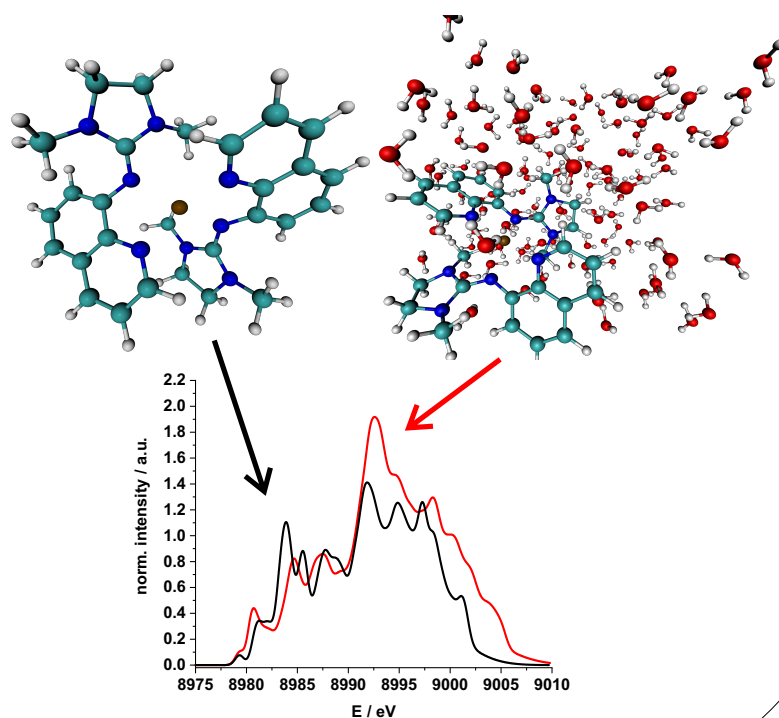


Information Theoretische Chemie



Juni 2018

Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

mit der aktuellen Ausgabe der Info Theoretische Chemie übernimmt die Arbeitsgruppe für Theoretische Chemie an der Universität Paderborn den Stab für die nächsten Ausgaben von den Würzburger Arbeitsgruppen um Bernd Engels, Volker Engel und Roland Mitric. Wir möchten uns bei der Gelegenheit herzlich bei den Würzburger Kollegen für die hervorragende Betreuung der InfoTC innerhalb der letzten vier Jahre bedanken. Des Weiteren möchten wir uns ebenfalls recht herzlich für alle eingesendeten Beiträge bedanken, ohne die die vorliegende Ausgabe der Information Theoretische Chemie nicht möglich gewesen wäre. Wir möchten deswegen sämtliche Arbeitsgruppen animieren, uns weiterhin eifrig Berichte und Neuigkeiten für die nächsten Ausgaben zuzusenden. Dies richtet sich insbesondere auch an Nachwuchsgruppenleiter/-innen, die mit einem Beitrag in der Rubrik "Arbeitsgruppen stellen sich vor ..." eine wie ich finde schöne Möglichkeit haben, ihre Tätigkeiten einem breiten Fachpublikum vorstellen zu können.

Paderborn, Juni 2018

Thomas D. Kühne und Patrick Müller



Impressum:

Dynamics of Condensed Matter
Universität Paderborn
Department Chemie
Warburger Straße 100
D-33098 Paderborn

Inhaltsverzeichnis

1	11. Kongress der „World Association of Theoretical and Computational Chemists 2017“ (WATOC 2017) in München	3
2	53. Symposium für Theoretische Chemie: “Big Data in Chemistry”	9
3	Mitgliederversammlung 53. Symposium für Theoretische Chemie 2017 in Basel	14
4	Die Arbeitsgruppe „Computational Physical Chemistry“ an der Karl-Franzens-Universität Graz stellt sich vor	18
5	Klatsch und Tratsch	24
5.1	Berufungen	24
5.2	Preise	26
5.3	Weitere Nachrichten	27
6	Nachrufe	28
6.1	Martin Schütz	28
6.2	Janos Ladik	30

1 11. Kongress der „World Association of Theoretical and Computational Chemists 2017“ (WATOC 2017) in München

Vom 27. August bis zum 1. September 2017 fand in München der „11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists“ statt. Der unter Federführung von Christian Ochsenfeld von der LMU München organisierte Kongress brach Rekorde: Mit 1.520 Teilnehmern aus 62 Ländern handelte es sich um die größte Konferenz, die weltweit bisher im Bereich der Theoretischen Chemie ausgerichtet wurde. Eine Rekordzahl von 363 Vorträgen und über 920 Postern beschäftigte sich mit mathematischen Grundlagen und neuen Rechenmethoden sowie Anwendungen auf Fragestellungen aus allen Gebieten der Chemie und ihrer Nachbarwissenschaften. Der Kongress demonstrierte damit eindrucksvoll die immer weiter wachsende Bedeutung der Theorie für die Chemie und verwandte Wissenschaftsdisziplinen.



Abbildung 1.1: Der Gasteig als Veranstaltungsort des 11. WATOC-Kongresses.

Seit 1987 veranstaltet die World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) alle drei Jahre den WATOC-Kongress, der nach Stationen auf allen Kontinenten nun erstmals in Deutschland stattfand. Veranstaltungsort war der Gasteig, der nur wenige Schritte vom Deutschen Museum entfernt im Herzen von München gelegen ist. Als Kulturzentrum und Heimstätte der Münchner Philharmoniker bildete der Gasteig einen inspirierenden Rahmen für den Kongress, der am 27. August mit Reden von Gastgeber Christian Ochsenfeld, WATOC-Präsident Walter Thiel, LMU-

Vizepräsidentin Barbara Conradt und dem Präsidenten der Alexander von Humboldt-Stiftung Helmut Schwarz eröffnet wurde.



Abbildung 1.2: Der Präsident der Alexander von Humboldt-Stiftung Helmut Schwarz (links) bekommt die Schrödinger-Medaille durch den scheidenden WATOC-Präsidenten Walter Thiel überreicht.

Nach einem musikalischen Intermezzo, dargeboten von Ville Kaila (TU München) und Lika Bibileishvili, begann eine intensive Woche, die Theoretische Chemiker aus aller Welt und in allen Stadien ihres Werdegangs unter einem Dach vereinte. 12 Plenarvorträge, 215 eingeladene Vorträge und 136 Kurzvorträge, die aus über 550 Bewerbungen ausgewählt worden waren, deckten die ganze Breite der modernen Theoretischen Chemie ab: von methodischen Fortschritten in der Elektronenstrukturtheorie, der Molekulardynamik, der Festkörperphysik, und der Theoretischen Biochemie hin zu Anwendungen in Molekülchemie, Katalysatorforschung, Materialwissenschaften, Nanotechnologie und Molekularbiologie. Dieses Spektrum war auf sechs parallele Vortragsreihen verteilt und endete in gemeinsamen abendlichen Posterpräsentationen.

