

JUNI 2017

Information THEORETISCHE CHEMIE

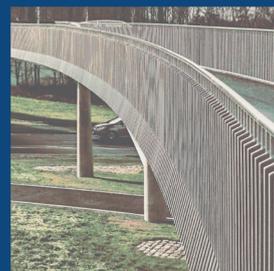
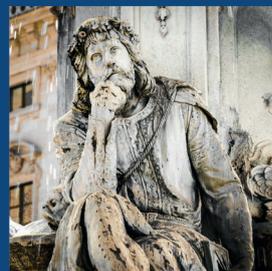
Quantenchemie
auf dem Smart-
phone

51. & 52.
Symposium für
Theoretische
Chemie

Nachrufe

Reinhard Ahlrichs
Heinz Werner Preuß

UN
WÜ



EDITORIAL

Liebe Leserinnen und Leser der INFO THEORETISCHE CHEMIE

Was haben wir uns gefreut, als wir die Gestaltung dieses Blattes übernehmen durften und was freuen wir uns erst, dass wir es jetzt wieder abgeben dürfen. Unser Dank geht an alle, die uns unterstützt haben und natürlich auch an die, die das Heft durchgeblättert haben. Sollte es Ihnen gefallen haben, loben Sie uns nur im Stillen und nicht öffentlich, wer weiß, wen ein solches Lob auf welche Gedanken bringt. Besonders bedanken möchten wir uns bei den Leuten, die sich als unsere Nachfolger zur Verfügung gestellt haben. Nach Aussage unseres großen Vorsitzenden war die Findungsphase ja mit Körben gepflastert. Dir, Christian, vielen Dank, dass du die Suche trotzdem nicht aufgegeben hast!

Bei der Übernahme der Gestaltung haben wir einiges versucht, aber davon ist auch einiges wieder eingeschlafen, sodass sich, kritisch betrachtet, nicht viel geändert hat, außer dem Erscheinungsdatum des nächsten Heftes. Dieses verschob sich bekanntermaßen, aus diversen Gründen, immer „ein wenig“. Dabei und hier möchten wir unseren Nachfolgern Mut machen. Es ist nicht so viel Arbeit, aber wie der Rheinländer so schön sagt: „Et is nit weit, aber et zieht sich.“ Daher wünschen wir unseren Nachfolgern eine unermüdlich sprudelnde Quelle an Zusendungen, sehr genau wissend, dass nicht alle guten Wünsche im Leben vollständig in Erfüllung gehen. Natürlich wünschen wir unseren Nachfolgern auch aufmerksame Leser, denen nicht entgeht, dass etwas, was im Editorial angekündigt wird, gar nicht im Heft ist.

Später erscheinende Ausgaben haben den Vorteil, dass man mehr hineinpacken kann, da der abzudeckende Zeitraum aus nachvollziehbaren Gründen länger ist. Daher finden Sie in dieser Ausgabe zwei Berichte von STC-Konferenzen. Da uns aufgefallen war, dass auch in dem vorliegenden wichtigen Informationsmedium Bilder bevorzugt werden, hatte Bernd angeregt, die Berichte als Comic zu präsentieren. Leider konnte mit dem Vorschlag aber nicht durchsetzen. Dummerweise klappte die Übertragung der Bildunterschriften nicht, sodass die Redaktion hier eigene Kommentare beifügen

musste. Wir bitten das zu entschuldigen. Zudem gibt es einiges an Klatsch&Tratsch in der Bild-Zeitung-Rubrik. Weiterhin bringen wir das Protokoll der letzten Versammlung der AG TC welches, wie das bei Protokollen halt so üblich ist, allgemeine Begeisterungstürme entfachen wird. Das Durchlesen lohnt sich auf alle Fälle, wer weiß, vielleicht macht der große Vorsitzende Ernst und schreibt auf der nächsten STC-Tagung mit uns allen einen Test.

Empfehlenswert ist auf alle Fälle der Bericht der Herren Giel, Müller-Plathe und Böhm, die beschreiben, wie Sie auf dem Handy mit Hilfe einer von ihnen entwickelten App quantenchemische Berechnungen durchführen können. So können Sie auf einer Bahnfahrt nicht nur ein Paper auf Basis vorhandenen Daten schreiben, sie können die Daten sogar während der Bahnfahrt generieren. Sollte Ihnen ihre geplante Fahrt zu kurz erscheinen, sprechen Sie die Deutsche Bahn doch einfach an, ob sie keine Verspätung erzeugen könnte, sie bräuchten noch was Zeit. Bernd hatte letztes den Eindruck, dass solche Anfragen recht häufig positiv beschieden werden.

Da man hin und wieder den Eindruck haben könnte, dass nicht jeder Empfänger die InfoTC aufmerksam bis zum Ende liest, möchte sich die InfoTC Redaktion ganz herzlich bei Matthias Wohlgemuth bedanken. Er macht seinem Namen alle Ehre, ansonsten wäre es ihm nicht gelungen, unsere dürren Texten mit diesem hervorragende Layout zu veredeln. Bilder des für die InfoTC aus Würzburg zuständige Team findet sich am Schluss des Heftes. Sie wurden kurz nach Übernahme des Jobs aufgenommen, unsere damalige Begeisterung ist mit Händen zu greifen.

Damit wünschen wir allen Leserinnen und Lesern eine vergnügliche Lektüre, unseren Nachfolgern eine erfolgreiche und damit auch schöne Zeit und uns etwas mehr Ruhe.

Würzburg, Mai 2017

Eure Würzburger InfoTC Redaktion

INHALT

Quantenchemie auf dem Smartphone	4
51. Symposium für Theoretische Chemie 2015	7
52. Symposium für Theoretische Chemie 2016	13
Protokoll der Mitgliederversammlung 2016	17
Tagungen	20
Klatsch und Tratsch	21
Erstmalige Vergabe des Erich-Hückel-Preises	23
Emmy-Noether Nachwuchsgruppe	24
Verleihung des Peyerimhoff-Nachwuchspreis 2016	27
Nachruf - Reinhart Ahlrichs	29
Nachruf - Heinzwerner Preuß	32
Interview mit Dr. Judith B. Rommel	34
Arbeitsgruppe Barth	38

QUANTENCHEMIE AUF DEM SMARTPHONE

Ein Hückel-Programm für die Lehre

KONTAKT

Patrick Giel*, Florian Müller-Plathe, und Michael C. Böhm

Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie

Technische Universität Darmstadt

Alarich-Weiss-Str. 8, 64287 Darmstadt

* E-Mail: p.giel@gmx.de

Abstrakt:

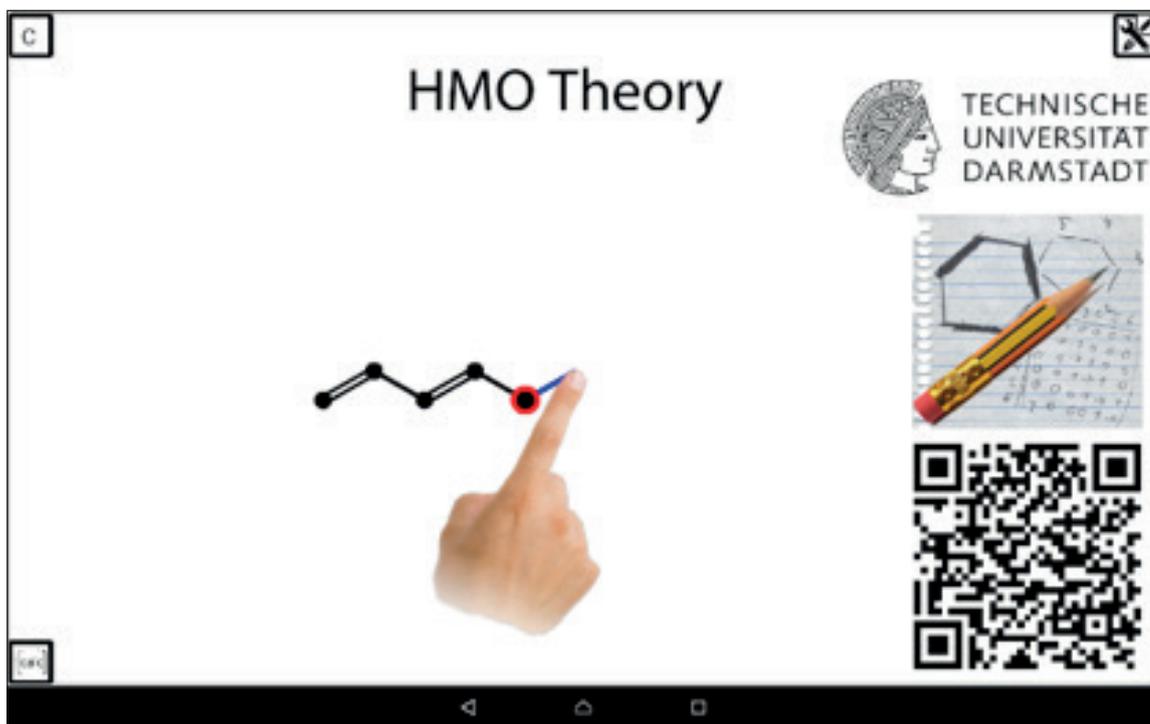
Im Rahmen einer wissenschaftlichen Hausarbeit für das Staatsexamen Lehramt Gymnasien haben wir eine App für Android-basierte Smartphones und Tablets entwickelt. Sie führt in Echtzeit quantenchemische Rechnungen im Rahmen der Hückel-Näherung durch, liefert die üblichen Resultate und stellt diese auf dem Gerät dar. Ihr Einsatzgebiet ist primär die Lehre; sie ermöglicht aber auch einen schnellen Einsatz bei der Lösung wissenschaftlicher Probleme. Unsere App lässt sich in einführenden Veranstaltungen zur molekularen Quantenmechanik und Spektroskopie (üblicherweise im Kanon der Physikalischen Chemie), in Grundvorlesungen der Theoretischen Chemie, in Organischer Chemie aber auch im Oberstufenunterricht verwenden. Sie steht kostenlos im Google-Playstore unter dem Namen "Hueckel Molecular Orbital HMO" zur Verfügung.

HMO-Programm:

In der theoretisch-chemischen Forschung wird die Hückel-Molekülorbital (HMO) Theorie nicht mehr häufig verwendet [1]. Ausnahmen sind interessante Anwendungen in Kombination mit auf-

wendigeren Methoden [2-5]. Als Instrument der Lehre ist sie aber weiterhin sehr geschätzt, weil sie wesentliche Eigenheiten der molekularen Elektronenstruktur von π -Systemen mit ihrem Minimalmodell bereits qualitativ repräsentiert. Der Rechenaufwand ist dabei so gering, dass handelsübliche Telefone Rechnungen an Molekülen mit über 100 Atomen in wenigen Sekunden zulassen. Daraus ergibt sich die Möglichkeit, Teilnehmer von Lehrveranstaltungen unterrichtsbegleitend quantenchemische Rechnungen durchführen zu lassen, um die vorgestellten Konzepte zu vertiefen.

Wir haben zu Lehrzwecken die o.a. App entwickelt und auch schon in der Literatur vorgestellt [6]. Bei der Implementierung haben wir uns zunächst auf das Android-Betriebssystem konzentriert, weil dies in Deutschland die größte Verbreitung besitzt. Man kann ein Molekül, hier ein π -System, mit dem Finger oder einem Touchscreen-Eingabestift auf das Gerät zeichnen. Dabei können auch die gängigen Heteroatome eingegeben werden; d.h. diejenigen, für die wir in der Literatur eine Parametrisierung finden konnten [7]. Für Systeme, die sich so nicht spezifizieren lassen, kann man auch die Hückel-Determinante händisch eintragen. Mit unserer App lassen sich deshalb Möbius-Topologien behandeln [8] sowie – im Fall von Annulenen – den Einfluss des Pauli-Antisymmetrie-Prinzips quantifizieren [2]. Speziell Annulene und Polyene lassen sich auch „dynamisch“ definieren. Hier genügt es, die Art des π -Systems anzugeben. Unsere App erzeugt dann alle Verbindungen innerhalb angegebener Grenzen und startet die HMO-Rechnungen ohne graphische Eingabe.



Eine HMO-Rechnung mit unserer App liefert Molekülorbital (MO)-Energien sowie die π -Atomorbital (AO) Koeffizienten in den MOs. Beide werden graphisch dargestellt (Energiediagramm und MO-Struktur). Daneben berechnet sie den Kanon an üblichen Resultaten: Bindungsordnungen, Partialladungen, freie Valenzen, sowie Atom-Atom-, Bindungs-Bindungs- und Bindungs-Atom polarisierbarkeiten. Auch die Hückel- und Möbius-Determinanten sind direkt zugänglich. Zum Druck lassen sich die Resultate als pdf-Dateien exportieren.

Wir haben die App selbst mit einigem Erfolg in der Lehre verwendet, z.B. im Rahmen der Physikalischen Chemie. Wir haben sie sogar missbraucht, um das tight-binding-Modell der Festkörperphysik zu vertiefen [9]. Sie ist bei der großen Mehrzahl der Teilnehmer sehr gut angekommen. Das mag daran liegen, dass vielen Studenten ihr Telefon vertrauter erscheint als jedes Lehrbuch. Zum anderen lassen sich Konzepte durch „experimentieren“ erfahren: Wie verändern sich die Orbitalenergien, wenn ich 6 Atome als offene Kette oder als Ring beschreibe? Wie „aromatisch“ ist ein Cyclodekapaen

verglichen mit Benzol? Wie „antiaromatisch“ ist Cyclobutadien verglichen mit Cyclooctatetraen? Wie verändert sich der HOMO-LUMO-Abstand, wenn ich eine Nitrogruppe, eine Aminogruppe, oder zwei solcher Gruppen in ortho-, meta- und para-Stellung an einen Benzol-Ring setze? Oder, für Fortgeschrittene, was passiert mit den π -Atomorbital-Koeffizienten an einem bestimmten Atom, wenn ich den Wert eines Resonanzintegrals anders wähle?

Unser Hückel MO Programm ist kostenlos, werbefrei, und verlangt keine Ressourcenzugriffe, die es nicht für seine unmittelbare Aufgabe braucht. Es kann vom Google-Playstore heruntergeladen werden und hat auf allen von uns getesteten Android-Geräten (ab Betriebssystemversion 4.1) funktioniert. Wir freuen uns über Rückmeldungen und Erfahrungsberichte.

Referenzen

[1] Heilbronner, E., Bock, H., Das HMO-Modell und seine Anwendung, (Verlag Chemie, Weinheim, 1970).

- [2] Böhm, M.C., Schütt, J., Philipp, S., *Int. J. Quant. Chem.*, 1998, 69:727.
- [3] Pérez-Enríquez, R., *Rev. Mex. Fis., Suppl. 1*, 2002, 48:262.
- [4] Böhm, M.C., Schulte J., *J. Mol. Struct. Theorchem*, 2005, 722:21.
- [5] Schaller, G.R., Herges, R., *Chem. Comm.* 2013, 49:1254.
- [6] Giel, P., Müller-Plathe, F., Böhm, M.C., *Chem. Unserer Zeit*, 2017, 51:65; DOI: 10.1002/Iciuz.201600761.
- [7] Streitwieser, A., *Molecular Orbital Theory for Organic Chemistry*, (Wiley, New York, 1967).
- [8] Heilbronner, E., *Tetrahed. Lett.*, 1964, 29:1923.
- [9] Ashcroft, N.W., Mermin, N.D., *Solid State Physics*, (Thomson Learning, Toronto, 1976).

PS: Unsere App ist nun seit ca. 13 Monaten im Google-Playstore verfügbar. Dokumentierte HMO-Rechnungen wurden bisher (Stand 7.2.2017) an mehr als 770 verschiedenen Geräten durchgeführt. Die geschätzte Zahl von App-Installationen beträgt etwa 1250. Die Nutzer unserer App kommen aus 39 Ländern. Diese Werte sind jeweils untere Grenzen, da nicht alle Nutzer diese Angaben zur Verfügung stellen. Durch die Ausführung so genannter dynamischer Simulationen ist auch die bisher dokumentierte Zahl von 20000 verschiedenen Rechnungen ebenfalls nur eine untere Abschätzung. In einer von uns angelegten Benutzer-Statistik (patrick-giel.de/hmo/) sehen wir auch das große Interesse an Ringen mit Möbius-Topologie. Das größte bisher gezeichnete Molekül hat 102 π -Zentren, während das größte dynamisch erzeugte System über 550 Zentren verfügt. Schließlich hoffen wir, dass unsere App auch in Zukunft viele Nutzer finden wird.

