

November 2013

Information

THEORETISCHE CHEMIE

Leitartikel

**Theoretische Chemie
Quo Vadis?**

Experiment trifft Theorie

**Femtosekundenspektroskopie
und ultraschnelle
Laserkontrolle**

Tagungsbericht

**49. Symposium für
Theoretische Chemie**



EDITORIAL

Liebe Freundinnen und Freunde der Theoretischen Chemie,

die Theoretische Chemie in Würzburg darf/soll/muss die nächsten drei Ausgaben der INFO THEORETISCHEN CHEMIE gestalten. Was haben wir uns gefreut! Wer die letzten Sätze als pure Ironie versteht, irrt, zumindest teilweise. Nach etwas Nachdenken kamen wir nämlich zu der Einsicht: vielleicht ist dieses „Blättchen“ ja wichtiger als viele von uns denken? Immerhin macht es uns nach außen hin als eine Gruppe etwas sichtbarer. Vielleicht verstärkt sie sogar die Identität der AGTC nach innen? Zusätzlich kann einer von uns als ehemaliges Mitglied der AG Peyerimhoff sogar in die Fußstapfen seiner „alten Chefin“ treten, die 1992 die InfoTC aus der Taufe hob.

Wir aus Würzburg werden also alles geben, hoffen aber auch, dass uns die Community unterstützt. Zum Beispiel schickt uns allen K+T (wer-was; wer-wohin; wer mit wem und vor allem warum) frühzeitig (und mit ernstgemeinten Bildern) Wie wir von mehreren Vorgängern erfahren haben, gestaltet sich die Artikel-Akquise wohl manchmal etwas zäh, eine Erfahrung, die wir bei unserer ersten Ausgabe glücklicherweise noch nicht gemacht haben. Um die Attraktivität dieser „Zeitung“ aber weiter zu erhöhen, haben wir uns drei Neuerungen ausgedacht:

1. In jeder Ausgabe werden wir Theoretiker („Wohin wird/soll sich die Theoretische entwickeln; mögliche Fehlentwicklungen“) und Experimentatoren („Wenn ich mir von der Theorie was wünschen könnte“) zu Wort kommen lassen. Freiwillige oder Vorschläge für freiwillige Autoren sind natürlich herzlich willkommen! Für diese Ausgabe konnten wir Herrn Thiel und Herrn Baumert gewinnen! Vielen Dank!

2. Die InfoTC enthält bereits die Rubrik „Arbeitsgruppen stellen sich vor“. Wir möchten eine weitere Rubrik „Nachwuchsgruppen stellen sich vor“ einführen. Hiermit möchten wir diesen Gruppen die Mög-

lichkeit eröffnen, sich einem breiteren (und hoffentlich interessierten) Publikum bekannt zu machen. In Absprache mit Christian Ochsenfeld werden wir diese Artikel in alphabetischer Reihenfolge auf der Homepage der AG Theoretische Chemie archivieren, sodass das breite Publikum bei Bedarf sehr leicht an zusätzliche Informationen gelangen kann. Damit das INFO TC nicht zu dick wird, behalten wir uns vor, Beiträge in Absprache evtl. zu kürzen.

Die Voraussetzungen für einen solchen Beitrag sind: a) der/die Gruppenleiter(in) hat keine permanente Position inne und b) er/sie gehört der AG Theoretische Chemie an. Auch hier sind natürlich Freiwillige gesucht. Es sei erlaubt darauf hinzuweisen, dass kürzere Artikel mit einem prägnanten Abstrakt häufiger gelesen werden, als langatmige ohne.

3. Bei der Durchsicht älterer Ausgaben ist uns aufgefallen, dass diese zumeist wenige Personenbilder enthalten. Dies ist schade, da gerade solche Personenbilder die älteren Ausgaben sehr interessant machen würden. Insbesondere da Professoren auf den im Internet vorhandenen Bildern verblüffenderweise kaum altern! Daher werden wir alle Artikel mit deutlich mehr Personenbilder auszustatten.

Wir hoffen, dass diese Neuerungen auf Ihre Zustimmung stoßen und dieses Heft noch lesenswerter machen. Es verbleibt der Dank an unsere Vorgänger aus Potsdam, Peter Saalfrank und Gernot Füchsel. Wir möchten uns nicht nur im Namen aller für die letzten drei Ausgaben bedanken (übrigens mit exzellenten Editorials!) sondern auch für die viele Starthilfe, die wir von euch erfahren haben!

Würzburg, November 2013

Eure würzburger InfoTC Redaktion

INHALT

Theoretische Chemie – Quo Vadis?	4
Hellmann Preis 2013	8
CPMD 2013 - Tagungsreport	11
Neue Arbeitsgruppe in Konstanz	18
Bericht über das 49. Symposium für Theoretische Chemie	23
Was ich mir von der Theorie wünsche	31
Theoretische Chemie am IWR Heidelberg	32
Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie	38
Tagungen	41
Klatsch und Tratsch	43

THEORETISCHE CHEMIE – QUO VADIS?*

Walter Thiel

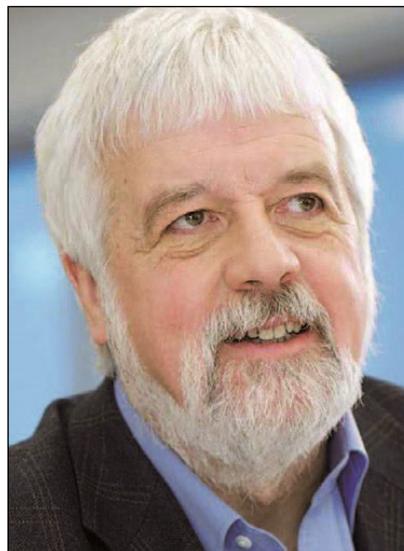
Theoretische Konzepte durchdringen die Chemie stärker als man gemeinhin denkt. Chemiker sind intuitiv vertraut mit den verschiedenen Ar-

Give me insight, not numbers.

KURT LEWIN, PSYCHOLOGE, 1951

ten der chemischen Bindung, mit der Struktur, Spektroskopie und Dynamik von Molekülen und mit der Vielfalt der möglichen chemischen Reaktionen. Sie verwenden bei der Beschreibung und der Analyse chemischer Phänomene theoretisch fundierte Konzepte, die beispielsweise aus der Quantenmechanik oder aus der statistischen Mechanik stammen. Es ist seit jeher die primäre Aufgabe der Theoretischen Chemie, diesen konzeptionellen und begrifflichen Rahmen zum Verständnis der Chemie bereit zu stellen.

Der stürmische Aufschwung der Theoretischen Chemie in den letzten Jahrzehnten hat aber eher damit zu tun, dass numerische Rechnungen und Simulationen immer genauer und leistungsfähiger geworden sind, durch das synergetische Zusammenwirken von Fortschritten bei den Rechenmethoden, der Software und der Hardware. Diese Entwicklung hat dazu geführt, dass heute weite Bereiche der Chemie mit den Methoden der Computational Chemistry realistisch modelliert werden können. Typische Beispiele für solche Anwendungen sind hochgenaue ab initio Rechnungen zur Spektroskopie und Dynamik kleiner Moleküle, Dichtefunktionalrechnungen zu Reaktionsmechanismen und zur Katalyse in der Übergangsmetallchemie, QM/MM



Prof. Dr. Walter Thiel

Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim

Rechnungen an enzymatischen Reaktionen und Molekulardynamik-Simulationen von Biomolekülen. Diese aktuellen Anwendungsbeispiele sind zwar sehr unterschiedlich, aber in all diesen Fällen bieten die Rechnungen unabhängige und verlässliche Informationen, die oft komplementär zum Experiment sind und wesentlich zum Verständnis beitragen. In den Computational Sciences werden Simulationen daher – neben Theorie und Experiment – auch als dritte Säule der Wissenschaft bezeichnet.

Methodenentwicklung

Was bleibt methodisch zu tun? Es wäre natürlich grundfalsch, sich mit dem Status quo zufrieden zu geben. Die Theoretische Chemie lebt von

* Abgedruckt mit freundlicher Unterstützung der Angewandte Chemie: *Angew. Chem.* 2011, 123, 9382-9384.

den Fortschritten bei der Methoden- und Programmentwicklung. Eine offenkundige Herausforderung ist die Genauigkeit der theoretischen Vorhersagen, die gesteigert werden kann, wenn die zugrunde liegenden Näherungen verbessert werden. Dies wird auf breiter Front versucht

The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble. It therefore becomes desirable that approximate practical methods of applying quantum mechanics should be developed.

PAUL DIRAC, PHYSIKER, 1929

Stichworte: explizit korrelierte ab initio Verfahren, Multireferenz-Methoden, verfeinerte und theoretisch fundierte Dichtefunktionale, polarisierbare Kraftfelder, ab initio Quantendynamik). Eine zweite Herausforderung betrifft die Komplexität chemischer Prozesse. Auch wenn man anhand stark vereinfachter Modellsysteme wertvolle Einsichten gewinnen kann, sollte man eigentlich die echten realen Systeme möglichst komplett und wirklichkeitsgetreu erfassen. Dies erfordert zum einen die Einbeziehung der Umgebung, sei es explizit atomistisch oder durch gröbere Ansätze bis hin zu Kontinuumsmodellen (Stichworte: Multiskalen-Methoden, mesoskopische Simulationen) und zum anderen eine adäquate Behandlung der enorm großen Zahl an Freiheitsgraden in solchen Systemen (Stichworte: Sampling des Konfigurationsraums, Entropie). Generelle Ziele bei jeglicher Methodenentwicklung sind Allgemeinheit und Robustheit: Rechenverfahren sollten idealerweise auf beliebige Systeme anwendbar sein (d.h. auf alle Elemente des Periodensystems und auf beliebige Typen von Verbindungen) und dabei eine möglichst gleichmäßige Genauigkeit garantieren (d.h. keine wilden Ausreißer). Eine weitere wesentliche Aufgabe bei der Programmentwicklung

ist die technologische Anpassung der Codes an neue leistungsfähigere Rechnerarchitekturen – aktuell geht es darum, zum einen massiv parallele Systeme mit Hunderttausenden von Prozessoren und zum anderen Hybrid-Systeme mit schnellen Graphikprozessoren für die Programme aus der Chemie nutzbar zu machen, um so die verfügbare Rechenleistung um Größenordnungen zu steigern. Wenn man all diese Tendenzen im Zusammenhang sieht, darf man sicher sein, dass die Möglichkeiten der Computational Chemistry auch in Zukunft rasant wachsen werden – unter der Voraussetzung, dass die Methoden- und Programmentwicklung weiterhin so aktiv wie bisher betrieben werden.

Praktische Anwendungen

Wie steht es mit Anwendungen, mit der Lösung konkreter chemischer Probleme auf dem Computer? Idealtypisch kann man zwischen drei Anwenderkreisen

There is nothing more practical than a good theory.

KURT LEWIN, PSYCHOLOGE, 1951

unterscheiden (auch wenn die Grenzen fließend sind und manchmal eine Personalunion vorliegen mag): Der Theoretiker will oft primär die Leistungsfähigkeit und die Grenzen von neu entwickelten Rechenverfahren erproben, beispielsweise durch systematische Validierungen an etablierten Benchmarks oder durch neuartige anspruchsvolle Erstanwendungen (proof-of-principle). Der Computerchemiker ist meist durch chemische Fragestellungen motiviert, er verwendet die richtigen (state-of-the-art) Rechenmethoden, um auf dem gewählten Arbeitsgebiet durch breit angelegte theoretische Untersuchungen qualitative Einsichten zum Verständnis der Chemie zu gewinnen. Der Experimentator ist an der Lösung konkreter Probleme interessiert, er nutzt theoretische Standardrechnungen dabei als eine zusätzliche Methode zur Charakterisierung und zum Verständnis seiner experimentellen Befunde. Alle diese Typen von Anwendungen sind

legitim – die Vielfalt an solchen möglichen Anwendungen ist sicher eine Stärke der Theoretischen Chemie.

Wo liegen die Gefahren bei Anwendungen speziell für Experimentatoren? In der Theoretischen Chemie ist der Technologietransfer zu den experimentellen Gruppen relativ einfach. Im konzeptionellen Rahmen einer „Modellchemie“ (John Pople) gibt es wohldefinierte Rechenverfahren, die in (teilweise kommerziellen) Programmpaketen verfügbar sind und leicht implementiert und benutzt werden können (black-box). Normalerweise wird es in einer experimentellen Arbeitsgruppe immer einige IT-kundige Doktoranden und Postdocs geben, die solche Programme gerne anwenden. Was ist dabei zu beachten? Zunächst muss man sich fragen, ob theoretische Rechnungen für ein gegebenes konkretes Problem überhaupt sinnvoll sind (im Hinblick auf die zu erwartenden Ergebnisse). Als nächstes ist zu entscheiden, an welchem Modellsystem gerechnet werden soll: Vereinfachungen des realen Systems sind zwar unvermeidbar, dabei müssen aber natürlich alle wesentlichen Komponenten in dem Modell erhalten bleiben; Fehler bei diesem essentiellen Schritt können später kaum noch korrigiert werden. Mit der Wahl des Modellsystems verbunden ist die Entscheidung über das verwendete Rechenverfahren und das konkrete Vorgehen; hier ist inhaltliche Expertise gefragt, weil die Theoretische Chemie eine Hierarchie von Rechenmethoden anbietet, die sich in Anwendungsbreite, Rechenaufwand und Genauigkeit unterscheiden. Auch wenn man sich für ein Standardverfahren wie Dichtefunktionaltheorie entscheidet, sind weitere Festlegungen erforderlich (z.B. hinsichtlich Funktional, Basissatz und Rechenprogramm), und aufgrund von methodischen Weiterentwicklungen können Standardansätze wie B3LYP/6-31G* durchaus obsolet werden. Die Durchführung der eigentlichen Rechnungen ist dann meist weniger kritisch,

obwohl natürlich technische Probleme auftreten können (z.B. fehlende Konvergenz, erfolglose Optimierungen, etc), die aber von Mitarbeitern mit der nötigen Erfahrung in der Regel gemeistert werden. Potentiell schwieriger ist der Umgang mit den erhaltenen Ergebnissen: Der Glaube an die Unfehlbarkeit des Computers ist genauso wenig gerechtfertigt wie ein tiefes Misstrauen gegenüber den ausgedruckten Zahlen. Man muss stattdessen in der Lage sein, die Fehlerbalken bei den theoretischen Ergebnissen realistisch einzuschätzen, und es empfiehlt sich, dabei nicht auf eine einzige Zahl zu starren, sondern alle rechnerisch zugänglichen Informationen auszuwerten und mit den experimentellen Befunden zu einem Gesamtbild zusammenzuführen. „Give me insight, not numbers“ (Charles Coulson) – dies ist der Anspruch, dem man sich bei der Analyse der Ergebnisse stellen muss.