Die Plenarvorträge im Konzertsaal der Münchner Philharmoniker bildeten die zentralen Veranstaltungen des Kongresses, wobei sechs Plenarvortragende jeweils eine der Schrödinger- und Dirac-Medaillen für die Jahre 2015 bis 2017 von WATOC-Präsident Walter Thiel überreicht bekamen. Die Schrödinger-Medaillen, die etablierte Wissenschaftler aus der Theoretischen Chemie würdigt, gingen



Abbildung 1.3: Der Konzertsaal der Münchner Philharmoniker bot eine atemberaubende Bühne.

an: Pavel Hobza (Prag) für seine Untersuchungen zu nicht-kovalenten Wechselwirkungen, Hiroshi Nakatsuji (Kyoto) für seine grundlegenden Beiträge zur exakten Lösung der Schrödingergleichung und Helmut Schwarz (TU Berlin) für seine experimentellen und theoretischen Arbeiten im Bereich der Massenspektrometrie und Katalysatorforschung. Die Dirac-Medaillen, die herausragende Theoretiker unter 40 Jahren auszeichnet, erhielten: Francesco Evangelista (Emory University) für Arbeiten zur Multireferenz-Coupled-Cluster-Theorie, Johannes Neugebauer (Münster) für die Entwicklung von Einbettungsmethoden in der Dichtefunktionaltheorie und Edward Valeev (Virginia Tech) für seine Beiträge zu explizit-korrelierten Wellenfunktionsmethoden.

In den übrigen Plenarvorträgen berichtete Giulia Galli (Chicago) über Photokatalyse und die Herausforderungen, welche sich bei der Modellierung der elektronischen Struktur an der Fest-Flüssig-Grenzfläche ergeben. Trygve Helgaker (Oslo) zeigte, wie starke Magnetfelder, die in der Astrochemie auftreten, die elektronische Struktur von Molekülen verändern können und Todd Martinez (Stanford) untersuchte photochemische Prozesse in ausgedehnten Systemen in Echtzeit mit Hilfe von Grafikprozessoren. Benedetta Mennucci (Pisa) beschäftigte sich mit Multiskalen-Methoden sowie deren Anwendung auf lichtsammelnde Moleküle. Frank Neese (MPI Mülheim) ging in seinem Vortrag auf niedrigskalierende lokale Coupled-Cluster-Methoden ein und erläuterte, wie die Coupled-Cluster-Theorie damit auch für Systeme mit mehreren hundert Atomen anwendbar wird. Ursula Röthlisberger (EPFL Lausanne) stellte Strategien vor, wie die Effizienz von Molekulardynamik-Simulationen mit Hilfe von künstlicher Intelligenz verbessert werden kann.

Die Diskussion einzelner Beiträge aus den parallelen Vortragsreihen würde den Rahmen dieses Artikels sprengen. Daher soll im Folgenden lediglich eine grobe Übersicht gegeben werden. Einen zentralen Themenkomplex bildeten Methoden zur Lösung der zeitunabhängigen elektronischen Schrödingergleichung. Zahlreiche Vorträge stellten neue Entwicklungen für Wellenfunktions- und Dichtefunktionalmethoden vor. Im Fokus stand insbesondere die Behandlung stark korrelierter Elektronen,

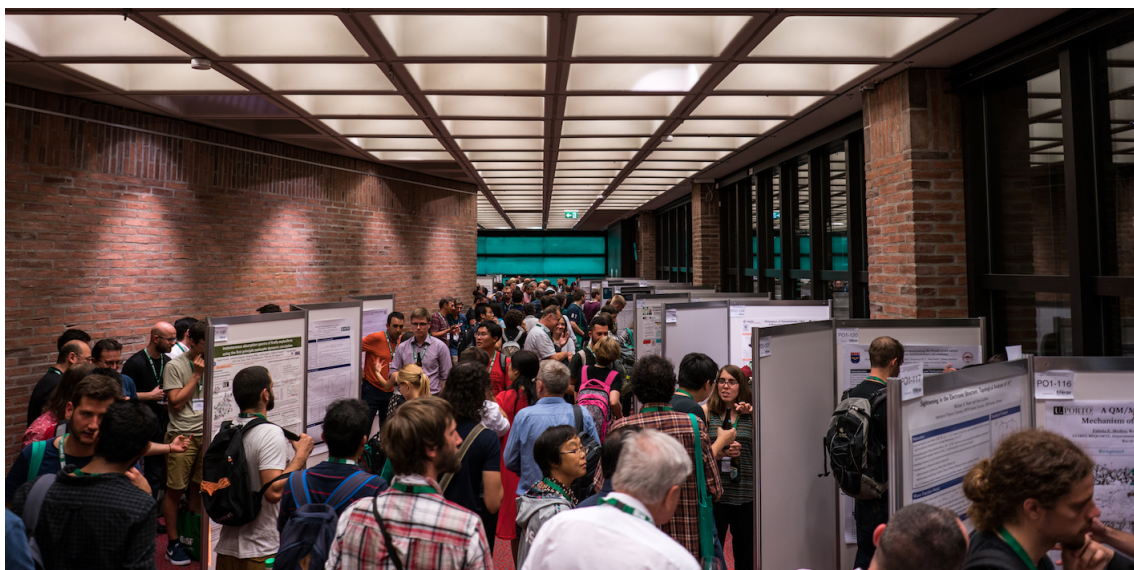


Abbildung 1.4: Die drei abendlichen Postersessions erfreuten sich großer Beliebtheit.

unter anderem mit Hilfe der Coupled-Cluster-Theorie, der Dichtematrix-Renormierungsgruppe und störungstheoretischer Methoden. In diesem Zusammenhang sind auch neue Ansätze zur Erreichung des Full CI-Grenzwerts erwähnenswert. Im Bereich der Dichtefunktionaltheorie spielten Subsystem-Methoden in mehreren Beiträgen eine Rolle, ebenso gab es eine Reihe von Vorträgen zur adiabatischen Verknüpfung, zum Fluktuations-Dissipationstheorem und zur Zufallsphasennäherung. Anknüpfungspunkte dazu hatten auch Entwicklungen zu Propagatormethoden und Greenschen Funktionen.

Ein weiteres wichtiges Forschungsfeld bildeten stochastische Ansätze, die zum Beispiel auf die Bestimmung der elektronischen Struktur oder die Erforschung von Potentialenergiehyperflächen angewendet wurden. Ebenso haben sich neuronale Netze, maschinelles Lernen und die Analyse von “Big Data” als Werkzeuge zur Modellierung von Molekülen und Materialien und zur Vorhersage von chemischen Reaktionen etabliert.

Das Ziel, komplexe ausgedehnte Systeme zu modellieren, bildete die Motivation in einer Reihe weiterer Beiträge. Hierzu zählen technische Fortschritte bei der massiven Parallelisierung und dem Einsatz von Grafikprozessoren, aber auch Entwicklungen bei numerischen Basissätzen, im Bereich des Dichtefittings und bei Methoden auf der Grundlage von lokalisierten Orbitalen. Eine maßgebende Rolle bei der Untersuchung großer Systeme spielten auch Einbettungsmethoden, sowohl in Form von gemischt quantenmechanisch-molekularmechanischen (QM/MM) Ansätzen als auch rein quantenmechanischen (QM/QM) Ansätzen, wobei zum Beispiel Neuerungen bei der polarisierbaren Einbettung vorgestellt wurden. Desweiteren wurden Arbeiten aufbauend auf semiempirischen Ansätzen wie Tight-Binding- und Kraftfeldmethoden präsentiert.

