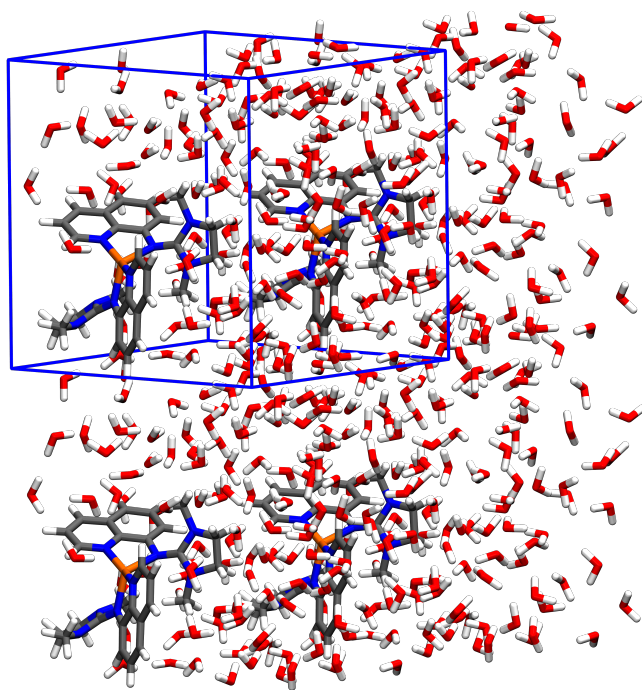


Information Theoretische Chemie



Juni 2019

Liebe Leserinnen und Leser,

wir möchten uns zuerst recht herzlich für alle eingesendeten Beiträge bedanken, ohne die die vorliegende Ausgabe der Information Theoretische Chemie nicht möglich gewesen wäre. Aufgrund des doch eher geringen Rücklaufs an Beiträgen hat sich die aktuelle Ausgabe leider etwas verspätet. Wir möchten deswegen nochmals 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 2019

Thomas D. Kühne und Patrick Müller



Impressum:

Dynamics of Condensed Matter
Lehrstuhl für Theoretische Chemie
Universität Paderborn
Warburger Straße 100
D-33098 Paderborn

Inhaltsverzeichnis

1	54. Symposium für Theoretische Chemie: “Non-Covalent Interactions”	4
2	Mitgliederversammlung 54. Symposium für Theoretische Chemie 2018 in Halle	9
3	Klatsch und Tratsch	14
3.1	Berufungen	14
3.2	Preise	15
3.3	Weitere Nachrichten	17

1 54. Symposium für Theoretische Chemie: "Non-Covalent Interactions"

Die STC 2018 im Überblick

Allgemeines

Thema: Non-covalent interactions

Teilnehmende: 291

Eingeladene Vorträge: 11

Eingereichte Vorträge: 30

Industrievorträge: 2

Hellmann-Preis: Bettina Keller

Hückel-Preis: Hans-Joachim Werner

Posterpreis: Gunnar Schmitz

Rahmenprogramm

Konferenzdinner: Dormero Rotes Ross

Stadtführung Halle

Landesmuseum für Vorgeschichte

Besuch der Leopoldina

Besuch der Franckeschen Stiftungen

Bierwanderung

Das **54. Symposium für Theoretische Chemie** fand vom 16. bis 20. September unter dem Schwerpunkt „Non-covalent interactions“ im beschaulichen Halle an der Saale statt. Die zentrale Bedeutung nicht kovalenter Wechselwirkungen in allen Bereichen der Chemie spiegelte sich auch in der Vielfalt der wissenschaftlichen Vorträge wider, angefangen bei der Strukturbildung von Proteinen, über Adsorptionsprozesse an Oberflächen, bis hin zu theoretischen spektroskopischen Methoden. In elf eingeladenen Vorträgen präsentierten führende Forscherinnen und Forscher der theoretischen Chemie aktuelle Highlights auf dem Gebiet der nicht-kovalenten Wechselwirkungen. Des Weiteren nutzten 30 überwiegend junge Nachwuchswissenschaftler die Gelegenheit, ihre Forschungsergebnisse in Vorträgen zu präsentieren. Zusätzlich boten zwei dreistündige Postersessions mit insgesamt 200 Posterbeiträgen die Chance zu regen wissenschaftlichen Diskussionen.

Sonntag

Nach der Registrierung am Sonntagnachmittag wurden die Teilnehmenden bei einem Sektempfang im Halleschen Stadthaus von **Daniel Sebastiani** mit einer Begrüßungsrede empfangen.