51. SYMPOSIUM FÜR THEORETISCHE CHEMIE 2015

Chemistry in Motion

Organisation

Prof. Dr. Peter Saalfrank
PD Dr. Tillmann Klamroth
JProf. Dr. Thomas Körzdörfer

Allgemeine Informationen

Motto: Chemistry in Motion
Veranstaltungsort: Campus Griebnitzsee
der Universität Potsdam
370 Teilnehmer/innen von Institutionen
aus 29 Ländern
13 eingeladene + 27 eingereichte Vorträge
289 Poster, 6 Posterpreise

Rahmenprogramm

Exkursionen: Filmpark Babelsberg, Schlosspark
Sanssouci, Stadtführung in Potsdam,
Power-Point Karaoke
Konferenzdinner: Prinz Eisenherz Restaurant
(Filmpark Babelsberg)

Sponsoren und Förderer

Sponsoren: SCM (Scientific Computing
& Modelling), RAID Media Systems
Posterpreise: Molecules
Förderer: Fonds der chemischen Industrie,
DFG, Universität Potsdam, Sonderforschungsbe-
reich 658

Tag 1 (Sonntag)

Das diesjährige Jahrestreffen der Arbeitsgemein-
schaft Theoretische Chemie wurde mit einem
eingeladenen Beitrag von Bretislav Friedrich vom
Fritz-Haber Institut der Max-Planck-Gesellschaft
Berlin eröffnet. In seinem Vortrag zum Thema
“How did the tree of knowledge get its blossom?
The rise of Physical and Theoretical Chemistry”
gab Friedrich einen umfassenden Überblick über
die Geschichte und Entwicklung der physikali-
schen und theoretischen Chemie. Insbesondere
arbeitete er die wichtigsten Meilensteine beider
Wissenschaftsdisziplinen, von ihren Anfängen im
frühen 17. Jahrhundert bis heute, heraus. Beson-
deres Augenmerk legte Friedrich dabei auf den
Wissenschaftsstandort Berlin/Potsdam und die
hier tätigen Wissenschaftler, welche die beiden
Fachgebiete nachträglich prägen konnten. Zwei
eingereichte Vorträge rundeten die Auftaktver-
anstaltung des Symposiums für Theoretische Che-
mie ab. Carolin König von der Aarhus Universi-
tät sprach in ihrem Vortrag über die Berechnung
und Verwendung lokaler Eigenschaften in Vib-
rationsrechnungen, welche z.B. für die effektive
Berechnung anharmonischer Vibrationspektren
für große Biomoleküle Anwendung finden. An-
schließend berichtete László von Szentpály über
die Verwendung thermodynamischer Gleichun-
gen und Symmetriegesetze für die Entwicklung
neuartiger Konzepte im Rahmen der Dichtefunk-
tionaltheorie. Im Anschluss bot sich allen Teilneh-
mern die Möglichkeit, sich am abendlichen Buffet
für die kommenden Tage zu stärken.

Tag 2 (Montag)

Der zweite Tag des Symposiums widmete sich
ganz dem Motto “Chemistry in Motion”. Die ers-



Insgesamt 370 Forscherinnen und Forscher aus 29 Ländern kamen im September 2015 nach Potsdam um ihre Ergebnisse auf dem Symposium für theoretische Chemie zu präsentieren. Um dem Motto des Symposiums (Chemistry in motion) Ausdruck zu verleihen, wurden die Teilnehmer besonders dynamisch gruppiert.

te Sitzung zum Thema Elektronendynamik wurde durch einen eingeladenen Vortrag von Lorenz Cederbaum von der Universität Heidelberg mit dem Titel “On systems with and without excess energy in environment ICD and other interatomic mechanisms” eröffnet. Im Zentrum des Vortrages stand die Frage nach der theoretischen Beschreibung von Mechanismen, welche es Atomen und Molekülen erlauben überschüssige Energie an benachbarte Systeme abzugeben. Anschließend berichtete Annika Bande vom Helmholtz-Zentrum Berlin über ihre Arbeiten zur Rolle von Phononen bei der Energieübertragung zwischen Quantendots. Den Abschluss der ersten Sitzung des Tages machte Axel Schild vom Max-Planck-Institut in Halle mit seinem Beitrag über die Beschreibung der Elektronendynamik in starken Feldern mit Hilfe einer exakten Faktorisierung der elektronischen Wellenfunktion.

Nach der Kaffeepause ging es mit dem Thema Reaktionsdynamik weiter. Stuart Althorpe von der University of Cambridge stellte in seinem eingeladenen Vortrag die Frage: “Is there a quantum transition-state theory?” Althorpe arbeitet dabei heraus, dass eine echte quantenmechanische Generalisierung der Eyring-Theorie des Übergangszustandes in Form einer Ratengleichung existiert, welche mit Hilfe von Ring-Polymer Molekulardynamik erhalten werden kann. Anschließend berichtete Inga Sabine Ulusoy vom Leibniz Institut in Frankfurt (Oder) über die Anwendung der Eyring-Theorie zur Berechnung von Reaktionsraten. Jeremy Richardson von der Friedrich-Alexander

Universität Erlangen-Nürnberg beschäftigte sich in seinem Vortrag mit der Berechnung von Elektronentransferraten und vibronischen Spektren mit Hilfe der Ring-Polymer Molekulardynamik.

Der erste Abschnitt des Tagungsprogramms am Nachmittag behandelte das Thema Molekulardynamik. Barbara Kirchner von der Universität Bonn berichtete in ihrem eingeladenen Vortrag mit dem Titel “Complex Molecular and Ionic Liquids from First-Principles Molecular Dynamics Simulations” über die Herausforderungen und Chancen der Anwendung von ab-initio MD-Rechnungen auf ionische Flüssigkeiten. In den eingereichten Vorträgen dieser Sitzung sprach zunächst Daniel Muñoz-Santiburcio aus Bochum über seine Arbeiten zur Reaktionsdynamik in eingegengten Flüssigkeiten, bevor Sandra Luber aus Zürich neue ab-initio MD Methoden zur Berechnung spektroskopischer und lokaler Eigenschaften in periodischen Systemen vorstellte.

Die Vorträge nach der Kaffeepause beschäftigten sich mit der Beschreibung optisch angeregter Zustände. Den Anfang machte Leticia González aus Wien mit ihrem eingeladenen Beitrag “Excited States for Complex Systems: Phase-Space Sampling and Environment”. In ihrem Vortrag, der sich vor allem mit QM/MM Methoden für angeregte Zustände von Molekülen in einer Lösungsumgebung beschäftigte, stellte sie insbesondere die Bedeutung einer vollständigen dynamischen Beschreibung der Kernfreiheitsgrade heraus. Anschließend stellte Deniz Tuna aus Mühlheim an der Ruhr seine Arbeiten zu konischen Über-



Postersession - Das wissenschaftliche Programm wurde durch zwei Postersessions abgerundet. Das Poster rechts ist verwaist, da es gerade wegen Überfüllung geräumt werden musste.

schneidungen und deren Rolle in der Photophysik bioorganischer Moleküle vor. Im letzten Vortrag des Tages berichtete Jörg Tatchen von der Universidad de los Andes Bogotá über seine Arbeiten zur Berechnung von Vibrationspektren mit Hilfe der Methode der "Frozen Gaussians".

Nach dem Zusammentreffen der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie und dem gemeinsamen Abendessen bot sich allen Teilnehmern die Möglichkeit, den Abend mit Bier, Wein, Brezeln und angeregten Diskussionen im Rahmen der ersten Postersession ausklingen zu lassen.

Tag 3 (Dienstag)

Das Programm am Dienstag Vormittag widmete sich ganz dem Themengebiet der Dichtefunktionaltheorie. Den ersten eingeladenen Vortrag des Tages hielt Andreas Görling aus Erlangen zum Thema "Density-functional methods based on the adiabatic-connection fluctuation-dissipation theorem combining high accuracy with wide applicability". Die von Görling vorgestellten Korrelationsfunktionale eignen sich nicht nur für die Beschreibung von van-der-Waals Wechselwirkungen, sondern auch für die Behandlung von starkkorrelierten Systemen. Im Anschluss stellte Hilke Bahmann von der Technischen Universität Berlin ihre Arbeiten zur nu-

merisch effektiven Behandlung von lokalen Hybrid-Funktionalen vor. Joachim Friedrich von der TU Chemnitz berichtete über den Vergleich von Dichtefunktional-Ergebnissen mit Basissatz-extrapolierten, auf der Methode von Inkrementen basierenden CCSD(T) Benchmark Rechnungen. Nach der Kaffeepause sprach Martin Head-Gordon von der UC Berkeley über "Survival of the Most Transferable: New Semi-empirical Density Functionals from a Combinatorial Design Strategy". Head-Gordon arbeitete dabei heraus, wie Austausch-Korrelationsfunktionale über kombinatorische Verfahren systematisch und gezielt verbessert werden können. Im Anschluss berichtete Daniel Boese aus Graz über die Genauigkeit von Post-Hartree-Fock und Dichtefunktionalmethoden in der Beschreibung von Wasserstoffbrücken-Bindungen. Vera Krewald vom Max-Planck Institut in Mülheim an der Ruhr sprach über die Berechnung von Redox-Potentialen von magnetisch gekoppelten Übergangsmetall-Clustern.

Die ersten Vorträge am Nachmittag beschäftigen sich mit Festkörperchemie. Den Anfang machte Ali Alavi vom Max Planck Institut in Stuttgart mit seinem Vortrag zum Thema "Full CI Quantum Monte Carlo: method and recent developments". Alavi stellte vor, wie stochastische Methoden eine effiziente Full-CI Behandlung von Molekülen und periodischen Festkörpern erlauben. Um die Effizienz der von ihm entwickelten Methoden zu unterstreichen zeigte Alavi eine eindrucksvolle Live-Demonstration verschiedener Rechnungen auf dem Vortragslaptop. Im ersten der beiden eingereichten Vorträge in diesem Themenkomplex sprach Denis Usvyat aus Regensburg darüber, wie man durch die Kombination von periodischen MP2 Rechnungen mit den für endliche Systeme berechneten Coupled-Cluster-Korrekturen sehr hohe Genauigkeit bei der Berechnung periodischer Festkörper erzielen kann. Schließlich erläuterte Ralf Tonner aus Marburg wie

eine energiebasierte Analyse chemischer Bindungen dabei helfen kann, die Reaktivität von Molekülen zu untersuchen und wie sich dieser Ansatz auf periodische Festkörper übertragen lässt.

Die Vorträge nach der Kaffeepause behandelten das Thema Oberflächenchemie. In ihrem Vortrag "Current-driven phenomena in junctions: An ensemble scattering theory applied to three bizarre reactions" gab Tamar Seideman von der Northwestern University eine Einführung in die Ensemble-Streutheorie und deren Anwendung zur Untersuchung von elektronendynamischen Prozessen. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Untersuchung von Resonanzeffekten beim Ladungstransport durch Moleküle an Oberflächen, wie sie z.B. bei STM Messungen auftreten. Im anschließenden Vortrag berichtete Gernot Fuchs von der Universität Leiden über die seine Ergebnisse bei der quantendynamischen Beschreibung der reaktiven Streuung von Molekülen an Oberflächen. Aleksandr Kandratsenka aus Göttingen sprach über die Berechnung des Vibrationsenergie-Transfers zwischen einem einzelnen Stickstoffmonoxid Molekül und einer Gold Oberfläche. Joachim Paier von der Humboldt-Universität Berlin stellte DFT und DFT+U Rechnungen zur Hydratation der Magnetit-Oberfläche vor. Nach dem Abendessen fand der Tag schließlich mit angeregten Diskussionen in der zweiten Postersession seinen wissenschaftlichen Ausklang.

Tag 4 (Mittwoch)

Der vierte Tag des Symposiums begann wieder ganz im Zeichen der Dichtefunktionaltheorie. Stephan Grimme aus Bonn sprach in seinem Vortrag "Simple Quantum Chemistry for Complex Systems and Processes" über zwei Schwerpunktthemen seiner Arbeit. Zum Einen zeigte Grim-



Exkursion Schlosspark Sanssouci - Manch Teilnehmer dieser Exkursion wünschte sich insgeheim, dass sich die DFG bei ihrer Forschungsförderung ein Beispiel an den sprudelnden Brunnen nehmen würde.

me einen neuartigen Ansatz zur Berechnung von Massenspektren mit Hilfe einer Kombination aus Stochastik, Molekulardynamik, und quantenchemischen Rechnungen. Zum Anderen sprach er über die automatisierte Erzeugung von klassischen Kraftfeldern für molekulardynamische Rechnungen, deren Genauigkeit mit der von dispersionskorrigierten DFT Rechnungen vergleichbar ist. Anschließend berichtete Igor Lyskov aus Düsseldorf über eine alternative Parametrisierung des DFT/MRCI Hamilton Operators und seiner Anwendung zur Berechnung von Anregungsenergien und Reaktionsenthalpien. Martin Korth von der Universität Ulm sprach schließlich über die Untersuchung und Selektion von für den Bau neuartiger Batterien geeigneten Elektrolytmaterialien mit Hilfe quantenchemischer Methoden.

Nach der Kaffeepause berichtete Roi Baer von der Hebrew University Jerusalem in seinem Vortrag zum Thema "Charge carrier localization in extended systems" über die Probleme bei der Beschreibung der Lokalisierung von Ladungen und Exzitonen in Polymeren und großen Metallclustern mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie. Baer zeigte dabei insbesondere, warum die Verwendung von reichweite-korrigierten Dichtefunktionalen bei einer zuverlässigen Beschreibung von Ladungslokalisierung in konjugierten Systemen hilfreich sein



Preisverleihung - Auch in diesem Jahr wurden wieder Geldpreise an die sechs besten Posterbeiträge vergeben. Ob die Posterpreisträger während der Postersession genauso viel Spaß gehabt hatten, ist nicht überliefert. Unkommentiert blieb auch der begeisternde Gesichtsausdruck des Leiters der Veranstaltung rechts. Vermutlich bedauerte er, dass, da die Tagung vorbei ist, er wieder ins Büro muss.

kann. Im Anschluß erklärte Peter Limacher aus Karlsruhe wie sog. Seniority-Zero-Wellenfunktionen die näherungsweise Lösung von Multireferenzproblemen mit Einfachreferenz-Ansätzen erlauben. Im letzten Vortrag des Tages sprach Jörg Kussmann von der LMU München über Entwicklungspotentiale und Resultate von massiv-parallelen quantenchemischen Rechnungen auf GPUs.

Am Mittwoch Nachmittag hatten die Teilnehmer des Symposiums die Gelegenheit, an einer von drei Exkursionen teilzunehmen. Während eine große Gruppe den nahegelegenen Filmpark Babelsberg besuchte, wo sie unter anderem einer Stuntshow beiwohnen konnte, nutzen die anderen Teilnehmer das großartige Herbstwetter um sich entweder im Rahmen einer Stadtführung oder einer Führung durch den Schlosspark und das Schloss Sanssouci über die Geschichte und Architektur der Gastgeberstadt Potsdam zu informieren. Als Indoor-Alternative für Frischluftverweigerer fand außerdem ein Power-Point-Karaoke Wettbewerb statt, welcher von den wenigen freiwilligen Teilnehmern mit großem Einsatz ausgetragen wurde.

Der Tag fand schließlich dennoch beim gemeinsamen Konferenzdinner im Prinz-Eisenherz Restaurant des Filmpark Babelsberg für alle Teilnehmer einen gemütlichen Ausklang.

Tag 5 (Donnerstag)

Der letzte Tag des diesjährigen Symposiums für Theoretische Chemie wurde durch den Vortrag von Claudia Draxl mit dem Titel "Theoretical spectroscopy of π -conjugated molecules and their condensed phases" eröffnet. Draxl sprach dabei in erster Linie über die Bedeutung von Vielteilcheneffekten bei der Beschreibung von Anregungsenergien großer organischer Moleküle, welche eine Erweiterung von DFT und TD-DFT Methoden im Rahmen der Vielteilchenstörungstheorie nötig machen, wie sie u.a. in der GW-Methode oder bei der Lösung der Bethe-Salpeter-Gleichung angewendet wird. Antonio Prlj aus Lausanne berichtete anschließend über Probleme bei der TDDFT Berechnung der Anregungsenergien in Oligothiophenen. Jörg Megow von der Universität Potsdam

sprach über die Berechnung optischer Anregungsspektren von supramolekularen Aggregaten.