Kooperationen

Die skizzierten Überlegungen treffen generell auf anwendungsorientierte Rechnungen zu, gleichgültig von wem sie durchgeführt werden. Bei hauptberuflichen Theoretikern und Computerchemikern erwartet man, dass sie sich all diese Aspekte bewusst sind und dass sie die lokalen experimentell arbeitenden Kollegen unterstützen können, wenn diese bei den eigenen Anwendungen auf Probleme stoßen. Es ist sicher gut, wenn Standardrechnungen direkt in den experimentellen Arbeitsgruppen gemacht werden, weil dort der unmittelbare Bezug zur chemischen Fragestellung besteht. Eventuell nötige Hilfestellungen seitens der lokalen Kollegen aus der Theorie sollten hierbei selbstverständlich sein ebenso wie eine generelle Diskussionsbereitschaft, die erfahrungsgemäß zu spannenden Kooperationen führen kann. Was anfangs wie eine Bringschuld für

You cannot believe in astronomical observations before they are confirmed by theory.

SIR ARTHUR EDDINGTON, ASTRONOM,
ZITIERT VON S. CHANDRASEKHAR,
NATURE 1974, 252, 15.

die Theorie aussieht, kann die eigene Forschung durchaus beflügeln.

Perspektiven

Welche langfristigen Entwicklungen bringen uns

We may even judge the degree of perfection to which a science has arrived by the facility with which it may be submitted to calculation.

ADOLPHE QUETELET,
MATHEMATIKER, 1828

voran? Zwei offensichtliche Antworten für den Bereich der Universitäten: Zum einen muss eine zeitgemäße moderne Ausbildung der Chemiestudenten in Theoretischer Chemie erfolgen, bei der die theoretischen Grundlagen des Fachs ebenso gründlich erlernt werden wie der praktischen Umgang mit den Werkzeugen der Computational Chemistry. Zum anderen eine Stärkung des Fachs durch geeignete Berufungen: Es werden auf Professorebene sowohl Theoretiker als auch Computerchemiker gebraucht, welche gemeinsam das Fach in der gesamten Breite vertreten und in der Forschung mit den experimentellen Kollegen zusammenarbeiten können.

Quo vadis? Die Theoretische Chemie hat sich in den letzten Jahrzehnten ausgehend von eher esoterischen Anfängen zu einem wichtigen eigenständigen Teil der Chemie und zu einem gesuchten Partner des Experiments entwickelt. Wenn man bedenkt, was heute im Vergleich zu der Zeit vor 10, 20 oder 30 Jahren an realistischen Rechnungen und Simulationen möglich ist, so erkennt man die rasanten Fortschritte auf diesem Gebiet. Diese Dynamik erscheint ungebrochen und verheißt einiges für die Zukunft. Das Experiment wird immer im Zentrum der Chemie bleiben, aber die Theorie wird zunehmend zum Design von Experimenten (durch Vorhersagen) und zur Interpretation der experimentellen Befunde (durch unabhängige Informationen aus begleitenden Rechnungen) beitragen können. Dabei wird die Theorie gefordert sein, anhand der zunehmend genauen Rechnungen die qualitativen theoretischen Konzepte der Chemie zu überprüfen und zu erweitern – letzten Endes kann es nicht darum gehen, Zahlen zu produzieren, sondern zu verstehen, was bei chemischen Prozessen geschieht.

HELLMANN PREIS 2013

Dr. Jörg Behler

Der Hellmann Preis 2013 geht an Herrn Dr. Jörg Behler, Leiter einer Emmy Noether-Gruppe an der Ruhr-Universität Bochum, für die Entwicklung neuartiger künstlicher neuronaler Netze zur dynamischen Simulation komplexer Systeme auf langen Zeitskalen.

Die von Jörg Behler originär entwickelte „neural network potential“ (NNP) Methode ist ein fundamentaler Beitrag zur hochgenauen und systematisch verbesserbaren Simulation in den molekularen Materialwissenschaften.

Die Behlerschen NNPs erlauben präzise und damit vorhersagekräftige Untersuchungen von Materialien, die einerseits mit konventionellen Potentialen (Kraftfelder, „MM“) nicht beschreibbar sind, und andererseits mit elektronenstrukturbasierten Methoden aufgrund der benötigten Längen- und/oder Zeitskalen nicht durchführbar sind.

Jörg Behler begann seine wissenschaftliche Laufbahn mit dem Chemiestudium an der Universität Dortmund, das er mit einer externen Diplomarbeit an der University of Reading in England zum Thema Molekulardynamik Simulationen von Kohlenhydraten in wässriger Lösung mit Auszeichnung abschloss. Für diese Arbeit und seine Leistungen während des Studiums wurde er von der Universität Dortmund zudem mit dem Jahrgangsbestenpreis ausgezeichnet.

Zur Promotion wechselte er ans Fritz-Haber Institut der Max-Planck Gesellschaft in Berlin, um in der Gruppe um Matthias Scheffler die Dissoziation von Sauerstoffmolekülen auf Alumini-



Dr. Jörg Behler

umoberflächen zu untersuchen. Diese Fragestellung stellte damals ein ungelöstes Problem der theoretischen Oberflächenwissenschaften dar, das von vielen Arbeitsgruppen bearbeitet wurde, da die experimentell gefundene ungewöhnlich niedrige Haftwahrscheinlichkeit von thermischen Sauerstoffmolekülen im eklatantem Widerspruch zu den Ergebnissen von konventionellen Dichtefunktionaltheorierechnungen stand. Herr Behler konnte durch Implementierung der bis dato in diesem Gebiet nicht angewendeten „constrained DFT“ Methode (entwickelt zur Behandlung von Magnetismus im Festkörper) in seiner Dissertation zeigen, dass dieser Widerspruch aus Unzulänglichkeiten konventioneller DFT Rechnungen resultierte. Für seine mit summa cum laude bewertete Promotion wurde er mit der Otto-Hahn Medaille der Max-Planck Gesellschaft ausgezeichnet. Es sei erwähnt, dass heute, knapp

zehn Jahre nach seiner Dissertation, das Gebiet der sogenannten nichtadiabatischen Oberflächenreaktionen wohletabliert ist und constrained DFT sich seither vielfältiger Einsatzmöglichkeiten erfreut.

Nach einem kurzen Postdoktorat bei Karsten Reuter am FHI wechselte Herr Behler an die ETH in die Gruppe von Michele Parrinello in Lugano. Hier wollte er sich der Untersuchung von globalen Hochdruckphasendiagrammen von Festkörpern mit Hilfe der Metadynamikmethode widmen. Es zeigte sich jedoch schnell, dass die direkte (on the fly, Car-Parrinello) Kopplung von DFT Rechnungen mit Metadynamik aufgrund der extremen Rechenzeitanforderungen zur Phasendiagrammberechnung nicht durchführbar war. Bekannt war natürlich, dass etablierte empirische (Mehrkörper-) Potentiale zur Beschreibung von Festkörpern (wie Tersoff, Finnis-Sinclair, Brenner usw.) aufgrund ihrer geringen Genauigkeit keine brauchbare Alternative zu DFT darstellten; aufgrund der Parameterisierung beschreiben diese Zugänge nur bestimmte Phasen, nicht aber das globale Phasenverhalten und Phasenübergänge.

Die von Herrn Behler vorgeschlagene Lösung des Problems war die Entwicklung eines grundsätzlich neuartigen Ansatzes zur Konstruktion von hochdimensionalen Potentialhyperflächen mit Hilfe von künstlichen neuronalen Netzen. Neuronale Netze wurden in der Chemie zu diesem Zeitpunkt von einigen wenigen Gruppen schon seit gut 10 Jahren benutzt allerdings lediglich im Sinne einer möglichst vorurteilsfreien Anpassung einer allgemeinen funktionalen Form an Daten („unbiased fit“) zur Darstellung von Energieflächen. Ein grundsätzliches Problem dieser Methode war jedoch die Beschränkung auf wenige Freiheitsgrade bzw. Dimensionen, und damit auf sehr kleine Systeme (z.B. Moleküle bestehend aus einem halben Dutzend Atomen oder die Wechselwirkung von starren Zweiatomern mit starren

Oberflächen). Genau diesen traditionellen Ansatz hat Herr Behler bereits während seiner Doktorarbeit kennengelernt und auch zur effizienten Berechnung vieler Trajektorien zur Sauerstoffdissoziation auf Aluminium eingesetzt.

Aufbauend auf diesen Erfahrungen gelang es Herrn Behler in seiner Zeit an der ETH, die fundamentalen konzeptionellen Probleme zu lösen und einen allgemeinen Ansatz zur Beschreibung von Energieflächen von Systemen bestehend aus extrem vielen Atomen zu entwickeln. Hierzu führte er eine neuartige Art von „Symmetriefunktionen“ ein, die es erlauben, die lokale Umgebung eines Atoms zu charakterisieren, auf denen aufbauend separate Subnetze erzeugt werden, über deren Kombination die Gesamtenergie des Systems zusammen mit den Kerngradienten und damit die Kräfte effizient darstellbar werden.

In einem gewissen Sinne handelt es sich um einen Inkrementenansatz zur eindeutigen Darstellung der Gesamtenergie eines Vielteilchensystems basierend auf einer speziellen Kernkonfiguration. Damit hatte Herr Behler erstmals alles beisammen, was man für eine Molekulardynamik Simulation zur Beschreibung der Wechselwirkungen braucht. Insbesondere gehören diese „neutral network potentials“ (NNPs) zur Klasse der sogenannten reaktiven Kraftfelder, mit denen chemische Reaktionen beschreibbar sind.

Basierend auf diesem Durchbruch gelang es ihm dann in einer ersten Anwendung erstmals, das komplexe Hochdruckphasendiagramm von reinem Silizium mit Hilfe von Computersimulationen vollständig und in exzellenter Übereinstimmung mit dem Experiment vorherzusagen.

Auch in weiteren anwendungsbezogenen Kollaborationen über seine Postdoktorandenzeit hinaus kamen die von Herrn Behler entwickelten Methoden sehr erfolgreich in den Materialwissenschaften zum Einsatz.

Nach seiner kurzen Postdoktorandenzeit an der ETH wechselte Herr Behler an die Ruhr-Universität Bochum mit dem Ziel, eine unabhängige Nachwuchsgruppe aufzubauen. Nach kurzer Zeit konnte er umfangreiche Drittmittel einwerben, u.a. ein Liebig Stipendium des FCI, das bereits nach einem Jahr durch eine Emmy Noether-Gruppe der DFG zum Thema NNP Entwicklung und Anwendung abgelöst wurde. Zudem wurde er von dem Leitungsgremium des SFB 558 „Metall-Substrat Wechselwirkungen in der Heterogenen Katalyse“ schnell als ein potenter Nachwuchswissenschaftler identifiziert und konnte ein eigenständiges Teilprojekt einbringen. Zurzeit ist er u.a. als federführender Wissenschaftler („PI“) in den Exzellenzcluster 1069 “RESOLV: Understanding and Design of Solvent Controlled Processes“ tätig. Weitere Forschungsmittel standen ihm durch die Berufung in das Junge Kolleg der Nordrhein-Westfälischen Akademie der Wissenschaften zur Verfügung.

Seine wissenschaftliche Arbeit in Bochum konzentriert sich auf weitere methodische Entwicklungen und die Erprobung der Anwendungsmöglichkeiten seiner NNPs, die bis dato nur für inkomponentensysteme einsetzbar waren, in Richtung von wesentlich komplexeren Multi-komponentensystemen wie etwa komplexe Metall/Oxidkatalysatoren oder wässrige Lösungen.

Hierzu erweiterte Herr Behler seine Methode durch die explizite und separate Behandlung von langreichweitigen elektrostatischen Wechselwirkungen. Diese basieren auf umgebungsabhängigen atomaren Ladungen, die wiederum sehr genau durch spezielle, unabhängige neuronale Netze ausgedrückt werden und etwa die Beschreibung von Ladungstransfer erlauben. Darüberhinaus ist die verallgemeinerte Methode sowohl für periodische als auch für nicht-periodische Systeme implementiert. Ein weiterer hochwillkommener Aspekt ist die Eigenschaft der systematischen Verbesserbarkeit der NNPs durch den Einsatz von korrelierten quantenchemischen Methoden bei ihrer Generierung, anstatt auf kostengünstigere DFT Methoden zurückzugreifen. Die umfangreichen Methodenentwicklungen wurden von Herrn Behler und seinen Mitarbeitern in das parallele Programmpaket RuNNer implementiert, welches an der Ruhr-Universität entstanden ist und bereits in vielen Zusammenarbeiten benutzt wird.

Nun wünsche ich Jörg Behler alles Gute für seine weitere wissenschaftliche Entwicklung.

Dominik Marx, Bochum

CPMD 2013 - TAGUNGSREPORT

2.-6. September 2013, Leipzig

Conference Summary

The development of first principles molecular dynamics (FPMD) simulation methods—as accomplished in the influential work of Car and Parrinello (Car-Parrinello molecular dynamics, CPMD)—represented a major breakthrough in computational chemistry. The ability of FPMD to accurately describe dynamic processes, condensed phases, and chemical reactions combined with the growing computational power of the last decades has made them an indispensable tool in solving, rather than modeling, real-world problems.

The CPMD meeting is an internationally renowned conference held every second year. It provides a platform for the discussion of the latest advancements—both in theory and applications—and defines future trends in the field. This year's meeting (CPMD 2013) was hosted from Monday, September 2nd to Friday, September 6th in Leipzig, Germany, and attended by about 150 participants.

The scene of the five days was set on materials science (Monday), life sciences (Wednesday), and method development (Thursday, Friday). Tuesday was an honored guest day. The actual topics covered in all 44 talks were much broader, including for example energy conversion and storage, green chemistry, nanotechnology, geochemistry, drug discovery, and catalysis. Keynote lectures introducing the topics of the day were given by Wanda Andreoni, Thomas Lippert, Nicola Marzari, Carme Rovira, Matthias Scheffler,



*Michael von Domaros
Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Bonn*

Michiel Sprik, Walter Thiel, and Xifan Wu. The conference also featured a poster session with plenty of time for individual discussions and a conference dinner on Wednesday, in Leipzig's famous historical restaurant "Auerbach's Keller". Funding was received from the European Science Foundation, the Deutsche Forschungsgesellschaft, and the German Research School for Simulation Sciences.

Scientific Content of Talks and Discussions

Day 1: Materials Science

The first day of the conference started with a keynote lecture delivered by Nicola Marzari, who



presented recent methodological developments designed to perform FPMD simulations in realistic electrochemical environments that include a liquid solvent, a dissociated electrolyte, an applied electrochemical potential, and a varying pH. Alfredo Pasquarello gave a talk about the importance of defects in all functional materials and theoretical tools to determine defect energy levels in the form of charge transition levels. The third speaker of the day, Mark Tuckerman, showed the results of *ab initio* molecular dynamics studies of the proton conduction mechanism in phosphate based liquids that are important electrolytes in fuel cells.

The afternoon session started with Stefan Wippermann's talk on density functional and many body perturbation theory calculations of the electronic, optical and transport properties of Si-ZnS nanocomposites which are used experimentally as charge transport layers. Marcela Ianuzzi gave an overview of efficient density functional theory (DFT) based computational methods that allow the investigation of adsorption processes on metallic surfaces. Afterwards, Mauro Boero presented combined first principles simulations and experimental work on the ferrocene/Cu(111) interface which is an ideal model for metal-molecule junctions for future electronic devices. Carlo Pignedoni demonstrated how atomistic simulations can help in the synthesis and characterization of atomically precise, graphene based heterostructures.