Montag

Den wissenschaftlichen Auftakt gab **Pavel Jungwirth** von der Karls-Universität Prag zum Thema „Exploring Solvated Electrons by Explosive as well as Non-Explosive Experiments and Simulations“. In seinem Vortrag erläuterte er, wie die Kombination von Molekulardynamik Simulationen mit Aufnahmen von Hochgeschwindigkeitskameras die „Coulomb-Explosion“ einerseits auf mikroskopischer Ebene entschlüsseln und andererseits auf makroskopischer Skala für das Auge sichtbar machen kann.

Laurence A. Nafie von der Syracuse University New York, erläuterte in seinem Vortrag „Chirality and Electron Transition Current Density in Molecular Vibrations: VCD and ROA“ die unterschiedlichen theoretischen Ansätze, welche nötig sind, um Schwingungszirkulardichroismus (VCD) und Raman-optische Aktivität (ROA) theoretisch zu beschreiben und berichtete, wie mit Hilfe der vollständigen adiabatischen Näherung die elektronische Wellenfunktion mit der Bewegung der Kerne korreliert werden kann. Als Ausblick zeigte er, wie diese störungstheoretische Behandlung der Kerngeschwindigkeit zur Berechnung von VCD Spektren verwendet werden kann.

Nach dem Mittagessen verlagerte sich der Schwerpunkt hin zu anwendungsbezogeneren Themen aus dem Gebiet der Materialwissenschaft.

Wie die kooperative Wirkung nicht-kovalenter Wechselwirkungen die Gesetze der Elektrostatik vermeintlich auf den Kopf stellen kann, erklärte **Ralf Ludwig** von der Universität Rostock in sei-



Abbildung 1.1: 291 Teilnehmerinnen und Teilnehmer hatten sich dieses Jahr zum 54. Symposium der Theoretischen Chemie im sonnigen Halle and der Saale eingefunden.

nem Vortrag „Competing interactions in ionic liquids: When cooperative hydrogen bonding overcomes Coulomb repulsion between ions of like charge.“ Am Beispiel von ionischen Flüssigkeiten bestehend aus schwach koordinierenden Anionen und polarisierbaren Kationen zeigte er, wie die attraktiven Wechselwirkungen vieler Wasserstoffbrücken die repulsiven Wechselwirkungen zwischen zwei Kationen übertreffen kann, was in der Ausbildung wasserstoffbrückenverknüpfter kationischer Cluster mündet. Die Bildung solcher kationischer Cluster ist mit dem Grad der Delokalisation der Ladung des Kations sowie der Koordinationsstärke des Anions korreliert.

Im Anschluss ging es direkt weiter mit organischen, photovoltaischen Materialien. **Denis Andrienko** vom MPI für Polymerforschung in Mainz unterstrich in seinem Vortrag die Notwendigkeit der Erweiterung theoretischer Modelle auf mesoskopische Größenordnungen für eine realistische Beschreibung photovoltaischer Systeme. Ferner veranschaulichte er am Beispiel verschiedener Kombinationen kurzkettiger Donoren mit Fullerenen, wie man durch gezielte Variation der molekularen Orientierung sowie des Grads der Donor-Akzeptor Mischung einen optimalen Kompromiss zwischen photovoltaischer Bandlücke, La-

dungsseparation, und Ladungsfreisetzung erreichen kann.

Abgerundet wurde der erste Tag der Konferenz dann durch einen Posterslam. Während das werbespotartige Präsentieren von Resultaten in anderen Bereichen der Wissenschaft bereits bekannt ist, ist es in der theoretischen Chemie noch Neuland. Nichtsdestotrotz nutzten 30 mutige Pioniere die Möglichkeit, die Anwesenden in genau einer Minute auf ihr Poster aufmerksam zu machen. Nach dem Jahrestreffen der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie konnten alle Anwesenden während insgesamt drei Stunden die vorgestellten Poster in aller Tiefe begutachten. Bei Bier, viel Wein und 1000 Brötchenhälften ließen die Teilnehmer den ersten Tag mit wissenschaftlichen Diskussionen entspannt ausklingen.

Dienstag

Der zweite Tag startete direkt mit zwei Preisverleihungen. Dieses Jahr durfte sich **Bettina Keller** von der Freien Universität Berlin über den Hellmann-Preis für herausragende Nachwuchswissenschaftler/-innen freuen.

Frau Professor Keller erhielt den Preis für „ihre

methodischen Arbeiten auf dem Gebiet der dynamischen Simulation und der Charakterisierung der Langzeitdynamik komplexer molekularer Systeme".

Der Hückel-Preis, welcher die Lebensleistung auf dem Gebiet der theoretischen Chemie würdigt, ging dieses Jahr an **Hans-Joachim Werner** von der Universität Stuttgart. Herr Prof. Werner, ein Mitentwickler von Molpro, wurde mit dem Preis für sein langjähriges Engagement im Bereich der Methodenentwicklung, insbesondere von Multireferenz- und Coupled-Cluster Methoden ausgezeichnet.