Die letzte Sitzung des Tages und damit auch der gesamten Konferenz wurde mit dem Vortrag von Roland Mitric von der Universität Würzburg zum Thema “Light-induced nonadiabatic dynamics in molecules and nanostructures“ eröffnet. Der Vortrag behandelte die Kombination von quanten-klassischer, nichtadiabatischer Dynamik mit effizienten Elektronenstrukturmethoden und deren Verwendung zur Beschreibung von Exzitonentransfer und Ladungsinjektion in Lichtsammelkomplexen und anderen Nanostrukturen. Anschließend sprach Erik Hedegård von der ETH Zürich über polarisierbares Embedding mit korrelierten Wellenfunktionen zur Beschreibung von Proteinen in Lösungsmitteln. Der letzte Beitrag der Konferenz wurde von Etienne Gindensperger aus Straßburg vorgetragen, der über seine Arbeiten zur spin-vibronischen Behandlung der Dynamik angeregter Zustände in Übergangsmetallkomplexen berichtete.

Den Abschluss des 51. Symposiums für Theore-

tische Chemie bildete die feierliche Verleihung der von Molecules gestifteten Posterpreise, über welche sich Christoph Bannwarth, Vincent Pohl, Christoph Bauer, Gül Bekçioglu, Albrecht Goez und Ralph Welsch freuen durften. In seinen abschließenden Worten dankte Peter Saalfrank allen Teilnehmern für ihre wissenschaftlichen Beiträge und angeregten Diskussionen, allen Sponsoren und Förderorganisationen für die finanzielle Unterstützung des Symposiums, sowie allen Mitgliedern des im Hintergrund arbeitenden Organisationsteams, ohne deren Einsatz die Durchführung der Tagung nicht möglich gewesen wäre.

Bericht: Thomas Körzdörfer

Fotos: Sophia Heiden, Rainer Neumann, Jonas Wirth

52. SYMPOSIUM FÜR THEORETISCHE CHEMIE 2016

Chemistry in Solution



Im Rahmen einer Diskussion im Rahmen der STC 2016 setzt Prof. van Wüllen zu einer seiner bekannt kritischen Fragen an. Während Herr Dr. Schindler (rechts) den Inhalt der Frage aufgrund seines langen Aufenthaltes in Bochum schon schmunzelnd erahnt, ist Herrn Dr. Schaefer der Hintergrund der Frage scheinbar noch nicht ganz klar.

Das 52. Symposium für Theoretische Chemie (STC) an der Ruhr-Universität Bochum wurde vom Lehrstuhl für Theoretische Chemie (Professor Dominik Marx) unterstützt durch den DFG Exzellenzcluster RESOLV (Ruhr Explores Solvation, EXC 1069) organisiert und war dem Schwerpunktthema „Chemie in Lösung“ gewidmet. An der viertägigen Tagung vom 26.-29.9.2016 diskutierten fast 400 Teilnehmer aus dem universitären und industriellen Bereich die verschiedenen Aspekte dieses Themas anhand von 13 eingeladenen Vorträgen international führender Experten aus dem Bereich Solvation Science. Als wichtigste jährlich stattfindende internationale Theorietagung im deutschsprachigen Raum

wurden neben dem Hauptthema auch viele weitere aktuelle Gebiete der Theoretischen Chemie im Rahmen von 30 Kurzvorträgen und über 250 Postern behandelt.

Chemische Prozesse in Lösung prägen die moderne Chemie seit ihren Anfängen und sind entscheidend für nahezu alle ihre Teilgebiete, angefangen von normalen organischen oder anorganischen Reaktionen in Flüssigphasen über biochemische Reaktionen in lebenden Zellen bis hin zu großskaligen Industrieprozessen. Dies umfasst nicht nur Vorgänge in homogener Lösung sondern auch Grenzflächenprozesse, z.B. an Lipidmembranen aber auch an Elektrodenoberflächen, die



Zwei Facetten der Postersessions auf der STC 2016. Auf der rechten Seite die bekannten sprachlichen Mitteilungen von Informationen, auf der linken Seite, die tonliche Mitteilung von Musik. Wer sich erfolgreicher mitteilte, blieb umstritten. Man kann aber davon ausgehen, dass bei der tonlichen Mitteilung weniger Kritik geübt wurde.

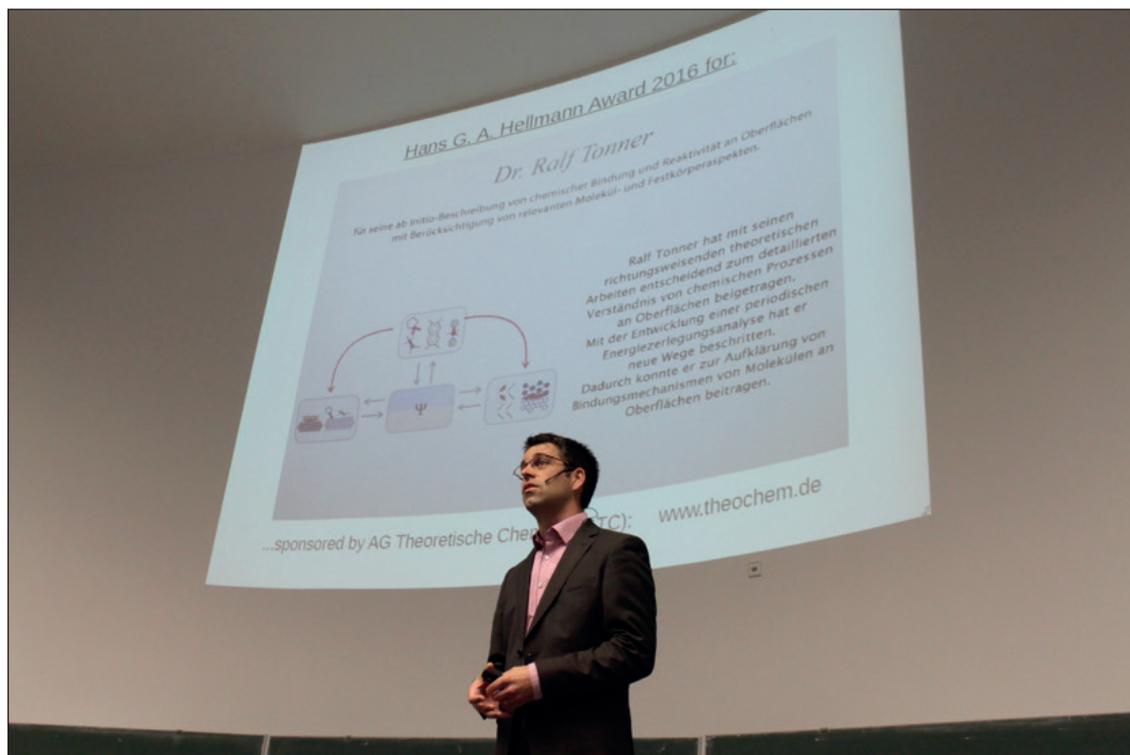
in der Elektrokatalyse und zur Energiekonversion und Energiespeicherung in den letzten Jahren stark an Bedeutung gewonnen haben. Diese zentrale Rolle von Lösungsmitteln und Lösungsvorgängen – besonders im Falle des wichtigsten Lösungsmittels Wasser – zeigt sich auch in der langen Tradition zur Untersuchung dieser Vorgänge mit Hilfe verschiedenster theoretischer Ansätze und numerischen Rechenverfahren. Das Hauptziel der diesjährigen STC war es, anhand von Schlüsselvorträgen einen Überblick über das mittlerweile sehr breite Methodenarsenal zu bieten und aufzuzeigen, dass nur durch die Kombination verschiedenster Methoden, von hochgenauen quantenchemischen Rechnungen bis hin zu ausgereiften Simulationstechniken, und durch die Berücksichtigung einer Vielzahl von Phänomenen ein tiefgreifendes Verständnis von Solvation Science erreicht werden kann.

Zum detaillierten Verständnis komplexer Systeme nimmt parallel zur Entwicklung stetig verfeinerter experimenteller Methoden die Berechnung experimentell zugänglicher Daten einen wichtigen Platz in der Theoretischen Chemie ein. Verschiedene Ansätze und Zugänge wurde hier insbesondere in den Vorträgen von Kenneth Ruud (University of Tromsø) zur Multiphotonenspektroskopie, von Oliver Kühn (Universität Rostock) zur Röntgenspektroskopie solvatisierter Metallionen und von Marie-Pierre Gaigeot

(Université d'Evry val d'Essonne, Paris) zur Simulation von SFG Spektren mit Hilfe von ab initio Molekulardynamik vorgestellt.

Die Anwendbarkeit bereits verfügbarer Simulationstechniken und Elektronenstrukturverfahren wurden beispielsweise von Douglas Tobias (UC Irvine) durch MD Simulationen von Ionen an der Elektrolyt/Vakuum Grenzfläche, von Bernd Meyer (Universität Erlangen-Nürnberg) zur Protonendynamik an fest-flüssig Grenzflächen und von Roland Netz (FU Berlin) zur Solvation in „Confinement“ demonstriert. Auch Kernquanteneffekte können eine wichtige Rolle spielen, wie von Thomas Markland (Stanford University) gezeigt wurde. Eine kritische Analyse der gegenwärtigen Möglichkeiten zur Simulation von Elektrolyt/Elektroden Grenzflächen im Bereich der Elektrochemie wurde von Eckhard Spohr (Universität Duisburg-Essen) vorgestellt.

Grundsätzlich ist es für viele Fragestellungen wünschenswert, noch höhere Genauigkeiten zu erreichen. So demonstrierte Joost VandeVondele (ETH Zürich), dass selbst für bereits gründlich untersuchte Systeme mit post-GGA Verfahren noch deutlich bessere Ergebnisse in Simulationen erhalten werden können, wie er höchst eindrücklich fuer Wasser mit MP2-MD demonstrierte. Auch verschiedene Einbettungsverfahren können hier beitragen, wie beispielsweise Elsa



Dr. Ralf Tonner bei seinem Vortrag anlässlich der Verleihung des Hans G. A. Hellmannpreises. Die Freude über den Preis ist ihm deutlich anzumerken.

Sanchez Garcia (MPI fuer Kohlenforschung) anhand von QM/MM Simulationen, Jacob Kongsted (University of Southern Denmark) mit Hilfe von polarisierbar Einbettungsmethoden und Lucas Vischer (Vrije Universiteit Amsterdam) durch Subsystem-DFT zeigen konnten.

Neben der Entwicklung, Verbesserung und Anwendung moderner theoretisch chemischer Methoden stellt auch die optimale Nutzung aktueller Rechnerarchitekturen bis hin zu Höchstleistungsrechnern mit massiv parallelen Strukturen einen zunehmende Herausforderung dar, die unter anderem im Vortrag von Thomas Kjærgaard (Aarhus University) zum hochparallelen DEC (divide-expand-consolidate) Coupled Cluster Algorithmus diskutiert wurde.

Ein weiterer interessanter Programmpunkt war neben der Jahresversammlung der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie ein Vortrag von Joachim Heberle (FU Berlin) in seiner Funktion

als Ombudsman für die Wissenschaft über wissenschaftliches Fehlverhalten mit einer ausführlichen und lebhaften Diskussion mit den Teilnehmern der STC.

Ein jährliches Highlight des STC ist die Vergabe des Hans G.-A. Hellmann Preises, dem angesehensten Preis für Nachwuchswissenschaftler mit habilitationsäquivalenten Leistungen im Bereich der Theoretischen Chemie, die bisher noch keine permanente Professur innehaben. In diesem Jahr wurde der Hellmann Preis an Dr. Ralf Tonner (Universität Marburg) für seine Beiträge zum Verständnis der chemischen Bindung und Reaktivität an Oberflächen mit Hilfe von Konzepten aus der Chemie und der Physik verliehen. Darüber hinaus wurde zum ersten Mal der neu eingerichtete Erich-Hückel-Preis der GDCh für herausragende Leistungen auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie an Professor Kutzelnigg (Emeritus der Theoretischen Chemie der Ruhr-Universität Bochum) verliehen. Werner Kutzelnigg wurde damit



Last not least, die Verleihung der Posterpreise. Für den Herren links war leider kein Preis mehr übrig.

für seine wegweisenden Arbeiten zur Natur der chemischen Bindung, zur Beschreibung der Elektronenkorrelation und magnetischer Eigenschaften, sowie für seine Beiträge zur relativistischen Quantenchemie ausgezeichnet.

Für hervorragende Posterpräsentationen in den beiden Postersitzungen im Audimax der Ruhr-Universität wurden zum Abschluss der Tagung Posterpreise an Adrian Mühlbach (ETH Zürich), Tamara Husch (ETH Zürich), Matti Hellström (Ruhr-Universität Bochum), Henry Schurkus (LMU München) und Christopher Stein (ETH Zürich) übergeben.

Die nächste STC wird von den Professoren Markus Meuwly und Anatole von Lilienfeld an der Uni-

versität Basel (21. bis 26. August 2017) zum Thema „Big Data in Chemistry: From Molecular Structure to Condensed Phase Dynamics“ ausgerichtet werden.

Wir bedanken uns bei Sinja Klees und Alexander Esser für die Bereitstellung der Fotos in diesem Artikel.

Dr. Michael Römelt und PD Dr. Jörg Behler
Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum

MITGLIEDERVERSAMMLUNG

52. Symposium für Theoretische Chemie 2016

Beginn: 27.09.2016 18:00

Ende: 27.09.2016 18:50

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

Tagesordnung

- 1) Genehmigung der Tagesordnung
- 2) Protokoll der Mitgliederversammlung 2015
- 3) Bericht des Vorstands
- 4) DFG – Frau Dr. Kowol-Santen
- 5) Kassenprüfung 2015
- 6) Wahl des Kassenprüfers 2016
- 7) Neuwahl des Vorstandes 2017
- 8) STC 2017
- 9) Verschiedenes

TOP1

Die Tagesordnung wird einstimmig angenommen.

TOP2

Zum Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC anlässlich des 51. Symposiums für Theoretische Chemie in Potsdam sind keine Anmerkungen eingegangen und es wird ohne Gegenstimme genehmigt.

TOP 3

Mitgliedschaft

Aktuell setzt sich die AGTC aus 230 Mitgliedern zusammen, von denen sechs Mitgliedschaften im letzten Jahr neu hinzu kamen; ebenso wie sieben neue Lebensmitgliedschaften, wie sie im letzten Jahr nach dem Modell der Bunsengesellschaft eingeführt wurden.

Hellmann-Preis

Der letztjährige Aufruf zu mehr Nominierungen für den Hellmann Preis hat zu einer deutlichen Besserung geführt, sodass in diesem Jahr der Preis wieder vergeben werden kann. Es wird darum gebeten auch weiterhin aktiv geeignete Kandidaten vorzuschlagen.

Liste der Nachwuchsgruppen

Es ist geplant eine Liste der aktiven Nachwuchsgruppen auf der Webseite der AGTC aufzubauen. Es wird um Mithilfe bei der Vervollständigung gebeten.

Folgende Kriterien gelten für eine Nachwuchsgruppe:

- 1) Abschluss der Promotion i.d.R. vor maximal 10 Jahren (mdl. Prüfung)
- 2) In der Regel Ortswechsel und Postdoc-Aufenthalt nach der Promotion. In begründeten Ausnahmefällen kann auch auf einen Postdoc verzichtet werden, jedoch ist in der Regel mindestens ein Orts-/Arbeitsgruppenwechsel nach der Promotion vorzusetzen.
- 3) Anstreben einer akademischen Laufbahn (Professur)
- 4) Leitung einer unabhängigen Arbeitsgruppe (Kriterien: wissenschaftlich eigenständige Publikationen, eigenständiges Einwerben von Projekten, in der Regel auch Verfügungsgewalt über ein eigenes Budget)
- 5) Eigene Stelle selbst extern oder intern wettbewerblich eingeworben oder in einem kompetitiven Verfahren erhalten (z.B. Liebig-Stipendium, Emmy Noether, ERC, etc.). Darunter fallen auch Nachwuchsgruppen, die in einem kompetitiven

Berufungsverfahren besetzt wurden (Juniorprofessuren, W2tt-Professuren, etc., - keine permanente Professur)

6) Mindestens ein/e Mitarbeiter/in mit Diplom/Master-Abschluss - dieses Kriterium kann bei klarer Definition einer Nachwuchsgruppe über 5) im frühen Stadium ausgesetzt werden. In Grenzfällen wird der AGTC-Vorstand die Zuordnung als unabhängige Nachwuchsgruppe überprüfen.

Jahresrückblicke

Die Trendberichte 2016 werden von Karin Fink (KIT Karlsruhe), Christine Peter (Universität Konstanz) und Jean-Christophe Tremblay (FU Berlin) verfasst.

