war immer sehr froh, wenn damit die Akzeptanz erhöht werden konnte. Ich musste mich allerdings darauf beschränken, nur solche Informationen zu nutzen, die einen Bezug zur Theoretischen Chemie hatten. In diesem Sinne bitte ich die Mitglieder

der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie und alle, die diesen Bericht lesen, durch Informationen zu fehlenden Einträgen von Personen zur Vervollständigung der Datenbank beizutragen. Ich brauche dabei Namen, Promotionsjahr, Dissertationstitel, Fachgebiet, Universität und Doktorvater für einen neuen Eintrag und einen wissenschaftlichen Lebenslauf für Professoren und Dozenten. Dies würde auch für eine größere Ausgewogenheit des Projekts sorgen. Dabei bitte ich auch die Regeln zu beachten, die für diese Einträge erarbeitet wurden und die unter "Rules" auf der Homepage stehen. Ich bitte um ergänzende Informationen, die in der Datenbank noch nicht vorhanden sind, mit Quellenangabe. Dass das internationale Interesse an dem Genealogieprojekt inzwischen sehr groß geworden ist, kann man daran ersehen, dass es täglich im Mittel 80 - 90 Besucher der Datenbank gibt, die eine oder mehrere Seiten anschauen. Davon kommen die meisten aus Deutschland, China und den USA. Weitere Besucher kommen aus vielen anderen Ländern wie Australien, Brasilien, Frankreich, Großbritannien, Indien, Japan, Niederlande, Österreich, Schweden und der Schweiz.

Zum Schluss möchte ich noch einen Punkt erwähnen, der sich im Zusammenhang mit dem Genealogieprojekt Theoretische Chemie ergeben hat. Mein Kollege Manfred Heinemann, der viele Jahre das Zentrum für Zeitgeschichte von Bildung und Wissenschaft an der Universität Hannover geleitet hat und den ich anlässlich des von mir veranstalteten Hellmann-Kolloquiums 2003 kennengelernt hatte und der vom Genealogieprojekt erfahren hatte, fragte vor einiger Zeit an, ob ich nicht ein Buch über die Geschichte der Theoretischen Chemie in Deutschland schreiben könnte. Heinemann ist Herausgeber der "edition bildung und wissenschaft" beim Akademie Verlag in Berlin. Nach einigem Zögern habe ich zugesagt und das Buch steht kurz vor dem Abschluss. Der vorläufige Titel heißt "Zweihundert Jahre Entwicklung der Theoretischen Chemie im deutschsprachigen Raum (1800 - 2000)". In diesem Buch habe ich versucht, die logischen

Zusammenhänge, die aus der oft tabellarischen Form der Datenbank nicht unmittelbar hervorgehen, in eine verständliche Form zu bringen. Ich hoffe, damit die nationale und internationale Kooperation, die sich nicht nur zwischen Deutschland, Österreich und der Schweiz entwickelt hat, konkreter sichtbar zu machen. Die

Zitate sollen einen repräsentativen Querschnitt der Forschung bieten.

Für Fragen stehe ich unter [jugthc@mbox.theochem.uni-hannover.de](mailto:jugthc@mbox.theochem.uni-hannover.de) zur Verfügung.

Karl Jug, Hannover

## 4 Tagungskalender

### Inländische Tagungen

**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  
<http://www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen/tagungen-2013/wifo-2013.html>

**22.–27.9.2013**, Erlangen  
49th Symposium on Theoretical Chemistry  
Organisation: Prof. Görling  
[Andreas.Goerling@chemie.uni-erlangen.de](mailto:Andreas.Goerling@chemie.uni-erlangen.de)

**8.10.–11.10.2013**, Münster  
Excited States and Complex Environments  
ESCE-2013  
<http://E2013.uni-muenster.de>

**4.11.–7.11.2013**, Potsdam  
Workshop on Scattering of Atoms and Molecules on Surfaces (SAMS-2013)  
Organisation: Peter Saalfrank, Mathias Nest, Tillmann Klamroth  
[www.chem.uni-potsdam.de/SAMS-2013/](http://www.chem.uni-potsdam.de/SAMS-2013/)

**10.11.–12.11.2013**, Fulda  
German Conference on Chemoinformatics  
<http://www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen/tagungen-2013/gcc-2013.html>

**2.9.–5.9.2013**, Berlin  
Workshop on Molecular Kinetics 2013  
[www.molkin2013.biocomputing-berlin.de](http://www.molkin2013.biocomputing-berlin.de)  
Registration open until June 1st.

**24.10.2013**, Bochum  
International Symposium at Ruhr-Universität Bochum: 40 Year of Concepts in Theoretical Chemistry from the Bochum Perspective  
Festkolloquium zum 80. Geburtstag von Werner Kutzelnigg (Fakultät für Chemie und Biochemie, HNC 30).