Im Anschluss der Preisverleihungen wurde gebührend mit einem Sektempfang gefeiert. Bei soviel Sekt am frühen Morgen darf natürlich das Wasser nicht vernachlässigt werden: In ihrem anschließenden Vortrag widmete sich **Marialore Sulpizi** von der Johannes Gutenberg Universität

Mainz den Charakteristika von Wasser an Festkörperoberflächen, welche sich substanziell von denen des Wassers im Bulk unterscheiden können. Diese können mit Hilfe von Summenfrequenzspektren, die aus ab-initio Molekulardynamiksimulationen berechnet werden, untersucht werden. Sie veranschaulichte, wie insbesondere die Schwingungsrelaxation an Grenzflächen entscheidend von der Umgebung abhängt, und dass die Zeitskalen des Energietransports sehr stark von der Stärke der Wasserstoffbrücken beeinflusst werden.

Über Energie- und Ladungstransport in Molekularen Schaltkreisen berichtete **Michael Thoss** von der Friedrich-Alexander-Universität Freiburg. Molekulare Schaltkreise - Systeme bestehend aus einzelnen Molekülen zwischen zwei Metallelektroden - sind einerseits vielversprechende Modellsysteme für Ladungstransport im Nanobereich. Andererseits erfordern sie eine anspruchsvolle theoretische Beschreibung, insbesondere in Systemen,



Abbildung 1.2: Zweimal Preise: Über den Hellmann-Preis durfte sich dieses Jahr Bettina Keller von der Freien Universität, Berlin freuen, während der Hückel Preis an Hans-Joachim Werner von der Universität Stuttgart ging.

in welchen elektronische und Schwingungsprozesse gekoppelt sind. Im Fokus dieses Vortrags standen deshalb mehrere methodische Ansätze zur Beschreibung vibronischer Nichtgleichgewichtseffekte.

Nach einer kurzen Kaffeepause wurden die anwesenden theoretischen Chemikerinnen und Chemiker mit Fragestellungen und Herausforderungen aus dem echten Leben konfrontiert. Dies geschah in Form von zwei Vorträgen welche sich mit der theoretischen Chemie in der Industrie beschäftigten. Den Anfang machte **Jan Wilhelm** von der BASF SE. Er berichtete wie in der Industrie Solvationsmodelle in theoretischen Simulationen eingesetzt werden, um Reaktivitäten industrierelevanter, homogener Katalysatoren abzuschätzen.

Im Anschluss demonstrierte **Gerd Berghold** von der Deutsche Bahn AG, dass die theoretische Chemie nicht nur einen fundamentalen Sockel der Chemie darstellt, sondern mittlerweile mitten im täglichen Leben angekommen ist. Er berichtete auf unterhaltsame Art und Weise, wie physikalische und mathematische Modelle zur Risikoquantifizierung in der Finanzwirtschaft eingesetzt werden. Anschließend gab **Alfred Blume** von der Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg einen historischen Überblick über die Chemie aus regionaler Perspektive.

Die Abendgestaltung beinhaltete die zweite Postersession. Wie schon am Tag zuvor konnten 30 Teilnehmer ihr Poster in 1 Minute vorstellen. Der Abend konnte dann wieder mit fachlichen Diskussionen, Speise und Trank bei der anschließenden Postersession ausklingen.

Mittwoch

Der Mittwoch Morgen startete mit einem Vortrag von **Ricardo Mata** von der Georg-August-Universität Göttingen zum Thema „Non-covalent interactions: from gas phase benchmarks to communication in enzymes“. Darin beschrieb er den Einfluss ausgedehnter Wasserstoffbrückennetzwerke auf die Kommunikation in En-

zymen. Des Weiteren hob er die Wichtigkeit akkurater Benchmarkdaten nicht-kovalenter Wechselwirkungen hervor, um Effekte wie die Chirale Erkennung theoretisch zu beschreiben.

Das Thema Chiralität wurde im Anschluss der Kaffeepause noch stärker vertieft. **Rodolphe Vuilleumier** von der Sorbonne Université Paris berichtete in seinem Vortrag, wie Schwingungszirkulardichroismus Spektren über die Fouriertransformierte der Zeitkorrelationsfunktionen des elektrischen und magnetischen Dipolmoments aus ab initio Molekulardynamiksimulationen gewonnen werden können.

Thomas Kühne von der Universität Paderborn schilderte in seinem darauffolgenden Vortrag, wie man durch effektive Kombination mehrerer Methoden die Zeitskalen von Quanten-Molekulardynamik-Simulationen signifikant verlängern kann. Durch die Berücksichtigung von Kernquanteneffekten wird eine Asymmetrie in den Bindungsenergien der Wasserstoffbrückenbindungen eines Wassermoleküls sichtbar, welche sich in experimentellen Röntgen- und Schwingungsspektren bemerkbar macht.