Im Bereich elektronisch angeregter Zustände stellten nichtadiabatische Phänomene einen Forschungsschwerpunkt dar. Weiterhin wurden zahlreiche Ergebnisse zu Elektronentransfer- und exzitonischen Prozessen präsentiert, oftmals mit Bezug zu Anwendungen in Photovoltaik und Halbleitertechnik. Eine weitere stark vertretene Forschungsrichtung bildete die Untersuchung ultraschneller Dynamik, wie sie in der Femtosekunden- und Attosekundenspektroskopie von Interesse ist. Beiträge zur Theorie



Abbildung 1.5: WATOC-Präsident Walter Thiel mit den Posterpreisträgern (von links nach rechts): Marcel D. Fabian, April Cooper, Antoine Carof, Henrik R. Larsson, Leon Freitag, Solène Oberli, Jae W. Park, Daryna Smyrnova, Sergi Ruiz-Barragán und Chunmei Liu.

der Schwingungsspektroskopie und der Kernspinresonanzspektroskopie wurden ebenfalls vorgestellt, wobei mehrdimensionale Verfahren für viele spektroskopische Methoden zunehmend bedeutsam werden.

Im Fokus vieler anwendungsorientierter Vorträge standen Proteine und Nukleinsäuren, was die wachsende Bedeutung der Theoretischen Chemie in Biochemie, Molekularbiologie und Pharmazie zeigt. Große Beachtung fanden auch Biomembranen, molekulare Motoren und Einzelmolekülschalter. Einen zweiten anwendungsorientierten Themenkreis bildeten materialwissenschaftliche Untersuchungen, wobei niedrigdimensionale Kohlenstoffallotrope wie Graphen, Fullerene, Nanoröhren und Nanocluster und analoge Verbindungen anderer Elemente einen Schwerpunkt darstellten. Spin-abhängige Prozesse sowie die Vorhersage von Kristallstrukturen und die Beschreibung von Nukleations- und Kristallisationsvorgängen waren ebenfalls Gegenstand mehrerer Vorträge.

Eine weitere Gruppe von Beiträgen beschäftigte sich mit katalytischen Prozessen. Während für die heterogene Katalyse die Untersuchung von Oberflächen und Sorptionsvorgängen zentral ist, erfordert die homogene Katalyse die Modellierung von flüssigen Phasen, oftmals in explizit zeitabhängiger Form. Weiterhin haben auch Elektrochemie und Photochemie zunehmende Bedeutung für die Katalysatorforschung gewonnen. Die Erforschung katalytischer Prozesse bildete auch einen Antrieb für die zahlreichen Untersuchungen zur Natur chemischer Bindungen sowie zu nicht-kovalenten und kooperativen Wechselwirkungen wie zum Beispiel Wasserstoffbrücken, van-der-Waals-Kräften und Selbstassemblierung.

Erwähnenswert ist in diesem Zusammenhang auch das Industriesymposium, das der WATOC-Kongress in diesem Jahr erstmals umfasste. In je einer biochemisch und materialwissenschaftlich ausgerichteten Vortragsreihe berichteten insgesamt zehn Referenten aus der freien Wirtschaft über Anwendungen der Theoretischen Chemie in der industriellen Forschung, beispielsweise bei der Entwicklung pharmazeutischer Wirkstoffe und in der Batterieforschung.

Der 11. WATOC-Kongress endete am 1. September nach der Verleihung der Posterpreise mit einem



Abbildung 1.6: Der neue WATOC-Präsident Peter Gill bei der Abschlusszeremonie.

Schlusswort von Peter Gill (ANU Canberra) als neugewähltem WATOC-Präsidenten. Er erinnerte die Teilnehmer an ihre besondere Verantwortung als Wissenschaftler in einer Zeit, in der unter dem Schlagwort “fake news” der Begriff der Wahrheit selbst wiederholt in Frage gestellt wird.

Der 12. WATOC-Kongress wird in Vancouver, Kanada vom 16.–21. August 2020 stattfinden.

Asbjörn M. Burow, LMU München (www.cup.uni-muenchen.de/pc/burow)

Thomas-C. Jagau, LMU München (jagau.cup.uni-muenchen.de)

Weitere Informationen zum 11. WATOC-Kongress: www.watoc2017.com



Abbildung 1.7: Das Organisationsteam (linkes Bild, von links nach rechts: Burow, Ochsensfeld, Jagau) und der gesamte Lehrstuhl Ochsensfeld (rechtes Bild) bedanken sich bei allen Teilnehmern für spannende Beiträge und Diskussionen sowie eine hervorragende Atmosphäre bei der WATOC2017.

2 53. Symposium für Theoretische Chemie: “Big Data in Chemistry”

Das 53. Symposium für Theoretische Chemie (STC) fand vom 21. – 25. August 2018 in Basel statt. Für die Organisation unter dem Motto “Big Data in Chemistry” zeichneten A. von Lilienfeld und M. Meuwly verantwortlich. Rund 300 Teilnehmer aus vieler Herren Länder waren an der Tagung vertreten, die im Bernoullianum Basel stattfand.

Die Tagung deckte mit 6 Plenar- 9 eingeladenen und 37 Kurzvorträgen die Themenbereiche des Hauptthemas breitflächig ab. Als spezielle Veranstaltung fand am Dienstag Nachmittag auch die Jahrestagung der Computerchemiker der Schweizerisch Chemischen Gesellschaft (SCS) mit 10 Kurzvorträgen statt.

Die Tagung wurde durch Kieron Burke von der University of California eröffnet. In seinem Vortrag berichtete er von neuen, Machine Learning basierten Dichte Funktionalen. Dieser Vortrag wurde gefolgt von den Präsentationen von Jörg Behler und Jutta Rogal. J. Behler diskutierte Potentialflächen basierend auf neuronalen Netzwerken und wie sie in Simulationen in der kondensierten Phase verwendet werden können. J. Rogal ihrerseits stellte Arbeiten zu Metallen, ihren Phasenumwandlungen und deren Nukleation vor.

Der Montagnachmittag wurde von Michiel Sprik (Cambridge, UK) eröffnet. In seinem Vortrag ging es um die atomistisch aufgelöste Modellierung von elektrolytischen Grenzflächen. Tristan Berau verknüpfte in seinem Vortrag genaue, Physik-basierte Kraftfeldmethoden mit datengetriebenen Ansätzen zur Beschreibung organischer Moleküle. Am Abend hatten die jüngeren Teilnehmer die Gelegenheit, ihre Arbeiten auf Postern und bei belegten Brötchen und Bier vom Fass zu präsentieren.

Der erste Vortrag am Dienstagmorgen behandelte die molekulare Dynamik komplexer Systeme basierend auf quantenmechanischen Techniken. Alessandro de Vita legte dabei besonderen Wert auf den Gebrauch von “Big Data” und dem Lernen on-the-fly. Felix Studt seinerseits zeigte in seinem Vortrag, wie Dichtefunktional-Theorie auf Probleme der Oberflächenphysik und Katalyse angewendet werden können.

Der Dienstag Nachmittag stand ganz im Zeichen der Computational Chemistry der Schweizerisch-Chemischen Gesellschaft.



Der Mittwochmorgen startete mit dem Hellmann-Vortrag von Sandra Luber. Die Preisträgerin (Bild) referierte zu ihren Arbeiten über vibratorische Spektroskopie mittels Dichtefunktionaltheorie-Ansätzen, die sie in den vergangenen Jahren vorangetrieben hatte. Der Preis wurde überreicht von Leticia Gonzalez. Das Programm wurde mit einem Vortrag zum Thema Material-Entwicklung mittels high-throughput ab initio Rechnungen und data mining durch Geoffroy Hautier fortgesetzt. Zum Abschluss des Mittwoch-Programms zeigte Philipp Marquetand, wie neurale Netzwerke auf Probleme der molekularen Dynamik in angeregten elektronischen Zuständen angewendet werden können.

