

August 2015

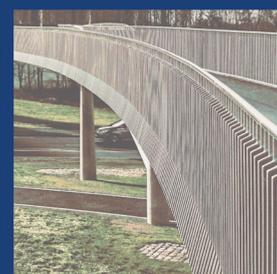
# Information THEORETISCHE CHEMIE

Leitartikel  
**20 Jahre COSMO**

Rückblick:  
**200 Jahre Theorie**

Ehrendoktorwürde  
**Reinhard Ahlrichs**

UN  
WÜ



# EDITORIAL

Liebe Freundinnen und Freunde der Theoretischen Chemie,

wenn Sie diese Zeilen lesen, haben wir schon die dritte Ausgabe des INFO THEORETISCHEN CHEMIE gestaltet. Wie Ihnen allen bestimmt aufgefallen ist, hat es die übliche Herbstausgabe nicht gegeben. Dies wurde durch mehrere missliche Umstände verursacht. So lagen noch keine Informationen zur STC in Wien vor und wir konnten uns nicht einigen, welche der 0 Einsendungen zu den Rubriken „Der AK stellt sich vor“ oder „Nachwuchswissenschaftler stellen sich vor“, wir denn jetzt publizieren sollten. Das Heft hätte also im Wesentlichen aus dem Protokoll der AG TC Sitzung in Wien bestanden, was die üblicherweise begierige und aufmerksame Leserschaft des Infoblatts gewiss massiv gesenkt hätte. Damit wäre der Ruf des TC-Info-Heftes als wichtiges, lesenswertes und identitätsstiftendes Organ der AG TC dahin gewesen. Daher haben wir die uns jetzt vorliegenden Infos in diesem Heft zusammengefasst, wobei die Anzahl der Einsendungen zu den oben genannten Rubriken dummerweise nicht angestiegen ist.

Trotzdem enthält diese Ausgabe einige interessante Dinge. Da ist z.B. das Protokoll der letzten Versammlung der AG TC, das, wie das bei Protokollen halt so üblich ist, allgemeine Begeisterungstürme entfachen wird. Hinzu kommt ein Bericht zur STC in Wien mit einigen schönen Bildern und sogar etwas Text. Berichtet wird auch von den Empfehlungen der GDCh-Studienkommission zum Bachelor-Studium Chemie an Universitäten, die einen für die Theoretische Chemie überraschend umfangreichen Themenkanon empfohlen hat. Zusätzlich beschreibt Mr. COSMO aus seiner Sicht die Entwicklung des COSMO-RS Ansatzes aus dem Bereich der Solvenssimulationen. Ein sehr interessanter Artikel, den wir empfehlen, da der COSMO-RS-Ansatz in seiner Beschreibung der verschiedenen Effekte deutlich genauer ist als der dielektrische Kontinuums-Ansatz, im Gegensatz zu

diesem aber von den theoretischen Chemikern wenig genutzt wird. Nicht unerwähnt bleiben soll Herr Prof. Helfrich, der uns wie immer sehr zuverlässig neueste Informationen über anstehende Tagungen zugeschickt hat. Und last but not least möchten wir auch auf den BILD-Zeitungsteil der Ausgabe hinweisen, der wie immer den Titel Klatsch und Tratsch trägt.

Da nun eine Ausgabe fehlt, werden wir auch die Herbst 2015 Ausgabe übernehmen, obwohl unsere „Dienstzeit“ eigentlich nach dieser Auflage beendet wäre. Dies ist für den geneigten Leser in vielerlei Hinsicht bedeutsam. Zum einen könnte die nächste Auflage die letzte Gelegenheit für Nachwuchsgruppen sein, sich vorzustellen, da unsere Nachfolger das Programm aufgrund mangelnder Resonanz mit Fug und Recht auslaufen lassen könnten. Für den Leser erfreulich wäre eventuell, dass die zukünftigen Ausgaben wieder pünktlich erscheinen. Ein gefährlicher Punkt kommt zum Schluss. Da unsere Zeit als Herausgeber sich dem Ende zuneigt, müssen die Verantwortlichen einen neuen Herausgeber suchen. Seien Sie bei der STC in Potsdam daher auf der Hut, da es Person(en) geben wird, die über Flure schleichen, um überfallartig neue „Freiwillige“ zu suchen. Sollte sich auf einem dunklen Flur eine kalte Hand auf ihre Schulter legen, begleitet von einem Lob über Ihre Fähigkeit Texte zu verfassen, haben Sie Gegengründe parat. Wenn Sie die Spannung nicht aushalten können, melden Sie sich einfach freiwillig. So viel Arbeit ist es auch wieder nicht.

Für die nächste (und damit für uns letzte Ausgabe), geloben wir aus Würzburg größere Pünktlichkeit (aber auch das wiederholt sich).

Würzburg, Juli 2015

Eure Würzburger InfoTC Redaktion

---

## INHALT

20 Jahre COSMO	4
200 Jahre Entwicklung der Theoretischen Chemie im deutschsprachigen Raum	11
Ehrenpromotion: Reinhart Ahlrichs	13
Mitgliederversammlung	14
Tagungen	17
Klatsch und Tratsch	18
Traueranzeigen	19
Buchvorstellung	20

# 20 JAHRE COSMO

## Ein persönlicher Rückblick

### KONTAKT

Prof. Dr. Andreas Klamt

COSMOlogic GmbH&CoKG

Imbacher Weg 46, 51379 Leverkusen, und  
Institut für Physikalische und Theoretische  
Chemie

Universität Regensburg

E-Mail: [klamt@cosmologic.de](mailto:klamt@cosmologic.de)



*Prof. Dr. Andreas Klamt  
Universität Regensburg*

Im Frühjahr 1991 kam Gerrit Schüürmann, damals ein Kollege bei Bayer, in mein Büro mit einem Artikel von Zerner und Katritzky [1], in dem diese das „spherical cavity Onsager model“ für die Berechnung von Spektren mit dem ZINDO Programm beschrieben. Gerrit sagte, dass er eine solche Berücksichtigung von Lösungsmittelleffekten in MOPAC für seine auf semi-empirischer Quantenchemie basierenden Modelle zur Ökotoxikologie benötige, und fragte, ob ich so ein Lösungsmittelmodell in MOPAC einbauen könne. Das war mein erster Kontakt mit Lösungsmittelmodellen. Meine erste Reaktion als theoretischer Physiker auf das Modell war sehr ablehnend. Ich fragte, was passieren würde, wenn die Dipole und Ladungen des Moleküls näher an die Kugeloberfläche kämen, und was mit Molekülen sei, die mehrere Teildipole haben, und, und, und. Ich erkannte, dass man die Energie einer in der Kugel eingeschlossenen beliebigen Ladungsverteilung ja im Grenzfall eines unendlich starken Dielektrikums, über die Spiegelladungsmethode in einem Leiter analytisch hinschreiben

kann, und demonstrierte damit die fundamentalen Unzulänglichkeiten des „spherical cavity Onsager-Modells“ für beliebige, d.h. in der industriellen Praxis realistische Moleküle. Nachdem ich jetzt gedanklich schon bei Molekülen eingebettet in einen Leiter war, sah ich sofort, dass man in diesem Grenzfall die Gleichungen für beliebig geformte Kavitäten, und somit auch für realistischere Moleküloberflächen, einfach niederschreiben konnte, womit man das große Problem, dass die molekularen Ladungszentren nahe an oder außerhalb der Kavität liegen, systematisch umgehen konnte. Der sich ergebende Ausdruck für die Solvat-Leiter-Wechselwirkung sah formal den intramolekularen Coulomb-Wechselwirkungen sehr ähnlich und sollte sich in enger Analogie in jedes Quantenchemie-Programm einbauen las-