INFO-TC

Nach einer noch kommenden letzten Ausgabe des INFO-TC durch Bernd Engels (Universität Würzburg), übernehmen Thomas Kühne (Universität Paderborn) für 2017/18, Andreas Dreuw (Universität Heidelberg) für 2019/2020, Leticia Gonzalez (Universität Wien) für 2021/2022, Thorsten Klüner (Universität Oldenburg) für 2023/2024 und Christoph Jacob (TU Braunschweig) für 2025/2026.

Konferenzen

Die STC 2017 wird von Markus Meuwly und Anatole von Lilienfeld in Basel. Die WATOC 2017 wird von Christian Ochsenfeld erstmals in Deutschland in München ausgerichtet. Dominik Marx wird für die Ausrichtung der STC 2016 in Bochum gedankt.

TOP 4

Johanna Kowol-Santen berichtet aus der DFG Geschäftsstelle. Roland Fischer (TU München) wird neues Mitglied des Vorstands. Simon Jörres übernimmt zukünftig die Betreuung der Theoretischen Chemie.

Sachmittelpauschalen

Als Richtlinie gilt eine Grenze von 5000€ p.a. welche für Gebrauchsmaterialien bestimmt und in Anträgen projektspezifisch begründet werden sollen. Es wird darauf hingewiesen dass es sich bei diesen um Ergänzung, nicht Ersetzungen bestehenden Materials handeln soll. Zusätzlich können bis zu 2500€ für Reisen und Publikationen bewilligt werden. Aktuell liegt die Bewilligungsquote bei 38%, die Förderquote bei 44%.

Neuerungen im SFB Programm

Die sich aus dem Hochschulprinzip ableitenden Eckpunkte und Bewertungskriterien werden zusammengefasst. Das Hauptaugenmerk des SFB Programms liegt in der Schwerpunktbildung an einzelnen Standorten. Die Neuerungen dienen dabei der Vermeidung der Unschärfe des „Standort“-Begriffs. Daher muss zukünftig eine einzelne Hochschule mind. 60% der Teilprojekte auf sich vereinen. Für Projekte, für die dies nicht zutrifft, wird auf das Transregio Programm verwiesen. Die Bewertung erfolgt entlang eines Punktesystems, wobei durch den Bericht eines unabhängigen Berichterstatters die Skalierung der Maßstäbe unterschiedlicher Bewertungsgruppen gewährleistet werden soll.

Exzellenzinitiative

Die auf unbestimmte Laufzeit angelegte Exzellenzinitiative wird ab 2019 zu 75% vom Bund und zu 25% von den Ländern finanziert sein und ein Fördervolumen von 533 Mio. € p.a. umfassen. Als Exzellenzcluster können sich dabei bis zu zwei und in Ausnahmefällen bis zu drei Universitäten bewerben, sofern alle gleichwertig beteiligt sind. Als Voraussetzung zur Bewerbung als Exzellenzuniversität gilt die Beteiligung an zwei Exzellenzclustern.

TOP 5

Seit 1. Januar erfolgt die Kontenführung durch die GDCh. Franz Mark wird für sein Engagement als

Kassenwart im letzten Jahr gedankt. Dieser stellt den Kontoauszug vor: Aus dem Jahr 2014 besteht ein Vortrag von 42202.39 €. Aus Mitgliedsbeiträgen und den neuen Lebensmitgliedschaften entstehen Zuflüsse von 3829.50 €. Mit Abschreibungen auf Forderungen von 26 € (einbehaltener Mitgliedsbeitrag) und sonstigen Kosten von 58 € ergibt sich somit ein Guthaben von 45947.89 € mit Stand 31.12.2015. Trotz sinkender Zinsrate ist durch Kursgewinne des Hellmann-Fonds im letzten Jahr ein Zuwachs des Stiftungsvermögens auf 61274.06 € zu verzeichnen. Der Vorstand wird per Akklamation entlastet.

TOP 6

Franz Mark wird ohne Gegenstimme für das kommende Jahr als Kassenprüfer bestätigt. Herr Mark signalisiert, dass er sein Amt gerne abgeben möchte, so dass um Vorschläge für geeignete Kandidatinnen und Kandidaten gebeten wird.

TOP 7

Wahlvorschlag für den AGTC-Vorstand (elektronische Wahl): Die Wahl wird ab diesem Jahr elektronisch abgehalten. Wolfram Koch bietet technische Expertise der GDCh zur Durchführung an – der Vorschlag wird dankend angenommen. Leticia Gonzalez (Universität Wien), Stefan Grimme (Universität Bonn), Wim Klopper (Universität Karlsruhe), Christel Marian (Universität Düsseldorf) und

Christian Ochsenfeld (Universität München) stehen zur Wiederwahl zur Verfügung. Daneben werden Andreas Görling (Universität Erlangen), Axel Groß (Universität Ulm), Christoph Jacob (Universität Braunschweig), Markus Reiher (ETH Zürich) und Christoph van Wüllen (Universität Kaiserslautern) als weitere Kandidaten vorgeschlagen.

TOP 8

Die STC 2017 wird vom 21. bis 25.8.2017 im Bernoullianum in Basel stattfinden und Big Data in Chemistry zum Thema haben. Der etwas ungewöhnliche Termin begründet sich mit den unterschiedlichen Semesterzeiten in der Schweiz. Die STC 2018 wird von Daniel Sebastiani (Universität Halle) organisiert werden.

TOP 9

Christoph Jacob (Universität Braunschweig) stellt das SPP Proposal „Theoretical Spectroscopy in Complex Environments“ vor. Koordinator ist Christoph Jacob, Barbara Kirchner ist Cokoordinatorin. Weitere Antragsteller sind Andreas Dreuw, Johannes Neugebauer und Christine Peter. Der Fokus liegt auf der methodischen Entwicklung für die Beschreibung komplexer Umgebungen.

STC 2016 in Bochum, den 27. September 2016

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
Sekt. C 7

www.helfrichtub.de/helfrichhome.htm

Helfrich_TUB@t-online.de

25. 5. -27. 5. 2017 in Kaiserslautern, TU

Bunsen-Tagung

Main Topic: Physical Chemistry for Life Sciences

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

11.7. – 14. 7. 2017 in Shropshire, UK, Harper-Adams-Universiy

17th European Seminar on Computational Methods in Quantum Chemistry (ESCMQC)

<http://www.escmqc2017.org/>

31. 7. – 11. 8. 2017 in Berlin, HU

Summer School on DFT:

“Density Functional Theory and Beyond: Accuracy, Efficiency and Reproducibility in Computational Materials Science”

<http://th.fhi-berlin.mpg.de/sitesub/meetings/dft-workshop-2017>

21. 8. – 26. 8. 2017 in Basel, Schweiz

53. Symposium on Theoretical Chemistry

“Big Data in Chemistry”

<http://www.chemie.unibas.ch/~stc2017>

27. 8. – 1. 9. 2017 in München, Kulturzentrum Gasteig

WATOC 2017

www.watoc2017.com

2.9. – 6. 9. 2017 in Marburg

REHE-2017, 12th International Conference on Relativistic Effects in

Heavy-Element Chemistry and Physics (Satellite to WATOC 2017)

<http://www.staff.uni-marburg.de/~rehe2017/welcome.html>

10. 9. – 14. 9. 2017 in Berlin

GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2017

Jubiläumskongreß „GDCh – 150 Jahre“

https://www.wifo2017.de/tms/frontend/index.cfm?l=7210&sp_id=1

10. 9. – 23. 9. 2017 in Palermo, Sizilien, Italien

European Summer School in Quantum Chemistry 2017

<http://www.esqc.org/>

5. 11. – 7. 11 2017 in Mainz

13th GCC – German Conference on Chemoinformatics

<https://www.gdch.de/index.php?id=3317>

KLATSCH UND TRATSCH

Es liegt in der Natur eines verspäteten Erscheinens, dass man mehr Klatsch & Tratsch berichten kann. Leider liegt es auch in der Natur des verspäteten Erscheinens, dass die meisten den Klatsch & Tratsch schon kennen. Trotzdem für den Fall, dass nicht alle alles gehört haben.



PD Dr. Jörg Behler, Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Ruhr-Universität Bochum, hat zum 1.2.2017 den Ruf auf eine W3 Heisenberg-Proffessur für Theoretische Chemie am Institut für Physikalische Chemie der Georg-August-Universität Göttingen angenommen und den Ruf auf eine „Professur für Materialdesign“ am Institut für Materialwissenschaften, Fakultät Chemie, der Universität Stuttgart abgelehnt.



Dr. Shirin Faraji, IWR Universität Heidelberg, hat einen Ruf auf eine Professur für Theoretische Chemie an der Universität Groningen angenommen und am 1. März 2017 angetreten.

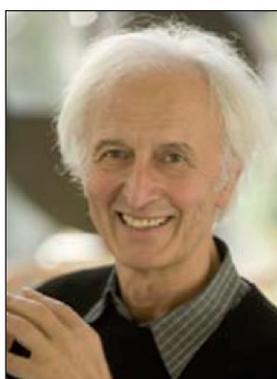


Prof. Dr. Thomas Kühne, Department Chemie der Universität Paderborn, hat im Herbst 2016 einen ERC Starting Grant für das Projekt „GreenOnWaterCat“ erhalten. Es sollen neuartige quantenchemischer Methoden zur Aufklärung der bislang unverstandenen grünen „On-Water“-Katalyse entwickelt werden. Dabei geht es darum herauszufinden wie chemische Reaktionen auf Wasserflächen ablaufen und katalysiert werden.

Dr. Mark Waller, bislang Habilitand an der Universität Münster, hat eine Professur an der Shanghai University angenommen.



Prof. Dr. Helmut Schwarz, Präsident der Humboldt-Stiftung seit 2008, bekommt in München auf der WATOC 2017 die Schrödinger Medal 2015 überreicht. **Prof. Dr. Johannes Neugebauer**, Professor für Theoretische Organische Chemie an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster bekommt die Dirac Medal 2016 überreicht.



Das Redaktionsteam möchte zwei Geburtstagskindern zu ihrem 80. Geburtstag gratulieren.

Zunächst Frau **Prof. Dr. Sigrid Peyerimhoff**, die seit den 70er Jahren des letzten Jahrhunderts enorm mitgewirkt hat, die Theoretische Chemie eigenständig neben der Physikalischen Chemie zu etablieren. Dazu beigetragen hat ihre hervorragende Forschung sowie ihre Tätigkeit in verschiedenen wissenschaftspolitischen Gremien, z.B. als Vizepräsidentin der DFG. Ihr Arbeitsgebiet umfasste zunächst die Simulation der Spektren kleiner Moleküle mit Multireferenz-CI Methoden unter Berücksichtigung aller möglicher Störungen die durch Kernbewegung, Spin-Bahn, Spin-Spin, Renner-Teller, ... Wechselwirkungen resultierten. Später wurden die Moleküle größer und beeinflusst durch die Gründung einiger SFBs rückte auch die Behandlung chemischer Probleme in den Fokus ihrer Arbeitsgruppe.

Ebenfalls gratulieren möchten wir Herrn **Prof. Dr. Georg Hohlneicher**. Er baute die Theoretische Chemie an der Universität zu Köln auf und lehrte dort von 1973 und 2002. Er engagierte sich sehr um die Gründung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie (Organisationsteam Ahlrichs, Hohlneicher, Kutzelnigg, Meyer, Peyerimhoff) und wurde deren erster Vorsitzender 1991-1995). Seine Arbeitsgebiete umfassten Spektrensimulation mittelgroßer organischer Moleküle sowie die quantendynamische Analyse der ablaufenden Vorgänge.

ERSTMALIGE VERGABE DES ERICH-HÜCKEL-PREISES

Werner Kutzelnigg, emeritierter Professor für Theoretische Chemie an der Ruhr-Universität Bochum, wurde am 28. September 2016 als Erster mit dem neu geschaffenen Erich-Hückel-Preis der GDCh ausgezeichnet. Die Preisverleihung fand im Rahmen des 52. Symposiums für Theoretische Chemie an der Ruhr-Universität Bochum statt.

Nach einführenden Worten zum neuen Erich-Hückel-Preis durch den GDCh-Geschäftsführer Prof. Wolfram Koch, und nach der Laudatio vom Kutzelnigg-Schüler Prof. Wim Klopper, erhielt Kutzelnigg den Erich-Hückel-Preis aus den Händen des Vorsitzenden der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie (AGTC), Prof. Christian Ochsenfeld.

Kutzelnigg erhielt den Erich-Hückel-Preis „in Würdigung seiner grundlegenden und wegweisenden Beiträge zum Verständnis der chemischen Bindung, zur Beschreibung von Elektronenkorrelationseffekten und magnetischen Eigenschaften, sowie zur Formulierung einer relativistischen Quantenchemie“.

Der Erich-Hückel-Preis, im Dezember 2014 vom GDCh-Vorstand beschlossen, wird für herausragende Leistungen in der Theoretischen Chemie vergeben und ist mit 7.500 Euro dotiert. Der



V.l.n.r.: Prof. em. Dr. Werner Kutzelnigg, Prof. Dr. Christian Ochsenfeld und Prof. Dr. Wolfram Koch bei der Verleihung des Erich-Hückel-Preises (Foto: Alexander Esser). Es ist eindeutig ersichtlich, wer von den Dreien mehr in die (ferne) Zukunft der Theoretischen Chemie und wer in die Kamera schaut.

GDCh-Vorstand hat der AGTC ein Vorschlagsrecht für die Benennung der Mitglieder der Preis-kommission eingeräumt. Die AGTC veranstaltet auch die jährlichen Symposien für Theoretische Chemie.

W. Klopper, Karlsruhe

Wir danken den Nachrichten aus der Chemie ganz herzlich für die Überlassung des Beitrags!

EMMY-NOETHER NACHWUCHSGRUPPE

am Max-Born-Institut

KONTAKT

Dr. Benjamin P. Fingerhut

Max Born Institute
Max-Born-Strasse 2 A
12489 Berlin, Germany

Tel: + 49-30-6392-1404

Web: <http://staff.mbi-berlin.de/fingerhu>

E-Mail: fingerhut@mbi-berlin.de



Dr. Benjamin P. Fingerhut

Seit Oktober 2014 befindet sich die neue Nachwuchsgruppe von Dr. Benjamin Fingerhut am Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie, Berlin in Aufbau. Die Nachwuchsgruppe wird im Emmy Noether Programm der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert, welches Nachwuchswissenschaftlern einen Weg zur frühen wissenschaftlichen Selbständigkeit eröffnen soll. Die wissenschaftliche Zielsetzung des Emmy Noether Projektes umfasst die Entwicklung neuer Simulationsalgorithmen für moderne, zeitaufgelöste Methoden der Schwingungs- und Optischen Spektroskopie. Beide Techniken nutzen unterschiedliche Beobachtungsfenster um eine Echtzeitbeobachtung von ultraschneller Reaktionsdynamik zu ermöglichen. Die entwickelten Simulationsprotokolle sollen dazu beitragen komplexe biomolekulare Dynamik zu untersuchen und ein mikroskopisches Bild von fundamentalen Reaktionsmechanismen zu entwickeln.

Ein Forschungsschwerpunkt liegt hierbei auf dem mikroskopischen Verständnis von elektronischer Anregungsdynamik. Lichtabsorption durch DNA induziert gesundheitsschädliche Fotoschäden wel-

che zu Zelltod und Krebs führen können. Die Natur verwendet spezialisierte Reparaturenzyme, genannt Photolyasen, welche in der Lage sind Fotoschäden zu reversieren und die Integrität des Genoms wieder her zu stellen (als Literaturhinweis siehe Ref. [1-3]). Unser Ziel ist es verschiedene mechanistische Vorschläge durch die Vorhersage experimenteller Observablen, insbesondere charakteristischer Markerbanden in zeitaufgelösten IR, Raman und 2D UV/Vis Signalen, zu quantifizieren. Ein Beispiel stellt der Reparaturmechanismus des Cyclobutan-Pyrimidin-Dimer (CPD) Fotoschadens dar (Ref. 3, Abbildung 1). Der molekulare Mechanismus des zentralen Schrittes, insbesondere der Spaltung der C-C Bindungen, stellt hierbei eine ungelöste Fragestellung dar. In Simulationen konnte nun gezeigt werden wie die Zeitentwicklung charakteristischer Markerbanden von C=O und C=C/C-C' Streckschwingungen des Thymin-Dinucleotid Radikalanions direkt mit Femtosekunden Stimulierter Raman Spektroskopie (FSRS) verfolgt werden kann. Basierend auf Dichtefunktional (M05-2X) Potentialflächen, welche zwei Barrieren für den intradimer C-C' Bindungsbruch aufweisen, konnte das Auftreten zweier C=C Streckmoden als spektroskopische

Signatur des Mechanismus des Bindungsbruches identifiziert werden. Hierbei weist der sequenzielle Mechanismus ausschließlich absorptive Signaturen in FSRS Signalen auf, während der schnelle, konzertierte Mechanismus sich durch charakteristische dispersive Linienformen auszeichnet. Die Echtzeitdetektion der komplexen molekularen Umlagerungen werden in Zukunft auf den Mechanismus der Reparatur des 6-4 DNA Fotoschadens durch Photolyase erweitert werden um transiente Radikalpaar-Intermediate zu charakterisieren. Wir wollen so einen Beitrag zur Beendigung der Kontroverse bezüglich der widersprüchlichen mechanistischen Vorhersagen liefern und ein mechanistisches Verständnis der katalytischen Beiträge des Enzyms Photolyase entwickeln.

