

Information Theoretische Chemie

April 2020



Liebe Kolleginnen und Kollegen,

ihr haltet die erste Ausgabe der *Information Theoretische Chemie* in Euren Händen, die von uns herausgegeben wird und die auch die allerletzte Ausgabe des InfoTC sein wird. Denn unser Vorstand hat beschlossen die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie aufzulösen und vollständig in der Gesellschaft deutscher Chemiker aufzugehen. Angesichts der immer weiter steigenden Bedeutung der Theoretischen Chemie in chemischer Forschung und Lehre macht es keinen Sinn mehr sich durch die Existenz der AGTC von den anderen Bereichen der Chemie abzugrenzen. Denjenigen unter Euch, die denken: „Endlich!“, und denjenigen, denen „Um Himmels Willen!“ durch den Kopf schießt, sei zugerufen: „April, April!“. Das ist natürlich nur ein verspäteter Aprilscherz, der die vor Euch liegende, an sich ziemlich traurige Ausgabe des InfoTC zu Beginn etwas aufheitern soll.

Wie bei einer Sportveranstaltung zu deren Beginn man mit einer Schweigeminute einem verstorbenen Mitglied gedenkt, so beginnt das InfoTC gleich mit dem Andenken an vier verstorbene Mitglieder: Werner Kutzelnigg, Walter Thiel, Georg Hohlneicher und Bernd Schimmelpfennig. Traurigkeit überschattet dann ein wenig die Lektüre der verbleibenden Artikel, die jedoch sehr gelungen und lesenswert sind. Es wird vom letztjährigen Symposium in Rostock und der Mitgliederversammlung berichtet, Dr. Ganna Gryn'ova stellt ihre Arbeitsgruppe am Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS) vor und zum Schluss Klatschen und Tratschen wir ein wenig. Ausdrücklich möchten wir uns bei den Autoren aller Beiträge aufs Herzlichste bedanken.

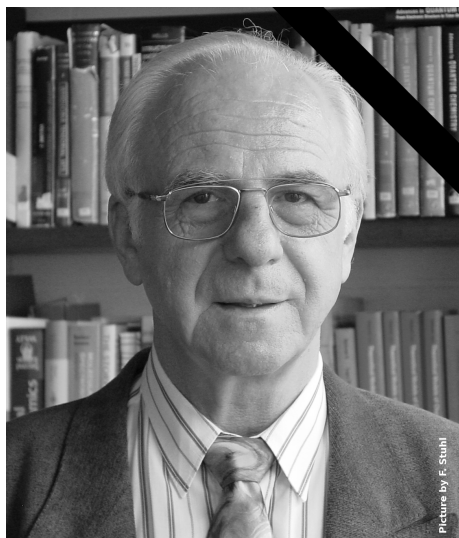
Zuletzt kommt der übliche Aufruf, die flehende Bitte an Euch, uns Anregungen, Mitteilungen, Beiträge, Wissenswertes, Rufe, Ehrungen, Preise, Klatsch und Tratsch aus dem Umfeld der Arbeitsgemeinschaft Theoretischen Chemie zu schicken, damit die nächste Ausgabe wieder lebendig, interessant und vor allem fröhlicher wird als diese.

Take care, stay home and healthy,

Andreas Dreuw
Heidelberg, April 2019

Impressum:

Lehrstuhl für Theoretische und computergestützte Chemie
Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen
Ruprecht-Karls Universität Heidelberg
Im Neuenheimer Feld 205
69120 Heidelberg



Werner Kutzelnigg

1933 – 2019

Mit Werner Kutzelnigg verliert die Quantenchemie einen international prägenden Vertreter dieses Fachs. Er hat in den gut fünfzig Jahren seines dokumentierten wissenschaftlichen Wirkens, von 1963 bis zu seiner letzten Publikation aus dem August 2014, die Quantenchemie in äußerst vielfältiger und ausgesprochen origineller Weise vorangebracht. Mehr dazu aber später.