In the last session of the day, Bernd Meyer demonstrated that reaction networks in heterogeneous catalysis can be generated from *ab initio* metadynamics simulations using methanol synthesis as an example. Rochus Schmid delivered a talk on a systematic force field generation strategy for metal organic frameworks based on first principles calculations and finally, Ding Pan explored the dielectric properties of water under extreme conditions as are present in the deep earth and are thus of fundamental interest in geochemistry.

Day 2: Honored Guest Day

Tuesday was an honored guest day with several keynote lectures on various topics. The day started with Teodoro Laino, who reviewed the status and computational materials challenges of Lithium-air batteries, which promise to outperform all known existing battery solutions. Afterwards, Matthias Scheffler presented a keynote lecture on *ab initio* thermodynamics and statistical mechanics of interfaces. Once more, the importance of defects was highlighted, and strategies to calculate Gibbs free energies were presented. He also explained the deficiencies of the widely-used exchange correlation functions and showed recent advances in these functionals beyond the random-phase approximation, which many of the subsequent speakers planned to use in the future. In last talk of the morning session, Evert Jan Meijer demonstrated how free energy methods and transition path sampling can be used in FPMD simulations to obtain a quantitative picture of

reactions involving proton transport in solutions of water and methanol. Finally, Marialore Sul-pizi explained the extraction of sum frequency

delivered by Michiel Sprik followed. With the aid of a Car-Parrinello standard hydrogen electrode, he and his group can compare electrode potenti-



The most important ingredients of CPMD: Carr (right) and Parrinello (left) together with the perfect simulation of fireworks.

generation infrared spectra (SFG-IR)—which is a popular experimental technique to investigate interfacial water properties—from FPMD simulations.

The afternoon session was introduced by a keynote lecture of Thomas Lippert, who presented the computational resources at the Jülich Supercomputing Center and future efforts to improve computational power and to integrate the CPMD community into Jülich's infrastructure. He also explained resource allocations obtained via international, national, and regional programs, in particular the PRACE project, which was the basis of most of the large-scale simulations presented on this conference. A second keynote lecture on Car-Parrinello computational electrochemistry

als directly to experiments and assess the effect of the delocalization error in common density functionals, which is the major source of error in these calculations. Results of oxidation potentials of some model aqua-cations (Cu^+ , Ag^+ , and Fe^{2+}) and the alignment of energy levels at the rutile MnO_2 -water interface were also given. The second day concluded with a poster session and many individual discussions among the scientists.

Day 3: Life Sciences

The morning session on Wednesday was opened by Carme Rovira with a keynote lecture on the prediction of sugar binding and catalytic mechanisms of carbohydrate-active enzymes using classical/first principles MD and metadynamics methods. These enzymes are of fundamental interest

in life sciences because of their role in health and diseases, as well as in enzymatic biomass conversion. Following this, Frank Uhlig delivered a talk on the structure and dynamics of the hydrated electron, a subject which has been controversially discussed in recent literature. Later on, Xifan Wu explained the computation of ionization potentials of hydrated hydroxide and hydronium ions with a many-body approach in the second keynote lecture of the day. Patricia Hunt presented FPMD simulations of aqueous chloride solutions, linking electronic and molecular structure of these ubiquitous solutions.

In the afternoon session, Carlo Camilloni talked about a combined study of NMR measurements, molecular dynamics simulations, and density functional theory on the enzymatic proline isomerization by Cyclophilin A. The group found that Cyclophilin A provides an electrostatic environment that acts on the substrate through elec-

trostatically leveraging the dipole associated with the carboxylic group of the glycine. Jens Dreyer presented results of FPMD and metadynamics simulations of the proton transport in the cation-selective membrane channel Gramicidin A, elucidating the role of the membrane dipole potential for the free energy barrier of proton permeation.

The last session commenced with Jorge Kohanoff's talk on DNA damage by low-energy electrons investigated by FPMD simulations. Low-energy electrons play an important role in irradiation-caused DNA damage and a thorough understanding of this process is of utmost importance in combating cancer. Giulia Rosetti presented computational techniques to investigate the Cu(II) binding to intrinsically disordered proteins which play a key role in several neurodegenerative diseases, such as Parkinson. The last speak of the day, Francesco Luigi Gervasio, presented a combined computational and experimental study



The poster session: melting pot for new results, new insights, new discussions and new friends.



Also important for a successful conference: nice lunch without long queues and coffee with discussion afterwards! Is that true, Walter?

on the role of conformational changes and allosteric regulation in protein kinases. Conformational shifts in kinases lead to several diseases, such as cancer, thus understanding how allosteric signals control the conformational equilibrium is believed to lead to a new rational drug design.

Day 4, 5: FPMD-based Methods

In the first talk on Thursday morning, Simone Raugè demonstrated how FPMD simulations and metadynamics can be used in the rational design of molecular electrocatalysts based on inexpensive and abundant metals such as Ni, Mn, and Fe for oxidation and production of H₂. After-

limited portion of phase space—with metadynamics to achieve a broad and accurate description of the conformational transitions of ATP-Mg²⁺ in water. Wanda Andreoni delivered a keynote lecture on techniques to disclose reaction pathways with CPMD simulations and their application in processes such as CO₂ capture and sequestration or structural transformations in nanocarbons.

The afternoon session started Giovanni Bussi, who explored the mechanism and dynamics of RNA folding and conformational transitions and of RNA/protein interactions using FPMD simulations and state-of-the-art free energy methods. Walther Thiel presented a keynote lecture about

Sed ut perspiciatis unde omnis iste natus error sit voluptatem

wards, Davide Branduardi combined the string method—which is a technique aimed at calculating a free energy in high dimensionality on a

the use of semiempirical quantum-chemical methods for the investigation of fast nonradiative

relaxation processes after photoexcitation. These simulations were used, e.g., to unveil the photostability of DNA bases in different environ-

transitions in some classical water potentials and presented an exhaustive study of the free energy surface of those liquids using umbrella sampling



NSA: Big brother is ... really interested in each topic?

ments, the mechanism of photoinduced molecular rotors, or the complete photochemical cycle of a GFP chromophore with ultrafast excited-state proton transfer. Following this, Vittorio Limongelli reported recent work the accurate estimation of free energy landscapes in biological systems. In particular, he discussed cyclooxygenases, adenosine deaminase and thrombin binding aptamer.

Gareth Tribello introduced the final session of the day with a talk on dimensionality reduction to generate simplified representations of the high-dimensional data obtainable from atomistic simulations, which is of high interest with the progressively increasing complexity of this data. Furthermore, he explained how these techniques can be used to map complex free energy surfaces. Jeremy Palmer talked about liquid-liquid phase

and well-tempered metadynamics. This sparked a particularly heated discussion, as other groups show different results using the same water model and umbrella sampling. The last speaker of the day, Fabio Pietrucci, showed how graph theory can be used in molecular dynamics simulations to greatly extend the accessible timescales, allowing to discover complex multi-step reaction pathways and leading to an efficient characterization of high-dimensional free energy landscapes.

The last day of the CPMD meeting was opened by Ralph Gebauer who presented a new approach to finding accurate, parameter-free approximations to the exchange-correlation energy functional which avoid self-interaction and capture strong electron correlations. This approach is particularly powerful in the high correlation limit, i.e.

at intermediate and large interatomic separations, and even beats coupled cluster calculations with single, double and perturbative triple electron-hole excitation, which is often considered the "gold-standard" of quantum chemistry. Rodolphe Vuilleumier demonstrated how maximally localized Wannier orbitals can be used to derive classical force fields from FPMD simulations. Focus was not only on the electrostatic interactions between fragments, but on all terms of the interaction, including repulsion and long-range dispersion. Jürg Hutter followed and presented a novel algorithm, based on a hybrid Gaussian and Plane Waves (GPW) approach with the resolution-of-identity (RI) approximation, developed for MP2, scaled opposite-spin MP2 (SOS-MP2) and direct-RPA (dRPA) correlation energies of finite and extended systems. The algorithm is implemented in the popular CP2K code.

In the last session of the conference, Angelos Michaelides talked about water and ice at surfaces. These interfaces are relevant to a plethora of physicochemical phenomena and technological processes. The talk featured a discussion on the importance of nuclear quantum effects and the

importance of van-der-Waals forces in adsorption. Afterwards, Brandon Wood showed results on CPMD simulations of III-V-semiconductor-water interfaces that are the most important photocathodes in solar hydrogen production. The results point to the importance of key dynamical processes in determining the electrochemical properties of the semiconductor-water interface. The conference was closed after Jun Cheng's talk on proton coupled electron transfer in water photooxidation at the TiO₂ water interface. By combining FPMD simulations with free energy perturbation theory the group was able to compute the thermochemistry of proton coupled electron transfer, to understand the delocalization error in standard GGA density functionals, and to propose simple model to understand how the band structures of materials modulate the electronic energy levels (redox potentials) of intermediates.

Text: Michael von Domaros, Bonn

Figure captions: Bernd Engels, Würzburg

NEUE ARBEITSGRUPPE IN KONSTANZ

Theoretische Chemie an der Universität Konstanz

KONTAKT

Prof. Dr. Christine Peter
 Universität Konstanz
 Fachbereich Chemie
 Fach 718
 D-78457 Konstanz
 Web: <http://cms.uni-konstanz.de/peter>
 E-Mail: Christine.Peter@uni-konstanz.de



*Prof. Dr. Christine Peter
 Universität Konstanz*

Seit April 2013 besteht die Arbeitsgruppe „Theoretische und computergestützte Chemie“ an der Universität Konstanz, mit thematischem Schwerpunkt auf klassischen Molekulardynamiksimulationen biologischer Systeme und biologischen und biomimetischen Materialien. Methodisch befassen wir uns mit der Entwicklung von Multiskalensimulationsmodellen zur Untersuchung von Selbstaggregation und Nanostrukturbildung in biologischen und biologisch inspirierten Materialien – von peptidbasierten Hydrogelen bis hin zu Biopolymeren wie Spinnenseide oder biologischen Hybridmaterialien wie Perlmutter.

Um die Wechselwirkungen und Mechanismen in solchen Aggregations- und Strukturbildungsprozessen zu verstehen, sind hierarchische Simulationsansätze ideal geeignet, da die obengenannten Systeme oft selbst hierarchisch strukturiert sind. Hier verknüpfen wir Modelle auf mehreren Auflösungsebenen systematisch miteinander, so dass wir einerseits eine akkurate mikroskopische, chemisch realistische Beschreibung der Wechselwirkungen und gleichzeitig Zugang zu den systemrelevanten Längen- und Zeitskalen er-

halten. Unser Schwerpunkt liegt bei klassischen atomistischen Molekulardynamiksimulationen und systematisch darauf aufgebauten vergrößerten Modellen. Darüber hinaus verknüpfen wir in Kooperationen diese vorwiegend klassischen teilchenbasierten Modelle wiederum mit weiteren Simulationsebenen: in die eine Richtung mit quantenmechanischen Simulationen, um zum Beispiel Photoreaktionen zu untersuchen, zum anderen hinein in den Bereich der Kontinuumsbeschreibung makroskopischer Materialeigenschaften.

Im Folgenden werden einige der Themen in unserer Gruppe näher beschrieben.

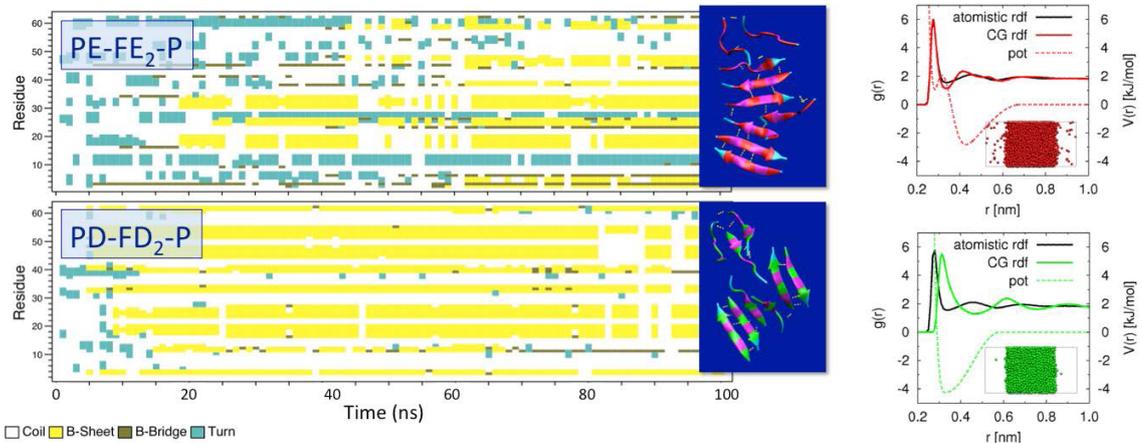


Abbildung 1: Amphiphile Peptide an der Luft/Wasser Grenzfläche linke Seite: DSSP Sekundärstrukturverlauf während atomistischer Simulation der Selbstaggregation von zwei Peptidsystemem (Pro-Glu-(Phe-Glu)₂-Pro, oben, und Pro-Asp-(Phe-Asp)₂-Pro, unten). Die Snapshots zeigen typische Aggregatstrukturen am Ende der Simulation. Rechte Seite: Vergrößerte für die Luft/Wasser Grenzfläche (durchgezogene Linien: radiale Paarverteilungsfunktionen; gestrichelte Linien: Wasser-Wasser Paarpotentiale). Oben (rot): Strukturbasiertes vergrößertes Modell. Unten (grün): Thermodynamik-basiertes vergrößertes Modell. [5]

Multiskalensimulationen von Selbstaggregation in Peptidsystemen

Aggregation und Nanostrukturbildung von Peptiden sind von ausgesprochenem Interesse für biomedizinische und materialwissenschaftliche Anwendungen. Um diese Phänomene in Simulationen zu untersuchen, werden Modelle gebraucht, die sowohl Faltung als auch Aggregation wiedergeben, die auf deutlich größeren Zeit- und Längenskalen stattfindet. Hier liefern hierarchische Simulationsansätze auf der atomistischen Ebene ein mikroskopisches, chemisch akkurates Bild und können über die vergrößerte Ebene auch zum Verständnis der zugrundeliegenden Mechanismen beitragen.

Ein wichtiges Element in diesem Kontext ist das Verhalten von Peptiden an Grenzflächen. Zum Beispiel haben hydrophobe Grenzflächen wie die Luft-Wasser oder Öl-Wasser Grenzfläche einen großen Einfluss auf das Faltungsgleichgewicht, die Sekundärstrukturbildung und damit auch auf das Aggregationsverhalten von amphiphilen

Peptiden. Wir untersuchen verschiedene Typen amphiphiler Peptide in Lösung und an der Luft-Wasser Grenzfläche. Dies sind zum einen β -Faltblatt bildende Peptide mit Sequenzen aus alternierend hydrophilen und hydrophoben Seitenketten, die an der Luft Wasser Grenzfläche Monolagen bilden und zum Beispiel als Template für Mineralisationsprozesse dienen, zum anderen α -helikale amphiphile zellpenetrierende Peptide.