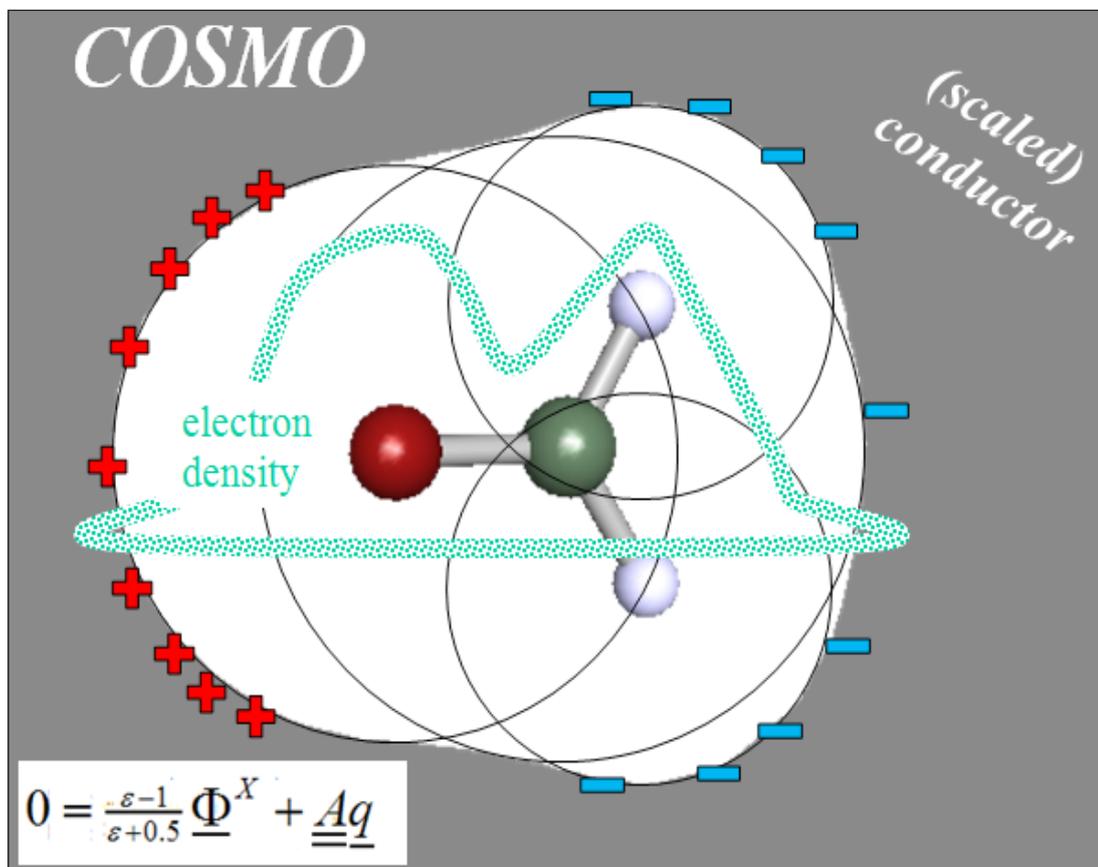


Abb. 1 Prinzip von COSMO: Die Abschirmladungen  $q$  werden mit der Randbedingungen eines skalierten Leiters berechnet.

sen. Und warum sollte man nicht, um Lösungsmittel mit endlicher Dielektrizitätskonstante darzustellen, auch auf diese Wechselwirkungsenergie, bzw. auf die Leiter-Abschirmladungen einen dielektrischen Skalierungsfaktor anwenden können, wie er im Onsager-Modell benutzt wurde. Dies wäre zwar etwas approximativer, aber sicher einen Versuch wert. So war innerhalb weniger Tage das Konzept des Conductor-like Screening Models, COSMO, entstanden.

Durch eine glückliche Fügung traf ich wenige Wochen später Mr. MOPAC, d.h. Jimmy Stewart, auf dem European Computational Chemistry Workshop in Oxford, und ich konnte ihn von COSMO begeistern. Er zeigte mir die entsprechenden Subroutinen und Stellen, die ich für die Implementierung in MOPAC brauchte,

und so hatte ich einige Monate später COSMO im Wesentlichen in MOPAC6 implementiert. Großzügiger Weise hatte mein Arbeitgeber Bayer keine Einwände gegen die Veröffentlichung der Methode, und so wurde COSMO 1993 in MOPAC7/MOPAC93 allgemein zugänglich und schließlich nach Ablehnung des Artikels in drei Journalen unter Vermittlung von Jimmy Stewart und Henry Rzepa eher etwas artfremd in Perkins Transactions publiziert [2]. Bis kurz vor der Veröffentlichung hatte ich keine Kenntnis von Tomasi's PCM Modell [3]: Zerner und Katritzky hatten diese ja nicht zitiert, da das Onsager Modell davon unabhängig war, Jimmy Stewart schien es nicht zu kennen, und auch sonst hat mich als Quereinsteiger keiner der quantenchemisch erfahrenen Kollegen darauf hingewiesen, dass mein

COSMO einiges an formalen Ähnlichkeiten mit PCM hatte. Erst ein neuer Kollege, Felix Reichel, der in seiner Promotion mit PCM gearbeitet hatte, wies mich auf die Ähnlichkeit hin. Aber es war klar, dass der COSMO Ansatz durch seine skalierte Leiter-Randbedingung zwar geringfügig approximativer war, aber zu einer wesentlich einfacheren und effizienteren Implementierung führte als PCM, das bis dato noch nach jedem SCF-Schritt die PCM-Ladungen iterativ berechnete und auch keine analytischen Gradienten hatte. Insofern hatte COSMO durch seine einfachere Struktur auf jeden Fall attraktive Vorteile. Nachdem wir später zeigen konnten, dass die COSMO Randbedingung auch noch die in PCM höchst unangenehmen Artefakte der geringen, unvermeidlich außerhalb der Kavität liegenden Elektronendichte um ca. 90% reduziert, war klar, dass COSMO dem klassischen PCM, das heute als D-PCM bezeichnet wird, überlegen ist [4]. Auch die Gruppe um Tomasi implementierte und nutzte danach die Leiterrandbedingung als C-PCM [5]. Heute wird vielfach die wesentlich kompliziertere und numerisch aufwendigere IEF-PCM Randbedingung, die mit Chipman's SS(V)PE formal identisch ist, verwendet [6,7]. Es sei aber darauf hingewiesen, dass IEF-PCM für sehr polare Lösungsmittel mit COSMO identisch wird, und dass auch bei kleinen Dielektrizitätskonstanten kein numerisch signifikanter Unterschied zwischen IEF-PCM und C-PCM zu erkennen ist, wenn man die originale COSMO Skalierungsfunktion benutzt [8]. Leider ist diese in C-PCM nicht der Default. Zusammenfassend kann man sagen, dass COSMO eine sehr fruchtbare Nachmittagsidee war, die mich ziemlich unvorbereitet zu einem führenden Entwickler von Solvatationsmodellen gemacht hat.