Der Mittwochnachmittag war zur freien Verfügung der Konferenzteilnehmer und am Abend fand ein Grillabend im Innenhof der Universität bei Bier, Wein, Raclette und Grillwürsten statt.



Helmut Grubmüller zeigte am Donnerstagmorgen, wie die Funktion von molekularen Maschinen, wie zum Beispiel des Ribosoms, mittels atomistischer Simulationen beschrieben werden kann. Michele Ceriotti referierte zu maschinellem Lernen der Eigenschaften von Materialien und Molekülen aus der Perspektive von "big data".

Das Nachmittagsprogramm wurde von Christoph Dellago zum Thema maschinelles Lernen bei atomistischen Simulationen für Reaktionspfade und Phasendiagramme eröffnet. Danach berichtete Freija De Vleeschouwer von ihren Arbeiten zum inversen Design von stabilen radikalen Molekülen. Am Abend gab es eine zweite Posterparade, wieder mit belegten Brötchen und Bier vom Fass.

Jonathan Tennyson eröffnete den letzten Teil des Programms am Freitagmorgen mit "big data"



Ansätzen in der Molekülphysik, wobei es um die Bearbeitung und um wissenschaftliche Auswertungen von Linienspektren kleiner Moleküle mit mehreren Millionen spektroskopischen Übergängen ging. Der letzte eingeladene Vortrag wurde von Nuria Plattner zum Thema Kinetik von Protein-Ligand Bindung basierend auf Markov Modellen gehalten.

Die Konferenz endete mit der Preisvergabe für die 2 besten Poster, gestiftet in der Form von Buch-Gutscheinen vom International Journal of Quantum Chemistry. Die glücklichen Gewinner waren Hr. Sascha Jähnigen von der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg mit dem Poster über "Electronic Flux and Vibrational Circular Dichroism by means of Nuclear Velocity Perturbation Theory" und Fr. Mila Andreeva vom Karlsruhe Institute of Technology mit dem Poster über "Finding Reaction Paths

in Free Simulations of Chemical Reactivity”. Der Preis für den besten mündlichen Beitrag, gestiftet von der Alumni-Vereinigung der Universität Basel, ging an Dr. Bing Huang von der Universität Basel, der über “The “DNA” of Chemistry: Scalable Quantum Machine Learning with Amons” referiert hatte.

Die Organisatoren möchten nochmal allen Teilnehmern für die gelungene Konferenz danken. Desweiteren sind sie den Sponsoren, NCCR MARVEL und MUST, dem Schweizerischen Nationalfonds, der Firma Dalco, der Firma Buehlmann, und dem Swiss National Supercomputing Center zu Dank für die finanzielle Unterstützung verpflichtet, aufgrund derer die Teilnahmegebühr entfallen konnte.

Markus Meuwly

Anatole von Lilienfeld



3 Mitgliederversammlung 53. Symposium für Theoretische Chemie 2017 in Basel

Mitgliederversammlung

53. Symposium für Theoretische Chemie 2017 in Basel

Beginn: 22.08.2017 16:40

Ende: 22.08.2017 17:10

Sitzungsleitung: Prof. Dr. Leticia González (Universität Wien, Österreich)

Tagesordnung

- 1) Genehmigung der Tagesordnung
- 2) Protokoll der Mitgliederversammlung 2016
- 3) Neuer Vorstand der AGTC
- 4) Bericht des Vorstands
- 5) Kassenprüfung 2016
- 6) Wahl des Kassenprüfers 2017
- 7) Verschiedenes

TOP1

Die Tagesordnung wird einstimmig angenommen.

TOP2

Zum Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC anlässlich des 52. Symposiums für Theoretische Chemie in Bochum gibt es keine Anmerkungen und es wird ohne Gegenstimme genehmigt.

TOP 3

Der Vorstand der AGTC in den Jahren 2015-2017 bestand aus C. Ochsenfeld (Vorsitzender), L. González (Stellvertreterin), W. Kloppe, C. Marian, sowie, als Vertreter der verschiedenen Schwestergesellschaften, S. Grimme (GDCh), D. Marx (DPG), W. Thiel (DBG). Nach den Neuwahlen setzt sich der Vorstand für die Jahre 2017-2019 nun folgendermaßen zusammen: L. González (Vorsitzende), W. Kloppe (Stellvertreter), C. Ochsenfeld, M. Reiher, C. Marian, S. Grimme (GdCh), D. Marx (DPG), W. Thiel (DBG).

TOP 4

- Mitgliedschaft:

Im Jahr 2016 zählte die AGTC 236 Mitglieder. 2017 kamen bisher 4 neue Mitglieder hinzu. Der Jahresbeitrag beträgt weiterhin 13.- Euro (6.50 Euro für Studierende). Ab einem Lebensalter von 58 Jahren besteht die Möglichkeit einer Lebensmitgliedschaft analog zum Modell der Deutschen Bunsen-Gesellschaft.

- Hellmann-Preis:

Die Voraussetzungen für den Hellmann-Preis sind ein Lebensalter bis 40 Jahre, eine erfolgreich abgeschlossene Habilitation oder äquivalente Leistungen und bisher keine Lebenszeit-Professur. Somit ergibt sich ein relativ kleines Zeitfenster und eine in der Regel kleine Anzahl an Bewerbern/-innen. Der Vorstand bittet daher alle Nachwuchswissenschaftler/-innen, die sich für geeignet halten, sich nominieren zu lassen. Nominierungen sind bis 15.3.2018 an die AGTC-Vorsitzende zu senden (keine Eigennominierungen und keine Nachnominierungen möglich).

- Nachwuchsgruppen

Die AGTC führt eine Liste von Nachwuchsgruppen auf ihrer Homepage (unter http://theochem.de/linkliste_Nachwuchs.html). Als Nachwuchsgruppe gilt

- 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.

- Hellmann- Jury Neuwahl

Die Jury des Hellmann-Preises setzte sich in den Jahren 2015-2017 aus A. Dreuw (Vorsitz), H.P. Luehti, J. Neugebauer, P. Saalfrank, R. Berger, B. Engels und B. Paulus zusammen. Für dieses Gremium in den Jahren 2017-2019 stehen bereits R. Berger, B. Engels und B. Paulus fest. Vier weitere Mitglieder sollten durch geheime Wahl bestimmt werden. Nach der Wahl ergab sich folgendes Ergebnis (Anzahl Stimmen in Klammern): I. Burghardt (16), J. Kästner (15), J. Gauss (13), O. Kühn (12), C. v. Wüllen (12), M. Meuwly (11), C. Peter (9), C. Jakob (8). Der vierte Platz wird aufgrund des Gleichstands per Losverfahren ermittelt.): I. Burghardt, J. Kästner, J. Gauss, und O. Kühn haben der Wahl angenommen.

- Erich-Hückel-Preis der GDCh

Die GDCh vergibt seit Kurzem den Erich-Hückel-Preis. Dieser 2015 eingerichtete Preis wird an Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen verliehen, die sich durch hervorragende Arbeiten auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie besondere Verdienste erworben haben. Der erste Preisträger ist Werner Kutzelnigg im Jahr 2016. Nominierungen für den Erich-Hückel-Preis 2018 können bis zum 29.9.2017 direkt an die GDCh eingereicht werden.

- Trendberichte

Die Trendberichte 2017 wurden verfasst von PD Dr. Ralf Tonner (Marburg), Prof. Dr. Niko Doltsinis (Münster) und J.-Prof. Bettina Keller (FU Berlin).