Atomistische Simulationsmodelle geben Einblick in das Wechselspiel von Aggregationsprozessen, Faltungsgleichgewichten, Verteilungsgleichgewichten zwischen hydrophoben und hydrophilen Medien und der Wechselwirkung mit Grenzflächen. Somit ist es möglich ein molekulares Verständnis der zugrundeliegenden Strukturen, relevanten Wechselwirkungen und thermodynamischen Triebkräfte zu erhalten, die die Strukturbildung auf der mesoskopischen Ebene bestimmen. Diese atomistischen Simulationen dienen dann als Referenz für die Entwicklung vergrößerter Modelle, die Zugang zu größeren Zeit- und Längenskalen ermöglichen [1–4].

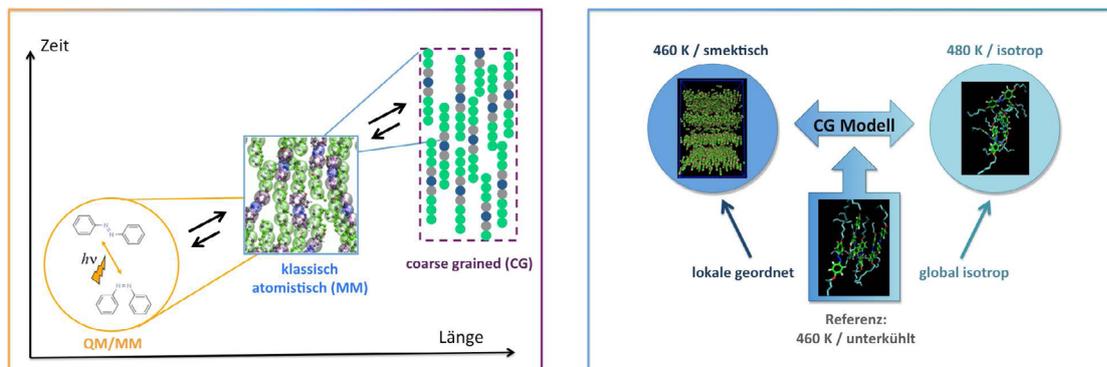


Abbildung 2: Linke Seite: Illustration eines Multiskalenansatzes bestehend aus QM/MM, klassischen MM, und vergrößerten Modellen zum Studium von photoinduzierten Phasenübergängen in azobenzolhaltigen Flüssigkristallen [14]. Rechte Seite: die Wahl eines geeigneten Referenzzustands ist essentiell um ein vergrößertes Modell zu entwickeln das zugleich die Struktur der flüssigkristallinen Phase und den flüssigkristallin-isotropen Phasenübergang gut repräsentiert [12].

Biologische und biologisch inspirierte Materialien

Die Ursache für die bemerkenswerten mechanischen Eigenschaften vieler biologischer Materialien, wie zum Beispiel Knochen oder Perlmutter, ist zu großen Teilen ihr hierarchischer Aufbau aus steifen mineralischen Partikeln, die von einer weichen, elastischen, organischen Matrix zusammengehalten werden. Um die mechanischen Eigenschaften dieser Materialien wie zum Beispiel Zähigkeit und Verformbarkeit zu verstehen, ist es wichtig, die beteiligten Mechanismen und Prozesse auf vielen Hierarchieebenen zu betrachten. Dies reicht von den mesoskopischen Eigenschaften der beteiligten Materialien (der mineralischen genauso wie der organischen Polyelektrolyt- und Strukturproteinkomponenten) bis hinunter zu einem mikroskopischen Verständnis der Wechselwirkungen der Polymere mit der mineralischen Oberfläche [6, 7].

Experimentell werden Peptidaggregate mit einem mit hohem Anteil Glutaminsäure der Asparaginsäure Seitenketten als gut steuerbare Template eingesetzt, an denen kontrollierte Mineralisation stattfinden kann (Stichwort: „synthetic tissue engineering“). Zur Simulation dieser

biomimetischen Systeme entwickeln wir Modelle zur Untersuchung der Wechselwirkung von Peptiden und synthetischen (biomimetischen) Polymeren mit Mineraloberflächen und der Wechselwirkung von diesen Polymeren mit Ionen (z.B. Kalzium) in Lösung in den frühen Stadien der Biomineralisation. Hier ist ein wichtiges Element die Entwicklung von klassischen atomistischen Kraftfeldern z.B. die Parametrisierung von Ionen anhand einer Kombination von thermodynamischen Größen wie Assoziationskonstanten mit Referenzdaten aus DFT-Rechnungen.

Die Grenzflächen zwischen harten und weichen Materialien stellen für Simulationen eine besondere Herausforderung dar, da für das Verhalten an diesen Grenzflächen sowohl eine akkurate Beschreibung der hohen Wechselwirkungsenergien im Kraftfeld wichtig ist als auch eine Beschreibung des Entropie-dominierten Verhaltens der organischen Komponente. Durch die hohen Wechselwirkungsenergien wird aber das Simulieren von dem korrekten Konformationsgleichgewicht extrem erschwert, da das System in atomistischen Simulationen in metastabilen Zuständen steckenbleibt. Um diese Samplingprobleme zu überwinden, setzen wir gezielt vergrößerte Mo-

delle in Kombination mit anderen Methoden ein, wie z.B. Replica Exchange Simulationen.

Bei den obengenannten Projekten ist eine wesentliche Komponente die systematische Entwicklung von vergrößerten Modellen basierend auf atomistischen Referenzsimulationen. Hier beschäftigen wir uns mit einer Reihe von methodischen Herausforderungen im Zusammenhang mit thermodynamischen und strukturellen Eigenschaften von vergrößerten Simulationsmodellen [8, 9]. Durch den coarse-graining Prozess gibt man naturgemäß mikroskopische strukturelle Details auf. Gleichzeitig verliert man per Konstruktion die Fähigkeit, alle Aspekte des höchst aufgelösten Systems gleichermaßen gut zu reproduzieren. Insbesondere ist eine der großen Herausforderungen für Coarse-Graining Methoden das gleichzeitige Reproduzieren von thermodynamischen und strukturellen Eigenschaften. Wenn man die Anzahl an Freiheitsgraden beim Coarse-Graining reduziert, werden die Modelle automatisch zunehmend stärker vom thermodynamischen Zustandspunkt abhängig, an dem sie parametrisiert wurden. Daher können sie nicht ohne weiteres auf andere Systemzustände (Tem-

peratur, Konzentration, chemische Zusammensetzung, etc.) übertragen werden. Insbesondere wenn man vergrößerte Modelle für komplexe Systeme wie die oben beschriebenen entwickelt, möchte man diese aber oft anhand weniger komplexer Referenzsysteme parametrisieren, für die man Simulationen bei höherer Auflösung (z.B. atomistisch) durchführen kann. Deshalb sind Repräsentierbarkeit- und Transferierbarkeitsfragen von besonders großer Bedeutung bei der Entwicklung von vergrößerten Modellen. Unter anderem befassen wir uns mit Fragen der Konzentrationstransferierbarkeit [10, 11], der korrekten Repräsentation von Grenzflächeneigenschaften [5] sowie Phasenseparation und Phasenübergängen [12].

Ein nicht-biologisches Modellsystem, anhand dessen wir grundsätzliche Fragen zur Transferierbarkeit bei Phasenübergang untersucht haben, ist ein azobenzolhaltiger Flüssigkristall. Hier wurden die Methoden zur Entwicklung von systematisch vergrößerten Simulationsmodellen so erweitert, dass sowohl die Struktur der flüssigkristallinen Phase als auch der flüssigkristallin-isotropen Phasenübergang korrekt wiedergege-

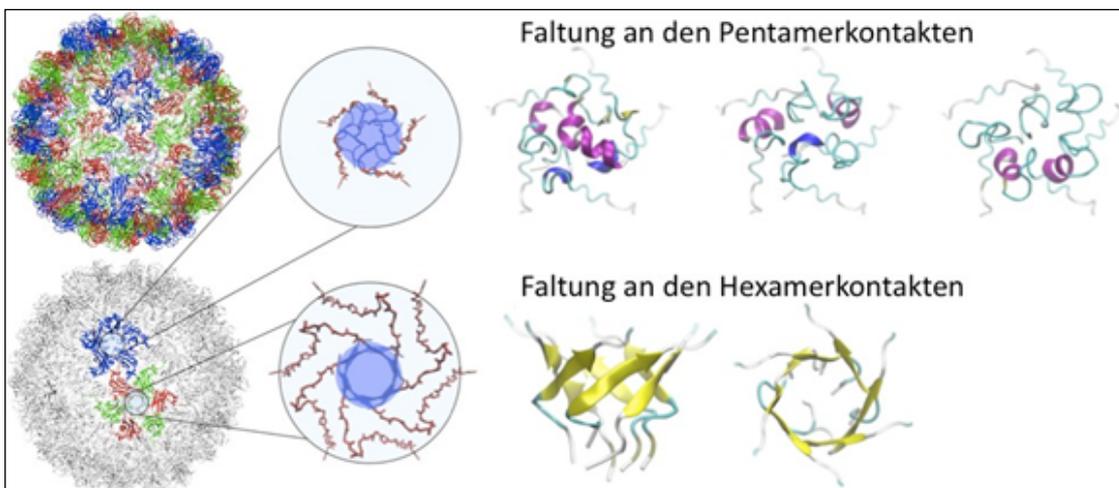


Abbildung 3: Eine Kombination von vergrößerter und atomistischer Simulationen kann zum Studium ungeordneter Bereiche in Proteinen eingesetzt werden. Hier wurde die Faltung ungeordneter Bereiche in Virusproteinen untersucht [16].

ben werden [12]. Mit diesem neu entwickelten Modell, das auch auf vergrößerten Ebene eine realistische Beschreibung der intramolekularen Flexibilität erlaubt, konnten neue mechanistische Erkenntnisse über die dynamischen Prozesse in smektischen Systemen gewonnen werden [13].

Multiskalensimulationen von Viruskapsiden

Bei einer andere Gruppe von Projekten befassen wir uns nicht so sehr mit materialwissenschaftlich, biomimetisch ausgerichteten Problemen, sondern mit der Simulation von großen Proteinsystemen, z.B. mit der Simulation der mechanischen Stabilität von Viruskapsiden [15] oder mit Faltungsprozessen an Protein/Protein Kontaktflächen [16]. In beiden Fällen werden ebenfalls vergrößerten Simulationsmodelle eingesetzt, um die notwendigen Längen und Zeitskalen zu erreichen. Auch hier spielt das Wechselspiel zwischen atomistischer und vergrößerter Auflösung eine entscheidende Rolle. Zum einen kommen bei der Parametrisierung atomistische Referenzsimulationen von einzelnen Proteinen in Lösung zum Einsatz, zum anderen können nach der Simulation auf vergrößerter Ebene durch eine geeignete inverse Mapping-Prozedur wieder atomistische Strukturen erhalten werden, um zum Beispiel mit experimentellen Daten zu vergleichen.

Referenzen

- [1] Alessandra Villa, Christine Peter, and Nico F A Van Der Vegt. Self-assembling dipeptides: conformational sampling in solvent-free coarse-grained simulation. *Phys Chem Chem Phys*, 11(12):2077–2086, 2009.
- [2] Alessandra Villa, Nico F A Van Der Vegt, and Christine Peter. Self-assembling dipeptides: including solvent degrees of freedom in a coarse-grained model. *Phys Chem Chem Phys*, 11(12):2068–2076, 2009.
- [3] Ozge Engin, Alessandra Villa, Christine Peter, and Mehmet Sayar. A Challenge for Peptide Coarse Graining: Transferability of Fragment-Based Models. *Macromol. Theory Simul.*, 20(7):451–465, June 2011.
- [4] Olga Bezkorovaynaya, Alexander Lukyanov, Kurt Kremer, and Christine Peter. Multiscale simulation of small peptides: Consistent conformational sampling in atomistic and coarse-grained models. *J Comput Chem*, 33(9):937–949, February 2012.
- [5] Mara Jochum, Denis Andrienko, Kurt Kremer, and Christine Peter. Structure-based coarse-graining in liquid slabs. *J Chem Phys*, 137(6):064102, 2012.
- [6] Chunli Li, Jiawei Shen, Christine Peter, and Nico F A Van Der Vegt. A Chemically Accurate Implicit-Solvent Coarse-Grained Model for Polystyrenesulfonate Solutions. *Macromolecules*, 45(5):2551–2561, March 2012.
- [7] Jia-Wei Shen, Chunli Li, Nico F A Van Der Vegt, and Christine Peter. Understanding the Control of Mineralization by Polyelectrolyte Additives: Simulation of Preferential Binding to Calcite Surfaces. *J Phys Chem C*, 117(13):6904–6913, April 2013.
- [8] Christine Peter and Kurt Kremer. Multiscale simulation of soft matter systems. *Faraday Discuss*, 144:9–24, 2010.
- [9] Andrzej J Rzepiela, Martti Louhivuori, Christine Peter, and Siewert J Marrink. Hybrid simulations: combining atomistic and coarse-grained force fields using virtual sites. *Phys Chem Chem Phys*, 13(22):10437–10448, 2011.
- [10] Alessandra Villa, Christine Peter, and Nico F A Van Der Vegt. Transferability of Nonbonded Interaction Potentials for Coarse-Grained Simulations: Benzene in Water. *J Chem Theory Comput*, 6(8):2434–2444, 2010.
- [11] Jia-Wei Shen, Chunli Li, Nico F A Van Der Vegt, and Christine Peter. Transferability of Coarse Grained Potentials: Implicit Solvent Models for Hydrated Ions. *J Chem Theory Comput*, 7(6):1916–1927, 2011.
- [12] Biswaroop Mukherjee, Luigi Delle Site, Kurt Kremer, and Christine Peter. Derivation of Coarse Grained Models for Multiscale Simulation of Liquid Crystalline Phase Transitions. *J Phys Chem B*, 116(29):8474–8484, July 2012.
- [13] Biswaroop Mukherjee, Christine Peter, and Kurt Kremer. Dual translocation pathways in smectic liquid crystals facilitated by molecular flexibility. *Phys Rev E*, 88(1):010502, July 2013.
- [14] Marcus Böckmann, Dominik Marx, Christine Peter, Luigi Delle Site, Kurt Kremer, and Nikos L Doltsinis. Multiscale modelling of mesoscopic phenomena triggered by quantum events: light-driven azo-materials and beyond. *Phys Chem Chem Phys*, 13(17):7604–7621, May 2011.
- [15] Christoph Globisch, Venkatramanan Krishnamani, Markus Deserno, and Christine Peter. Optimization of an Elastic Network Augmented Coarse Grained Model to Study CCMV Capsid Deformation. *Plos One*, 8(4):e60582, April 2013.
- [16] Tristan Bereau, Christoph Globisch, Markus Deserno, and Christine Peter. Coarse-Grained and Atomistic Simulations of the Salt-Stable Cowpea Chlorotic Mottle Virus (SS-CCMV) Subunit 26–49: Barrel Stability of the Hexamer and Pentamer Geometries. *J Chem Theory Comput*, 8(10):3750–3758, October 2012.