Nach der anfänglichen COSMO-Begeisterung kam mir allerdings schon Anfang 1994 die ernüchternde Erkenntnis, dass alle dielektrische Kontinuumsmodelle - einschließlich COSMO - schwerwiegende Unzulänglichkeiten haben:

Sie beinhalten keine Wasserstoffbrückeneffekte und können daher nicht zwischen protischen und aprotischen Lösungsmitteln mit gleicher Dielektrizitätskonstante unterscheiden. Sie können die starken Nächste-Nachbar-Dipol-Dipol-Wechselwirkungen, die zumindest bei neutralen Solvaten in polaren Lösungsmitteln, insbesondere auch in Wasser, die Wechselwirkungen dominieren, nicht beschreiben, und sie haben weder eine systematische Temperaturabhängigkeit noch ein Konzept zur Behandlung von gemischten Lösungsmitteln bzw. endlichen Konzentrationen des Solvats im Lösungsmittel. Eigentlich ist die Beschreibung des Lösungsmittels als dielektrisches Kontinuum nur in Lösungsmitteln ohne relevante lokale Multipolmomente, also in flüssigen Edelgasen und Alkanen, theoretisch zu rechtfertigen. Insofern machte es wenig Sinn, nach noch besseren und genaueren Implementierungen des dielektrischen Kontinuumsansatzes zu suchen, wenn der Ansatz selbst so fundamental unzulänglich ist.

Ich begann, mir gedanklich Modelle zu konstruieren, in denen ich die Solvat- und Solvensmoleküle zunächst auf Würfel idealisierte, die auf ihren Seiten unterschiedliche homogene Leiter-Abschirmladungsdichten trugen. Das attraktive an diesem Bild war, dass hier Solvat- und Solvensmoleküle in gleicher Weise behandelt wurden, und nicht wie in den Kontinuumsmodellen das Solvens ein externer, makroskopisch definierter Fremdkörper war. Schnell wurde mir klar, dass man die elektrostatischen Wechselwirkungen in so einem Modell recht gut als Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen der Abschirmladungsdichten darstellen kann. Ich versuchte dann, die statistische Thermodynamik für so ein Modell wechselwirkender Würfel auszuarbeiten. Hätte ich mich zu diesem Zeitpunkt mit Monte-Carlo Methoden ausgekannt, dann hätte ich sicher gesehen, wie schön und einfach sich so ein System von Würfeln mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen der Seiten über Lattice-MC Methoden berechnen lässt. Stattdessen versuchte ich es

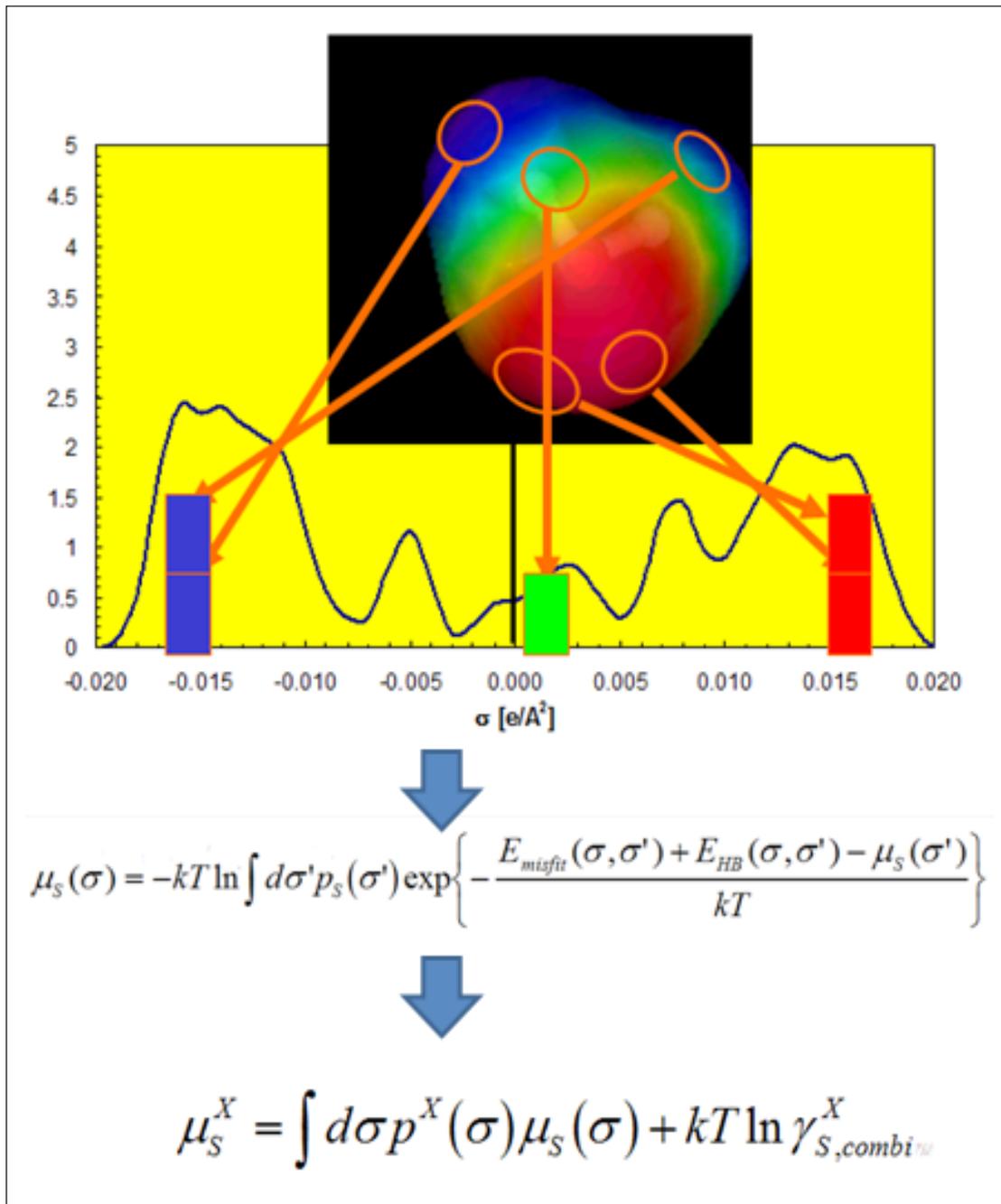


Abb. 2: COSMO-RS beginnt mit COSMO Polarisationsladungsdichten und führt über  $\sigma$ -Profile und statistischer Thermodynamik von wechselwirkenden  $\sigma$ -Flächenstücken zu den Chemischen Potentialen der Solvenz-moleküle.