### Tagungen im Ausland

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

**9.6.–12.6.2013**, Strand Hotel Fervik (Norwegen)  
Very Accurate and Large Computations and Applications 2013  
<http://www.ctcc.no/events/conferences/2013/valca2013/index.html>

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

**9.9.–13.9.2013**, Durham (U.K.)  
15.th International Conference on Density Functional Theory and its Applications (DFT 2013)  
<http://www.dft2013.org/>

**11.9.–13.9.2013**, Zürich (Schweiz)  
Leopoldina Symposium: Spectroscopy and Molecular Dynamics at the Limits  
<http://leopoldina.ethz.ch/leopoldina2013/index.php/announcement>

## Tagungen 2014

**17.-21.3.2014**, Frankfurt am Main

DPG Frühjahrstagung der Fachverbände Physik der Hadronen und Kerne, Didaktik der Physik  
[http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung\\_2014.html](http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2014.html)

**17.-21.3.2014**, Berlin

DPG-Jahrestagung und Frühjahrstagung der

Sektion AMOP u. a. Atomphysik und Molekülphysik

**24.3.-28.3.2014**, Mainz

DPG Frühjahrstagung des Fachverbands Teilchenphysik

**31.3.-4.4.2014**, Dresden

DPG Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM) u. a. Chemische Physik

Wir danken Herrn Prof. em. Dr. Helfrich für den Tagungskalender und den Arbeitskreisen der Theoretischen Chemie für weitere Zusendungen. Der geneigte Leser sei auch auf weitere Zusammenstellungen 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

<http://www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen.html>

Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen

<http://www.bunsen.de/>

Konferenzdienst Mandl

<http://www.conference-service.com>

## 5 Klatsch und Tratsch

**Matthias Bickelhaupt**, Professor of Theoretical Chemistry at VU University Amsterdam has been appointed, in December 2012, extraordinary professor on Theoretical Organic Chemistry at the Institute of Molecules and materials (IMM) of Radboud University Nijmegen. Bickelhaupt also remains Head of the Department of Theoretical Chemistry at VU University where he holds the chair Theoretical Organic Chemistry and Bio-Catalysis. In Nijmegen, he joins the Theoretical Chemistry group of the IMM where he will work with Prof. Gerrit Groenenboom. He will model complex molecular systems and materials and thus strengthen synergies in the areas of chemical biology, molecular materials, pharminochemistry, and astrochemistry. More information about Prof. Bickelhaupt can be found here:

- appointment Nijmegen:

<http://www.ru.nl/@879189/prof-dr-matthias/>

- personal website Amsterdam:

<http://www.few.vu.nl/bickel/>

**Stefanie Gräfe**, *Prof. Dr.*, erhielt zum 1.4.2013 einen Ruf an die Friedrich-Schiller-Universität Jena am Institut für Physikalische Chemie mit der Denomination "Theoretische Chemie" und tritt damit die Nachfolge von Prof. Leticia González an.

**Jörn Manz**, *Prof. em. Dr.*, hat für die Jahre 2013-2015 eine Professur an der Shanxi University in Taiwan angenommen. Er wird sich dort etwa 3-4 Monate im Jahr aufhalten, bleibt aber weiterhin an der FU Berlin aktiv.

**Stephan Irle**, *Prof. Dr.*, wurde am 1. April 2011 zum Professor für Quantenchemie an der Universität von Nagoya in Japan berufen. Das Themengebiet seiner Arbeiten ist im Feld der Quantenchemie komplexer Systeme angesiedelt. Seit Ende Oktober 2012 ist Prof. Irle auch Gründungsmitglied des "World Premier Institute (WPI) - Institute of Transformative Bio-Molecules" an derselben Universität.

**Roland Mitić**, *Prof. Dr.*, hat einen Ruf an die Julius-Maximilians-Universität Würzburg am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie auf eine W3-Professur für Theoretische Chemie erhalten und angenommen.

**Barbara Kirchner**, *Prof. Dr.*, hat zum 1.1.2013 einen Ruf an die Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn angenommen und besetzt einen Lehrstuhl für Theoretische Chemie am Mulliken Center for Theoretical Chemistry.

**Filipp Furche**, *Prof. Dr.*, wird für seine "Entwicklungen der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie und deren Anwendung in der Photochemie, sowie für Beiträge zur Random-Phase-Approximation in Systemen mit kleinen Bandlücken" mit der Dirac Medaille 2013 der World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) ausgezeichnet.

**Stefan Grimme**, *Prof. Dr.*, wird für seine "herausragenden Arbeiten zu *ab initio* und Dichtefunktionaltheorie-Methoden für große Moleküle" mit der Schrödinger Medaille 2013 der World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) ausgezeichnet.