Die Forschung der Emmy Noether Nachwuchsgruppe, insbesondere die Vorhersage und Simulation experimenteller Signaturen auf der ultraschnellen Zeitskala, erlauben einen direkten Vergleich zu modernsten, am MBI durchgeführten, zeitaufgelösten Messungen. Zur Kalibrierung der theoretischen Methoden dient hierbei die ultraschnelle Dynamik geladener Phosphat-Ionen in Lösung.

Wir untersuchen Strukturfluktuationen induziert durch Solvatation auf der ultraschnellen Zeitskala. Biochemische Prozesse beinhalten typischerweise die Wechselwirkung von Wasser mit funktionellen Gruppen von Biomolekülen. Geladene Phosphate stellen hierbei einen integralen Bestandteil von Makromolekülen, wie DNA und Phospho-lipiden, dar, in welchen die Hydratation der Phosphat-Gruppen die Stabilität und Struktur der DNA-Doppelhelix und Zellmembran bestimmt. Während Gleichgewichtsstrukturen hinlänglich verstanden sind, besteht erhebliches Interesse in der Untersuchung der ultraschnellen Dynamik. Fluktuationen der Hydratations-Hülle und Schwingungs-energielaxation erfolgen auf der Femto (fs)- bis Pikosekunden (ps) Zeitskala. Ein detailliertes Verständnis dieser Phänomene erfordert die Kenntnis über den Charakter und die

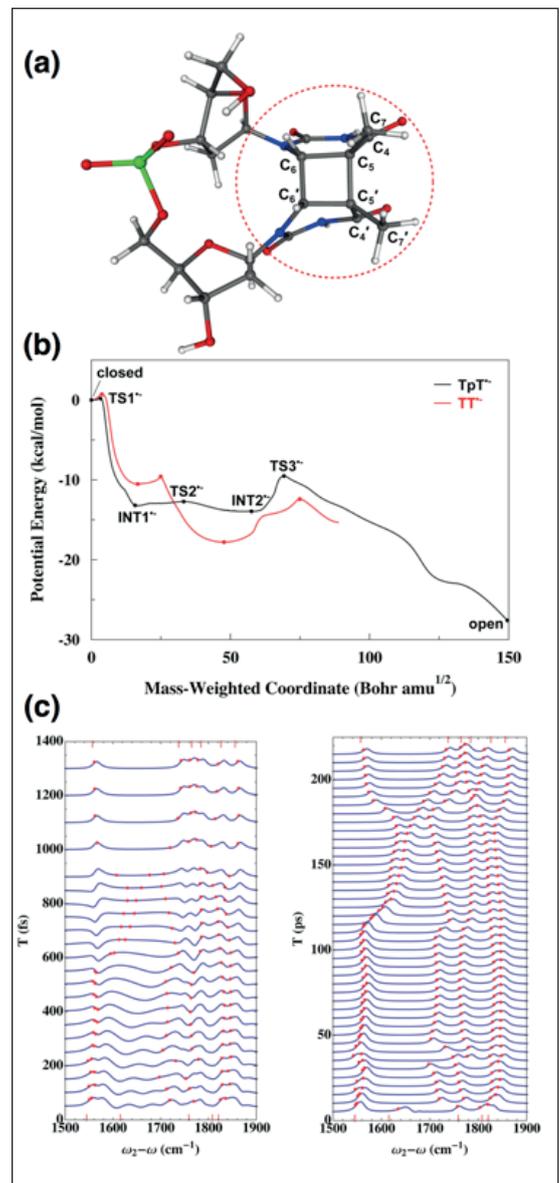


Abbildung 1: Femtosekunden Stimulierte Raman Spektroskopie (FSRS) der Reversion des CPD Fotoschadens: (a) Struktur; (b) M05-2X Potentialfläche mit TS3 als geschwindigkeits-bestimmender Schritt. (c) FSRS Signal des konzertierten (links) und sequentiellen Mechanismus (rechts). Adaptiert aus Ref. 3.

Dynamik von Phosphat-Wasser Wasserstoffbrückenbindungen, welche durch kurzreichweitige Fluktuationen und lang-reichweitige Coulomb-Wechselwirkungen der geladenen Gruppen bestimmt werden. Die beteiligten Kernbewegungen können direkt durch zeit- und frequenz aufgelöste Infrarot-techniken verfolgt werden.

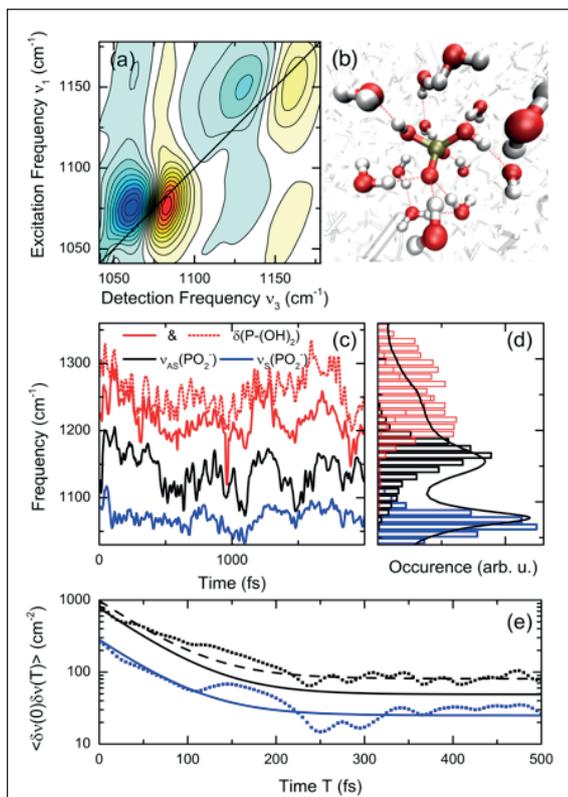


Abbildung 2: Fluktationsdynamik von Phosphat-schwingungen in wässriger Lösung: (a) 2D IR Spektrum der symmetrischen und asymmetrischen PO₂- Streck-schwingung; (b) Struktur; (c,d) simulierte Frequenz-fluktuationen; (e) Frequenz-Korrelationsfunktionen (durchgezogene Linie-Experiment; gepunktet- Simulation). Adaptiert aus Ref. 4.

Kürzlich konnte hierbei durch die Kombination von femtosekunden 2D IR Spektroskopie mit ab-initio Berechnungen und hybrid quanten-klassischer Moleküldynamik gezeigt werden das die Phosphat-Schwingungen als sensitive lokale Probe der strukturellen Fluktuationen von Wasserstoffbrücken in der Hydratationshülle des Ions dienen (Ref. 4, Abbildung 2). Hierbei erlaubt die Frequenz-Korrelations-Funktion, abgeleitet aus experimentellen 2D Spektren und Berechnungen, den direkten Vergleich zwischen Experiment und Theorie mit hoher Genauigkeit. Die Frequenz-Korrelations-Funktion von Phosphaten in wässriger Lösung ist hierbei dominiert durch einen ul-

traschnellen, sub-100 fs Zerfall, induziert durch die libronische Bewegung der umgebenden Hydratationshülle. Der Austausch von Wassermolekülen erfolgt auf einer langsameren, 10 ps Zeitskala. Phosphat- Wasser Wasserstoffbrücken sind somit langlebiger als Wasserstoffbrücken zwischen Wasser Molekülen.

Die theoretischen Entwicklungen des Projektes sollen spektroskopische Signaturen der frühesten mechanistischen Schritte von wichtigen biologischen Prozessen aufdecken. Durch die Verknüpfung von Protein- und Hydrationsstrukturen mit lichtinduzierter Dynamik, soll so ein umfassendes Bild von biomolekularen Reaktionsmechanismen erhalten werden. Interessierte Bachelor- und Masterstudenten können gerne Kontakt zum Nachwuchsgruppenleiter aufnehmen.

Referenzen

- [1] Mechanism of UV-Induced Formation of Dewar Lesions in DNA. K. Haiser, B. P. Fingerhut, K. Heil, A. Glas, T. T. Herzog, B. M. Pilles, W. J. Schreier, W. Zinth, R. de Vivie-Riedle, and T. Carell, *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 408-411 (2012).
- [2] Mechanism of UV-induced Dewar lesion repair catalysed by DNA (6-4) photolyase. B. P. Fingerhut, K. Heil, E. Kaya, S. Oesterling, R. de Vivie-Riedle, and T. Carell, *Chem. Sci.* 3, 1794-1797 (2012).
- [3] Femtosecond Stimulated Raman Spectroscopy of the Cyclobutane Thymine Dimer Repair Mechanism: A Computational Study. H. Ando, B. P. Fingerhut, K. E. Dorfman, J. D. Biggs, and S. Mukamel, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 14801-14810 (2014).
- [4] Ultrafast phosphate hydration dynamics in bulk H₂O. R. Costard, T. Tyborski, B. P. Fingerhut, and T. Elsaesser, *J. Chem. Phys.* 142, 212406 (2015).

VERLEIHUNG DES PEYERIMHOFF- NACHWUCHSPREIS 2016



Frau Prof. Peyerimhoff, Frau Prof. Kirchner und die diesjährigen Preisträgerinnen des Peyerimhoff-Nachwuchspreises. Ob Frau Peyerimhoff den Preisträgerinnen gerade erklärt, wie man in einer Sitzung mit renitenten männlichen Professoren umgeht, ist nicht bekannt.

Für ihre wissenschaftlichen Leistungen wurden die vier junge Chemikerinnen, Theresa Olyschläger, Janin Glänzer, Nabila Rauf Naz und Dr. Rebecca Sure an der Universität Bonn mit dem Sigrid Peyerimhoff-Nachwuchspreis ausgezeichnet. Die Ehrungen wurden am Rande der Tagung „Women in Science @ Spin Centers“ verliehen. Der Peyerimhoff-Nachwuchspreis wurde auf Initiative von Frau Prof. Dr. Barbara Kirchner im Jahre 2015 ins Leben gerufen und jetzt zum zweiten Mal verliehen. Frau Prof. Dr. Kirchner meinte, wenn man Frauenförderung ernst meinen würde, müsse man Frauen dort fördern, wo sie benachteiligt seien. Dies trifft bei der Vergabe von Preisen leider noch immer zu. Frauen sollten

nicht aufgrund ihrer Geschlechterzugehörigkeit gefördert werden, sondern aufgrund dessen nicht benachteiligt werden. Dabei geht es vor allem darum, dass Leistung zählt. Frauenförderung sollte auch die „Besten“ berücksichtigen. Dies kann durch die Vergabe eines Preises, der noch dazu nach einer der renommiertesten europäischen Quantenchemikerinnen, Frau Peyerimhoff, benannt ist, zum Ausdruck gebracht werden.

Der Preis wurde zu Ehren von Prof. Dr. Sigrid Doris Peyerimhoff initiiert, die in den vergangenen 50 Jahren Herausragendes in der Theoretischen Chemie geleistet hat, viele Jahrzehnte an der Bonner Universität forschte und lehrte sowie

mit renommierten Preisen wie dem Gottfried-Wilhelm-Leibniz-Preis ausgezeichnet wurde. „Ihr Name steht synonym für den Erfolg, den Frauen in der Wissenschaft erringen können“, sagt Prof. Vöhringer. „Sie ist damit das ideale Vorbild für alle Frauen, die in der akademischen Forschung tätig sein möchten.“

Prof. Peyerimhoff begrüßt sehr, dass für die jungen Wissenschaftlerinnen ein Forum zur Präsentation ihrer Ergebnisse gefunden wurde und dass einige ihrer hervorragenden Arbeiten von einer internationalen Jury mit einem Preis ausgezeichnet werden. „Ich kann mir vorstellen, dass ein solcher Preis bei manchen auch Motivation ist, um den Weg in die Wissenschaft zu finden – ein Weg, der mir ein Leben lang sehr viel Freude bereitet hat“, sagt Prof. Peyerimhoff.

Neben einer Urkunde erhielten die Doktorandinnen Theresa Olyschläger, Janin Glänzer und Nabila Rauf Naz sowie die Postdoktorandin Dr. Rebecca Sure Preisgelder in Höhe von bis zu 1.500 Euro. Alle gehören zum Sonderforschungsbereich 813 „Chemie an Spinzentren: Konzepte, Mechanismen, Funktionen“ an der Universität Bonn.

Frau Dr. Rebecca Sure erhielt ihren Preis für ihren herausragenden Vortrag zu „On the Potential of Computational Chemistry“.

Die Doktorandin Theresa Olyschläger erhielt ihren Preis für ihren Vortrag zu „Sustainability in Catalytic Radical Arylation of Epoxides – Electrochemical Catalyst Activation and applications“.

Die Doktorandin Janin Glänzer konnte ihren Preis entgegennehmen für ihre Leistungen zum Thema „Analysis of conformational changes in the substrate binding protein of TRAP transporter from *V. cholerae* by PELDOR spectroscopy and X-ray crystallography“.



Prof. Dr. Peyerimhoff im Kreise der Preisträgerinnen 2015 beim Erfahrungsaustausch: Frau Dr. Eva Perl, Alissa Idelson, Elisabeth Vogelsang und Jeanine Gleim. Die Tafelaufschrift deutet daraufhin, dass die Beteiligten über die Berechnung von Vier-Index-Integrale diskutieren. Vermutlich aufgrund der komplexen Formeln ist das gerade verwendete Nachschlagewerk auch etwas dicker.

Die Doktorandin Nabila Rauf Naz erhielt ihren Preis für ihre Leistungen zum Thema „P-TEMPO phosphane tungsten and manganese complexes“.

„Knapp die Hälfte aller am SFB 813 beteiligten Masterstudierenden, Doktoranden und Postdoktoranden sind junge Frauen. Das zeigt, dass die Naturwissenschaft Chemie alles andere als eine reine Männerdomäne ist“, sagt SFB-Sprecher Prof. Dr. Peter Vöhringer vom Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Bonn. Die Projektverantwortlichen wollen sich jedoch auf diesen guten Zahlen nicht ausruhen. „Wir müssen weitere intensivere Anstrengungen unternehmen, um insbesondere bei den Dozenturen und Professuren den Anteil an Wissenschaftlerinnen zu erhöhen“, sagt Prof. Vöhringer.

Die Fotos wurden von Herrn Dr. Oldamur Hollóczy aufgenommen.

NACHRUH

Reinhart Ahlrichs

Am 12. Oktober 2016 verstarb im Alter von 76 Jahren Reinhart Ahlrichs, emeritierter Professor für Theoretische Chemie am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und einer der führenden Wissenschaftler im Gebiet der Theoretischen Chemie in Deutschland und weltweit. Seine Arbeiten haben die Grenzen und Möglichkeiten der Quantenchemie entscheidend erweitert und geprägt. Gleichzeitig brachte er das Zusammenspiel von Theorie und Experiment auf ein neues Niveau.

Reinhart Ahlrichs wurde am 16. Januar 1940 in Göttingen geboren. Er studierte Physik an der Universität Göttingen (Diplom 1965) und wurde dort 1968 bei Professor Werner Bingel promoviert. Nach einem Postdoktorat bei Professor Clemens C. J. Roothaan an der University of Chicago folgte die Habilitation bei Professor Werner Kutzelnigg an der Universität Karlsruhe (TH) (heute Campus Süd des KIT), wo er dann 1975 auch einen Lehrstuhl für Theoretische Chemie erhielt. In den folgenden Jahren entwickelte sich Karlsruhe zu einem der führenden Orte für Theoretische Chemie weltweit. Grund hierfür waren nicht nur die bedeutenden methodischen Entwicklungen der Gruppe von Reinhart Ahlrichs, sondern auch die intensive Interaktion von Ahlrichs mit experimentell arbeitenden Gruppen in Karlsruhe und weltweit. Des Weiteren beteiligte sich Reinhart Ahlrichs auch an kollaborativen Forschungsprojekten (z. B. SFB, Center for Functional Nanostructures) und trat 1998, neben seiner Professur an der Universität, dem neu gegründeten Institut für Nanotechnologie (INT) am Forschungszentrum Karlsruhe (heute Campus Nord des KIT) bei. Er blieb auch über seine Emeritierung 2008 hinaus aktiv.