analytisch, indem ich die Würfel gedanklich in ihre Einzeloberflächen zerlegte und die Kontakt-wahrscheinlichkeiten in einem solchen Ensemble von paarweise wechselwirkenden Oberflächen-stückchen zu berechnen versuchte. Nachdem ich mit dem Versuch, dies durch Störungstheorie

ausgehend von der optimalen Paarung bei  $T=0$  zu entwickeln, gescheitert war, kam mir nach drei schlafarmen Wochen eines Morgens die Idee, dass man aus der Zustandssumme aller Paarungen eine rekursive Selbstkonsistenzgleichung gewinnen kann, aus der sich die freien Energien

der Oberflächensegmente bei gegebenem Wechselwirkungsoperator exakt berechnen lassen. Die freien Energien der einzelnen Segmente werden dann zur freien Energie des Gesamtmoleküls aufsummiert. Dies war der Moment, an dem ich wusste, dass ich ein grundsätzlich neues Lösungsmodell entwickelt hatte, das ich "COSMO for Realistic Solvation", oder kurz COSMO-RS, nannte. Später konnte ich zeigen, dass mein Lösungsweg über die isolierten Segmentpaare erstaunlicherweise bei realistischen Annahmen über die Segmentabschirmladungsdichten im Rahmen der Statistik zu identischen Resultaten wie eine Lattice-MC Behandlung der Würfelmoleküle führt, solange die Temperatur oberhalb des Gefrierpunkts des Würfelsystems liegt. Damit war Mitte 1994 COSMO-RS reif, das Licht der Welt zu erblicken. Die erste Publikation erschien 1995, diesmal im ersten Anlauf in *J. Phys. Chem.*[9]

Da ich feststellen musste, dass die lokalen Dipolmomente in allen verfügbaren semi-empirischen Methoden zu ungenau waren, um quantitative Solvationsthermodynamik darauf aufzubauen, suchte ich nach einem DFT-Programm. Leider bestand zu diesem Zeitpunkt bei einem führenden deutschen Quantenchemie-Programm kein Interesse an so etwas Empirischem wie einem Solvationsmodell. Daher haben wir in den Folgejahren zunächst COSMO in das DFT-Programm DMol<sup>3</sup> eingebaut und darauf basierend COSMO-RS quantitativ parametrisiert. Wir haben im Zuge der Parameterisierung auch einen Ausdruck für die Wasserstoffbrückenenergie als bilineare Funktion der Abschirmladungsdichten von Donor und Akzeptor eingeführt. Diesen zunächst rein heuristischen Ansatz konnten wir in den letzten Jahren durch Vergleich mit direkt quantenchemisch berechneten, bzw. mit experimentell gemessenen Wasserstoffbrückenenthalpien erstaunlich gut untermauern [10,11]. 1998 haben wir dann ein Paper zum Refinement und zur Parameterisierung von COSMO-RS publiziert [12].

Diese Methode wurde dann ganz überraschend

von den verfahrenstechnischen Thermodynamikern begeistert aufgegriffen, die schon lange nach einem praktikablen Weg gesucht hatten, ihre bisherigen, rein empirischen Gruppenbeitragsmodelle durch Verknüpfung mit quantenchemischen Rechnungen prädiktiver zu machen. An dieser Stelle bin ich Wolfgang Arlt (damals TU Berlin, heute TU Erlangen) zu besonderem Dank verpflichtet, da er COSMO-RS in die verfahrenstechnische Fachwelt eingeführt hat [13]. Ganz entscheidend für diesen Durchbruch war die Tatsache, dass COSMO-RS sowohl die Temperatur-, als auch die Konzentrationsabhängigkeit der freien Energien, oder wie die Verfahrenstechniker lieber sagen der Aktivitätskoeffizienten, thermodynamisch konsistent beschreibt. Dieses Potential der Methode in der Verfahrenstechnik, zusammen mit tiefgreifenden Umstrukturierungen bei der Bayer AG, motivierte mich dann, die Firma COSMOlogic zu gründen und aus dieser heraus COSMO-RS weiterzuentwickeln und sowohl der Industrie als auch interessierten Gruppen im akademischen Umfeld als ein breit anwendbares und in seiner Art einmaliges Tool zur Verfügung zu stellen, um die Thermodynamik von Molekülen in Flüssigkeiten zu berechnen.

Die BASF stand direkt als erster Kunde vor der Tür und ist seitdem unser bester Kunde und der erfahrenste Anwender. Die Zusammenarbeit mit den hochqualifizierten Kollegen bei der BASF hat schon zu vielen gegenseitigen Befruchtungen unserer Arbeit geführt. Ein erstes konkretes Resultat war, dass wir auf Vermittlung und unter Mithilfe der BASF unser COSMO in TURBOMOLE einbauen konnten [14], das danach zu unserem bevorzugten Programm für die DFT/COSMO Rechnungen als Input für COSMO-RS wurde. In den Folgejahren hat sich COSMO-RS als Standardmethode in der verfahrenstechnischen Thermodynamik etabliert und wird heute in sehr vielen Universitäten und großen Chemiefirmen genutzt, um anderweitig schwer zugängliche Aktivitätskoeffizienten komplexerer Moleküle zu berechnen

oder ein effizientes Screening nach alternativen Lösungsmitteln, Additiven oder Trennhilfsstoffen durchzuführen [15]. Die etwas überraschende Anwendbarkeit von COSMO-RS, das eigentlich für neutrale Lösungsmittel entwickelt worden war, auf ionische Flüssigkeiten führte zu einem regelrechten Boom von COSMO-RS-Anwendungen zur Auswahl bzw. zum Screening geeigneter ILs [16].

Seither sind als weitere wichtige Anwender viele große Firmen aus dem Bereich Reinigungsmittel, Körperpflege, Kosmetik, und insbesondere auch der Duftstoffindustrie hinzugekommen, die sich für die Verteilung der verschiedensten Inhaltsstoffe ihrer häufig hochkomplexen flüssigen Produkte sowohl innerhalb des Produkts, als auch bei der Anwendung interessieren. Desweiteren sind die Wirkstoffentwicklungs- und Formulierungsabteilungen vieler großer Pharma- und Pflanzenschutzfirmen zu wichtigen Kunden geworden. Wenn auch wirtschaftlich nur von untergeordneter Bedeutung möchte ich dennoch hier auch die vielen Anwendungen im Bereich der Berechnung des Umweltverhaltens von Chemikalien erwähnen, die mir noch immer sehr am Herzen liegen, da nicht nur Gerrit Schüürmann sondern auch ich in der Zeit der Entstehung von COSMO und COSMO-RS wesentlich auf diesem Gebiet gearbeitet haben und damals sowohl die Motivation, als auch die Finanzierung für die Entwicklung dieser Methoden zum großen Teil aus diesem Bereich kamen.

Inhaltlich konnten wir COSMO-RS in den letzten 15 Jahren in vielerlei Hinsicht ausbauen. Eine wichtige Richtung ist dabei die Erweiterung auf inhomogene Systeme wie Flüssig-Flüssig- und Flüssig-Gas-Grenzflächen bis hin zu mizellaren Systemen und Biomembranen [17,18]. Eine andere, sehr spannende und vielversprechende Erweiterung stellen unsere COSMOsim3D und COSMOsar3D Methoden dar [19,20], die auf einer Idee von Michael Thormann (Origenis) basieren und mit denen uns der Nachweis gelungen ist, dass sich

die COSMO-Oberflächenladungsdichten auch in hervorragender Weise zur Quantifizierung von Ligand-Rezeptor-Wechselwirkungen eignen.