Der Mittwochnachmittag konnte für verschiedene Exkursionen genutzt werden. Besonders bei dem jüngeren Publikum erfreute sich hierbei die eher unpräzise, organisierte Bierwanderung entlang der schönen Saale großer Beliebtheit. Wer Füße oder Leber lieber schonen wollte, hatte die Möglichkeit, charakteristische Wahrzeichen von Halle, wie das Landesmuseum für Vorgeschichte, die Leopoldina, oder die Franckeschen Stiftungen zu besuchen, oder in einer Stadtführung mehr von der Stadt zu sehen.

Abends trafen sich dann die Teilnehmer zum Konferenzdinner im „Roten Roß“ wo zu Klavierklängen ein reichhaltiges Büffett aufgetischt wurde.

Donnerstag

Der letzte Konferenztag wurde von **Gerhard Hummer** vom MPI für Biophysik in Mainz mit einem Vortrag zum Thema „Molecular simulations of lipid membrane sensing“ eröffnet. Hierin schilderte er, wie Molekulardynamiksimulationen in Kombination mit experimentellen Techniken Mechanismen zellulärer Maschinerien entschlüsseln können.

Den krönenden Abschluss der Konferenz bildete der Vortrag von **Anna Krylov** von der University of Southern California, Los Angeles über den Einfluss von Solvenseffekten auf Photoionisationsspektroskopie von Kern- und Valenzelektronen. Sie berichtete, wie Orbitalenergie und -form eines solvatisierten Moleküls durch die lokale Struktur des Solvens beeinflusst wird und wie diese mittels experimenteller Photoelektronenspektroskopie in Kombination mit theoretischen Rechnungen untersucht werden können.

Ganz zum Ende der Konferenz wurde der Posterpreis verliehen. Freuen durfte sich in diesem Jahr **Gunnar Schmitz** von der Aarhus Universität in Dänemark welcher den Preis für sein Poster zum Thema „Benchmarking of Machine Learning algorithms in the context of constructing potential energy surfaces“ entgegen nahm.

In seiner abschließenden Rede dankte Daniel allen Teilnehmenden sowie dem Organisationsteam und entließ alle Anwesenden gefühlte fünf Kilogramm schwerer - in Magen und Kopf - nach Hause.



Abbildung 1.3: Der stolze Posterpreisempfänger, **Gunnar Schmitz** von der Aarhus Universität, Dänemark, zusammen mit Daniel Sebastiani.

2 Mitgliederversammlung 54. Symposium für Theoretische Chemie 2018 in Halle

Mitgliederversammlung

54. Symposium für Theoretische Chemie 2018 in Halle

Beginn: 17.09.2018 18:20

Ende: 17.09.2018 19:00

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

Tagesordnung

- 1) Genehmigung der Tagesordnung
- 2) Protokoll der Mitgliederversammlung 2017
- 3) Bericht des Vorstands
- 4) Kassenprüfung 2017
- 5) Neuwahl des Vorstandes 2019
- 6) Aus DFG-Fachkollegiaten: Förderung von nicht opensource Software
- 7) Verschiedenes

TOP 1

Die Tagesordnung wird einstimmig angenommen.

TOP 2

Zum Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC anlässlich des 53. Symposiums für Theoretische Chemie in Basel gibt es keine Anmerkungen und es wird ohne Gegenstimme genehmigt.

TOP 3

- Mitgliedschaft:

Am 1. September 2018 zählte die AGTC 233 Mitglieder. Es wurden 2 Austritte und 4 neue Eintritte verzeichnet. Der Jahresbeitrag beträgt weiterhin 13.- Euro. Ab einem Lebensalter von 58 Jahren besteht die Möglichkeit einer Lebensmitgliedschaft analog zum Modell der Deutschen Bunsen-Gesellschaft.

Es kam die Frage auf, ob eine Lebensmitgliedschaft auch unabhängig von Bunsen möglich wäre. Ja, dies ist möglich.

- Website und Nachrichten:

Unsere Website (www.theochem.de) ist jetzt mit eine Impressum und Datenschutzerklärung nach Datenschutz-Grundverordnung ergänzt.

Nachrichten an Monika Lickfeld (lickfeld@mpi-muelheim.mpg.de) nur bis Ende 2018, da sie dann in Pension geht. Ab Januar 2019, übernimmt die Aufgabe Silke Lohmann (lohmann@kofo.mpg.de). Besten Dank an F. Neese für seine weitere Unterstützung der AGTC mit der Website und Email Verteilung aus der MPI Kohlenforschung in Mülheim.