Während seiner Promotion in Freiburg hat sich Werner Kutzelnigg bei Mecke mit experimenteller Chemie beschäftigt und hierzu eine Fülle von Originalarbeiten in den Jahren 1959 bis 1962 publiziert, eine *Zur KBr-Preßtechnik in der IR-Spektroskopie*. Werner Kutzelnigg war also „Chemiker“ von Anfang an, im Gegensatz zu vielen Quantenchemikern seiner Generation, die in der Physik sozialisiert wurden. In der ihm eigenen Art hat er seine Publikationsliste selbst kommentiert, in dem er für ihn selbst wichtige Arbeiten gekennzeichnet hat – denn bekanntlicherweise stand Werner Kutzelnigg der heute weitverbreiteten bibliometrischen Bewertung kritisch bis ablehnend gegenüber; seine „kommentierte Publikationsliste“ ist seit langer Zeit über www.theochem.rub.de öffentlich zugänglich. Aus der Zeit seiner Promotion haben zwei von etwa zehn Arbeiten zu IR-spektroskopischen Untersuchungen diese Hervorhebung erfahren.

Der kühne Schritt von der experimentellen zur theoretischen Chemie erfolgte direkt nach der Promotion, als Werner Kutzelnigg nach Paris zu Pullman und Berthier ging (1960-1963) und danach zu Löwdin nach Uppsala. Interessanterweise gibt es keine gemeinsamen Publikationen mit Löwdin in begutachteten Zeitschriften, trotzdem erkennt man prägende Einflüsse, etwa bei Kutzelniggischen Arbeiten aus den 1960iger Jahren zu reduzierten Dichtematrizen und natürlichen

Orbitalen. Im Anschluß an Uppsala wechselte Werner Kutzelnigg 1964 nach Göttingen zu Bingel und habilitierte sich dort rasch (1967). Ab 1970 war er kurzzeitig in Karlsruhe, um schließlich 1973 den Ruf auf den neu geschaffenen Lehrstuhl für Theoretische Chemie in Bochum anzunehmen. Diesen baute er bis zu seiner Emeritierung im Jahr 1998 zu einem international sichtbaren Leuchtturm der Quantenchemie auf. Wenn man Kutzelniggs “kommentiertes Publikationsverzeichnis” anschaut stellt man ein starkes Ansteigen der von ihm markierten Publikationen fest mit Beginn der 1970iger Jahre. Dieser Anteil wichtiger Arbeiten bleibt über viele Jahre im wesentlichen konstant, steigt aber nochmal im neuen Jahrtausend, also nach der Emeritierung, signifikant an.

In der Tat sind die vielen bahnbrechenden Beiträge, die Werner Kutzelnigg im Laufe der Jahrzehnte geleistet hat, hinlänglich bekannt. Insbesondere zu nennen sind die direkte Bestimmung der PNOs (Pair Natural Orbitals) um diese in korrelierten Rechnungen zu verwenden, die IGLO (Individual Gauge for Localized Orbitals) Methode zur Berechnung von NMR (Nuclear Magnetic Resonance) chemischen Verschiebungen, Quantenchemie im Fockraum, seine DPT (Direct Perturbation Theory) zur Behandlung relativistischer Effekte, sowie der Einsatz explizit korrelierter Wellenfunktionen in Elektronenstrukturechnungen. Gerade die erst- und letztgenannten Methoden haben maßgeblich zur Effizienzsteigerung von genauen Rechnungen geführt und sind heutzutage in weiterentwickelter Form, versteckt hinter Akronymen wie PNO, DLPNO, r_{12} oder F12 im Zusammenhang mit Coupled Cluster Verfahren, in vielen modernen Quantenchemiepaketen zu finden. Seine IGLO Methode, basierend auf der fundamentalen Arbeit *Theory of Magnetic Susceptibilities and NMR Chemical Shifts in Terms of Localized Quantities* (1980 publiziert im Israel Journal of Chemistry), hatte zu ihrer Zeit einen ganz enormen Einfluß auf die Verbreitung von NMR Methoden zur Aufklärung von Molekülstrukturen genommen, wie noch heute experimentelle Chemiker der Generation sich gerne erinnern.