Etwas enttäuschend ist die Resonanz der theoretischen Chemie auf die COSMO-RS Methode. Noch immer kennen viele theoretische Chemiker bestenfalls die konzeptionell wesentlich unterlegenen dielektrischen Solvatationsmodelle wie PCM, COSMO oder SMx. Lediglich Stefan Grimme hat seit kurzem die Bedeutung von COSMO-RS für die quantitative Beschreibung von Komplexbildungskonstanten in der Flüssigphase erkannt [22]. Außerdem ist Frank Neese zu nennen, der zusammen mit uns den "Direct COSMO-RS" in ORCA implementiert und gezeigt hat, dass dieser Ansatz die Notwendigkeit für explizite Lösungsmittelmoleküle in der Berechnung von Spektren und anderen Response-Properties überflüssig machen kann [23]. Gute Ergebnisse mit Direct-COSMO-RS wurden kürzlich auch von Martin Kaupp und Mitarbeitern publiziert [24]. Direct-COSMO-RS ist heute in ORCA und TURBOMOLE implementiert und wartet auf breitere Nutzung durch die Theoretiker-Gemeinde. Für die bei COSMOlogic im Vordergrund stehenden industriellen Anwendungen ist es allerdings von untergeordneter Bedeutung.

Als große Herausforderungen für die weitere Entwicklung von COSMO-RS bleiben konsistente Erweiterungen auf kompressible Flüssigkeiten, also nahe- und überkritische Flüssigkeiten, einerseits, und auf Elektrolytsysteme andererseits. In diesen Bereichen sind uns und unseren Kooperationspartnern bisher nur Teillösungen gelungen.

Mit diesem Ausblick möchte ich meinen zugegebener Weise etwas lang geratenen Rückblick auf 20 Jahre COSMO-RS beenden. Ich freue mich, dass es mir mit COSMO-RS gelungen ist, einerseits vielen Anwendern in Industrie und öffentlicher Forschung ein robustes Werkzeug zur Berechnung von Molekülen in flüssigen Phasen zur Verfügung zu stellen, und andererseits einigen theoretischen Chemikern und Programmierern

einen hoffentlich interessanten und abwechslungsreichen Arbeitsplatz zu bieten. Mein Dank gilt allen Kooperationspartnern, Kunden und Mitarbeitern, die dazu beigetragen haben, dass dies möglich wurde. Ich würde mich freuen, wenn sich noch mehr der Fachkollegen aus der theoretischen Chemie nach 20 Jahren einmal ernsthaft das COSMO-RS-Konzept ansehen würden.

Mitte März haben wir aus Anlass des 20. Geburtstags von COSMO-RS das 4. COSMO-RS Symposium, in Bonn veranstaltet. Mit über 100 externen Teilnehmern aus allen Teilen der Welt war dies wieder ein reger Austausch von Erfahrungen und Ideen zu den breitgefächerten Anwendungsmöglichkeiten von COSMO-RS.

#### References:

- [1] Karelson M.M., Tamm T., Katritzky A.R., Cato S. J., Zerner M.C., *Tetrahedron*, 1989, 2:295
- [2] Klamt A., Schüürmann G., *J. Chem. Soc. Perkin Transactions 2*, 1993, 799
- [3] Tomasi J., Bonaccorsi R., Cammi R., del Valle F.J.O., *Theochem*, 234: 401
- [4] Klamt A., Jonas V., *J.Chem. Phys.* 1996, 105:9972
- [5] Barone V., Cossi M. *J. Phys. Chem. A* 1998, 102:1995
- [6] Cancès E, Mennucci B, Tomasi J., *J. Chem. Phys.* 1997, 107:3032
- [7] Chipman D., *J. Chem. Phys.* 2000, 112:5558
- [8] Klamt A., Moya C., Palomar P., *J. Chem. Theo. Comp.* 2015, submitted
- [9] Klamt A., *J. Phys. Chem.* 1995, 99:2224
- [10] Klamt A., Reinisch J., Eckert F., Hellweg A., Diedenhofen M., *PCCP*, 2012, 14:955
- [11] Klamt A., Reinisch J., Eckert F., Graton J., Le Questel, J.Y., *PCCP*, 2013, 15:7147
- [12] Klamt A, Jonas V, Bürger T, Lohrenz J., *J. Phys. Chem.* 1998, 102:5074
- [13] Clausen I, Arlt W., *Chem.-Ing.-Tech.* 2000, 72:727
- [14] Schäfer A., Klamt A., Sattel D., Lohrenz J. C., Eckert F., *PCCP*, 2000, 2:2187
- [15] Klamt A., Eckert F., Arlt W., *Ann. Review Chem. Biomol. Engineering*, 2010, 1:101
- [16] Diedenhofen M, Eckert F, Klamt A., *J. Chem. Eng. Data* 2002, 48:475
- [17] Bittermann K., Spycher S., Endo S., Pohler L., Huniar U., Goss K.U., Klamt, A. *J. Phys. Chem. B.* 2014, just online
- [18] Andersson M.P., Bennetzen M.V., Klamt A., Stipp S.L. *J. Chem. Theo. Comp.* 2014, just online
- [19] Klamt A., Thormann M., Wichmann K., *J. Chem. Inf. Model.* 2012, 52:2149
- [20] Klamt A., Thormann M., Wichmann K., Tosco P., *J. Chem. Inf. Model.* 2012, 52:2157
- [21] Ehrlich S., Bettinger H.F., Grimme S., *Angeordnete Chemie* 2013, 125:11092
- [22] Sinnecker S, Rajendran A, Klamt A, Diedenhofen M, Neese F, *J. Phys. Chem. A.* 2006, 110:2235
- [23] Theilacker K., Buhrke D., Kaupp M., *J. Chem. Theo. Comp.* 2014, just online

# 200 JAHRE ENTWICKLUNG DER THEORETISCHEN CHEMIE IM DEUTSCHSPRACHIGEN RAUM

Die Basis für das Buch unter obigem Titel war das Genealogieprojekt Theoretische Chemie, das von mir 2009 in einer Online-Datenbank veröffentlicht wurde, um die Sichtbarkeit der Theoretischen Chemie international zu erhöhen. Ich habe 2010 beim von Stefan Grimme organisierten 46. Symposium für Theoretische Chemie in Münster darüber berichtet und im von Peter Saalfrank herausgegebenen Info Theoretische Chemie vom April 2013 den neuesten Stand beschrieben. Das Genealogieprojekt erfasst inzwischen knapp 2500 Personen und wird weltweit genutzt. Nach Umstellung auf einen externen Server ist es unter <http://www.genealogy-theochem.de> erreichbar. Dieser Link steht auch auf der Homepage der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie unter „Verschiedenes“ zur Verfügung.

Nachdem mein Kollege Manfred Heinemann von der Online-Datenbank des Genealogieprojekts erfahren hatte, lud er mich ein, in seiner Buchreihe „Bildung und Wissenschaft“ beim Akademie Verlag ein Buch über die Entwicklung der Theoretischen Chemie in Deutschland zu schreiben. Ich erweiterte den Bereich auf den gesamten deutschsprachigen Raum, also den Bereich des Symposiums für Theoretische Chemie. Um eine Breitenwirkung zu erzielen, habe ich Wert darauf gelegt, dass das Buch auch für alle Chemiker und andere Interessierte lesbar sein soll. Nachdem das Manuskript 2013 fertig war und beim Akademie Verlag eingereicht wurde, geriet der Verlag in Schwierigkeiten. Ich entschloss mich deshalb Ende 2013, einen anderen Verlag anzusprechen,



*Prof. Dr. Karl Jug  
Universität Hannover*

so dass das Buch nun Ende Oktober 2014 beim Springer Verlag erscheinen wird. Ein Flyer war bereits allen Teilnehmern des 50. Symposiums für Theoretische Chemie im September in Wien zugänglich gemacht worden.