- Fachkollegien der DFG:

Die Struktur der Fachkollegien wurde verändert. Es wurde nun ein eigenes Fachkollegium „Theoretische Chemie“ eingerichtet. Dieses setzt sich aus dem Fach „Theoretische Chemie: Elektronenstruktur, Dynamik, Simulation“ mit 2 Fachkollegiaten und dem Fach „Theoretische Chemie: Moleküle, Materialien, Oberflächen“ mit 3 Fachkollegiaten zusammen. Die Wahl findet 2019 statt, jeder mit Dr. Titel kann wählen.

- Hellmann-Preis:

Der Hellmann-Preis wird nach Möglichkeit jährlich vergeben. Die Voraussetzungen für den Hellmann-Preis sind weiterhin ein Lebensalter von maximal 40 Jahren, eine herausragende abgeschlossene Habilitation oder äquivalente Leistung und bisher keine Lebenszeit-Professur. Der/die BewerberIn sollte verbunden mit der deutschsprachigen Forschungslandschaft sein. Daraus ergibt sich eine relativ kleine Anzahl an möglichen BewerberInnen, die sich nominieren lassen können. Der Vorstand bittet, alle NachwuchswissenschaftlerInnen, die sich dafür geeignet halten, nominieren zu lassen. Nominierungen sind bis zum 15. 3. 2019 an den AGTC-Vorsitzenden zu senden. Eine Selbstbewerbung sowie Nachnominierungen sind nicht möglich. Der aktuelle Hellmann Jury besteht aus Beate Paulus (Vorsitz), Robert Berger, Bernd Engels, Johannes Kästner, Jürgen Gauss, Irene Burghard, und Oliver Kühn

- Nachwuchsgruppen:

Die AGTC führt Nachwuchsgruppen, für deren Mitglieder in der Regel folgende Definition gilt: Die Promotion sollte vor maximal 10 Jahren erfolgt sein, nach der Promotion erfolgte ein Ortswechsel sowie ein Postdoc-Aufenthalt, es wird eine akademische Laufbahn mit Professur angestrebt, es wird eine unabhängige Arbeitsgruppe geleitet, die eigene Stelle wurde selbst extern oder intern wettbewerblich eingeworben und es wird mindestens ein/e MitarbeiterIn mit Diplom/Master geführt, wobei letzteres in höherem Stadium ausgesetzt werden kann. Nähere Informationen zu Nachwuchsgruppen sind unter <http://www.theochem.de/agtc.arbeitsgruppen.html> zu finden. In Grenzfällen wird der AGTC-Vorstand die Zuordnung als unabhängige Nachwuchsgruppe überprüfen.

- Erich-Hückel-Preis:

Der Erich-Hückel Preis wird von der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) an WissenschaftlerInnen verliehen, die sich durch hervorragende Arbeiten auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie besondere Verdienste erworben haben. Er ist nach Erich Hückel benannt mit €7.500 dotiert und wurde erstmals 2016 an Prof. Werner Kutzelnigg verliehen. 2018 erhielt Prof. Hans-Joachim Werner den Preis. Die Deadline für die Einreichung von Nominierungen für den Erich-Hückel-Preis 2020 wird im Jahr 2019 bekannt gegeben.

- INFO-TC:

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

- STC:

Dieses Jahr findet die STC 2018 in Halle unter der Ausrichtung von Prof. Daniel Sebastiani statt. Ihm wird für die Ausrichtung gedankt. Im nächsten Jahr findet die STC 2019 in Rostock (Deutschland) von 22.-27. September 2019 statt. Organisiert wird sie von Prof. Oliver Kühn und Prof. Ralf Ludwig. 2020 findet sie in Innsbruck (Österreich) von 14.-17. September 2020 unter der Organisation von Prof. Klaus Liedl und Dr. Maren Podewitz statt. Im Jahr 2021 wird sie von Prof. Bernd Engels, Prof. Roland Mitric und Prof. Volker Engel in Würzburg abgehalten, 2022 unter der Organisation von Prof. Andreas Dreuw in Heidelberg (Deutschland).

- AGTC präsentiert sich:

Theorie sollte mehr Präsenz zeigen. Dafür wird erstmalig in der GDCh-Wissenschaftsforum Chemie „WiFo“, von 16. Bis 18. September 2019 in Aachen eine Theorie session stattfinden. Auch in der Bunsentagung mit dem Titel „Functional Materials“, welche von 30. Mai bis 01. Juni 2019 in Jena stattfindet, sollte eine Theorie session inkludiert sein. Weiters findet das 17. Central European Symposium on Theoretical Chemistry 2019 in Burg Schleining (Österreich) von 9. bis 12. September 2019 statt. Nähere Infos sind unter www.cestc2019.univie.ac.at zu finden.