Reinhart Ahlrichs ist bekannt für seine zahlreichen exzellenten Beiträge zur Theoretischen Chemie, wobei seine Forschungsthemen eine außergewöhnliche Breite abdecken. Es ist hier nicht möglich, all seine Beiträge aufzulisten, eine Vielzahl ist jedoch eng mit der Entwicklung und Anwendung des TURBOMOLE-Programmpakets verknüpft, das heute breite Anwendung in der akademischen und industriellen Forschung findet. Zu Beginn seiner Karriere interessierte sich Ahlrichs für die mathematischen Eigenschaften von Schrödinger-Operatoren, das Verhalten der exakten Wellenfunktion sowie die Struktur intermolekularer Wechselwirkungen. Dem folgten Arbeiten zum Elektronenkorrelationsproblem. Er war an der Entwicklung der Coupled Electron-Pair Approximation (CEPA) beteiligt, und seine Arbeiten zur Elektronenkorrelation fanden ihren

Höhepunkt in der Formulierung der Coupled-Pair-Functional(CPF)-Methode, die das Größenextensivitätsproblem der zu jener Zeit populären Configuration-Interaction(CI)-Methoden umgeht. Durch die Entwicklung der Coupled-Cluster-Methoden wird zwar heutzutage die CPF-Methode nicht mehr verwendet, jedoch erfreut sich die entsprechende Multireferenzvariante ACPF (averaged CPF) nach wie vor großer Beliebtheit und ist eine der Standardmethoden im Multireferenzkontext.

Ein wichtiger Wendepunkt in der Karriere von Reinhart Ahlrichs war seine erste Veröffentlichung (zusammen mit Marco Häser) zur direkten SCF-Methode für die Beschreibung großer Moleküle, in der neue Methoden zu Integralvorabschätzungen, basierend auf dem Cauchy-Schwarz-Kriterium, sowie inkrementelle Methoden zur Konstruktion der Fock-Matrix vorgestellt wurden. Diese Veröffentlichung markiert gleichermaßen das Entstehen des TURBOMOLE-Programmpakets und wendete Ahlrichs' Forschungsinteressen in Richtung großer Moleküle mit einem Fokus auf effiziente (oft integral-direkte) Methoden. Zusätzlich führte er hoch kompakte und gut ausgewogene Basissätze (die sogenannten Karlsruher Basissätze) ein, die heute effiziente und genaue Berechnungen für das ganze Periodensystem ermöglichen.

Nach etwas Zögern begann Ahlrichs 1992 mit Arbeiten zur Dichtefunktionaltheorie (DFT). Seine pragmatische Auffassung war, dass DFT zwar ein nützliches und mächtiges Werkzeug für die genauere Beschreibung großer Moleküle sei, aber – zumindest für ihn – kein Forschungsgebiet an sich. Sein Fokus lag erneut auf der Entwicklung effizienter Implementierungen beispielsweise durch die Verwendung der Resolution-of-Identity(RI)-Näherung, was die Einführung kompakter und genauer Auxiliärbasen einschloss. Dieser pragmatische Ansatz zur Quantenchemie gewährleistete, dass das TURBOMOLE-Programmpaket immer ein mächtiges und kompetitives Werkzeug für chemische Anwendungen blieb.

Reinhart Ahlrichs selbst stand immer in engem Kontakt zu Experimentatoren und war besonders fasziniert von Metall- und anderen anorganischen Clustern. Hier konnte er wichtige Beiträge leisten, die weit über die Quantenchemie hinausreichen, wobei intensive Zusammenarbeiten – immer auf Augenhöhe – mit experimentell arbeitenden Gruppen wie denen von Fenske, Kappes oder Schnöckel von zentraler Bedeutung waren. Seine beeindruckende Fähigkeit, dabei interdisziplinär zu arbeiten und Brücken zwischen Theorie und Experiment zu schlagen, war außergewöhnlich.

Reinhart Ahlrichs formte die Theoretische Chemie auf unterschiedliche Weisen. Es war beeindruckend, wie tief er, der als Physiker ausgebildet war, in das Gebiet der Chemie einzutauchen vermochte. Er erkannte sehr früh, wie wichtig es war, die Theoretische Chemie auch auf zentrale chemische Fragestellungen anzuwenden und so neue und sonst nicht zugängliche Einblicke in das chemische Verhalten zu gewinnen. Große Teile seiner Forschung und insbesondere seine Methodenentwicklungen waren getrieben von den Erfordernissen für die Anwendung quantenchemischer Methoden auf reale chemische Systeme – ein zentrales Motto war hier sicherlich die Entwicklung von „tools, not toys“. Durch dieses frühe Erkennen des gegenseitigen Nutzens von Theorie und Experiment konnte Ahlrichs die Theoretische Chemie in Karlsruhe und auch weltweit als unabhängige und starke Disziplin in der Chemie etablieren, immer auf Augenhöhe mit dem Experiment.

Ahlrichs war nicht nur ein brillanter Wissenschaftler mit herausragenden Fähigkeiten in Physik, Mathematik und Chemie, sondern er war auch ein kritischer Geist mit klaren Meinungen zu vielen Themengebieten. Er war eine außergewöhnlich beeindruckende und inspirierende Persönlichkeit, was – neben seinem wissenschaftlichen Renommee – ihm ermöglichte, immer wieder herausragende Studenten in Karlsruhe um sich zu scharen. Es war die inspirierende und herausfordernde Atmosphäre in Karlsruhe, die viele seiner ehemaligen Mitarbei-

ter prägte, die heute Positionen an Universitäten und in der Industrie einnehmen.

Seine Forschungsbeiträge und seine Bedeutung für die Wissenschaft in Deutschland und weltweit wurden mehrfach durch Auszeichnungen gewürdigt: 1991 wurde er in die Heidelberger Akademie der Wissenschaften gewählt, 1992 wurde er Mitglied der International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS) und 2008 der Göttinger Akademie der Wissenschaften. 1999 erhielt er den Landesforschungspreis des Landes Baden-Württemberg und 2000 die Bunsen-Denkmünze der Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie sowie die Liebig-Denkmünze der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh). Seine letzte Auszeichnung war die Ehrendoktorwürde der Humboldt-Universität zu Berlin im Juli 2015.

Mit Reinhart Ahlrichs verliert die Gemeinschaft nicht nur einen exzellenten Wissenschaftler, sondern auch einen brillanten und kritischen Geist, der

auf bedeutende Weise die moderne Theoretische Chemie in Deutschland und weltweit geformt hat. Die Erinnerung an eine beeindruckende Persönlichkeit und einen herausragenden Wissenschaftler sowie an seine wissenschaftlichen Errungenschaften wird uns immer begleiten.

Jürgen Gauss Johannes Gutenberg-Universität Mainz

Christian Ochsenfeld Ludwig-Maximilians-Universität München

Wir danken der Angewandten Chemie ganz herzlich für die Überlassung des Beitrags

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ange.201611596/full>

NACHRUF

Heinzwerner Preuß

Mit Heinzwerner Preuß (12. September 1925 – 29. Oktober 2016) hat die deutsche Community der Theoretische Chemie einen Pionier der Zeit nach dem 2. Weltkrieg verloren. Das Team TC Info Würzburg widmet Heinzwerner Preuß diesen kurzen Nachruf, um sein wissenschaftliches Werk und seine Beiträge zur Anerkennung der Theoretischen Chemie in Deutschland zu würdigen.

Wie fast alle Theoretischen Chemiker der damaligen Zeit studierte Heinzwerner Preuß Physik (Diplom 1951). Er interessierte sich aber für die Quantenchemie und promovierte 1954 bei Wilhelm Lenz in Hamburg über das quantenchemische Thema: Zweizentrensysteme mit beliebigen Kernladungszahlen und Abschätzungsverfahren für Austauschintegrale. Sein Interesse an quantenchemischen Fragestellungen wird vom Web of Science belegt, das als seine erste Arbeit eine Publikation in der Zeitschrift für Physik von 1951 zur Berechnung des Grundzustandes des H₂-Moleküls angibt.[1] Die zweite Arbeit, vom Web of Science auf 1953 datiert, beschäftigt sich bereits mit der Abschätzung von Integralen, dem Thema seiner Doktorarbeit mit dem sich Heinzwerner Preuß internationale Anerkennung verdiente.[2] So publizierte er im Springer Verlag vier Bücher zu den Integraltafeln zur Quantenchemie. Um zu einfacheren Integraltypen zu gelangen, diskutierte Heinzwerner Preuß 1956 die von Boys eingeführten Gaussfunktionen im Zusammenhang mit dem SCF und dem CI-Ansatz.[3] Ein Studium dieser Arbeiten zeigt deutlich wie die vielen, auch auf Heinzwerner Preuß zurückgehenden Fortschritte in den quantenchemischen Algorithmen das tägliche Arbeitsleben einer Theoretischen Chemikerin oder Chemikers verändert hat. Welchen exzellenten Ruf Heinzwerner Preuß in der internationalen Community hat, wird aus der



folgenden Erzählung deutlich. Als ein Doktorand auf eine internationale Tagung gehen wollte, trug ihm Herr Preuß auf, Herrn Prof. Parr Grüße auszurichten. Als der Doktorand dem kürzlich ebenfalls verstorbene Herr Prof. Parr die Grüße ausrichtete, sagte dieser: „Preuss! Wir waren die Pioniere!“

In seinem beruflichen Werdegang ging Heinzwerner Preuß zunächst an das Max-Planck-Institut nach Göttingen und zog 1958 mit ihm nach München um. Er habilitierte 1961 bei Hermann Hartmann in Frankfurt, arbeitete aber weiterhin am Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik in München. 1969 erfolgte sein Ruf als Direktor des durch seine Initiative neu gegründeten Instituts für Theoretische Chemie an der Universität Stuttgart. Diese Stelle hatte er bis zu seiner Emeritierung 1993 inne.

In Stuttgart baute Heinzwerner Preuß ein weltweit hochangesehenes Team auf, das einige essentielle Elemente der Quantenchemie entweder selbst entwickelte oder zumindest doch maßgeblich zur

Entwicklung beitrug. Zu nennen sind hier Entwicklungen zur relativistischen Quantenchemie, die Pseudopotentiale, die Dichtefunktionaltheorie oder Ansätze zur Illustration von Bindungsphänomenen. Dies zeigt, dass Heinz Werner Preuß es ausgezeichnet verstand junge, exzellente Forscher anzuziehen, sie hervorragend auszubilden und zu außergewöhnlichen Arbeiten zu motivieren. Dass er an der Lehre über alle Maßen interessiert war, zeigen die von ihm verfassten Lehrbücher, die er bereits in den sechziger Jahren veröffentlichte.[4] Zudem ging Heinz Werner Preuß über die „bloße Naturwissenschaft“ hinaus und beschäftigte sich damit, wie die Quantenmechanik Ethik und Weltbild beeinflusst.[5]

[1] H. Preuss, Zeitschrift Für Physik 1951, 130, 239-241.

[2] H. Preuss, Z. Naturforsch. Sect. A-J. Phys. Sci. 1953, 8, 270-272.

[3] H. Preuss, Zeitschrift Für Naturforschung Part a-Astrophysik Physik Und Physikalische Chemie 1956, 11, 823-831.

[4] a) H. Preuss, Quantentheoretische Chemie I, Bibliographisches Institut, Mannheim, 1963; b) H. Preuss, Quantentheoretische Chemie II, Bibliographisches Institut, Mannheim, 1965; c) H. Preuss, Quantentheoretische Chemie Band III, Bibliographisches Institut, Mannheim, 1967.

[5] a) H. Preuss, Materie ist nicht materiell: Die Bedeutung der Quantenchemie für unser Denken und Handeln, Vieweg, 1997; b) H. Preuss, Das Atom und die Ethik: Über eine Ethik und ein Weltbild als Konsequenz aus unserer naturwissenschaftlichen Erkenntnis, LIT, 2009.

INTERVIEW

mit Dr. Judith B. Rommel

Frau Rommel - wer sind Sie und wo arbeiten Sie im Moment?

Seit Abschluss meiner Doktorarbeit bin ich Research Fellow am Department of Chemistry der Universität Cambridge. Research Fellows forschen hier in England unabhängig und eigenständig; ihnen stehen eigene Forschungsmittel zur Verfügung. Meine ersten Fördergelder verlieh mir die Alexander-von-Humboldt-Stiftung in Form eines Fedor-Lynen-Stipendiums. Anschließend konnte ich ein Knowledge-Transfer-Fellowship des Engineering-and-Physical-Sciences-Research-Council (EPSRC), dem britischen Gegenstück zur Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), einwerben. Dieses Fellowship ermöglicht mir eine Kooperation mit der Firma Dassault Systèmes BIOVIA. Außerdem wurde ich als Fellow des St. Edmund's Colleges in Cambridge nach einem kompetitiven Auswahlprozess ausgezeichnet. Zur Universität Cambridge zählen 31 Colleges, welche für die Ausbildung ihrer Studenten verantwortlich sind. Über meine Forschung hinaus bin ich als Fellow auch Mitglied im Leitungsgremium des Colleges.

Was ist das Besondere an Ihren aktuellen Projekten?

Alle meine Projekte sind multidisziplinär ausgerichtet. Insbesondere interessiert mich, wie Simulationen, die mehrere Längen- und Zeitskalen koppeln, zuverlässige Vorhersagen hervorbringen können. Außerdem bin ich davon überzeugt, dass durch die aktuelle Debatte über Wahrheit, postfaktische Informationen und das Vertrauen in Wissenschaft jedes Forschungsfeld dringend eine ehrliche Reflexion und offene Debatte über die eigenen Qualitätsstandards braucht [1].



Dr. Judith B. Rommel

Ein Aspekt meiner Forschung ist die Frage danach, wie mit Unsicherheiten verschiedenen Ursprungs in Simulationen gut umgegangen werden kann. Abb. 1 zeigt eine Möglichkeit, wie Algorithmen quantitativ bewertet werden können. Besonders relevant ist ein systematisches Herangehen an Qualitätskontrolle und Risikobewertung, wenn Simulationsergebnisse über mehrere Zeit- oder Längenskalen hinweg ausgetauscht werden.

Industriezweige, in denen Konstruktion, Entwicklung und Validierung von Materialien im Nanobereich eine Rolle spielen, oder in denen die Einschätzung der Toxizität von Nanomaterialien und Medikamenten wichtig ist, haben großes Interesse an diesen Fragestellungen aus Perspektive der Computerchemie. Außerdem zeichnet mich eine umfassende Expertise in Multiskalensimulationen aus: (a) QM/MM (Quanten-/Molekular-Mechanik) Simulationen von Enzymen [7,8,12], (b) Entwicklung von Methoden zur einheitlichen Bestimmung von Tunnelraten im klassischen und im quantenmechanischen Regime [5,6,9,10,11],

Verknüpfung von Modellen im Femto- und Nanosekundenbereich, um Chemisorption, Kinetik und Selbstassemblierung von organischen Molekülen auf Metallen zu untersuchen [2], Abb. 2.

Wie geht es weiter für Sie als Forscherin?

In den letzten drei Jahren ist mein thematischer Fokus stark von Enzymen und Tunnelraten, die Gegenstand meiner Doktorarbeit waren, abgerückt. Für die Zukunft suche ich momentan nach Wegen und Möglichkeiten, eine eigene Arbeitsgruppe im Bereich Validierung, Unsicherheitsanalyse und Risikobewertung von Multiskalenmodellen [1] aufzubauen.

Die Bandbreite meiner aktuellen Forschung reicht von Elektronenstrukturrechnungen und atomistischen Modellen bis hin zu Flugzeugsimulationen [4]. Hierbei ist es von großer Wichtigkeit, Herangehensweisen zu entwickeln, mit denen die Qualität chemischer Modelle geprüft [3] werden kann, um diese dann für die Konstruktion und Entwicklung von Nanotechnologien zu verwenden. Hier sind besonders Fragen der Werkstoffermüdung oder Fehlfunktion unter bestimmten Umweltbedingungen faszinierend, die Modelle und Simulationen über mehrere Längen- und Zeitskalen hinweg erfordern.