Ursprünglich sollte das Buch den Zeitraum von 1800 bis 2000 umfassen. Nach Gesprächen mit Kollegen und dem Verlag wurde der Zeitraum dann bis in die heutige Zeit erweitert. Das Buch ist personenorientiert. Im Personenverzeichnis sind mehr als 550 Personen aufgeführt. Dabei handelt es sich überwiegend um Professoren und Dozenten der Theoretischen Chemie und verwandter Fachgebiete aus dem deutschsprachigen Raum. Hinzu kommen Chemiker und Physiker des 19. Jahrhunderts und der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts, die im Zusammenhang mit der Entwicklung der Theoretischen Chemie eine Rolle gespielt haben. Der größte Teil wurde den Kollegen gewidmet, die etwa zwischen 1950 und

1985 Dozenten und Professoren wurden. Weitere konnten nur mit einem kurzen Lebenslauf bedacht werden. Diese Lebensläufe sind Querschnitte, die anhand von Publikationen und wissenschaftlichen Kooperationen den Trend der wissenschaftlichen Arbeiten auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie im Laufe der Jahrzehnte widerspiegeln sollen. Aus verständlichen Gründen konnte hier keine Vollständigkeit, sondern nur eine Auswahl angestrebt werden. Immerhin ergaben sich auf diese Weise fast 1500 Literaturzitate. Dabei habe ich mich überwiegend daran orientiert, ob eine Publikation häufig zitiert wurde. Ich bitte um Nachsicht, wenn dies nicht immer mit den subjektiven Bewertungen einzelner Personen übereinstimmt. Ich bedaure es auch außerordentlich, dass manche Kollegen nicht mit einem Lebenslauf, sondern nur in einer Professoren- und Dozententabelle aufgeführt werden konnten. Eine ausführliche Darstellung aller Personen hätte den Abschluss des Manuskripts in eine unbestimmte Zukunft verschoben. Trotz aller guten Vorsätze von meiner Seite wird es vorkommen, dass Personen fehlen, sich Fehler eingeschlichen haben oder ergänzende Aspekte eingebracht werden können. In solchen Fällen bitte ich um Zuschrift per Email an [jugthc@mbox.theochem.uni-hannover.de](mailto:jugthc@mbox.theochem.uni-hannover.de).

# EHRENPROMOTION

## Reinhart Ahlrichs



Mit Reinhart Ahlrichs (KIT Karlsruhe) ehrt die HU einen Quantenchemiker von Weltrang und engagierten Hochschullehrer, der universitäre Strukturen durch die Förderung des Nachwuchses und die Erweiterung der Forschungsmöglichkeiten nachhaltig geprägt hat. Im 25. Jahr der deutschen Einheit wird damit auch sein Engagement für die Neugestaltung der Wissenschaftslandschaft im Osten „an der Basis“ gewürdigt.

Von all dem hat die Humboldt-Universität in besonderer Weise profitiert. Für die zwölfjährige erfolgreiche Tätigkeit des Sonderforschungsbereichs 546 (der zweite an der Humboldt-Universität überhaupt), die Forschung im Exzellenzcluster UNICAT, und den neuen Sonderforschungsbereichs 1109 waren und sind die von Ahlrichs entwickelten Methoden wie das Programmpaket TURBOMOLE zur Beschreibung von Nanostrukturen (grosse Moleküle und Cluster) essentiell.

Reinhart Ahlrichs (geb. 1940) ist seit 1975 Professor für Theoretische Chemie an der Universität Karlsruhe und gehört zu den Gründungsmitgliedern des Instituts für Nanotechnologie. Er ist Mitglied der Heidelberger und der Göttinger Akademie der Wissenschaften sowie der International Academy of Quantum Molecular Science.

Die Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Humboldt-Universität zu Berlin lädt ein zur

### Akademischen Feier

anlässlich der Verleihung der akademischen Würde

**doctor rerum naturalium  
honoris causa**

an

**Prof. Dr. Reinhart Ahlrichs, Karlsruhe**

am

**Donnerstag, 28. Mai 2015, 16.30 Uhr**  
Hörsaal 0'06, Lehrraumgebäude,  
Newtonstraße 14, 12489 Berlin  
(Campus Adlershof)

### PROGRAMM

#### Begrüßung

Prof. Dr. Klaus Rademann (Prodekan)  
Prof. Dr. Jan-Hendrik Olbertz (Präsident)

#### Musik

Dr. h.c. Wolf Biermann

#### Laudatio

Prof. Dr. Joachim Sauer

#### Festvortrag

**„Als die Moleküle berechenbar wurden“**

Prof. Dr. Reinhart Ahlrichs

*Empfang im Anschluss vor dem Hörsaal*

# MITGLIEDERVERSAMMLUNG

Beginn: 17.09.2014 18:20

Ende: 17.09.2013 19:00

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

Die Mitglieder der AG TC werden aufgefordert auch für das nächste Jahr Vorschläge für den Hellmann-Preis zu unterbreiten. Vorschläge sind bis zum 15.03.2015 an den AGTC-Vorsitzenden (Christian Ochsenfeld) einzureichen.

## Tagesordnung

- 1) Genehmigung der Tagesordnung
- 2) Protokoll der Mitgliederversammlung 2013
- 3) Bericht des Vorstands
- 4) DFG – Frau Dr. Kowol-Santen
- 5) Kassenprüfung 2013
- 6) Wahl des Kassenprüfers für 2014
- 7) Wahl des Vorstands 2015
- 8) STC 2015
- 9) Verschiedenes

## 3. Jahresrückblicke

Die Jahresrückblicke für 2014 in den Nachrichten der Chemie werden von Herrn Wolfgang Hieringer (Erlangen), Herrn Thomas Kühne (Paderborn) und Herrn Marek Sierka (Jena) verfasst.

## 4. INFO-TC

Seit April 2013 hat die Gruppe von Herrn Bernd Engels (Würzburg) 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.

## TOP 1)

Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Einwände angenommen.

## 5. Bericht:

Die STC 2015 wird von Peter Saalfrank (Potsdam) ausgerichtet.

Die STC 2016 wird von Dominik Marx (Bochum) organisiert und die

## TOP 2)

Das Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC anlässlich des 49. Symposiums für Theoretische Chemie in Erlangen wurde im Info TC 2013/11 veröffentlicht. Es sind keine Anmerkungen eingegangen. Das Protokoll wird ohne Gegenstimme genehmigt.

STC 2017 wird eventuell in der Schweiz stattfinden.

Es erfolgt der Hinweis auf die WATOC 2017, die in München im Gasteig vom 27.08.-01.09.2017 stattfinden wird mit der Bitte, diesen Termin verbindlich zu notieren und andere Konferenzen um ihn herum zu planen.