BERICHT ÜBER DAS 49. SYMPOSIUM FÜR THEORETISCHE CHEMIE

22.-26. September 2013, Erlangen

Organisation

Prof. Dr. Tim Clark

Prof. Dr. Bernd Meyer

Prof. Dr. Dirk Zahn

Prof. Dr. Andreas Görling

Lehrstuhl für Theoretische Chemie / Computer-
Chemie-Centrum

Egerlandstraße 3

D-91058 Erlangen



PD Dr. Wolfgang Hieringer

Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg

Exzellenzcluster „Engineering of Advanced Materials“

Graduate School Molecular Science

Sonderforschungsbereich 953 “Synthetic Carbon Allotropes”

Taylor & Francis Group

Allgemeines

Motto: „Bridging Scales in Theoretical Chemistry“

321 Teilnehmer/innen von Institutionen aus 20 Ländern

14 eingeladene Vorträge + 25 eingereichte Vorträge

227 Poster, 6 Posterpreise (gestiftet durch die AGTC)

Verleihung des Hans G. A. Hellmann-Preises für Theoretische Chemie an Dr. Jörg Behler, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum

Rahmengprogramm:

Stadtführungen in Nürnberg

Konferenzdinner im Heilig-Geist-Spital, Nürnberg

Sponsoren:

Wissenschaftliches Programm

Tag 1 (Sonntag)

Traditionell wird das Symposium durch den Vortrag eines experimentell arbeitenden Kollegen eröffnet. In diesem Jahr stellte **Hans-Peter Steinrück** (Physikalische Chemie, Erlangen) seine Arbeiten auf dem Gebiet der Oberflächenchemie vor und zeigte an mehreren Beispielen auf, wie die experimentellen Arbeiten von theoretischer Unterstützung profitieren kön-

nen. Konkrete Beispiele waren die Kinetik der Schwefeloxidation an gestuften Platinoberflächen mittels temperaturprogrammierter Desorption und Röntgenphotoelektronenspektroskopie, die supramolekulare Strukturbildung von Metalloporphyrinen auf Oberflächen sowie deren Reaktivität gegenüber kleinen Molekülen, und die Anwendung traditioneller „Surface Science“-Methoden auf oberflächengebundene ionische Flüssigkeitsfilme.

Im Anschluss daran legte **Karsten Reuter** (München) dar, dass die theoretische Beschreibung heterogenkatalysierter Prozesse ein komplexes Problem darstellt, das den Einsatz skalenergreifender Methoden erfordert, um alle wichtigen Aspekte einschließlich der Makro- und Mikrokinetik zu erfassen. Der erste Teil des Vortrags beschäftigte sich mit der Beschreibung der Mikrokinetik mit Hilfe einer Kombination von Elektronenstruktur (Dichtefunktional)-Rechnungen und kinetischen Monte-Carlo-Simulationen zur Lösung der Rategleichungen, wobei hier der sorgfältigen Fehlerkontrolle eine zentrale Rolle zukommt. Der zweite Teil des Vortrags behandelte die Berechnung des Wärme- und Massentransports in Reaktoren mittels Fluidynamiksimulationen. Die Leistungsfähigkeit und Grenzen der Methoden wurde jeweils an einigen Beispielen aus der Praxis illustriert.

rokinetik mit Hilfe einer Kombination von Elektronenstruktur (Dichtefunktional)-Rechnungen und kinetischen Monte-Carlo-Simulationen zur Lösung der Rategleichungen, wobei hier der sorgfältigen Fehlerkontrolle eine zentrale Rolle zukommt. Der zweite Teil des Vortrags behandelte die Berechnung des Wärme- und Massentransports in Reaktoren mittels Fluidynamiksimulationen. Die Leistungsfähigkeit und Grenzen der Methoden wurde jeweils an einigen Beispielen aus der Praxis illustriert.

Tag 2 (Montag)

Gustavo Scuseria (Houston) stellte in seinem Vortrag am Montagmorgen neuartige Ideen zur Erfassung statischer („starker“) Elektronenkorrelation in der Quantenchemie mittels ursprünglich symmetriegebrochener Wellenfunktionen vor, deren Symmetrieeigenschaften durch Projekti-



Eine fruchtbare Postersession. Vorne rechts lösen Etablierte unlösbare Probleme. Der nachdenkliche Mann im blauen Hemd siniert über Inhalt und Layout und zukünftige Lehrstuhlinhaber (mitte links) diskutieren über Stuttgart. Der Rest bleibt unscharf, aber der Abend ist noch jung.



Konferenzdinner (ohne Speisen und Getränke): Alle sind in froher Erwartung bei festlichem Ambiente.

onstechniken wiederhergestellt werden. Darauf aufbauende Methoden zur effizienten Berücksichtigung verbleibender Korrelationseffekte und zur Beschreibung angeregter Zustände wurden dargelegt. Die Anwendbarkeit für Moleküle und Festkörper wurde diskutiert.

Julien Toulouse (Paris) präsentierte in seinem anschließenden Kurzvortrag neuere Konzepte auf dem Gebiet der entfernungsseparierten TDDFT-Methoden, in denen neben dem Austausch- auch der Korrelationsterm in kurz- und langreichweitige Beiträge unterteilt wird.

Andreas Hesselmann (Erlangen) berichtete über die Eignung aktueller selbstkonsistenter „random phase approximation“ (RPA)-Methoden zur Vorhersage von Responseeigenschaften von Molekülen und von intermolekularen Wechselwirkungen.

Christian Ochsenfeld (München) sprach über neue Entwicklungen im Bereich der linear und

sublinear mit der Systemgröße skalierenden quantenchemischen Methoden, insbesondere von MP2-Verfahren. Die Effizienzsteigerungen werden dabei u.a. durch Abschätzung der auftretenden Integrale und Screeningverfahren erreicht. Die sublinear skalierende Berechnung von NMR-Verschiebungen ausgewählter Kerne war ein weiteres Thema des Vortrags. Mit Hilfe der dargelegten Methoden und Implementierungen konnten Moleküle mit derzeit bis zu knapp über zweitausend Atomen auf MP2-Niveau und gängigen Workstation-Architekturen berechnet werden.

Peter Langhoff (San Diego) diskutierte den Einsatz atomarer Paarzustände als Basis für quantenchemische Rechenverfahren.

Daniel Boese (Potsdam) analysierte die Eignung verschiedener quantenchemischer Verfahren und Näherungen für die theoretische Vorhersage der Energetik und der Strukturen von Dimeren und

Molekülkristallen, die vorwiegend über Wasserstoffbrücken gebunden sind.

Tatyana Shubina (Erlangen) untersuchte die Koordination kleiner Moleküle an Metalloporphyrine mit DFT-Methoden und CASPT2 sowie die Kombination von DFT und semiempirischen Verfahren zur Beschreibung von farbstoffsensibilisierten Solarzellen (DSSCs).

Über nichtadiabatische QM/MM- und ab initio MD-Simulationen berichtete **Dominik Marx** (Bochum) am Beispiel der photoschaltbaren Azobenzole. Neben methodischen Aspekten, die sowohl DFT-basierende Moleküldynamiksimulationen bis hin zu „coarse graining“-Techniken umfassten, wurden auch seit langem offene Fragen zum Mechanismus der Photoisomerisierung von Azobenzolen behandelt. Die Methoden wurden am Beispiel eines lichtinduzierten Phasenübergangs eines azobenzolhaltigen Flüssigkristalls demonstriert.

Stephan Baeurle (Regensburg) demonstrierte den Einsatz eines skalenübergreifenden feldtheoretischen Ansatzes in Kombination mit Moleküldynamik- und Monte Carlo-Techniken zur Modellierung von Polymermischungen für Solarzellen.

Dimitrios Pantazis (Mülheim/Ruhr) zeigte neue QM/MM-Berechnungen insbesondere zur Vorhersage der EPR-Daten verschiedener Modellsysteme des aktiven Zentrums von Photosystem II, das für die photosynthetische Wasseroxidation verantwortlich ist.

Den Beginn eines Themenblocks zur Modellierung von Solvenseffekten machte **Stefan Kast** (Dortmund) mit seinem Vortrag über die Simulation von Lösungsmitteln mit Hilfe der „Theorie der Integralgleichungen“ („integral equation theory“). Der Beitrag behandelte die statistische Mechanik von Lösungsmittelleffekten und führte methodisch zu den „embedded cluster RISM“

(„reference interaction site model“)-Verfahren und deren Kombination mit polarisierbaren Kraftfeldern hin. Neben zahlreichen erfolgreichen Anwendungsbeispielen wurden auch offene Fragen in der Lösungsmittelsimulation angesprochen.

Łukasz Walewski (Bochum) beschrieb den Einsatz von QM/MM und bosonischen Pfadintegralmethoden zur Beschreibung chemischer Reaktionen in superfluidem Helium.

Thomas Kühne (Mainz) sprach über einen neuen feldtheoretischen Ansatz für das großkanonische Potential und dessen Einsatz in der Moleküldynamik am Beispiel von flüssigem Methan in ungewöhnlichen thermodynamischen Zuständen.

Am Abend bot sich den Teilnehmern Gelegenheit, bei leichter Kost und Getränken weitere wissenschaftliche Ergebnisse anhand der Poster zu diskutieren.

Tag 3 (Dienstag)

Mit einem Vortrag zu theoretischen Aspekten der Katalyse an Oberflächen und Clustern eröffnete **Notker Rösch** (München/Singapur) den dritten Tag des Symposiums. Beginnend mit einer historischen Einführung wurden diverse aktuelle Modellsysteme zur Vorhersage der katalytischen Eigenschaften von Oberflächen und Clustersystemen vorgestellt. Wichtige Einflussgrößen wie die Clustergröße oder die gewählte Dichtefunktionalmethode wurden diskutiert. Anhand von gemischten Pd/Au Clustern wurde die Kombination von DFT mit Kraftfeldmethoden beschrieben. Weitere Anwendungsbeispiele waren Nanoinseln auf Unterlagen sowie die Adsorption von Molekülen auf Nanoteilchen.

Daniel Escudero (Mülheim/Ruhr) referierte über diverse Methoden zur Berechnung angeregter Zustände in Übergangsmetallkomplexen im Hinblick auf deren Anwendung in der Photoche-

mie und zur Beschreibung von farbstoffsensibilisierten Solarzellen.

Jan Philipp Götze (Mülheim/Ruhr) stellte verschiedene Methoden zur Berechnung von Franck-Condon-Faktoren gegenüber und präsentierte anhand von Flavin-Systemen eine Methode zur Berechnung von Spektren in internen Koordinaten.

Axel Gross (Ulm) schilderte den schwierigen Weg zur theoretischen Beschreibung der Elektrokatalyse, bei der im Vergleich zu Standardproblemen der UHV-Oberflächenchemie zusätzlich eine oberflächengebundene flüssige Phase sowie Elektrodenpotentiale berücksichtigt werden müssen. Darüber hinaus wurden auch Simulationen zu oberflächengebundenen Wirt-Gast-Netzwerken mit kombinierten DFT/Kraftfeldmethoden sowie zu ionischen Flüssigkeiten auf Oberflächen besprochen.

Ralph Tonner (Marburg) gab einen Überblick über Methoden zur Analyse chemischer Bindungen an Oberflächen und präsentierte beispielhaft Ergebnisse, die mit Hilfe einer Zerlegung der Energiebeiträge der Bindung an Oberflächen („periodic energy decomposition analysis“) erhalten wurden.

Zum Abschluss des Vortragsprogramms am dritten Tag gab **Wolf Gero Schmidt** (Paderborn) einen Einblick in die theoretische Beschreibung der Struktur und der Eigenschaften atomarer Nanodrähte. Im Mittelpunkt standen Phasenübergänge in In/Si(111)-Drähten und deren Eigenschaften auf die Leitfähigkeit der Drähte, die Ursachen der beobachteten Phasenübergänge sowie Möglichkeiten, solche Phasenübergänge gezielt zu induzieren.

Am Nachmittag bot sich den Konferenzteilnehmern die Möglichkeit, an einer Führung durch den historischen Teil von Nürnberg teilzunehmen. Der Tag fand mit einem gemeinsamen

Abendessen der Teilnehmer im Heilig-Geist-Spital im Zentrum von Nürnberg seinen Ausklang.

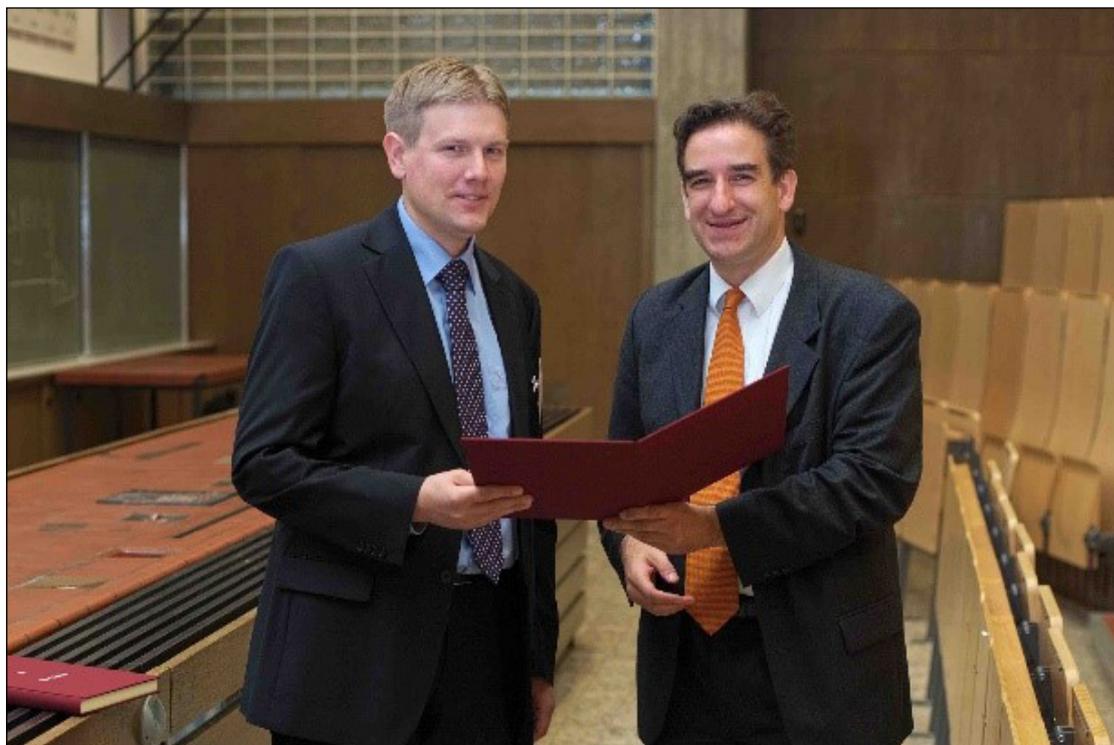
Tag 4 (Mittwoch)

Der vierte Tag begann mit der feierlichen Vorstellung des diesjährigen Empfängers des Hellmann-Preises, **Jörg Behler** (Bochum). Nach einer kurzen Einleitung durch Christian Ochsenfeld zum Leben und Werk des Namenspatrons des Preises, Hans G. A. Hellmann, und der Preisverleihung selbst bot Jörg Behler einen Überblick über seine Arbeiten zum Einsatz neuronaler Netzwerke auf verschiedenen aktuellen Gebieten der Theoretischen Chemie, die an diesem Tag in besonderem Maße durch die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie gewürdigt wurden. Einem ausführlicheren Überblick über die Person und die grundlegenden Beiträge des Preisträgers ist ein eigenes Kapitel im Anschluss an diesen Tagungsbericht gewidmet.