Ein Herzenthema, das mich schon lange immer wieder fesselt, ist die Frage, wie Menschen mit Materialien der Nanomedizin und unsichtbaren Umwelteinflüssen interagieren. Welche Risiken ergeben sich durch den Einfluss physikochemischer Eigenschaften kleiner Moleküle oder organisch-anorganische Interaktionen auf makromolekularer, zellulärer oder gesamt physiologischer Ebene menschlicher Körper? Hieran reizt mich besonders, Mechanismen der Nanotoxizität über mehrere Längenskalen zuverlässig aufzuklären. Forschung an Bionano-Schnittstellen ist für mich eine spannende Herausforderung, die wunderbar meinen großen Erfahrungsschatz und mein breites Wissen aus Quantenchemie, Mathematik, Ingenieurwissenschaften und Biologie kombiniert.

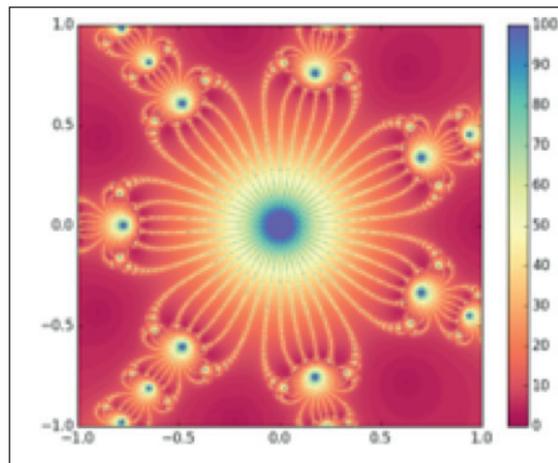


Abb. 1: Anzahl der Iterationen bis zur Konvergenz eines Algorithmus je nach Startwert in der komplexen Zahlenebene [1].

Sie sind auf einem recht ungewöhnlichen Weg mit Erfahrungen als Lehrerin an einem Gymnasium in die Theoretische Chemie gekommen. Was war ausschlaggebend für Ihre berufliche Neuorientierung und den Eintritt in die Forschung?

Stimmt. Mein erster universitärer Abschluss ist ein Staatsexamen für höheres Lehramt in Mathematik und Biologie der Universität Ulm. Mehr als ein Jahr lang habe ich diese beiden Fächer an einem Gymnasium unterrichtet. Ausschlaggebend für die Neuorientierung war die Erkenntnis, dass ein schulisches Umfeld meinen Zielen und Kenntnissen und besonders meiner Persönlichkeit nicht gerecht wird.

Da ich ständig voller Ideen und Pläne stecke, ist es essentiell für mich, Neues auszuprobieren und Dinge zu entwickeln oder zu verbessern — also zu ‘forschen’ und meiner Neugierde freien Lauf zu lassen. Trotz meiner frühen Erfolge bei ‘Jugend Forscht’ habe ich mich doch dahingehend beeinflussen lassen, den besonders für Frauen ‘klassischen’ Weg einer Lehrerkarriere einzuschlagen. Geplant war ursprünglich eine externe Promotion in numerischer Mathematik parallel zur schulischen Lehrtätigkeit. Anfang 2009 bin ich jedoch zufällig über die für mich perfekte Stelle bei Johannes Kästner gestolpert, die das Wissen aus

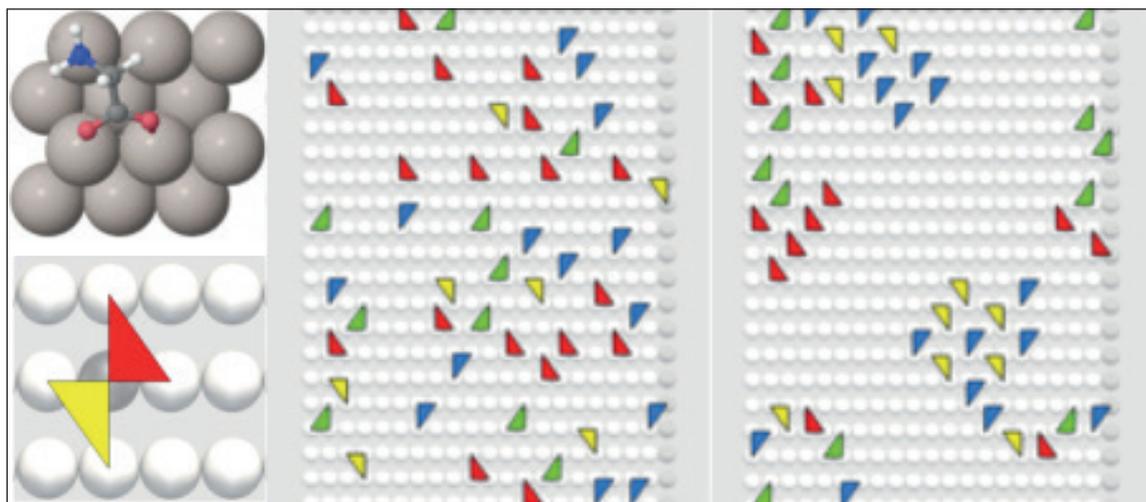


Abb. 2: Kinetik und Selbstassemblierung von Glyzin auf Cu(110).

meinen beiden Studienfächern sehr gut vereinen ließ. Zwischen unserem ersten Gespräch und meiner Zusage lag knapp eine Woche. Diesen Wechsel und ‘Sprung ins kalte Wasser’ habe ich seither nie bereut.

Wo sehen Sie die Zukunft des Faches Theoretische Chemie?

Wir leben in einer spannenden Zeit und sind im Moment mitten in einer rapiden Entwicklung von Informationstechnologie und Simulationstechniken. In 10 Jahren werden die meisten Chemiker ihre Experimente zunächst am Computer modellieren und erst anschließend im Labor durchführen, um existierendes Wissen zu nutzen und um Unbekanntes vorherzusagen. Theoretische Modellierung und Simulation chemischer Reaktionen wird eine eng mit Experimenten verknüpfte Spitzentechnologie sein. Damit stehen folgende Aufgaben im Raum:

- A. Zuverlässige Automatisierung von regelmäßig anfallenden Prozessen der Modellbildung.
- B. Breite Verfügbarkeit von nutzerfreundlichen Simulationsprogrammen.
- C. Entwicklung neuer Methoden und Simulationsmodelle zur Abschätzung von Unsicherheiten in den berechneten Vorhersagen und zur Messung bzw. Kontrolle der Qualität der Ergebnisse.

Das Meistern dieser Herausforderungen wird das Fach Chemie und seine verwandten Disziplinen stark beeinflussen. Auf Basis computergestützter Vorhersagen wird es möglich sein, gezielt Moleküle und Materialien mit ganz bestimmten Eigenschaften zu entwickeln und anschließend im Labor herzustellen. Zuverlässige Interaktionen mit Computersimulationen chemischer Systeme, die auf solide validierten Modellen inklusive Unsicherheitsanalyse und Risikobewertung basieren, werden in Entscheidungsprozessen von Firmen präsent sein. Nanomaterialien, die eine garantierte Produktlebenszeit haben und innerhalb eines bestimmten Zeitraums für Menschen und Umwelt unschädlich nutzbar sind, können dann direkt durch berechnete Vorhersagen entwickelt werden.

Wo werden wir Dr. Judith Rommel in 5 Jahren begegnen?

Das ist mit Abstand die schwierigste aller hier gestellten Fragen. Natürlich würde es mich freuen, eine Chance zu bekommen, die es mir ermöglicht an der Zukunft der Theoretischen Chemie in Deutschland mitzuwirken, da sie von Haus aus ein sehr interdisziplinär orientierter Fachbereich ist.

Persönlich möchte ich auf jeden Fall in Europa leben und ich wünsche mir einen Ort, der Raum für

interkulturellen und fachübergreifenden Austausch bietet, an dem sich ein gutes Team mit interessanten und begeisterungsfähigen Menschen finden lässt — und der die Umsetzung von aufregenden Ideen unterstützt.

Eine letzte Frage: Welches ist für Sie das beste Getränk zum Forschen — Kaffee oder Tee?

Das weltweite Lieblingsgetränk Tee ist mir in England dank der täglichen ‘Tea Time’ zur guten Gewohnheit geworden. Das Aufgießen mit sprudelnd heißem Wasser gehört mit zur echten englischen Teezeremonie. Im Gegensatz zu vielen Briten schmeckt mir schwarzer Tee allerdings besser ohne Milch.

(1) J. B. Rommel. From Prescriptive to Predictive: Risk Assessment and Quality Control in Computational Chemistry. Submitted, 2017.

(2) J. B. Rommel and D. J. Wales. Kinetics of Molecular Diffusion and Self-Assembly: Glycine on Cu(110). Submitted, 2017.

(3) J. B. Rommel. Reliable and Predictive Multi-scale and Multi-physics Simulations: From Atoms and Electrons to Airplanes. in preparation, 2017.

(4) J. B. Rommel. Density Embedding Methods: Quality Control and Efficiency for Large Metal Clusters. in preparation, 2017.

(5) A. N. Beyer, J. O. Richardson, P. J. Knowles, J. B. Rommel, and S. C. Althorpe. Quantum Tunnelling Rates of Gas-Phase Reactions from On-The-Fly Instanton Calculations. *J. Phys. Chem. Lett.*, 7:4374, 2016.

(6) Y. Zhang, J. B. Rommel, M. T. Cvitaš, and S. C. Althorpe. Shallow-Tunnelling Correction Factor for Use With Wigner–Eyring Transition-State Theory. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16:24292, 2014.

(7) E. Abad, J. B. Rommel, and J. Kästner. Reaction Mechanism of the Bicopper Enzyme Peptidylglycine-Hydroxylating Monooxygenase. *J. Biol. Chem.*, 289:13726, 2014.

(8) J. B. Rommel, Y. Liu, H.-J. Werner, and J. Kästner. The Role of Tunneling in the Enzyme Glutamate Mutase. *J. Phys. Chem. B*, 116:13682, 2012.

(9) J. Meisner, J. B. Rommel, and J. Kästner. Kinetic Isotope Effects Calculated with the Instanton Method. *J. Comput. Chem.*, 32:3456, 2011.

(10) J. B. Rommel and J. Kästner. Adaptive Integration Grids in Instanton Theory Improve the Numerical Accuracy at Low Temperature. *J. Chem. Phys.*, 134:184107, 2011.

(11) J. B. Rommel, T. P. M. Goumans, and J. Kästner. Locating Instantons in Many Degrees of Freedom. *J. Chem. Theory Comput.*, 7:690, 2011.

(12) J. B. Rommel and J. Kästner. The Fragmentation–Recombination Mechanism of the Enzyme Glutamate Mutase Studied by QM/MM Simulations. *J. Am. Chem. Soc.*, 133:10195, 2011.

ARBEITSGRUPPE BARTH

Arbeitsgruppen stellen sich vor

KONTAKT

Dr. Ingo Barth (taub)

Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik,
Weinberg 2, 06120 Halle (Saale)

www.mpi-halle.mpg.de/MPRG_CCQD
barth@mpi-halle.mpg.de

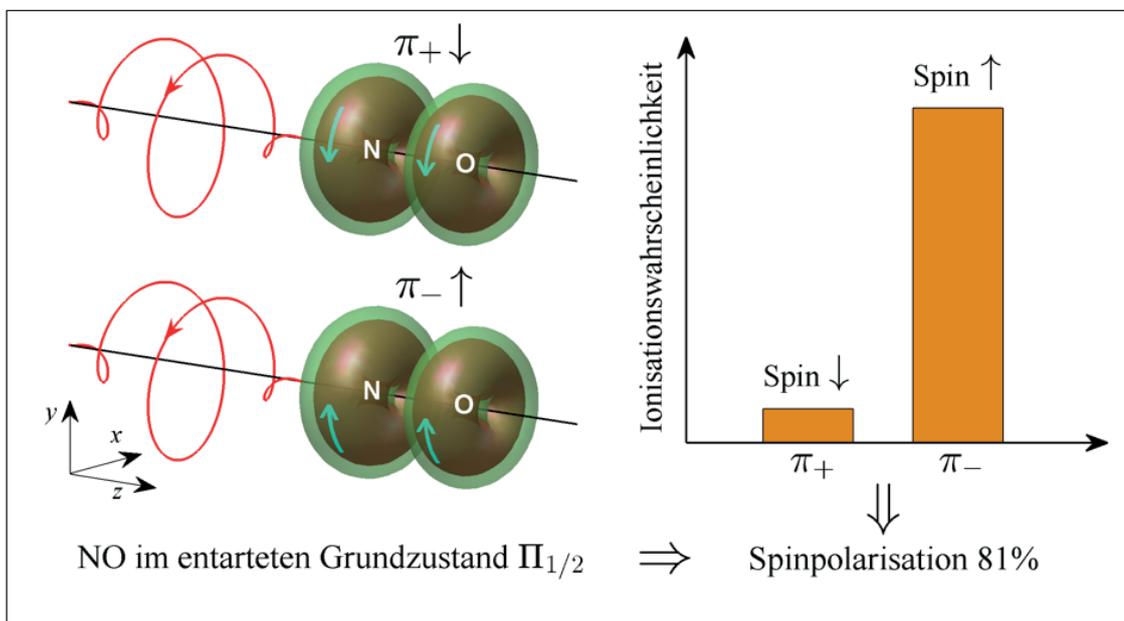


Dr. Ingo Barth

Die unabhängige Max-Planck-Forschungsgruppe „Stromtragende Quantendynamik“, engl.: „Current-Carrying Quantum Dynamics“ (CCQD), unter der Leitung des tauben Wissenschaftlers Dr. Ingo Barth, wurde im Ende des Jahres 2014 am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik in Halle (Saale) aufgebaut. Diese Gruppe betreibt aktuell drei Forschungsbereiche: Ionisationsdynamik in starken zirkular polarisierten Laserfeldern, Analyse und Kontrolle von elektronischen und nuklearen Strömen und Entwicklung und Dokumentation von MINT-Fachbegriffen in Deutscher Gebärdensprache.

Vor ein paar Jahren wurde die Theorie der nicht-adiabatischen Tunnelionisation von entarteten elektronischen Valenzorbitalen der Edelgasatome in starken zirkular polarisierten Laserfeldern [1, 2] entwickelt. Diese Theorie sagt voraus, dass p Elektronen, die im Anfangszustand gegenläufig zum Laserfeld rotieren, durch eine laserinduzierte Potentialbarriere besser tunneln als p Elektronen, die ursprünglich mit dem Laserfeld rotieren. Das heißt, im rechts zirkular polarisierten Laserfeld werden stromtragende p- Valenzorbitale bevorzugt ionisiert. Im adiabatischen Grenzfall, bei dem das Laserfeld nicht mehr rotiert und oszilliert, sind die Ionisationswahrscheinlichkeiten für p- und

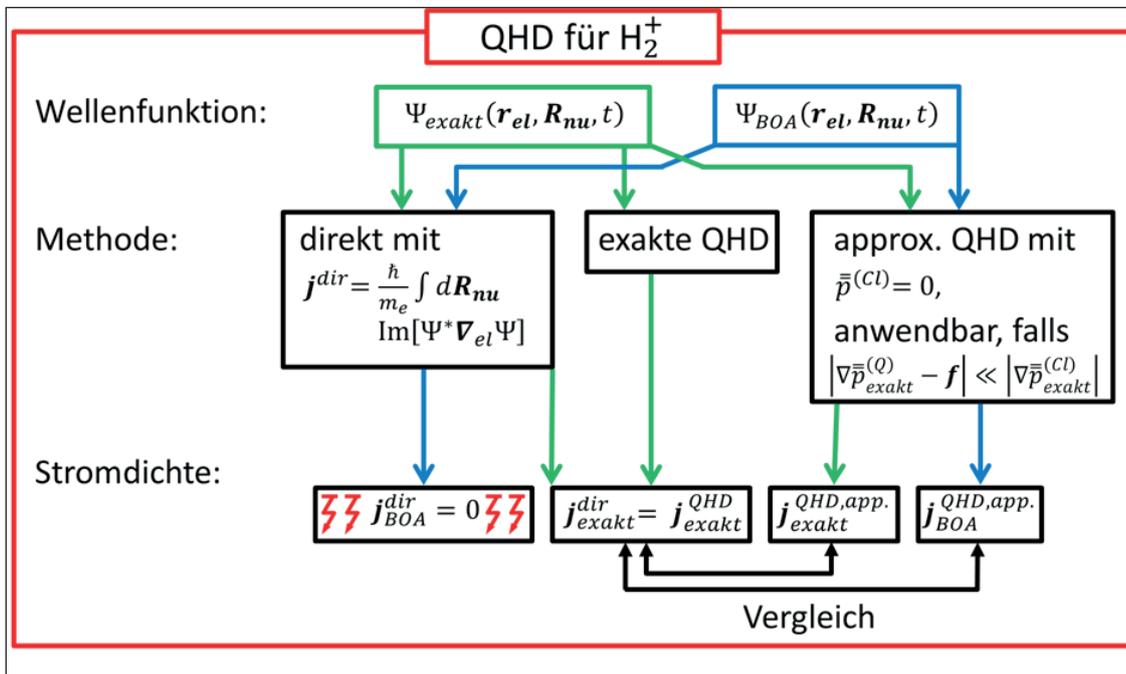
p+ Valenzorbitale erwartungsgemäß gleich. Diese theoretische Voraussage wurde durch numerische Simulationen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung für das zweidimensionale Neon-Modellatom [3] und durch Doppelpuls-Experimente der sequentiellen Doppelionisation von Argon teilweise [4, 5] bestätigt. In unserer Forschungsgruppe haben wir vor kurzem die Theorie der nicht-adiabatischen Tunnelionisation von entarteten Valenzorbitalen der linearen Moleküle weiter entwickelt. Es stellt sich heraus, dass die Formel für das Verhältnis der Ionisationsraten für π^+ und π^- Molekülorbitale genau gleich der Formel für das Verhältnis der Ionisationsraten für p- und p+ Atomorbitale ist. Dabei haben wir numerische Simulationen zum Lösen der zeitabhängigen dreidimensionalen Schrödinger-Gleichung für ein Valenzelektron im entarteten π Orbital des linearen NO-Moleküls für verschiedene Parameterwerte des starken zirkular polarisierten Laserfeldes ausgeführt [6]. Die numerischen Ergebnisse stimmen im Ganzen mit den theoretischen Ergebnissen überein. Dabei gibt es beobachtbare Abweichungen, die durch Orbitalmodifikationen im starken