## TOP 3)

### 1. Mitgliederstand

Ende 2013 hatte die AGTC 215 Mitglieder; die Zahl der Mitglieder ist um ein Mitglied auf 216 angestiegen.

### 6. Wahl der DFG Fachvertreter

Bisherige Vertreter: Stefan Grimme (Theorie OC), Jörg Neugebauer, Gotthard Seifert (Theorie Festkörper), Wim Klopper, Dominik Marx (Allgem. TC)

### 2. Hellmann-Preis

Es wird berichtet, dass der Vorstand die bisherigen Fachvertreter erneut vorgeschlagen hat. Da Wim Klopper bereits das Maximum von zwei Perioden DFG-Fachvertreter war, wurden als Nachfolger Christel Marian und Frank Neese vorgeschlagen.

**TOP 4)**

Frau Dr. Kowol-Santen berichtet von der DFG: Die neue Wahlordnung für Fachvertreter wird diskutiert und damit verbundene Schwierigkeiten angesprochen.

Die Bewilligungsraten der DFG werden positiv diskutiert, allerdings bestehen gewisse Sorgen aufgrund sinkender Antragszahlen aus dem Gebiet der Theoretischen Chemie im Normalverfahren.

Auf die Frage, warum es keine Antwortmöglichkeit auf Fachgutachten gebe, wird die damit einhergehende Verlangsamung der Antragsverfahren erläutert.

**TOP 5)**

Nach Vorstellung des Kassenberichtes für das Jahr 2013 durch Herrn Mark wird dieser von der Mitgliederversammlung entgegengenommen und der Vorstand entlastet. Herrn Mark wird der Dank des Vorstands und der AGTC ausgesprochen.

**TOP 6)**

Wahl des Kassenprüfers 2014:

Der Vorsitzende schlägt vor, Herrn Dr. Mark auch für 2014 als Kassenprüfer zu benennen. Die Zustimmung erfolgt einstimmig per Akklamation.

**TOP 7)**

Der jetzige Vorstand besteht aus den Mitgliedern Gernot Frenking (Vertreter der GDCh), Stefan Grimme, Wim Klopper, Christel Marian, Dominik Marx (Vertreter der DFG), Christian

Ochsenfeld (Vorsitzender), Beate Paulus und Walter Thiel (Vertreter der DBG).

Für die anstehende Neuwahl des Vorstandes 2015 werden zusätzlich zu den derzeitigen Mitgliedern: Andreas Görling, Leticia González, Barbara Kirchner, Andreas Köhn, Markus Reiher als Kandidaten vorgeschlagen.

Die Wahlunterlagen sollen im Dezember 2014 verschickt werden.

**TOP 8)**

Die STC 2015 wird von Peter Saalfrank in Potsdam auf dem Campus Griebnitzsee (51. Symposium) vom 20. –24. September 2015 ausgerichtet werden. Das Motto soll sein „Chemistry in Motion“.

**TOP 9)**

---

Wien, den 17.09.2014

Prof. Dr. Christian Ochsenfeld

**Kassenbericht****1. Kassenstand der AGTC**

Vortrag aus 2012	36982.89	Euro
Mitgliedsbeiträge AGTC	2808.00	Euro
Porto-Gebühren	-58.00	Euro
Abschreibung auf Forderungen	-26.00	Euro
Posterpreise STC2013 Erlangen	-300.00	Euro
Guthaben per 31.12.2013	39406.89	Euro

Der Mitgliedsbeitrag konnte von zwei Mitgliedern nicht eingefordert werden. Das Konto der AG TC entwickelt sich stetig.

**2. Hellmann-Preis**

Der Hellmann-Fonds hat sich positiv entwickelt.

2013 ist das erste Jahr ohne Spenden oder Zustiftungen.

Von 2009 bis 2013 erfolgte ein Zinsrückgang von 6% auf 3%.

Das Stiftungsvermögen beträgt aktuell 52.000,-- €, die Dividenden betragen 1660,-- €.

**3. Entwicklung**

Jahr	2012	2013
Zustiftungen	1200.00	0.00
Zinserträge	1980.85	1662.52
Hellmann-Preis	-1300.00	-1000.00
Freie Rücklagen	1186.95	2006.46
Stiftungsmittel	1576.77	1685.17
Stiftungsvermögen	51983.45	51983.45
Gesamtvermögen	54747.17	55675.08

**Vorstand der AGTC 2015-2017**

C. Ochsenfeld (Vorsitzender)	L. Gonzalez (Stellvertreterin)
S. Grimme	W. Klopfer
C. Marian	D. Marx (DPG),
W. Thiel (DBG)	G. Frenking (GdCH)

# 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

[www.helfrichtub.de/helfrichhome.htm](http://www.helfrichtub.de/helfrichhome.htm)

[Helfrich\\_TUB@t-online.de](mailto:Helfrich_TUB@t-online.de)

## 2015

30.8. – 2. 9.2015 in Dresden

GDCh-Wissenschaftsforum CHEMIE 2015

<http://www.wifo2015.de>

31.8. – 4.9. 2015 in Debrecen, Ungarn

16th International Conference on Density Functional Theory and its Applications

<http://dft2015.unideb.hu/home>

14. 9. – 18. 9. 2015 in Catania, Sizilien, Italien

1st European Conference on Physical, Theoretical and Computational Chemistry

<http://www.1stphyschemconference.unict.it/>

20. 9. – 24. 9. 2015 in Potsdam

51. Syposium über Theoretische Chemie, Campus Griebnitzsee

<http://tcb16.chem.uni-potsdam.de/stc2015/>

8. 11 – 10. 11. 2015 in Fulda

11. GCC - German Conference on Chemoinformatics

<http://www.wifo2015.de/>

## 2016

29.2. - 04.3.2016 DPG-Frühjahrstagungen

Hannover: Sektion Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (SAMOP)

Hamburg: Gravitation und Relativitätstheorie, Strahlen- und Medizinphysik, Teilchenphysik, Theoretische und Mathematische Grundlagen der Physik, Arbeitsgruppe Philosophie der Physik

6.3. - 11.3.2016 in Regensburg

Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung: Sektion Kondensierte Materie (SKM)

14.3. - 18.3.2016 in Darmstadt

DPG-Frühjahrstagung: Physik der Hadronen und Kerne, Arbeitskreis Beschleunigerphysik

5.5. - 7.5.2016 in Rostock

Bunsentagung 2016

Das STC 2016 wird von Dominik Marx (Bochum) organisiert werden

# KLATSCH UND TRATSCH

## Preise & Auszeichnungen



Foto: Mirko Krenzel für VolkswagenStiftung.