- INFO-TC

Das Informationsblatt INFO-TC wird in Zukunft verfasst von: Prof. Dr. Thomas Kühne et al. (Paderborn) 2017/18, Andreas Dreuw (Heidelberg) 2019/20, Leticia González (Wien) 2021/22, Thorsten Klüner (Oldenburg) 2023/24, Christoph Jacob (Braunschweig) 2025/26.

- STC

Markus Meuwly und Anatole von Lilienfeld wird für die Ausrichtung des STC 2017 in Basel gedankt. Das Symposium für Theoretische Chemie findet 2018 in Halle (Saale) in Deutschland statt und wird organisiert von Prof. Daniel Sebastiani. Es gibt bereits eine Homepage unter <https://stc2018.de> Das STC 2019 wird organisiert von Prof. Oliver Kühn und Prof. Ralf Ludwig in Rostock (D). Im Jahr 2020 soll das STC in Österreich stattfinden.

Top 5

Über viele Jahre hinweg hat Franz Mark das Amt des Kassenprüfers innegehabt und gibt es nun ab. Für seine Arbeit wird ihm in Abwesenheit herzlich gedankt. Über den Stand der Konten wird folgendes berichtet: Aus dem Jahr 2015 besteht ein Vortrag von 45947.89 €. Aus Mitgliedsbeiträgen entstehen Zuflüsse von 3067.50 €. Die Kosten für die Domainverwaltung betragen 58 €. Somit ergibt sich ein Guthaben von 48957.39 € mit Stand 31.12.2016. Bei der Kassenprüfung für das Jahr 2015 wurde ein Buchungsfehler beim Hellmann-Fonds-Konto entdeckt (1098.28 € zu Ungunsten der AGTC bei den Stiftungsmitteln); es wurde der AGTC daraufhin ein korrigierter Kontoauszug übermittelt, der überprüft und akzeptiert wurde. Tatsächlich war aber diese Korrektur von der Buchhaltung nicht durchgeführt worden. Diese nicht erfolgte Korrektur zieht auch einen fehlerhaften Kontoauszug 2016 nach sich. Deshalb können die für 2016 angegebenen Zahlen für Stiftungsmittel und Gesamtvermögen nicht akzeptiert werden. Der Fehler in der Buchhaltung wurde von den Wirtschaftsprüfern nicht entdeckt, so dass die Jahre 2015 und 2016 bei der GDCh abgeschlossen sind. Eine Korrektur kann daher erst im Laufe 2017 erfolgen. Der Kontoabschluss 2016 für den Hellmann-Fonds wird somit nicht akzeptiert.



Abbildung 3.1: Der neue Kassenprüfer, A. Auer, überreicht im Namen der AGTC einen edlen Tropfen an F. Mark. Für seine langjährige Leistung als Kassenprüfer gilt Herrn Franz Mark besonderer Dank!

TOP 6

Als neuer Kassenwart wird A. Auer (MPI Mühlheim) einstimmig gewählt.

TOP 7

Es gibt keine weiteren Anliegen. Die Sitzung wird durch die Vorsitzende L. González beendet.

STC 2017 in Basel, den 22. August 2017

PD Dr. Philipp Marquetand

Prof. Dr. Leticia González

4 Die Arbeitsgruppe „Computational Physical Chemistry“ an der Karl-Franzens-Universität Graz stellt sich vor

Kontakt

Prof. Dr. Adrian Daniel Boese

Karl-Franzens-Universität Graz

Institut für Chemie

Physikalische und Theoretische Chemie

Heinrichstrasse 28/IV

A-8010 Graz

Österreich

Web: <https://chemie.uni-graz.at/de/quantum-chemistry>

E-Mail: Adrian_Daniel.Boese@uni-graz.at



Abbildung 4.1: Prof. Dr. Adrian Daniel Boese
Karl-Franzens-Universität Graz

Seit November 2014 existiert die neu gegründete Arbeitsgruppe „Computational Physical Chemistry“ an der Karl-Franzens-Universität (KFU) Graz. Sie ist eng in einen der Hauptforschungsschwerpunkte der KFU Graz, „Modelle und Simulationen“ eingegliedert, in dem verschiedene Kooperationen unter anderem mit der Physik der KFU vorgesehen sind.

Die Hauptforschungsgebiete der Gruppe zielen vor allem auf die exakte Beschreibung von intermolekularen Wechselwirkungen ab: Zu diesem Zweck werden zahlreiche Elektronenstrukturmethoden verwendet, kombiniert sowie weiterentwickelt: Sowohl QM:MM, Dichtefunktionaltheorie (DFT), QM:QM als auch Post-Hartree-Methoden. Die Anwendungen dieser Methoden sind vielfältig und reichen von Wechselwirkungen einzelner Moleküle untereinander über die von Molekülen auf Oberflächen bis hin zu Molekulkristallen.

Der erste und wichtige Teil der Forschung ist die Dichtefunktionaltheorie. Bereits im Jahr 1997 wurde darauf hingewiesen, dass sich Dichtefunktionale durch die Addition von Dispersionsthermen stark verbessern lassen und keines der damals gängigen Dichtefunktionale alleine in der Lage war, schwache Wechselwirkungen systematisch zu beschreiben.[1] Für Wasserstoffbrücken jedoch, die einen hohen elektrostatischen Anteil besitzen, können Dichtefunktionale leicht verändert werden, so dass diese die wasserstoffverbrückten Systeme besser beschreiben können, was in den mittlerweile recht bekannten HCTH/120 und HCTH/407-Funktionalen resultierte.[2-4]

$$\begin{aligned}
 E_{xc}^{BMK}(\rho_{\sigma}, s_{\sigma}) = & \sum_{\sigma} \int e_{x\sigma}^{UEG}(\rho_{\sigma}) \left(1 + \sum_{i=0}^3 c_{4i+1} \left[\frac{\gamma_1 s_{\sigma}^2}{1 + \gamma_1 s_{\sigma}^2} \right]^i \right) dr \\
 & + \sum_{\sigma} \int e_{x\sigma}^{UEG}(\rho_{\sigma}) f_{x\sigma}^{n-l}(\omega_{\sigma}) \left(1 + \sum_{i=0}^3 c_{4i+1} \left[\frac{\gamma_1 s_{\sigma}^2}{1 + \gamma_1 s_{\sigma}^2} \right]^i \right) dr \\
 & + \sum_{\sigma} \int e_{c\sigma\sigma}^{UEG}(\rho_{\sigma}) \left(1 + \sum_{i=0}^3 c_{4i+2} \left[\frac{\gamma_2 s_{\sigma}^2}{1 + \gamma_2 s_{\sigma}^2} \right]^i \right) dr \\
 & + \int e_{c\alpha\beta}^{UEG}(\rho_{\sigma}) \left(1 + \sum_{i=0}^3 c_{4i+3} \left[\frac{\gamma_3 s_{gem}^2}{1 + \gamma_3 s_{gem}^2} \right]^i \right) dr \\
 & \text{with } s_{gem}^2 = \frac{s_{\alpha}^2 + s_{\beta}^2}{2}
 \end{aligned} \tag{1}$$

Funktionalform des Boese-Martin-for-kinetics Funktional.[5]