TOP 4

Kassenprüfung der AGTC und des Hellmann-Fonds

- Hellmann-Fonds:

Im Jahr 2015 wurde ein Buchungsfehler bei Hellmann-Fonds-Konto entdeckt. Eine Spende von €520 wurde demnach nicht gutgeschrieben, sondern abgezogen. Es wurde ein korrigierter Kontoauszug übermittelt, der akzeptiert wurde. Diese Korrektur wurde jedoch von der Buchhaltung nicht durchgeführt.

Im Jahr 2016 wirkt die nicht erfolgte Korrektur im Kontoauszug nach. Aus diesem Grund wurden für 2016 angegebene Zahlen für Stiftungsmittel und Gesamtvermögen nicht akzeptiert.

Dieser Fehler wurde von Wirtschaftsprüfern nicht entdeckt, aus diesem Grund sind die Jahre 2015 und 2016 bei der GDCh abgeschlossen und eine Korrektur kann erst im Jahr 2017 erfolgen.

Der Kontoabschluss 2016 für den Hellmann-Fonds konnte nicht akzeptiert werden und ein endgültiger Kontoabschluss muss erst erreicht werden. Eine Korrektur von -520 Euro steht für 2018 aus.

- Finanzen der AGTC:

Aus dem Jahr 2017 bestägt ein Vortrag von 48957.39 Euro. Die Kosten der Domainverwaltung beziehen sich auf 0.00 Euro. Aus den Mitgliedsbeiträgen ergeben sich 2840.50 Euro. Per 31.12.2016 wird somit ein Guthaben von 51797.89 Euro verzeichnet. Die EDV-Kosten entfallen, da die AGTC 2017 versehentlich nicht damit belastet wurde. Der Abschluss für 2017 wurde bereits festgestellt, eine Korrektur von -58 EURO für die EDV erfolgt Ende 2018.

Da weder für den Hellmann-Fonds, noch für die AGTC ein gültiger Abschluss vorhanden ist, wird der Kontoabschluss für 2017 nicht akzeptiert.

Eine Anmerkung zu freien Rücklagen wurde eingebracht: Da sich die freien Rücklagen auf 7000 Euro belaufen, was hoch ist, wurde empfohlen, sich hierüber Gedanken zu machen. Eine Anmerkung fiel, dass die Rücklagen eventuell durch eine Zustiftung abgebaut werden können.

Eine weitere Frage wurde gestellt, was mit den Einnahmen der AGTC passiert.

TOP 5

Neuwahl des Vorstandes 2019

- Vorstand 2017-2019

Im Jahr 2017-2019 war L. González Vorsitzende mit Stellvertreter W. Klopper. Weitere Vorstände waren C. Ochsenfeld, M. Reiher, C. Marian, S. Grimme (GDCh), D. Marx (DPG) und W. Thiel (DBG).

- Vorstand 2019-2021

Für die nächste Vorstand kandidieren weiterhin L. González, W. Klopper, C. Ochsenfeld, M. Reiher, C. Marian, so wie P. Saalfrank and F. Neese. S. Grimme, D. Marx und W. Thiel bleiben als Vertreter der GDCh, DPG, bzw. DBG, teil des Vorstands. Die Wahl findet elektronisch anfang 2019 statt.

TOP 6

Aus DFG-Fachkollegiaten: Förderung von nicht-opensource Software

Das DFG-Fachkollegiat Theoretische Chemie (S. Grimme, A. Groß, D. Marx, F. Neese, P. Saalfrank) öffnete eine Diskussion mit folgender Frage:

„Es geht darum, wie wir als Fachkollegiaten oder auch als Fachgutachter der DFG mit Anträgen umgehen sollen, die Förderung für zu entwickelnde Software beantragen, diese Software der Allgemeinheit aber nicht oder nur unter unverträglich hohen Kosten zugänglich machen.“

Das Problem:

DFG-Anträge für/mit Softwareentwicklung sind oftmals nicht frei zugänglich und/oder rein kommerziell. Darüberhinaus gibt es unterschiedliche Gutachter- oder Fachkollegiatenmeinungen. Soll es eine allgemeine Verfahrensweise geben und eine Empfehlung an DFG?

Mögliche Modelle:

- Keinerlei Verpflichtungen zum allgemeinen Zugang (bisher)
- Zugänglichmachung als Pflichtvorgabe (folgende Varianten: open-source, executables verfügbar, Verfügarmachung nach Karenzzeit, Verfügarmachung für akademische Einrichtungen)
- Sonstiges: Verfügbarkeit im Abschlussbericht dokumentiert, Verfügbarkeit „auf Zuruf“, Gesichtspunkt der Kostenfreiheit

Pro „Zugänglichkeitspflicht“

- Gerechte Verwendung von Steuergeldern
- Wissenschaftliche Verifizierbarkeit
- Wissenschaftlicher Fortschritt

Gegen „Zugänglichkeitspflicht“

- Bürokratie, Kontrolle – wie?
- Wissenschaftliche Konkurrenz
- Verfügarmachung, Pflege, Dokumentation, Implementierung der Software – wie?
- Nicht-professionelle Software / Entwicklungssoftware?
- Juristische Rahmenbedingungen bei kommerziellem Vertrieb
- Nachteile für Theorieprojekte bei Antragstellung?