Anschließend wurde das Tagungsprogramm mit dem Vortrag von **Ulrike Salzner** (Ankara) fortgesetzt, die über den Einsatz von TDDFT zur Untersuchung der elektronischen Struktur und der Eigenschaften leitender organischer Polymere sprach.

Wolfgang Hieringer (Erlangen) berichtete über TDDFT-Methoden zur Berechnung von Rumpfanregungsspektren und deren Anwendung auf oberflächengebundene Übergangsmetallkomplexe.

Wim Klopper (Karlsruhe) legte in seinem Vortrag dar, dass durch explizit korrelierte Zweielektronen-Basisfunktionen die Basissatz-Konvergenz nicht nur in klassischen Wellenfunktionsmethoden, sondern auch in den aktuell vielbeachteten „random phase approximation“ (RPA) DFT-Methoden stark verbessert werden kann. Als Beispiel wurde eine Korrektur der direkten RPA-Korrelationsenergie mit Hilfe ex-



Eine Preisverleihung, zwei Premieren: Während Herr Dr. Jörg Behler (l.) das erste Mal in seinem Leben die Urkunde des Hellmann-Preises erhält, überreicht sie Prof. Dr. Christian Ochsenfeld (r.) zum ersten Mal in seiner neuen Funktion als Vorsitzender der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie.

plizit korrelierter Möller-Plesset Störungstheorie zweiter Ordnung vorgestellt.

Joachim Friedrich (Chemnitz) berichtete über ein Inkrementenschema als effiziente Näherung für explizit korrelierte coupled cluster (CCSD(T) (F12*)) Verfahren und zeigte dessen Robustheit bezüglich der auftretenden Abbruchparameter.

Daniel Kats (Stuttgart) berichtete über die „distinguishable cluster approximation“ zur Beschreibung statischer Korrelation in der Quantenchemie und demonstrierte deren Anwendung für den Bruch von Mehrfachbindungen in Molekülen.

Clemens Woywod (Tromsø) befasste sich mit der Berechnung von Rydberg-Zuständen mit wellenfunktionsbasierten Methoden.

Den Nachmittag eröffnete **Pavel Jungwirth**

(Prag), der in seinem Vortrag Anwendungen umfangreicher, klassischer Kraftfeld-Molekulardynamiksimulationen an biologischen Membransystemen vorstellte, die beispielsweise im Hinblick auf deren mögliche Bedeutung zum Verständnis biologischer Phänomene wie des programmierten Zelltods von Interesse sind. Die Ergebnisse der Berechnungen wurden mit Ergebnissen experimenteller Verfahren (zeitaufgelöste Fluoreszenzspektroskopie zum Studium der Lösungsmittelrelaxation) in Beziehung gesetzt. Anwendungsbeispiele umfassten u.a. die Oxidation der Acylketten von Phospholipiden und membrandurchdringende kationische Peptide, die bei HIV-Infektionen eine Rolle spielen.

Shirin Faraji (Heidelberg) demonstrierte die Anwendung von QM/MM Methoden zur Simulation von enzymatischen Reparaturmechanis-

men von lichtinduzierten DNA-Schäden.

Dassia Egorova (Kiel) skizzierte am Beispiel des Singulettzerfalls in Pentacen die theoretische Analyse zweidimensionaler Photonen-Echo-Spektren zur Untersuchung vibronischer Zustände.

Die theoretische Modellierung und Vorhersage der Eigenschaften spezieller Wirt-Gast-Systeme, der sogenannten „metalorganic frameworks“ (MOFs) und von „covalent organic frameworks“ (COFs), stand im Fokus des Vortrags von **Thomas Heine** (Bremen). Es wurden verschiedene Methoden zur Simulation solcher MOFs, von Kraftfeldmethoden bis hin zur DFTB-Beschreibung, gegenübergestellt. Insbesondere wurde auf die „Quantized Liquid DFT“-Methode zur Beschreibung der Wasserstoffadsorption und die Wasserstoffspeicherung in Gastssystemen wie MOFs oder COFs eingegangen.

Johannes Hachmann (Boston) präsentierte ein Forschungsprogramm zum Auffinden neuer, optimierter organischer Halbleiter für die Anwendung in der organischen Photovoltaik mittels umfangreicher DFT-Rechnungen und computergestützter Auswertung der resultierenden Datenbasis.

Im Anschluss an das Vortragsprogramm fand die Mitgliederversammlung der AGTC und am Abend die zweite Posterpräsentation statt.

Tag 5 (Donnerstag)

Christine Peter (Konstanz) berichtete zu Beginn des letzten Tages des Symposiums über Strategien zum systematischen „coarse graining“ für die effiziente Simulation insbesondere von biomimetischen Kompositsystemen. Fragen der Transferierbarkeit und der spezifischen Anforderungen an die Methode bei der Beschreibung der verschiedenen Komponenten speziell von hart/

50th Symposium on Theoretical Chemistry



14th – 18th September 2014
University of Vienna
(Austria)

50th Symposium on Theoretical Chemistry
„Quantum Chemistry and Chemical Dynamics“

<http://stc2014.univie.ac.at>




weich Kompositen wurden analysiert. Als konkretes Anwendungsbeispiel diente unter anderem ein Calcit/Polymer (PSS) System.

Birgit Strodel (Jülich/Düsseldorf) berichtete über die Entwicklung von Kraftfeldern zur atomistischen und coarse grained Simulation der Aggregation von Amyloidproteinen, die im Zusammenhang mit Erkrankungen wie beispielsweise Alzheimer eine Rolle spielen.

Petra Imhof (Berlin) präsentierte Berechnungen zur Dynamik von DNA-Strängen mit atomistischen Kraftfeldmethoden, die zum Verständnis der selektiven Bindung von Enzymen an DNA beitragen.

Die Simulation „seltener Ereignisse“ („rare events“) u. a. bei photoaktiven Proteinen mit ab initio-Moleküldynamikmethoden war zentrales Thema des Vortrags von **Bernd Ensing** (Amsterdam). Zum Auffinden von Reaktionspfaden und zur Berechnung von effektiven Aktivierungsenergien mit Molekulardynamiksimulationen wurde insbesondere die „path metadynamics“-Methode vorgestellt und erläutert. Im Speziellen wurden Fragen des Protonentransfers in „photoaktivem gelben Protein“ („photoactive yellow protein“) und des Elektronentransfers in Flavinen untersucht.

Oliver Weingart (Düsseldorf) präsentierte nichtadiabatische QM/MM Untersuchungen zum Mechanismus der Photoisomerisierung u. a. von Retinal in der Opsin-Proteinumgebung.

Dominik Kröner (Potsdam) berichtete über lasergetriebene Elektronendynamik basierend auf TD-CIS(D) Elektronenstrukturrechnungen und

deren Anwendung zur Unterscheidung von Stereoisomeren in der laserkontrollierten Massenspektroskopie.

Tillmann Klamroth (Potsdam) berichtete schließlich über die Simulation lasergesteuerter Desorption von Molekülen an Metalloberflächen mittels Dichtematrix-Methoden und Langevin-Dynamik unter Einbeziehung von Elektronen-Reibungstermen.

Das Konferenzprogramm wurde durch zwei Posterabende am Montag und Mittwoch vervollständigt. Dabei wurden auch in diesem Jahr wieder sechs von der AGTC gestiftete Posterpreise vergeben, die von den eingeladenen Sprechern in geheimer Wahl auserkoren worden waren. Über die Verleihung eines Posterpreises durften sich **Patrick Bleiziffer, Pavlo Dral, Gerald Knizia, Christine Krause, Susanne Leitherer** und **Rebecca Sure** freuen.

In seinen abschließenden Worten dankte Andreas Göring den Sponsoren für die finanzielle Unterstützung des Symposiums sowie, last but not least, Frau **Leonore Steinbauer** (Sekretariat Theoretische Chemie, Erlangen), ohne deren aufopferungsvolles Engagement und die Fähigkeit, das Hintergrundteam zu führen und allzeit den Überblick zu behalten, die Tagung nicht denkbar gewesen wäre.

Wolfgang Hieringer, Nürnberg-Erlangen

Fotos: Matthias Hennemann, Erlangen

Bildunterschriften: Bernd Engels, Würzburg

WAS ICH MIR VON DER THEORIE WÜNSCHTE...

Femtosekundenspektroskopie und Ultraschnellen Laserkontrolle

KONTAKT

Prof. Dr. Thomas Baumert
Experimentalphysik III
Institut für Physik, Universität Kassel
Heinrich-Plett-Str. 40
34132 Kassel

Web: www.uni-kassel.de/fb10/institute/physik/forschungsgruppen/femtosekundenspektroskopie/

E-Mail: baumert@physik.uni-kassel.de



*Prof. Dr. Thomas Baumert
Institut für Physik, Universität Kassel*

Die Arbeitsgruppe Experimentalphysik III des Instituts für Physik der Universität Kassel forscht unter der Leitung von Prof. Dr. Thomas Baumert auf dem Gebiet der Femtosekundenspektroskopie und Ultraschnellen Laserkontrolle.

Die ultraschnelle Kontrolle von photophysikalischen Systemen auf primären molekularen Zeitskalen mittels Laserlicht geht über den rein beobachtenden Ansatz der Spektroskopie mit bandbreitebegrenzten ultraschnellen Laserpulsen hinaus: Ziel ist es, ein photophysikalisches System von einem Anfangszustand zu einem vorbestimmten Endzustand zu leiten, indem die Laserfelder der Systemdynamik angepasst werden und / oder aktiv die Potentiallandschaft verändern.

Wir führen Experimente zu den Grundlagen der Wechselwirkung in Phase, Amplitude und Polarisation geformter Femtosekundenpulse mit unterschiedlichsten Systemen durch: die Spann-

weite reicht von freien Elektronen, Atomen und Molekülen in der Gasphase über Farbstoffmoleküle und kolloidale Quantenpunkte in Lösung bis hin zu Anregungs- und Abtragsmechanismen in Festkörpern. Bei unseren Untersuchungen stehen physikalisch motivierte Pulsformen im Vordergrund, um durch diesen Ansatz ein besseres Verständnis für die dynamischen Wechselwirkungsmechanismen zu finden, die dann als Grundlage für neue Anwendungsfelder dienen können. Unsere Gruppe fußt in der Physik und hat starke Ausstrahlung in die Chemie und Technikwissenschaften, sowie Berührungspunkte zur Biologie und Medizin.

Folgenden Fragestellungen wird in den nächsten Jahren verstärkt nachgegangen werden: In der Molekülphysik interessieren wir uns zur Zeit für die gekoppelte Elektronen-Kernbewegung insbesondere in starken Feldern. Als Detektionskanal verwenden wir winkel- und energieaufgelöste Photoelektronenspektroskopie sowie

Massenspektroskopie. Fragestellung ist, ob mit den Methoden der kohärenten Kontrolle eine molekulare Identifizierung durchgeführt werden kann oder von der anderen Seite betrachtet, ob mit diesen Methoden eine andere Art von Spektroskopie betrieben werden kann, die jenseits der Anregungs- Abtastspektroskopie liegt. Hier ist die Theorie gefordert. Die Beschreibung der Experimente erfordert eine realistische Modellierung der gekoppelten Elektronen- und Kernbewegung im Molekül, d.h. eine Beschreibung jenseits der Born-Oppenheimer Näherung. Weiterhin muss die Wechselwirkung mit den externen Feldern berücksichtigt werden. Da diese i.A. von hoher Intensität sind, reicht eine Behandlung der Feld-Materie Wechselwirkung innerhalb einer Störungsordnung niedriger Ordnung nicht aus. Eine weitere Herausforderung ist die Beschreibung des Ionisationskontinuums. Bei der Berechnung der winkelaufgelösten Photoelektronenspektren aus Multiphotonenionisation versagen die herkömmlichen Methoden der Reduktion der Dimension. Von Seiten der Theorie müssten entsprechende Messsignale an räumlich zufällig orientierten Molekülen zunächst reproduziert werden, um dann für Vorhersagen weiterentwickelt zu werden.

In der Materialbearbeitung steht die Frage im Vordergrund, ob durch geschickten zeitlichen Energieeintrag auf der Femtosekundenzeitskala räumliche Strukturen beeinflusst werden können. In Dielektrika wurden im Einzelschuss Strukturgrößen eine Größenordnung unterhalb der Beugungsbegrenzung beobachtet, die sich voraussichtlich auf Grund von Propagationsef-

fekten drastisch von Strukturen mit bandbreitebegrenzten Pulsen unterscheiden. Diese Effekte sind bisher weitgehend unverstanden. Hilfe von Seiten der Theorie ist unbedingt erforderlich. Hier ist es nötig, zunächst einfache Modelle zu entwickeln. Eine erweiterte theoretische Behandlung erfordert die rigorose Lösung der Maxwell-Gleichungen unter Berücksichtigung der vielfältigen nichtlinearen Effekte.

In dem sich neu abzeichnenden Gebiet der ultraschnellen Elektronenbeugung stehen bei uns zunächst Fragen zu Phononzerfallskanälen in freistehenden Dünnschichtsystemen im Vordergrund.

Auch hier wird in den nächsten Jahren Unterstützung von Seiten der Theorie unerlässlich sein. Methodisch muss eine akkurate Beschreibung der Schichten mit Methoden der zeitabhängigen Streutheorie kombiniert werden.

Wer Genaueres wissen möchte (und sich hoffentlich zu theoretischen Arbeiten stimulieren lassen möchte), dem sei als Hintergrundinformation zu unseren Arbeiten der folgende Artikel empfohlen:

„Ultrafast laser control of electron dynamics in atoms, molecules and solids“

M. Wollenhaupt and T. Baumert

Faraday Discussions, 2011, 153, 9 - 26.

THEORETISCHE CHEMIE AM IWR HEIDELBERG

Den Lehrstuhl für Theoretische und Computerchemie am Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR) der Ruprecht-Karls Universität Heidelberg gibt es seit April 2011, seit der Berufung von Andreas Dreuw auf die Nachfolge von Prof. Jürgen Warnatz. Der vorherige Forschungsschwerpunkt von Prof. Warnatz war die Simulation von reaktiven Strömungen, Flammenkinetik und Explosionen. Die Umwidmung des Lehrstuhls fand im Zuge der Gründung des Centers for Advanced Materials in Heidelberg statt, mit dem man sich vermehrt der Forschung an funktionalen organischen Materialien im Bereich der Organischen Elektronik verschrieben hatte. Damit ist der Fachbereich Chemie der Universität Heidelberg der erste in Deutschland, der über zwei Lehrstühle für Theoretische Chemie verfügt, den Lehrstuhl von Prof. Lorenz Cederbaum am Physikalisch-Chemischen Institut und eben den neu geschaffenen Lehrstuhl am IWR von Prof. Andreas Dreuw. Obwohl der Lehrstuhl von Andreas Dreuw administrativ und räumlich am IWR angesiedelt ist, ist die Professur dem Fachbereich Chemie und dort dem Physikalisch-Chemischen Institut zugeordnet, wo auch das Lehrdeputat zu erbringen ist.