Das Boese-Martin-for Kinetics (BMK) Funktional[5] ist mit mehr als 800 Zitationen eines der häufig angewendeten Funktionalen, wobei die damals entwickelte Funktionalform[6] immer häufiger in moderneren Funktionalen verwendet wird. Diese Arbeiten sollen weitergeführt werden, im Speziellen mit Hinblick auf die Probleme, die derzeit gängige Dichtefunktionale (ohne oder auch mit Dispersionskorrekturen) bei der exakten Beschreibung von Wasserstoffbrücken besitzen.[7]

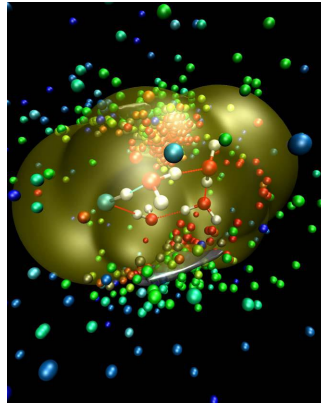


Abbildung 4.2: Genauigkeit des an SAPT angepassten Kraftfeldes für ausgewählte Punkte auf der Potenzialenergiehyperfläche.[8]

Ein weiteres Standbein der Arbeitsgruppe ist die symmetrieadaptierte Störungstheorie (SAPT), die vor allem auch in Hinblick auf die darunterliegenden Funktionalen (DFT-SAPT) interessant erscheint. Hier können die ermittelten Einzelbeiträge helfen, neue semiempirische Kraftfelder zu konstruieren, selbst wenn diese sehr verschiedene Bindungssituationen beschreiben müssen.[8] Zusätzlich hat sich die Kombination von SAPT mit der Zhao-Morrison-Parr Methode, um exakte Austauschkorrelationspotenziale zu berechnen, als eine interessante Alternative herausgestellt, bei der ein Teil der DFT-SAPT-Methode zugrundeliegenden Dichtefunktionale durch Post-Hartree-Fock-Methoden ersetzt wird. Um noch genauer in der Beschreibung der intermolekularen Wechselwirkungen zu werden,

müssen Coupled-Cluster Methoden in Kombination mit Extrapolations- und/oder F12-Methoden verwendet werden. Auch hier gibt es verschiedene interessante Ansätze, um das Basissatzlimit beispielsweise verschiedener Coupled-Cluster Methoden mit möglichst wenig Rechenaufwand zu erreichen.[10-13] Insgesamt ist CCSD(T) sehr wahrscheinlich ausreichend, um eine Genauigkeit im sub-kJ/mol Bereich für intermolekulare Wechselwirkungen von geschlossenschaligen Molekülen zu erzielen.[14] Für offenschalige Systeme ist dies weitaus schwieriger, da hier häufig nicht klar ist, welche Referenzmethoden die besten Ergebnisse erzielen sollten.[15,16] Die hohe Genauigkeit (von einem Fehler von weniger als 1 kJ/mol) ist notwendig, wenn wir uns vorstellen, dass selbst ein „kleiner Cluster“ von 20 Wassermolekülen 30-36 Wasserstoffbrückenbindungen besitzt. Vor allem in solchen Fällen müssen approximative Methoden eine Fehlerkompensation aufweisen, die nicht einfach zu erzielen ist und möglicherweise für kleinere oder größere Cluster oder auch periodische Systeme nicht mehr gilt.

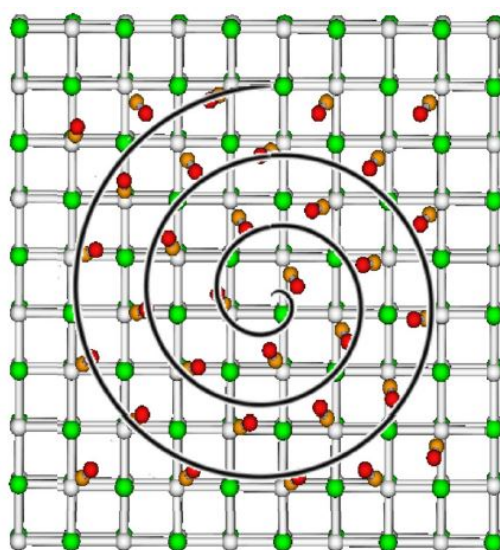


Abbildung 4.3: Kooperative Effekte von CO auf NaCl: Die Minimumsstruktur ergibt spiralförmige angeordnete Cluster.[19]

Um sich auf diese Fehlerkompensation nicht verlassen zu müssen, werden QM:QM bzw. QM:MM-Methoden weiterentwickelt und verwendet. Dies hat bereits bei der Berechnung der Adsorptionsenergie von Molekülen auf Oberflächen zu überraschenden Resultaten geführt.[17,18] Der alte Literaturwert für die Adsorption von CO auf MgO, der auch durch quantenchemische Rechnungen immer wieder bestätigt wurde, musste um 50% nach oben korrigiert werden. Die Beschreibung interessanter kooperativer Effekte, wie die Beeinflussung verschiedener CO-Moleküle auf der Oberfläche von NaCl untereinander,[19] sind ein weiterer Schritt zum molekularen Festkörper.

Diese Erfahrungen, zusammen mit der Generierung von supramolekularen Synthonen in Molekülkristallen,[20,21] sollen insgesamt zur exakteren Beschreibung und Berechnung von Molekülkristallen beitragen[22]. Die Dichtefunktionaltheorie zeigt hier insgesamt gemischte und zum Teil durch die Wahl des Funktionals und der Dispersionskorrektur sehr unterschiedliche Ergebnisse,[23,24] die ohne Zweifel verbesserungswürdig sind.

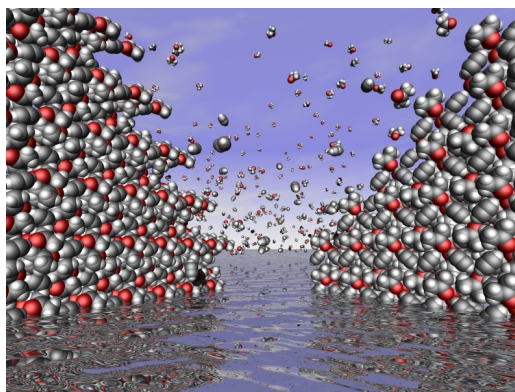


Abbildung 4.4: Kooperative Effekte im Molekulkristall: Hier am Beispiel von Aceton, in den Veröffentlichungen für Ethylacetat und THT/THF.[21,22]

Da hier weitere Effekte, wie die exakte Beschreibung der Nullpunktsschwingungen, aber auch deren Anharmonizitäten, eine größere Rolle spielen könnten, soll auch versucht werden, die Methoden, die für die Berechnung von quartischen Kraftfeldern verwendet wurden, weiter zu entwickeln und diese auf die Problemstellungen im molekularen Festkörper und auf Moleküle auf Oberflächen anzuwenden.[25-27]

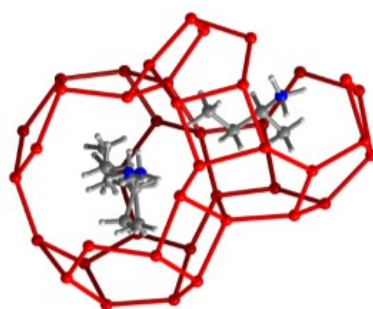


Abbildung 4.5: Kristallstruktur von 2-Aminobutan-Hydrat.