Kommentare aus dem Publikum:

- Wie wird das im experimentellen Bereich gehandhabt? – es gibt keine einheitliche Regelung, es muss keine Muss-Regel sein, kann auch auf einer Empfehlung stattfinden
- Software = Werkzeug, keine Anträge bestehen nur aus Softwareentwicklung, sondern beinhalten Softwareentwicklung; Experimentatoren müssen auch lange Geräte etc. aufbauen
- Instandhaltung von Software kostet Geld
- Algorithmus und Gleichungen zur Verfügung stellen sollte ausreichen, um das Ergebnis reproduzierbar zu machen.
- Es sollten sämtliche Forschungsergebnisse exakt dokumentiert und freigegeben werden, damit die Forschungsergebnisse der Allgemeinheit zur Verfügung stehen und reproduziert werden können. Die Konkurrenz muss aber nicht in der Lage sein, 1:1 das Selbe zu verwenden.
- Meinung dagegen, dass opensource verpflichtend ist, weil manche Gruppen gar keine Möglichkeit besitzen, ein Programm zu Warten bzw. so zu schreiben, dass es für alle verwendet werden kann.
- Weitere Meinung dagegen: weil die meisten Entwicklungen in Turbomole etc. stattfindet – es müsste vorher eine Plattform generiert werden, wo dies zur Verfügung gestellt wird; man würde kleine Gruppen und junge Leute ausgrenzen, weil man manche kommerziellen Programme nicht zugänglich machen kann.

- Dagegen, weil Experimente ebenso nicht frei zugänglich sind.
- Vorschlag für einen Lösungsweg: öffentliche Steuermittel für kommerzielles Programm sollte nicht vorkommen; Bedingung könnte sein, dass man ein Programm nach einer bestimmten Karenzzeit akademisch zur Verfügung stellt bzw. gegen vertretbaren Betrag kaufbar macht (es soll kein Profit entstehen, sondern nur die Wartung etc. gesichert werden mit dem Preis)
- Kommentar: es werden zur Entwicklung nicht nur die Fördergelder verwendet, sondern normalerweise wird diese auch von anderem Geld finanziert
- Akademisch vertretbare Zugänglichkeit
- Zugänglichmachung verursacht Kosten
- Software als Produkt und Software als Service muss unterschieden werden
- Kommentare zu nach der Förderungszeit:
 - Vgl. mit individuellem Entwickler: dieser hat Freiheit zu entscheiden, ob es open source ist – man kann keine Auflagen machen
 - man kann keine Pflichten über die Förderungszeit hinaus einführen – benötigt der Abschlussbericht ein eigenes Kapitel? Wie gut zugänglich? zB alle Formeln publiziert, etc. – es muss irgendwie in einer Form der Allgemeinheit zugänglich sein
 - auch derzeit wird gefordert, dass Daten aufgehoben werden nach der Förderungszeit
- Formeln sollen offengelegt werden; wie sichern wir ein Patent für Karenzzeit?

TOP 7

Verschiedenes:

Theoretical Chemistry Genealogy Project wurde von D. Andrae vorgestellt (<http://www.genealogy-theochem.de/>). Hier befinden sich mittlerweile 3500 Einträge. Jeder wurde aufgefordert, die Einträge zu aktualisieren.

Die Sitzung wurde durch die Vorsitzende L. González beendet.

Leticia González

STC 2018 in Halle, 17. September 2018

3 Klatsch und Tratsch

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

3.1 Berufungen

- Dr. Blazej Grabowski vom Max-Planck Institut für Eisenforschung hat einen Ruf an die Universität Stuttgart auf die W3-Professur für Materialdesign angenommen.



- Jun.-Prof. Dr. Bettina Keller von der Freien Universität Berlin hat den Ruf auf die W2-Professur für Computational Chemistry an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg abgelehnt. Zudem hat Frau Keller einen Ruf an die Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf für die W1-Juniorprofessur mit Tenure Track “Physikalische Chemie - Theorie und Simulation komplexer Systeme” erhalten.



- PD Dr. Ralf Tonner von der Philipps-Universität Marburg hat einen Ruf an die Technische Universität Chemnitz auf die Professur (W2) “Angewandte Quantenchemie und Computational Chemistry” erhalten.