**Dr. Annika Bande** hat im April 2014 das hoch-dotierte Freigeist-Fellowship der Volkswagen-Stiftung für ihr interdisziplinäres Forschungsprojekt "Electrodynamics of Ultrafast Energy Transfer Processes in Clusters of Real and Artificial Atoms Induced by Long-Range Electron Correlation" erhalten. Zur optimalen Verbindung von ihrer Theorie mit modernsten Experimenten im Bereich der Elektronendynamik hat die Habilitandin der Universität Heidelberg ihre unabhängige Nachwuchsgruppe seit Oktober 2014 im Institute of Methods for

Material Development am Helmholtz-Zentrum Berlin und dem Joint Lab JULiQ mit der Freie Universität Berlin angesiedelt. Kontakt: annika.bande@helmholtz-berlin.de



**Prof. Dr. Johannes Kästner** (Universität Stuttgart, Bild links) und **Prof. Dr. Roland Mitric** (Universität Würzburg, Bild rechts) erhalten vom Europäischen Forschungsrat einen ERC-Grant in der Forschungslinie „Consolidator Grant“

## Berufung



**Prof. Dr. Christoph Jacob** hat einen Ruf auf eine Professur für Theoretische Chemie an der TU Braunschweig zum 1.10.2014 angenommen.

# TRAUERANZEIGEN

*Ich habe den Berg bestiegen,  
der euch noch Mühe macht,  
drum weint nicht meine Lieben,  
ich hab mein Werk vollbracht.*



Nach kurzer Krankheit unerwartet verstorben.

**Prof. Dr. Peter Botschwina**  
\* 4. Mai 1948 † 27. Dezember 2014

Ich bin zügigen Schrittes vorangegangen.

**In Trauer**      **Eva Botschwina**  
                         **Birgit Botschwina**  
                         **Daniel Brannolte**

Die Trauerfeier findet am Mittwoch, dem 14. Januar 2015 um 14 Uhr in der Universitätskirche St.-Nikolai zu Göttingen, Nikolaikirchhof 1, statt. Die Urnenbeisetzung erfolgt zu einem späteren Zeitpunkt im Familienkreis.

Von Blumen und Kränzen bitten wir im Sinne des Verstorbenen abzusehen und bitten um eine Spende an die „Göttinger Gesellschaft zur Unterstützung der Krebsforschung und –therapie e.V.“, Sparkasse Göttingen, IBAN: DE22 2605 0001 0019 0073 19, BIC: NOLADE21GOE, Kennwort: Prof. Dr. Peter Botschwina.

Bestattungshaus Günther, Pfalz-Grona-Breite 86, 37081 Göttingen

*Ein Leben für die Wissenschaft.  
Jetzt hat er die Tür zum letzten Geheimnis aufgestoßen.*

**Ernst Ruch**  
Prof. em. Dr. rer. nat.  
\* 26. August 1919 † 11. Mai 2015

**In stiller Trauer**  
Michael Ruch und Sabine Claussen  
im Namen aller Angehörigen

Parkstraße 39  
82065 Baierbrunn

Die Beerdigung findet am Donnerstag, den 21. Mai 2015, um 12.45 Uhr im Waldfriedhof München, Alter Teil, Eingang Fürstenrieder Straße 288, 81377 München, statt.

# HANS HELLMANN: „EINFÜHRUNG IN DIE QUANTENCHEMIE“

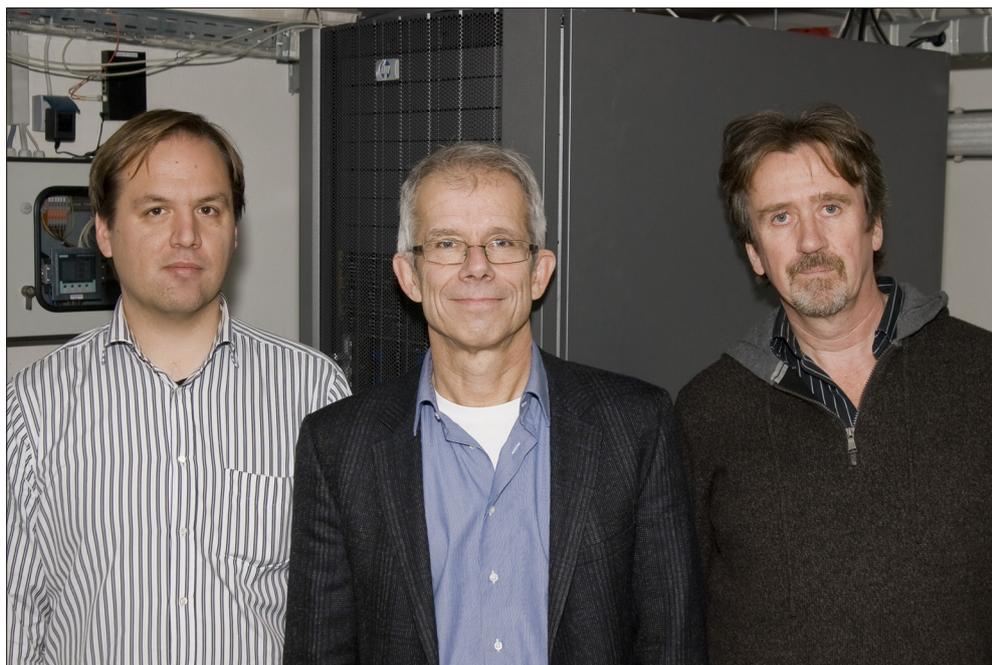


Aus dem Vorwort: Im Jahr 1937 erschienen die ersten Lehrbücher des damals noch sehr jungen Fachgebiets der Quantenchemie, zunächst eines in Russisch und danach eines in Deutsch, beide geschrieben von Hans Hellmann (1903–1938). Im Gegensatz zu anderen frühen Lehrbüchern zu diesem und nah verwandten Fachgebieten, wie jenen von Pauling & Wilson (Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry, McGraw-Hill, 1935) oder von Eyring, Walter & Kimball (Quantum Chemistry, Wiley, 1944), wurden Hellmanns Lehrbücher später weder nachgedruckt noch neu aufgelegt. Beachtet man seine bedeutenden wissenschaftlichen Leistungen – erwähnt seien hier die Aufklärung der Natur der kovalenten chemischen Bindung (1933), das molekulare Virialtheorem (1933), welches man auch Hellmann-Slater-Theorem nennen könnte, das quantenmechanische Krafttheorem (1933, 1936/1937), welches heute als Hellmann-Feynman-Theorem

bekannt ist, die Pseudopotentialmethode (1934) und die später von Born und Huang erneut und weiter bearbeitete Theorie der diabatischen und adiabatischen Elementarreaktionen (1935) – so kann dieser Sachverhalt nur unzu-reichend durch Hellmanns tragisches Schicksal erklärt werden. Eine Neuauflage der deutschen Fassung von Hellmanns Lehrbuch ist daher mehr als wünschenswert.“ Die jetzt erschienene originalgetreue Neuauflage enthält zusätzlich biografische Notizen (mit Abbildungen, ein Beitrag des Sohnes von Hans Hellmann) sowie ein vollständiges Verzeichnis der wissenschaftlichen Arbeiten von Hans Hellmann.

Dirk Andrae, Freie Universität Berlin

Hans Hellmann: Einführung in die Quantenchemie, mit biografischen Notizen von Hans Hellmann jr.; hrsgg. von Dirk Andrae, Springer, Berlin, Heidelberg, 2015, VII + 389 S., ISBN 978-3-662-45966-9 jr., hrsgg. von Dirk Andrae, Springer, (39,99 EUR), ISBN 978-3-662-45967-6 (eBook), DOI 10.1007/978-3-662-45967-6



INFORMATION THEORETISCHE CHEMIE  
Ausgabe August 2015

IMPRESSUM

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

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

August 2015