Für die Berechnung von Molekulkristallen stehen zwei Anwendungsbereiche im Vordergrund: Gashydrate und Polymorphie. Die Masse des gebundenen Kohlenstoffs, der weltweit in Methanhydraten vorhanden ist, entspricht bis zu dem Zehnfachen der Masse des Kohlenstoffs aller anderen fossilen Energieträger zusammen. Von daher ergibt sich ein unglaubliches Potenzial, wenn Methanhydrate als Energieträger verwendbar gemacht werden könnten. In Kooperation mit einer kristallographisch ausgerichteten Arbeitsgruppe der Universität Warschau werden sowohl experimentell als auch theoretisch verschiedene Methoden untersucht, um diese Energieträger nutzbar zu machen. Unter anderem besteht beispielsweise die Möglichkeit, das klimaschädliche CO₂ in Methanhydrate einzuspeisen und zu einer nicht klimaschädlichen Energiequelle zu machen.

Ein gutes Beispiel für den zweiten Themenkomplex, die Polymorphie, ist das altbekannte Aspirin. In dessen kristalliner Form sind die Moleküle auf eine ganz bestimmte Art angeordnet. Findet man nun zunächst – theoretisch – eine weitere Möglichkeit der Anordnung, die eine verbesserte Wirksamkeit aufweist, könnte man diese vielleicht technisch produzieren. Für die pharmazeutische Industrie

stellt dies eine attraktive Möglichkeit dar, altbekannte Medikamente zu verbessern, weshalb man sich auch hier sehr intensiv mit dieser Forschung beschäftigt. Zu diesem Zweck bestehen intensive Kooperationen mit dem Center for Advanced Studies, Research and Development auf Sardinien und der Universität Innsbruck.

Somit sind die notwendige Weiterentwicklung effizienter theoretischer Methoden zur Erfassung schwacher Wechselwirkungen unter anderem mit periodischen Randbedingungen (Oberflächen, kristalline Feststoffe) Schwerpunkt der Arbeitsgruppe Boese. Gleichzeitig werden neue Lösungsansätze für anwendungsrelevante, aktuelle Problemfelder in der Pharmazie und für eine nachhaltige Energieversorgung getestet und dazu konkrete Modelle erarbeitet.

- [1] A. Daniel Boese, Masterarbeit, Rice University, 1997.
- [2] A. Daniel Boese, Nikos L. Doltsinis, Nicholas C. Handy und Michiel Sprik, J. Chem. Phys. 2000, 112, 1670-1678.
- [3] A. Daniel Boese und Nicholas C. Handy, J. Chem. Phys. 2001, 114, 5497-5503.
- [4] A. Daniel Boese, Amalendu Chandra, Jan M.L. Martin und Dominik Marx, J. Chem. Phys., 2003, 119, 5965-5981.
- [5] A. Daniel Boese und Jan M.L. Martin, J. Chem. Phys 2004, 121, 3405.
- [6] A. Daniel Boese und Nicholas C. Handy, J. Chem. Phys. 2002, 116, 9559-9569.
- [7] A. Daniel Boese, ChemPhysChem 2015, 140, 978-985. [8] A. Daniel Boese, Harald Forbert, Marco Masia, Adem Tekin, Dominik Marx und Georg Jansen, Phys. Chem. Chem. Phys. 2011, 13, 14550-14564.
- [9] A. Daniel Boese und Georg Jansen, in Vorbereitung.
- [10] A. Daniel Boese, Mikhal Oren, Onur Atasoylu, Jan M.L. Martin, Mihaly Kallay und Jürgen Gauss, J. Chem. Phys. 2004, 120, 4129.
- [11] A. Daniel Boese, Jan M.L. Martin und Wim Klopper; J. Phys. Chem. A 2007, 111, 11122-11133.
- [12] A. Daniel Boese, Martin Torheyden, Georg Jansen, Sebastian Höfener und Wim Klopper, Phys. Chem. Chem. Phys. 2011, 13, 1230-1238.
- [13] A. Daniel Boese, Molecular Physics 2015, 14, 1618-1629.
- [14] A. Daniel Boese, J. Chem. Theory Comput. 2013, 9, 4403-4413. (A) 2014, 10, 893.
- [15] Edelsys Codorniu-Hernández, A. Daniel Boese und Peter G. Kusalik, Can. J. Chem. 2013, 7, 544 551.
- [16] Edelsys Codorniu-Hernández, Kyle Wm. Hall, A. Daniel Boese, Daniel Ziemianowicz, Sheelagh Carpendale und Peter G. Kusalik, J. Chem. Theor. Comput 2015, 11, 4740-4748.
- [17] A. Daniel Boese und Joachim Sauer, Phys. Chem. Chem. Phys. 2013, 15, 16481-16493.
- [18] A. Daniel Boese und Joachim Sauer, J. Comput. Chem. 2016, 37, 2374-2385.
- [19] A. Daniel Boese und Peter Saalfrank, J. Phys. Chem. C 2016, 120, 12637-12653.
- [20] Roland Boese, A. Daniel Boese, Dieter Bläser, Michail Yu. Antipin, Arkadi Ellern, and Konrad Seppelt, Angewandte Chemie 1997, 109, 1538-1541.
- [21] Edelsys Codorniu-Hernández, A. Daniel Boese, Carsten Schauerte, Alberto Rolo-Naranjo, Ramón

Miranda-Quintana, Luis A. Montero-Cabrera und Roland Boese, Cryst. Eng. Comm. 2009,11, 2358-2370.

[22] A. Daniel Boese und Joachim Sauer, Crystal Growth and Design 2017, 17, 1636-1646.

[23] A. Daniel Boese, Michael Kirchner, Gustavo A. Echeverria und Roland Boese, ChemPhysChem 2013, 14, 799-804.

[24] A. Daniel Boese und Roland Boese, Crystal Growth and Design 2015, 15, 1073-1081.

[25] A. Daniel Boese und Jan M.L. Martin, J. Phys. Chem. A 2004, 108, 3085-3096.

[26] A. Daniel Boese, Wim Klopper und Jan M.L. Martin, Mol. Phys 2005, 103, 863-876.

[27] A. Daniel Boese, Wim Klopper und Jan M.L. Martin; Int. J. Quant. Chem. 2005, 104, 830-845.

5 Klatsch und Tratsch

Wie der Name schon sagt, sind alle Angaben wie immer ohne Gewähr ;)

5.1 Berufungen

- PD Dr. Jörg Behler von der Ruhr Universität Bochum hat einen Ruf an die Georg-August-Universität Göttingen auf die W3-Professur für Theoretische Chemie angenommen.



- Dr. Adrian Daniel Boese von der Universität Potsdam hat einen Ruf auf die Professur für Computational Physical Chemistry (Nachfolge Prof. Dr. Rudolf Janoschek) an der Karl-Franzens-Universität Graz (Österreich) angenommen.



- Prof. Dr. Joachim Dzubiella vom Helmholtz-Zentrum Berlin hat einen Ruf auf die W3-Professur für Angewandte Theoretische Physik (Computergestützte Physik) an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg angenommen.



- Prof. Dr. Thomas Heine von der Universität Leipzig hat einen Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie (Nachfolge Prof. Dr. Gotthard Seifert) an der Technischen Universität Dresden angenommen.



- Dr. Matthias Heyden vom Max-Planck Institut für Kohlenforschung hat einen Ruf auf eine Assistenzprofessur an der Arizona State University (USA) angenommen.



- Prof. Dr. Frank Neese vom Max-Planck Institut für Chemische Energiekonversion hat einen Ruf auf die Direktorenstelle für Molekulare Theorie und Spektroskopie (Nachfolge Prof. Dr. Walter Thiel) am Max-Planck Institut für Kohlenforschung in Müllheim an der Ruhr angenommen.