Laserfeld, nicht-adiabatische Coulomb-Effekte und transiente elektronische Übergänge hervorgerufen werden können. Die folgende Abbildung zeigt die Tunnelionisation der beiden $\pi+$ und $\pi-$ Orbitale des vorher orientierten NO-Moleküls im starken rechts zirkular polarisierten Laserpuls (3 Zyklen, 400 nm, $1.8 \cdot 10^{14}$ W/cm²). Somit ionisiert der rechts zirkular polarisierte Laserpuls ganz bevorzugt das π Orbital des NO-Moleküls. Ferner ist der Grundzustand $\Pi_{1/2}$ des NO-Moleküls aufgrund der vorhandenen Spin-Bahn-Kopplung doppelt entartet und hat mit zwei möglichen magnetischen Quantenzahlen $m_j = +1/2$ und $m_j = -1/2$ zwei verschiedene elektronische Konfigurationen für das Valenzorbital $\pi+\downarrow$ (mit dem Spin nach unten) und $\pi-\uparrow$ (mit dem Spin nach oben). Weil das Valenzorbital $\pi-$ bevorzugt ionisiert wird, wird durch diese Spin-Bahn-Korrelation das Elektron mit Spin bevorzugt entfernt. Daher können spinpolarisierte Photoelektronen durch Tunnelionisation nicht nur in Atomen [7,8], sondern auch in Molekülen produziert werden. In diesem Beispiel beträgt die Spinpolarisation 81%. Ferner kann die Spinpolarisation nicht nur durch starke Laserfelder, sondern auch durch Vorauswahl des entarteten Grundzustandes in Bezug auf die magnetische Quantenzahl kontrolliert werden. In naher Zu-

kunft werden wir die Tunnelionisation von entarteten stromtragenden Orbitalen in ringförmigen Molekülen und auch in chiralen Molekülen der Symmetrie C_n oder D_n ($n > 2$) in starken zirkular polarisierten Laserfeldern untersuchen, wobei die Tunnelionisation in solchen chiralen Molekülen uns weitere Informationen über die Chiralität des Moleküls liefern kann. Das werden wir im Rahmen des von mir und Prof. J. Berakdar durchgeführten Projektes „Laser-maßgeschneiderte, ultraschnelle Spin-aufgelöste Dynamik in chiralen/helikalen Molekülen“ im DFG-Schwerpunktprogramm „Quantendynamik in maßgeschneiderten intensiven Laserfeldern“ (QUTIF), bei dem sich die beiden Disziplinen Starkfeldphysik und Theoretische Chemie treffen, in Zusammenarbeit u.a. mit Prof. M. Lein, Dr. O. Smirnova, Prof. R. Dörner und Prof. M. Drescher untersuchen.

Im Rahmen des zweiten Forschungsgebietes der Gruppe, der Analyse und Kontrolle von elektronischen und nuklearen Strömen, befassen wir uns momentan mit der Fragestellung, wie die elektronische Stromdichte in einem vibrierenden H_2^+ -Molekül im elektronischen nicht-entarteten Grundzustand über eine mit der Born-Oppenheimer-Approximation (BOA) bestimmte Wellenfunktion berechnet werden kann. Es ist ein altbe-



kanntes Problem, dass diese Fragestellung nicht in trivialer Weise mit der aus Lehrbüchern bekannten Formel für die Berechnung einer Stromdichte aus einer Wellenfunktion gelöst werden kann, weil die reelle elektronische BOA-Wellenfunktion zu einem Verschwinden der elektronischen Stromdichte führt. Nur die Berechnung von elektronischen Strömen durch bestimmte Flächen in der Molekülgeometrie ist über die Kontinuitätsgleichung möglich [9]. In unserer Gruppe wird zur Lösung dieses Problems an einem alternativen Verfahren gearbeitet, das auf der Quantenhydrodynamik (QHD) beruht (siehe auch das abgebildete Diagramm): In Analogie zu der Kontinuitätsgleichung und der Impulsbilanzgleichung in der klassischen Hydrodynamik können in der Quantenmechanik entsprechende partielle Differentialgleichungen (QHD-DGLs) definiert werden [10, 11]. In die QHD-DGLs gehen folgende Größen ein: Die gesuchte über alle Kernkonfigurationen gemittelte elektronische Wahrscheinlichkeitsstromdichte \mathbf{j} sowie die auf das Elektron wirkende und in derselben Weise gemittelte Coulombkraftdichte \mathbf{f} , die elektronische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ρ , das Betragquadrat der gesamten Wellenfunktion $|\Psi|^2$ und eine Größe \mathbf{u}_{el} , die als fluktuierender Anteil der Geschwindigkeit

des Elektrons aufgefasst werden kann. Hierbei ist mit der Mittelung über alle Kernkonfigurationen gemeint, dass dabei all diejenigen Kernkonfigurationen berücksichtigt werden, die an demjenigen Zeitpunkt auftreten, für den die genannten Größen berechnet werden. Damit die elektronische Stromdichte \mathbf{j} zu einem bestimmten Zeitpunkt bestimmt werden kann, werden die QHD-DGLs mittels des iterativen Verfahrens gelöst. Man kann bei Anwendung der BOA die Größen ρ_{BOA} und für ein vibrierendes H₂⁺-Molekül im elektronischen Grundzustand in guter Näherung leicht berechnen, aber $\mathbf{u}_{el, \text{BOA}}$ verschwindet. Da man i. A. die drei Größen ρ , $|\Psi|^2$ und \mathbf{u}_{el} benötigt, um mit den QHD-DGLs die elektronische Stromdichte \mathbf{j} bestimmen zu können, kann man in der BOA mit diesen Differentialgleichungen die Stromdichtenbestimmung nur bei Vorliegen der folgenden Situation durchführen: Die Approximation, dass man von abhängige Beiträge in den QHD-DGLs gegenüber anderen Beiträgen vernachlässigen kann, ist zulässig. Man kann eine Bedingung herleiten, für deren Erfüllung diese Approximation korrekt ist: In den QHD-DGLs tritt ein Drucktensor \mathbf{p} auf, zu dessen Interpretation eine Veröffentlichung in Vorbereitung ist [12]. Der Drucktensor \mathbf{p} kann in zwei Summanden zerlegt

werden. Der erste Summand ist in der im Limes $\hbar \rightarrow 0$ verschwindende Quantendrucktensor $\underline{p}^{(Q)}$. Der zweite Summand ist der im Limes $\hbar \rightarrow 0$ nicht verschwindende klassische Drucktensor $\underline{p}^{(Cl)}$, der das dyadische Produkt $\underline{u}_{el} \otimes \underline{u}_{el}$ des Vektors \underline{u}_{el} enthält und für $\underline{u}_{el} = 0$ verschwindet. In den QHD-DGLs treten ausschließlich für $\underline{p}^{(Cl)}$ Abhängigkeiten von \underline{u}_{el} auf, so dass die Approximation, von \underline{u}_{el} abhängige Beiträge in den QHD-DGLs zu vernachlässigen, äquivalent zu der Näherung $\underline{p}^{(Cl)} = 0$ ist. Man erhält unter Berücksichtigung der Form der QHD-DGLs, dass die Näherung $\underline{p}^{(Cl)} = 0$ gut ist, sofern für eine Berechnung mit der exakten Wellenfunktion Ψ_{exakt} des Systems als Bedingung die Ungleichung $|\underline{p}^{(Q)}_{\text{exakt}} - \underline{f}| \ll |\nabla \underline{p}^{(Cl)}_{\text{exakt}}|$ erfüllt ist. Ist dies der Fall, kann man mit den QHD-DGLs auch für Analysen mit der in der BOA approximierten Wellenfunktion Ψ_{BOA} die elektronische Stromdichte $\mathbf{j}^{\text{QHD,app}}_{\text{BOA}}$ in guter Näherung bestimmen. Wir beabsichtigen nun für verschiedene vibronische Wellenpakete im elektronischen Grundzustand des H_2^+ -Moleküls die Bedingung zu überprüfen und für deren Erfüllung per Lösen der QHD-DGLs in der BOA die so genäherte elektronische Stromdichte zu bestimmen. Für das H_2^+ -Molekül sind Verfahren bekannt, mit dem die exakte Wellenfunktion bestimmt werden kann [13], und unser Kooperationspartner Prof. J.-P. Karr stellt unserer Gruppe mit derartigen Verfahren berechnete exakte Wellenfunktionen Ψ_{exakt} zur Verfügung. Somit ist erstens eine Überprüfung der angesprochenen Bedingung möglich und zweitens können wir die elektronische Stromdichte \mathbf{j} auch außerhalb der BOA bestimmen, indem wir mit Ψ_{exakt} entweder die QHD-DGLs ohne die Näherung $\underline{p}^{(Cl)} = 0$ lösen oder die Stromdichtenberechnung \mathbf{j} einfach direkt über das Lehrbuchverfahren durchführen. Die so erhaltenen Ergebnisse für innerhalb und außerhalb der BOA können zur Kontrolle miteinander verglichen werden.

Ein weiteres Tätigkeitsfeld, mit dem sich die Gruppe im Rahmen der Analyse von elektronischen und nuklearen Strömen befassen möchte, ist die

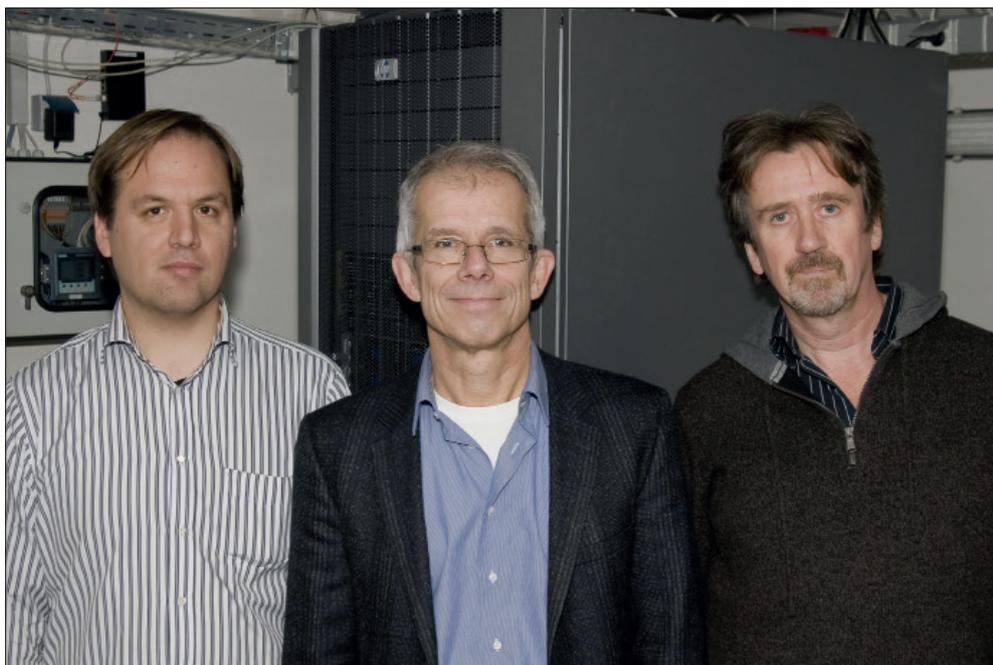
Berechnung von elektronischen und nuklearen Ringströmen sowie induzierter Magnetfelder für Moleküle unterschiedlicher Größe, die mit zirkular polarisierten Laserpulsen kontrolliert werden können. Dabei sollen nicht nur elektronisch angeregte, entartete Zustände betrachtet werden, sondern auch im elektronischen Grundzustand entartete Zustände von Molekülen, die elektronische Ringströme tragen. Außerdem sollen mit der Dirac-Gleichung auch durch den Spin induzierte Stromdichten berechnet werden. Insbesondere wollen wir in diesem Kontext die bezüglich des Spins entarteten $1s$ Orbitale des Wasserstoffatoms betrachten, die keine durch die Bahn induzierten Ringströme aber durch den Spin induzierte Ringströme aufweisen, weil für den Elektronenspin die magnetische Quantenzahl nicht Null ist. Die Kontrolle derartiger langlebiger, spininduzierter und emissionsfreier Ringströme ist eine interessante Herausforderung, die unsere Gruppe angehen möchte.

Gemäß der im Jahr 2008 in Kraft getreten UN-Behindertenrechtskonvention haben taube Studenten das Recht auf inklusive Hochschulbildung. Diese Inklusion fördert taube Studenten, unter anderem durch Verwendung von Fachgebärden in den MINT-Fächern (Mathematik, Informatik, Naturwissenschaft, Technik), durch Einsatz von Gebärdensprachdolmetschern bei den Lehrveranstaltungen und durch Einführung der inklusiven MOOCs (Massive Open Online Courses), in denen nicht nur akustische, sondern auch visuelle Materialien mit Gebärdensprache und Untertitel enthalten sind. Die von Dr. Barth organisierten MINT-Workshops für taube Naturwissenschaftler, Mediziner und Akademiker und auch für MINT-Gebärdensprachdolmetscher fanden zwischen den Jahren 2015 und 2017 bereits viermal statt und es sollen weitere MINT-Workshops folgen. In Zusammenarbeit mit anderen tauben Wissenschaftlern aus Deutschland und anderen Ländern sollen Fachvokabulare in Deutscher Gebärdensprache und Internationalen Gebärden weiterentwickelt, auf Videos dokumen-

tiert und schließlich im Internet veröffentlicht und verbreitet werden.

Literatur

- [1] I. Barth, O. Smirnova, Phys. Rev. A 84, 063415 (2011)
- [2] I. Barth, O. Smirnova, Phys. Rev. A 87, 013433 (2013)
- [3] I. Barth, M. Lein, J. Phys. B 47, 204016 (2014)
- [4] T. Herath, L. Yan, S. K. Lee, W. Li, Phys. Rev. Lett. 109, 043004 (2012)
- [5] I. Barth, O. Smirnova, Phys. Rev. A 87, 065401 (2013)
- [6] K. Liu, I. Barth, Phys. Rev. A 94, 043402 (2016)
- [7] I. Barth, O. Smirnova, Phys. Rev. A 88, 013401 (2013)
- [8] A. Hartung, A. Laucke, M. Kunitski, R. Dörner, J. Phys. Conf. Ser. 635, 092069 (2015)
- [9] I. Barth, H.-C. Hege, H. Ikeda, A. Kenfack, M. Koppitz, J. Manz, F. Marquardt, G. K. Paramonov, Chem. Phys. Lett. 481, 118 (2009)
- [10] L. S. Kuz'menkov, S. G. Maksimov, Theo. Math. Phys. 118, 227 (1999)
- [11] R. E. Wyatt, Quantum Dynamics with Trajectories: Introduction to Quantum Hydrodynamics (Springer, 2005)
- [12] K. Renziehausen, I. Barth, Derivation of Many-Particle Quantum Hydrodynamics and Discussion about Different Versions of the Pressure Tensor, in preparation (2017)
- [13] V. I. Korobov, Phys. Rev. A 61, 064503 (2000)



INFORMATION THEORETISCHE CHEMIE

Ausgabe Juni 2017

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 für Satz und
Design.

Würzburg, Juni 2017