Das Interdisziplinäre Zentrum für wissenschaftliches Rechnen

Das IWR wurde vor 25 Jahren an der Universität Heidelberg gegründet und ist bis heute ein in seiner Form einzigartiges Forschungszentrum in Deutschland. Seither verfolgt das IWR seine Mission mathematische Methoden und computergestützte Rechenverfahren für die Naturwissenschaften zu entwickeln und entsprechende,



*Prof. Dr. Alexander Dreuw
IWR, Heidelberg*

effiziente Computerprogramme bereit zu stellen. Dies erfolgt am IWR jedoch nicht allein durch die dort ansässigen Mathematiker und Informatiker, sondern in einem interdisziplinären Ansatz Hand in Hand mit den Anwendern. Dies spiegelt sich in der unterschiedlichen Zuordnung der am IWR tätigen Wissenschaftler zu den Fachbereichen der Mathematik, Informatik, Physik, Chemie, Biologie, Geowissenschaften und sogar den Sozialwissenschaften wieder, und selbst die Mehrzahl der am IWR beschäftigten Doktoranden sind häufig zwei Betreuern aus unterschiedlichen Fachbereichen zugeordnet. Ein besonderer Erfolg des IWR war die erfolgreiche Einwerbung der Heidelberg Graduate School „Mathematical and Computational Methods for the Sciences“ im Rahmen der Exzellenzinitiative, die durch den interdisziplinären Geist des IWRs getragen wird.

Arbeitsgruppe Dreuw

Der Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe Dreuw liegt zum einen auf der Entwicklung quantenchemischer Methoden zur Beschreibung elektronisch angeregter Moleküle und zum anderen auf deren Anwendung auf spannende photo-

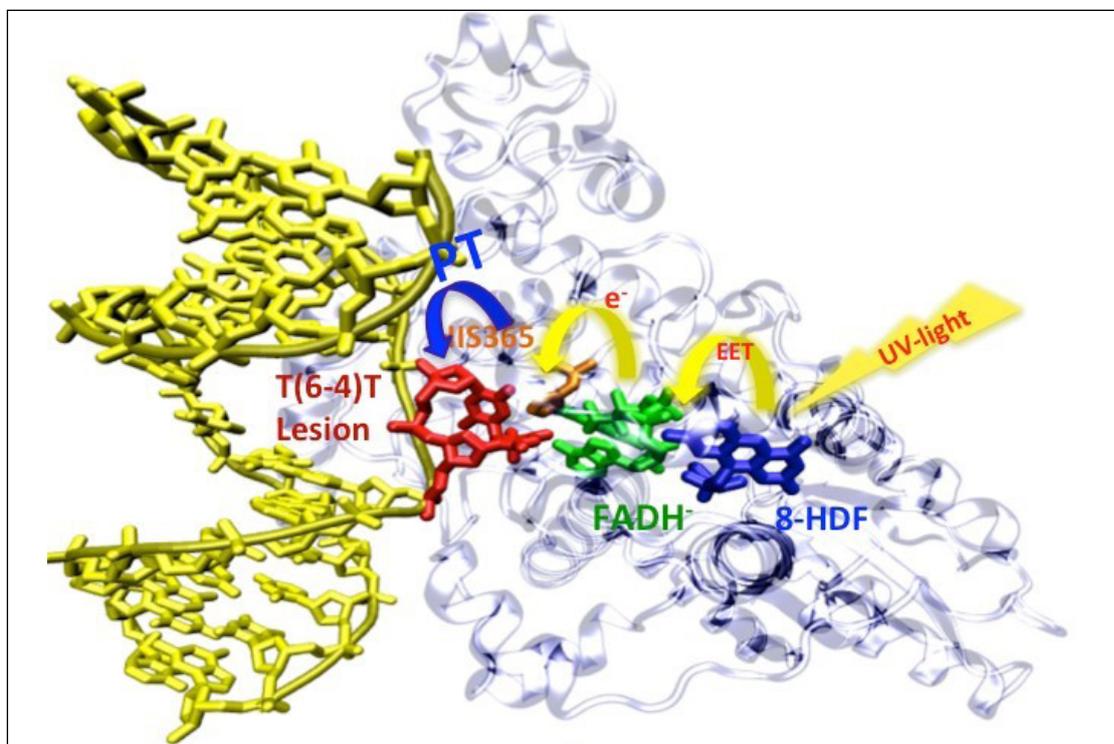


Figure 1: DNA Photoschäden werden in Photolyasen durch Absorption eines Photons durch ein Antennenpigment initiiert, welches Energietransfer sowie einen gekoppelten Elektronen- und Protonenübertrag auf den DNA Schaden ermöglicht. Mit Hilfe von Elektron und Proton wird zuletzt der DNA Photoschaden repariert.

chemische und photobiologische Fragestellungen. Im Bereich der Methodenentwicklung liegt der Schwerpunkt auf dem Algebraischen Konstruktionsverfahren (ADC) zur direkten Berechnung von Anregungsenergien (ω -ADC), Ionisierungspotentialen (IP-ADC) und Elektronenaffinitäten (EA-ADC). Diese Verfahren bieten neben einem eleganten Zugang zu den entsprechenden vertikalen Anregungs- und Ionisierungsspektren auch eine effiziente Möglichkeit Eigenschaften des jeweiligen, angeregten elektronischen bzw. ionisierten Zustands zu berechnen. Das mittelfristige Ziel im Bereich dieser Entwicklungsarbeit ist die Bereitstellung eines effizienten Computerprogramms, das eine umfassende Beschreibung von Photochemie und Ionisierungsprozessen erlaubt. Derzeit werden die Entwicklungen der Arbeitsgruppe in eine Entwicklungsversion des Quantenchemieprogramms Q-Chem implementiert,

KONTAKT

Prof. Dr. Andreas Dreuw
 Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen Institut für Physikalische Chemie
 Ruprecht-Karls Universität Heidelberg
 Im Neuenheimer Feld 368
 69120 Heidelberg

Web: www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/compchem
 E-Mail: dreuw@uni-heidelberg.de

in der nahen Zukunft wird aber ein alleinstehendes ADC- Programm bereit gestellt werden, welches zur Ausführung allein die Daten einer vorherigen Hartree-Fock Rechnung bedarf, und somit recht einfach an jedes Quantenchemiepro-

gramm angekoppelt werden kann.

Ein weiterer theoretischer Schwerpunkt in der Arbeitsgruppe dreht sich um die Zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie, deren fundamentalen Verständnis sowie der Entwicklung pragmatischer Austauschkorrelationsfunktionale zur Verbesserung der Beschreibung von Ladungstransferzuständen. In diesem Zusammenhang wird ein Korrekturpotential entwickelt, welches unabhängig vom gewählten Funktional und universell anwendbar die Beschreibung von Ladungstransferzuständen ermöglicht.

Im Rahmen der Anwendungen theoretischer Verfahren auf herausfordernde photochemische und photobiologische Fragestellung werden in der Arbeitsgruppe vielfältige Themen bearbeitet. In Zusammenarbeit mit der Nachwuchsgruppe Faraji wurde zuletzt erfolgreich der Reparaturmechanismus von DNA Photoschäden durch Photolyasen studiert und ein eleganter Reparaturmechanismus identifiziert. Hierzu wurden sowohl Rechnungen an ausgewählten molekularen Modellen in der Gasphase durchgeführt als auch moderne gekoppelte klassisch/quantenmechanische Verfahren verwendet.

Ultra-schnelle photochemische Prozesse in Photoschaltern und photolabilen Schutzgruppen spielen ebenfalls eine wichtige Rolle im Anwendungsspektrum der Arbeitsgruppe Dreuw, wobei im Vordergrund immer das grundlegende Verständnis der ablaufenden Prozesse und die Identifikation des Mechanismus der Photoprozesse stehen. Als repräsentative Beispiele seien hier zwei Projekte genannt: (1) die mechanistische Untersuchung der Freisetzung von sogenannten Käfigverbindungen, die mit der spezifischen elektronischen Anregung einer photolabilen Schutzgruppe, meist Nitrobenzol, beginnt und mit deren Abspaltung endet, und (2) die Untersuchung von intermolekularen Zerfallsprozessen in großen molekularen Systemen im Rahmen

der DFG Forschergruppe "Intermolecular and Interatomic Coulombic Decay (ICD)" (FOR 1789). Im Rahmen dieser Forschergruppe ist es zuletzt gelungen den ersten (ICD) Prozess in einem biologischen System zu identifizieren.

Mit dem Wechsel der Arbeitsgruppe Dreuw an das Interdisziplinäre Zentrum für wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg ist auch die Organische Elektronik in den Fokus des Interesses gerückt. In Zusammenarbeit mit Heidelberger synthetischen (Prof. Bunz, Prof. Hashmi, Prof. Gade) und physikalischen Chemikern (Prof. Motzkus, Prof. Tegeder) steht die Entwicklung neuer Materialien zur Verwendung in organischen elektronischen Bauteilen im Vordergrund. In enger Kooperation mit den synthetischen Gruppen werden auf dem Computer neue Moleküle mit gezielten Eigenschaften entworfen und anschließend synthetisiert und spektroskopisch charakterisiert. Hier stehen vor allem Ladungstransfer- und Energietransfereigenschaften der organischen Materialien im Vordergrund, welche eine theoretische Multiskalenbeschreibung beginnend mit hochgenauen Rechnungen auf kurzen Zeit- und Längenskalen bis hin zu einer Modellierung der Transferprozesse auf mesoskopischen Zeiten- und Längenskalen bedürfen.

Zusammenfassend kann man die theoretische Forschung in der Arbeitsgruppe Dreuw folgendermaßen beschreiben: Es werden Methoden zur zuverlässigen Beschreibung großer molekularer Systeme entwickelt, die die Behandlung photochemischer, photobiologischer und materialwissenschaftlicher Fragestellungen erlauben.

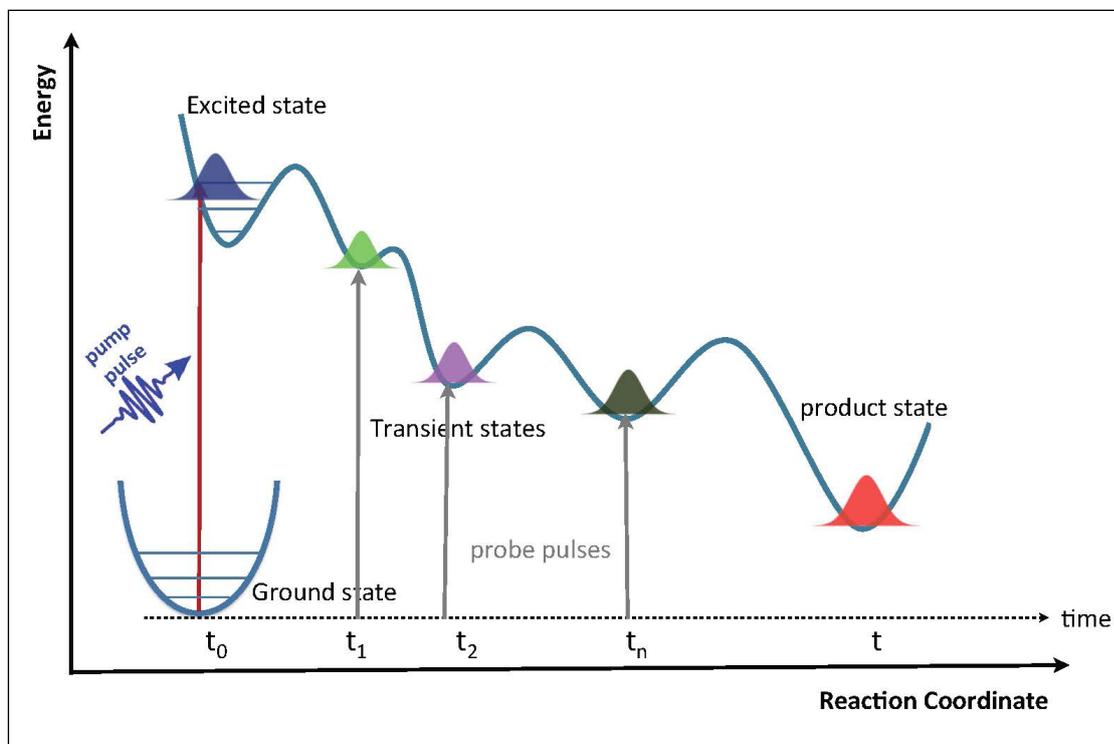


Figure 2: Schematische Darstellung der Pump-Probe Spektroskopie. Ein erster Lichtpuls initiiert einen photochemischen Prozess, der dann durch einen zweiten Impuls zu verschiedenen Verzögerungszeiten (t_1 , t_2 , ...) in Echtzeit beobachtet wird.

Nachwuchsgruppe Faraji

Die Nachwuchsgruppe von Dr. Shirin Faraji existiert seit 2012 und wird durch das Elite-Postdoktoranden Programm der Baden-Württemberg Stiftung finanziert. Es ist das erklärte Ziel von Frau Faraji im Rahmen dieser Qualifikationsstelle die Habilitation im Fach Theoretische Chemie durchzuführen.

Der thematische Fokus der Nachwuchsgruppe Faraji liegt auf Quantendynamiksimulationen mittelgroßer Moleküle mit bis zu 50 Atomen in der kondensierten Phase. Diese werden zur Interpretation von moderner zeitaufgelöster Spektroskopie benötigt, da solche Simulationen die Beobachtung von chemischen Prozessen in Echtzeit auf quantenmechanischem Niveau erlaubt. Bis heute sind diese aber nur in sehr begrenztem Umfang möglich. Um eine detaillier-



Dr. Shirin Faraji
IWR, Heidelberg

tes Verständnis der Dynamik und einen direkten Vergleich mit dem Experiment zu ermöglichen, sollen moderne zeitabhängige (nichtlineare und multidimensionale) Spektroskopien simuliert werden. Die dafür erforderliche Verzögerungszeiten (t_1 , t_2 , ...) werden in Echtzeit beobachtet. Erweiterung der methodischen Ansätze umfasst insbesondere das Konzept der effektiven Moden im Rahmen eines System-Bad-Ansatzes und die

KONTAKT

Dr. Shirin Faraji
Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen Institut für Physikalische Chemie
Ruprecht-Karls Universität Heidelberg
Im Neuenheimer Feld 368
69120 Heidelberg

Web: www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/theospec

E-Mail: shirin.faraji@uni-heidelberg.de

sehr vielversprechende ML-MCTDH (Multi Layer-Multiconfigurational time-dependent Hartree) Methode.

Neben diesen quantendynamischen Arbeiten wird in der Arbeitsgruppe Faraji auch die Funktions-

weise der (6-4)-Photolyase bei der Reparatur von DNA Photoschäden mittels kombiniert quantenmechanischen/klassischen (QM/MM) Methoden erforscht. Zusammen mit der Arbeitsgruppe Dreuw konnten die wichtigsten Reparaturmechanismen für die verschiedenen auftretenden Photoschäden identifiziert werden, welche bereits in gerade erschienen Publikationen veröffentlicht wurden. Die Arbeitsgruppe Faraji arbeitet eng mit der experimentellen Spektroskopiegruppe von Prof. Motzkus am Physikalisch-Chemischen Institut zusammen und ist dort an verschiedensten Anwendungsprojekten beteiligt, die sowohl eine umfassende quantenchemische wie auch quantendynamische Beschreibung benötigen.

MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER ARBEITSGEMEINSCHAFT THEORETISCHE CHEMIE

beim 49. Symposium
für Theoretische Chemie in Erlangen

Beginn: 24.09.2013 17:40

Ende: 24.09.2013 18:00

Sitzungsleitung: Prof. Dr. Christian Ochsenfeld
(Universität München LMU)

Tagesordnung

- 1) Tagesordnung
- 2) Protokoll MGV 2012
- 3) Wahlen zur Hellmann-Jury
- 4) Bericht des Vorstands
- 5) Kassenbericht 2012
- 6) Wahl des Kassenprüfers für 2013
- 7) STC 2014
- 8) Verschiedenes

TOP 1 Tagesordnung

Die vorgeschlagene Tagesordnung wurde ohne Einwände angenommen.

TOP 2 Protokoll MGV 2012

Das Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC anlässlich des 48. Symposiums für Theoretische Chemie in Karlsruhe wurde im Info TC 2012/11 veröffentlicht. Es sind keine Anmerkungen eingegangen. Das Protokoll wird ohne Gegenstimme genehmigt.

TOP 3 Wahlen zur Hellmann-Jury

Derzeitige Jury-Mitglieder:

P. Blaha, A. Dreuw, M. Kaupp, H.P. Lüthi, F. Neese, P. Saalfrank, R. de Vivie-Riedle.

Auf Anfrage wird bestätigt, dass Prof. Blaha österreichisches und Prof. Luethi schweizerisches Mitglied der aktuellen Hellmann-Jury ist.

Für die Hellmann-Jury steht turnusgemäß eine Neuwahl eines Teils der Mitglieder an. Die Amtszeiten von Herrn Dreuw, Frau de Vivie-Riedle und Herrn Saalfrank enden dieses Jahr. Die Amtszeiten der Herren Blaha, Kaupp, Lüthi, Neese laufen erst 2015 aus.

Es werden folgende Wahlvorschläge gemacht:

Dreuw, Hättig, Kirchner, Neugebauer, Saalfrank, de Vivie-Riedle.

In geheimer Wahl bestimmt die Mitgliederversammlung die folgenden Kollegen

A. Dreuw (Universität Heidelberg)

P. Saalfrank (Universität Potsdam)

J. Neugebauer (Universität Münster)

als Mitglieder der Hellmann-Jury. Diese nehmen die Wahl an und werden der Jury bis 2017 angehören.

TOP 4 Bericht des Vorstands

1. Der neue Vorstand

Der jetzige Vorstand besteht aus den Mitgliedern

Frenking, Grimme, Klopfer, Marian, Marx, Ochsenfeld (Vorsitzender), Paulus, Thiel und ist seit Juli 2013 im Amt.

Die Vorstandsmitglieder bedanken sich für die Wahl und beim ehemaligen Vorstand, insbesondere bei Jürgen Gauss für sein Engagement als ehemaliger Vorsitzender der AGTC.

2. Mitgliederstand

Ende 2012 hatte die AGTC 215 Mitglieder; der Mitgliederbestand ist damit unverändert.

3. Hellmann Preis

Es wird mitgeteilt, dass gem. einstimmigem Beschluss des AGTC-Vorstands die Vortragssprache für den Hellmann-Vortrag sowohl deutsch oder englisch sein kann.

Die Mitglieder der AGTC werden aufgefordert, auch für das nächste Jahr Vorschläge zu unterbreiten.

Nominierungen sind bis zum Stichtag 15.03.2014 an den AGTC Vorsitzenden zu richten. 4. Jahresrückblicke

Die Jahresrückblicke 2013 in den Nachrichten der Chemie werden von Herrn Joachim Friedrich (Chemnitz), Herrn Andreas Heßelmann (Erlangen) und Frau Carmen Herrmann (Hamburg) verfasst.

5. INFO-TC

Seit April 2013 hat die Theoretische Chemie Würzburg (Mitric, Engel und Engels) die Aufgabe übernommen, drei Ausgaben zu editieren. Die Mitglieder der AGTC werden ermutigt, Beiträge wie z.B. die Vorstellung einzelner Arbeitsgruppen oder zu sonstigen interessanten Themen einzureichen.

6. Bericht:

Die STC 2014 wird von Leticia Gonzalez (50. Symposium) 14. – 18. September 2014 ausgerichtet werden.

Die STC 2015 wird von Peter Saalfrank, die STC 2016 von Dominik Marx organisiert werden.

TOP 5 Bericht des Kassenprüfers 2012

Nach Vorstellung des Kassenberichtes für das Jahr 2012 durch Herrn Mark wird dieser von der

Kassenstand der AGTC

Konto AGTC :	2011	34610,89 €
	2012	36982,89 €
AGTC Konto am 31.12.2012:		36982,89 €
Einnahmen aus Mitgliedsbeiträgen:		2795,00 €
Posterpreise:		300,00 €
Hellmann-Fonds		
Gesamtvermögen des Hellmann-Fonds am 31.12.2012:		54747,17 €
Zinserträge:		1980,85 €
Einnahmen aus Spenden:		1200,00 €
Hellmannpreis:		1300,00 €

Mitgliederversammlung entgegengenommen und der Vorstand entlastet. Herrn Mark wird der Dank des Vorstands und der AGTC ausgesprochen.

Beide Konten AGTC und Hellmann-Fonds haben sich positiv entwickelt.

Der Mitgliedsbeitrag konnte von 5 Mitgliedern nicht eingefordert werden.

Zum ersten Mal wurden auf der STC 2012 Posterpreise zu insgesamt 300 Euro vergeben. Dies erfolgte ebenso auf der STC 2013 und soll beibehalten werden.

Das Guthaben ist angestiegen, die Ausgaben gleich geblieben (bis auf einen Buchungsfehler 2010, der nachträglich berücksichtigt wurde).

Die Spendeneinnahmen sind variabel. Die Zinserträge sind aufgrund der Wirtschaftskrise gering, aber das Geld wurde dennoch gut angelegt.

Es gab 2012 drei Zustiftungen.

TOP 6 Wahl des Kassenprüfers 2013

Der Vorsitzende schlägt vor, Herrn Mark auch für 2013 als Kassenprüfer zu benennen. Die Zustimmung erfolgt per Akklamation.

TOP 7 STC 2014

Die STC 2014 wird vom 14. bis 18. September 2014 von Leticia Gonzalez (Universität Wien) organisiert.

TOP 8 Verschiedenes

Es wird auf die WATOC 2014 in Chile hingewiesen.

Gleichzeitig berichtet der Vorsitzende von der erfreulichen Verleihung der Schrödinger - Medaille an Stefan Grimme (Universität Bonn) und der Dirac - Medaille an Philipp Furche (UC Irvine).

Erlangen, den 24. 09.2013

Prof. Dr. Christian Ochsenfeld

TAGUNGEN

Zusammengestellt von

Prof. Dr. Klaus Helfrich

Fachgebiet Theoret. Chemie-Quantenchemie
Fakultät II Mathematik und Naturwissenschaften

Technische Universität Berlin

Straße des 17. Juni 135

10623 Berlin

Sekr. C 7

Web: helfrichtub.de/helfrichhome.htm

E-Mail: Helfrich_TUB@t-online.de

24. - 28. März 2014 in Mainz

DPG Frühjahrstagung des Fachverbands Teilchenphysik

31. März - 4. April 2014 in Dresden

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

29. 5. - 31. 5. in Hamburg

Bunsentagung

2014

18. 2. - 21. 2. in Mariapfarr, A

Arbeitstagung Theoretische Chemie

tagung-theoretische-chemie.uni-graz.at/de/

10. 3. - 11. 3. 2014 in Paderborn

Chemiedozententagung

www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen/tagungen-2014/cdt-2014.html

DPG-Tagungen 2014

17. - 21.3. 2014 in Frankfurt

DPG Frühjahrstagung der Fachverbände Physik der Hadronen und Kerne, Didaktik der Physik

17. - 21.3. 2014 in Berlin

DPG-Jahrestagung und Frühjahrstagung der Sektion AMOP (u. a. Atomphysik und Molekülphysik)

1.6. - 5. 6. in Nordwijkerhout, NL

10th Conference on Chemical Structures and

10. German Conference on Chemoinformatics

20. 7. -25. 7. in Telluride, Colorado /USA

American Conference on Theoretical Chemistry

<http://events.hellotrade.com/conferences/american-conference-on-theoretical-chemistry/>

14. 9. - 18. 9. in Wien

50. Symposium für Theoretische Chemie

stc2014.univie.ac.at

5.10. - 10.10 in Santiago, Chile

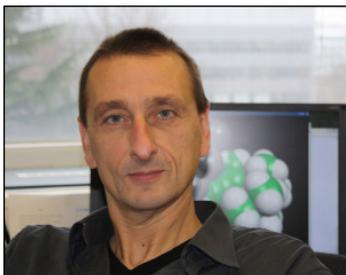
World Association of Theoretical and Computational Chemists: WATOC 2014

www.watoc2014.com

DPG-Tagungen 2015	2015 Hinweise auf weitere Tagungskalender:
02. - 06.3.2015 in Bochum	Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie, Symposien, Tagungen
DPG-Frühjahrstagung der Fachverbände Plasma-physik und Kurzzeitphysik	www.theochem.de/agtc.home.html
	Cecam Workshops
09. - 13.3.2015 in Wuppertal	www.cecarn.org/workshops.html
DPG-Frühjahrstagung des Fachverbands Teilchenphysik	Deutsche Physikalische Gesellschaft, Tagungen
	www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/kalender.html
15. - 20.3.2015 in Berlin	CONFMENU von Prof. Young S. Kim
79. DPG-Jahrestagung und Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (u.a. Chemische Physik)	www.ysfine.com
	Gesellschaft Deutscher Chemiker, Tagungen
23. - 27. 3.2015 in Heidelberg	www.gdch.de/veranstaltungen/tagungen.html
DPG-Frühjahrstagung der Fachverbände Atomphysik, Massenspektrometrie, Molekülphysik, Physik der Hadronen und Kerne, Quantenoptik und Photonik	Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen
	www.bunsen.de
	Konferenzdienst Mandl
8.6. - 13. 6. 2015 in Beijing, China	www.conference-service.com
15th International Congress of Quantum Chemistry	
www.icqc2015.org	
30. 8. - 2. 9. 2015 in Dresden	
GDCh-Wissenschaftsforum	

KLATSCH UND TRATSCH

Ehrungen



Prof. Dr. Stefan Grimme (Bonn) wurde zum Mitglied der Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS) gewählt, wurde in das Kuratorium der Angewandten Chemie berufen und erhielt die Schrödinger Medaille.



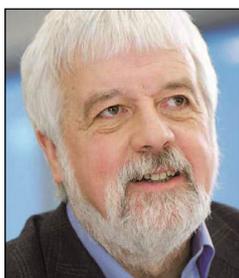
Prof. Rodney J. Bartlett (Florida) hat den Humboldt-Forschungspreis verliehen bekommen und wird von 2014 bis 2015 für längere Zeit Gast bei Herr Prof. Thiel am MPI für Kohlenforschung sein.



Prof. Dr. Frank Neese (MPI für chemische Energiekonversion, Mülheim) wurde in die Leopoldina Nationale Akademie der Wissenschaften gewählt.



Prof. Dr. Filipp Furche (Irvine) erhielt die Dirac Madaille von der World Association of Theoretical and Computational Chemists verliehen.



Prof. Dr. Walther Thiel (MPI für Kohlenforschung, Mülheim) und **Prof. Dr. Hans-Joachim Werner** (Stuttgart) erhalten vom Europäischen Forschungsrat einen ERC-Grant in der Förderlinie „Advanced Grants“.

KLATSCH UND TRATSCH

Berufung



PD Dr. Andreas Köhn wurde auf die W3 Professur im Institut für Theoretische Chemie der Universität Stuttgart (vorgezogene Nachfolge Prof. Werner) berufen.

Geburtstag

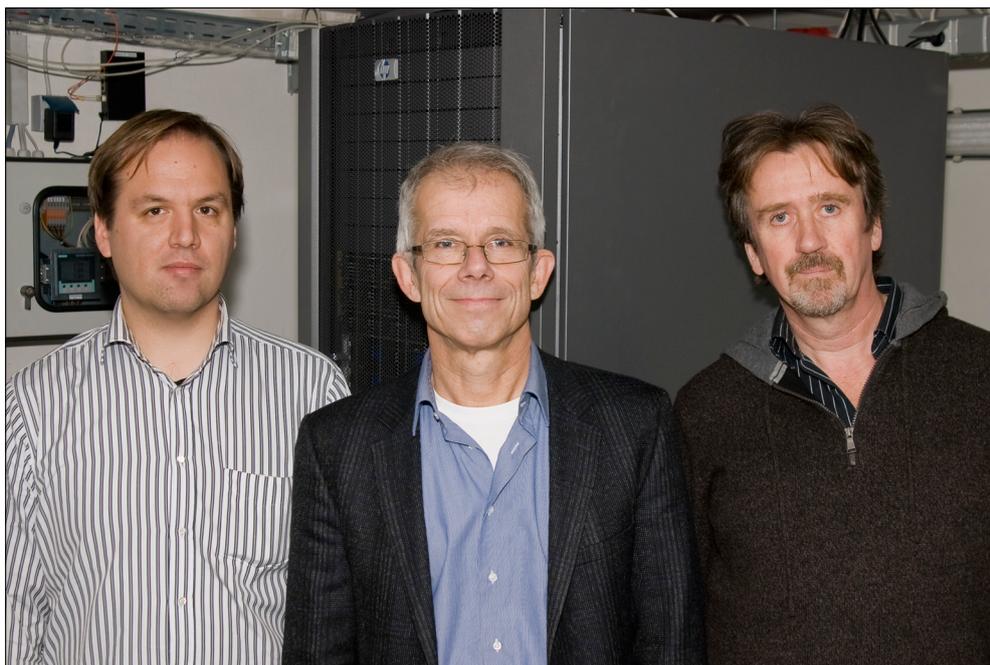


Prof. Clemens Roothaan (ehemaliger Direktor des Computation Center, University of Chicago) beging im August 2013 seinen 95. Geburtstag

Verstorben



Isaiah Shavitt (Emeritus an der Ohio State University), ein Pionier der Computational Chemistry, verstarb am 8. Dezember 2012 im 87. Lebensjahr



INFORMATION THEORETISCHE CHEMIE
Ausgabe November 2013

IMPRESSUM

Team Theorie Würzburg
Prof. Dr. Bernd Engels, Prof. Dr. Volker Engel,
Prof. Dr. Roland Mitric
Julius-Maximilians Universität Würzburg
Am Hubland, 97074 Würzburg

Die Editoren danken Matthias Wohlgemuth dafür, dass er die
ganze Arbeit gemacht hat!

November 2013