- Prof. Dr. Michael Thoss von der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg hat einen Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Physik der kondensierten Materie (Nachfolge Prof. Dr. Hermann Grabert) an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg angenommen.



5.2 Preise

- Dr. Oldamur Hollóczki von der Rheinische Friedrich-Willhelms-Universität Bonn ist mit dem ADUC-Preis 2018 ausgezeichnet worden.



- Prof. Dr. Werner Kutzelnigg von der Ruhr Universität Bochum ist als erster Preisträger mit dem Erich-Hückel-Preis der Deutschen Chemischen Gesellschaft ausgezeichnet worden.

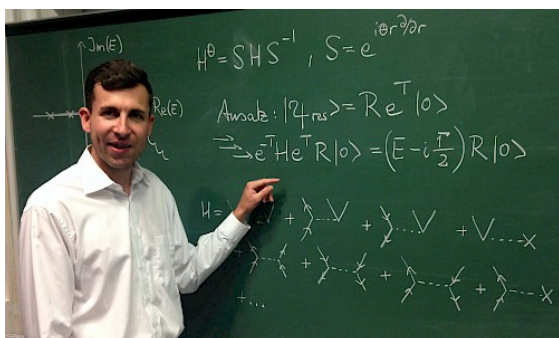


- Dr. Sandra Luber von der Universität Zürich (Schweiz) hat den Hans G.A. Hellmann-Preis der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie, den Robin Hochstrasser Young Investigator Award des Elsevier Verlags und den Werner Preis der Schweizerischen Chemischen Gesellschaft gewonnen.



5.3 Weitere Nachrichten

- Dr. Thomas-Christian Jagau von der LMU München war mit seinem Antrag auf eine Emmy Noether-Nachwuchsgruppe bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft erfolgreich.



- Dr. Axel Schild vom Laboratorium für Physikalische Chemie der ETH Zürich ist mit einem Ambizione-Beitrag des Schweizerischen Nationalfonds ausgezeichnet worden.



6 Nachrufe

6.1 Martin Schütz

UNIVERSITÄT REGENSBURG Fakultät für Chemie und Pharmazie

Mit großer Anteilnahme möchte die Fakultät Chemie und Pharmazie der Universität Regensburg mitteilen, dass am 25. Februar 2018 mit

Herrn Professor Dr. Martin Schütz

ein verdienter Kollege und ehemaliger Angehöriger unserer Universität im Alter von 54 Jahren verstorben ist.

Professor Dr. Schütz gehörte der Universität Regensburg von 2004 - 2016 an und hatte in dieser Zeit die Professur Theoretische Chemie am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie inne, bevor er einem Ruf an die Humboldt-Universität Berlin auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie folgte.

Der Forschungsschwerpunkt von Professor Dr. Schütz lag auf dem Gebiet der Quantenchemie, insbesondere auf der Entwicklung von hochpräzisen Modellen zur Beschreibung der Grund- und angeregten Zustände von großen Molekülen und Kristallen. Daneben engagierte sich Professor Dr. Schütz in den universitären Gremien für die Belange der Fakultät und der Universität. Mehrere Jahre war er gewähltes Mitglied des Fachbereichsrats der Fakultät Chemie und Pharmazie und vertrat die Fakultät in der Kommission für Informations- und Kommunikationstechnik.

Die Fakultät Chemie und Pharmazie der Universität Regensburg wird Herrn Prof. Dr. Schütz als einem in besonderer Weise verdienten und engagierten Wissenschaftler ein ehrendes Gedenken bewahren. Seiner Familie, Freunden und Verwandten gehört unser tiefstes Mitgefühl und Beileid.

Prof. Dr. Jörg Heilmann

Prof. Dr. Bernhard Dick

Für die Fakultät Chemie und Pharmazie der Universität Regensburg

In tiefer Trauer teilen wir mit, dass unser lieber Freund und Kollege

Martin Schütz

am 25. Februar 2018 daheim im Kreis seiner Familie im Alter von 54 Jahren nach einem schweren Kampf gegen seine Krankheit verstorben ist.

Martin Schütz wurde 1963 in Burgdorf (Schweiz) geboren. Er hat seinen Dokortitel in der physikalischen Chemie 1993 an der Universität Bern erworben. In seiner Doktorarbeit hat er unter der Betreuung von Prof. S. Leutwyler die vibronischen Effekte in Lösungs-Clusters experimentell und theoretisch erforscht. Nach der Promotion hat Martin Schütz sich auf die Theorie fokussiert. Sein erster Postdoc war an der Universität Lund (Schweden) mit Prof. B. Roos, wo er die Direct-Hartree-Fock- und Direct-MP2-Methode entwickelt und implementiert hat. Für diese Arbeit wurde er mit dem SUP'Prize 1996 ausgezeichnet. Danach verbrachte er mehrere Jahre an der Universität Stuttgart mit



Prof. H.-J. Werner. Von Martin Schütz wurden dort die ersten Pionierarbeiten im Bereich der lokalen quantenchemischen Methoden realisiert. In Stuttgart habilitierte er 2001 und wurde im Jahr 2002 als Hochschuldozent (C2) ernannt. Im Jahr 2004 erhielt er einen Ruf als Universitätsprofessor (C3) der Universität Regensburg. Seit 2016 war Martin Schütz Professor der Theoretischen Chemie an der Humboldt-Universität zu Berlin, der Nachfolger von Prof. J. Sauer.

Wissenschaftlich wird Martin Schütz unter anderem für seine bahnbrechenden Beiträge in der Quantenchemie der komplexen Systeme in Erinnerung sein. Er war einer der Pioniere der lokalen Post-Hartree-Fock-Theorie, die heutzutage in vielen Gruppen weltweit sehr intensiv entwickelt und angewendet wird. Diese Theorie erlaubt eine hochpräzise theoretische Beschreibung der Grund- und angeregten Zustände der großen Moleküle und Kristalle.

Martin Schütz war zudem eine sehr nette und fürsorgliche Person. Wir werden ihn schwer vermissen. Unser tiefstes Mitgefühl ergeht an seine Familie, Freunde und seine Verwandten.

Denis Usvyat, sowie Kolleginnen und Kollegen des Instituts für Chemie der Humboldt-Universität zu Berlin

6.2 Janos Ladik

Dear Member of the Board of Directors,

I have just learned the sad news that our dear colleague and personal friend Janos Ladik passed away on March 17. He was the Founder and First President of the International Society for Theoretical Chemical Physics 1990-2000.

He was a great scientist that had a fundamental impact on chemical physics in general and polymer physics in particular. He was instrumental in preparing, instructing and initiating solid state physics and quantum biology, with approved methods from quantum theory, on a truly international platform starting already with his tutoring lecture series at Löwdin's Quantum Chemistry Group in Uppsala during 1962.

His book "The Beginnings of Cancer in the Cell An Interdisciplinary Approach" with Wolfgang Förner, is not only a precious gem, but an important anticipatory application of what today has become a highly widespread and popular field of investigation.

Janos was generous, inquisitive and a true friend for his colleagues, coworkers and assistants always working in a climate of confidence and trust.

He will be dearly missed by all of us!

For those of you that knew Janos Ladik condolences can be sent to

Frau Eva Ladik
Schleifmühlstr. 3
91054 Erlangen - Ost
Germany

Erkki Brändas
President ISTCP