- Dr. Vera Krewald von der University of Bath hat einen Ruf an die Technische Universität Darmstadt auf die Assistenzprofessur (W2, Tenure Track) für Theoretische Chemie angenommen.



- Dr. Carolin König von der Königliche Technische Hochschule in Stockholm hat einen Ruf an die Christian-Albrechts-Universität zu Kiel auf die Juniorprofessur (W1) für Theoretische Chemie angenommen.



3.2 Preise

- Prof. Dr. Hans-Joachim Werner von der Universität Stuttgart ist mit dem Erich-Hückel-Preis für Theoretische Chemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker ausgezeichnet worden.



- Jun.-Prof. Dr. Bettina Keller von der Freien Universität Berlin ist mit dem G. A. Hellmann-Preis der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie ausgezeichnet worden.

- Prof. Dr. Laura Gagliardi von der University of Minnesota ist mit dem Humboldt-Forschungspreis ausgezeichnet worden. Zitat aus der Laudatio: “Laura Gagliardi has made seminal contributions to the development of electronic structure methods and their use for understanding complex chemical systems, in particular in the challenging area of strong correlation. She is developing improved variants of multi-reference methods that extend their range of applicability to larger and more complex molecules.”

Professor Joachim Sauer, Humboldt-Universität, ist Gastgeber des für das erste Halbjahr 2019 geplanten Aufenthaltes in Berlin. Laura Gagliardi wird mit Chemikern des Exzellenzclusters [Uni\(Sys\)Cat](#) auf dem Gebiet mehrkerniger Übergangsmetallverbindungen zusammenarbeiten.



- Prof. Dr. Joachim Sauer von der Humboldt-Universität zu Berlin ist für seine “Outstanding contributions to the quantum chemistry of solid materials and their successful application to heterogeneous catalysis” von der World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) mit der Schrödinger Medaille ausgezeichnet worden.



- Prof. Dr. Anna Krylov von der University of Southern California ist mit dem “MAINZ Graduate School of Excellence Visiting Professorship 2018” ausgezeichnet worden.



- Prof. Dr. Sandra Luber von der Universität Zürich hat von der Deutschen Gesellschaft für Katalyse den Jochen Block-Preis zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses auf dem Gebiet der Katalyse, sowie den Carl-Duisberg-Gedächtnispreis der Gesellschaft Deutscher Chemiker und den OpenEye Outstanding Junior Faculty Award der American Chemical Society erhalten.



- Dr. Joachim Paier von der Humboldt-Universität zu Berlin hat von der Deutschen Bunsengesellschaft für physikalische Chemie den Nernst-Haber-Bodenstein-Preis erhalten.



- Dr. Giovanni Maria Piccini von der Eidgenössischen Technische Hochschule Zürich hat von der Deutschen Bunsengesellschaft für physikalische Chemie den Ewald-Wicke-Preis erhalten.



3.3 Weitere Nachrichten

- Prof. Dr. Leticia González von der Universität Wien wurde am 17.06.2018 in die International Academy of Quantum Molecular Science IAQMI aufgenommen. Außerdem wurde ihr am 04.07.2018 die Ehrendoktorwürde der Université de Lorraine in Nancy verliehen. Desweiteren

wurde Sie als ChemPubSoc Europe Fellow (Class 2016/2017) und als Fellow of the European Academy of Sciences gewählt.



- Prof. Dr. Stefan Grimme von der Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn wurde als ordentliches Mitglied in die Akademie der Wissenschaften Leopoldina aufgenommen.



- Dr. Michael Römelt von der Ruhr-Universität Bochum war mit seinem Antrag auf eine Emmy Noether-Nachwuchsgruppe bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft erfolgreich.



- Prof. Dr. Hans-Joachim Sauer wurde zum auswärtigen Mitglied der Royal Society gewählt.
[Leopoldina News](#)
[RSC News](#)
- Dr. Jan Gerit Brandenburg erklärt im Rahmen der ard-alpha Sendung Campus-Talks in unter 13 Minuten, wie die Theoretische Chemie beim Design von molekularen Materialien helfen kann.
[Link zum Video](#)



- "Erfolgreich bei der Stoffdatenvorhersage"

Nachdem das Team der Firma COSMOlogic (Leverkusen) schon in 2016 den SAMPL5 Challenge zur Blindvorhersage von Alkan-Wasserverteilungskoeffizienten klar gewonnen hatte, hat es nun auch beim SAMPL6 logP(Oktanol-Wasser) Wettbewerb die Plätze 1 und 3 von 91 Einsendungen belegt.

[Github Link](#)

Stefan Kast von der TU Dortmund belegte Platz 4. Der SAMPL6 Challenge für die pKa Vorhersage wurde letztes Jahr von der Gruppe von Stefan Grimme (Universität Bonn) unter Verwendung der COSMO-RS Methode gewonnen.