Wie anfangs betont war Werner Kutzelnigg Chemiker und “suchte” die Chemie konzeptionell in der Quantenphysik – also jenseits numerischer Berechnungen konkreter molekularer Systeme. So hat er in der kommentierten Publikationsliste seine wegweisenden Arbeiten in der Angewandten Chemie zur einfach klingenden Frage *Was ist chemische Bindung?* (1973), und eine Dekade später zur chemischen Bindung bei den höheren Hauptgruppenelementen (1984), als herausragend eingestuft. Entsprechend widmete Werner Kutzelnigg auch dem Verständnis der chemischen Bindung(en) den gesamten zweiten Band (*Teil II: Die chemische Bindung*) seiner bedeutenden Monographie *Einführung in die Theoretische Chemie* aus den 1970iger Jahren (erfreulicherweise 2001 nachgedruckt von Wiley-VCH). Daran schließt sein Artikel *What I like about Huckel theory*

(2007) logisch an, in dem Werner Kutzelnigg argumentiert, daß auch heute noch das Hückel MO Modell seine Daseinsberechtigung habe, um zentrale Aspekte der chemischen Bindung qualitativ zu verstehen. Ebenso war Werner Kutzelnigg daran interessiert, überwiegend empirische Konzepte wie die Hundschen Regeln (*Hund's Rules, the Alternating Rule, and Symmetry Holes*, 1993, sowie *Hund's rules*, 1996) oder Fermis Kontaktwechselwirkung (*Origin and meaning of the Fermi contact interaction*, 1988) aus der Quantenmechanik heraus fundamental zu verstehen. Bei Hund interessierte ihn darüberhinaus, welche Konzepte der Quantenphysiker in the Quantenchemie eingebracht hat (*Friedrich Hund and Chemistry*, 1996).

Die vielfältigen und überaus bedeutsamen Beiträge aus Werner Kutzelniggs Hauptschaffensphase wurden bereits mehrfach in Laudationes gewürdigt. Sie sind zudem die Grundlage vielfältiger Ehrungen in Deutschland und weltweit: Carl-Duisberg-Gedächtnispreis der GDCh (1971), Schrödinger Medal der World Association of Theoretical and Computational Chemists (1995), Liebig-Denkmünze der GDCh (1996), Dionýz Ilkovič Medal der Slovak Academy of Sciences (1998) sowie den 2016 erstmals vergebenen Erich-Hückel-Preis der GDCh, der Werner Kutzelnigg auf der Bochumer STC von Wolfram Koch überreicht wurde. Werner Kutzelnigg wurde auch in die International Academy of Quantum Molecular Science berufen, aber ganz erstaunlicherweise in keine Akademie der Wissenschaften in Deutschland.

Nach seiner Emeritierung im Jahr 1998 blieb Werner Kutzelnigg weiterhin wissenschaftlich hochaktiv, ja er begründete in der Dezemberausgabe 2001 des *Info Theoretische Chemie* die neue Rubrik *Emeriti stellen sich vor*. Nach einer aufschlußreichen Einleitung entwickelt er dort sein Forschungsprogramm für den formalen Ruhestand wie folgt: 1. Elektronenkorrelation, 2. Relativistische Quantenchemie, 3. Konvergenz von Basisentwicklungen, 4. Nichtadiabatische Korrekturen. Werner Kutzelnigg verzeihe mir den Blick ins *Web of Science*, aber dadurch erkennt man rasch die große Resonanz, die seine Publikationen – insbesondere zu den Punkten 1 und 2 dieser Agenda – zuteilwurde. Zur Behandlung der Elektronenkorrelation haben ihn in der Spätphase seines Schaffens insbesondere die Grundlagen der Dichtekumulantenfunktionaltheorie (DCFT) fasziniert, wie er 2001 explizit schreibt: *Diese Arbeiten stehen im Zusammenhang damit, daß ich die Erfolge der Kohn-Sham-artigen Dichtefunktionaltheorie als eine Herausforderung an die ab-initio Theorie empfinde, nach besser begründeten Ansätzen zu suchen, die bei vergleichbar geringem Rechenaufwand die richtige Antwort aus dem richtigen Grund geben können, wodurch es möglich sein sollte, das verlorene Terrain 'wiederzuerobert'.* Seine DCFT hat er im Jahr 2006 in der Einautorennarbeit *Density-cumulant functional theory* in JCP eingeführt und ab 2010 im Rahmen einer externen Zusammenarbeit implementiert und getestet. Sich daran

anschließende Entwicklungen der Kooperationspartner befassen sich übrigens mit Density Fitting, analytischen Gradienten und linearer Antworttheorie basierend auf DCFT. Die überhaupt letzte Arbeit Werner Kutzelniggs, die im *Web of Science* erfaßt wird, ist dem Thema *Density cumulant functional theory from a unitary transformation* ... gewidmet und stammt aus dem Jahr 2014. Ad 2, der Relativistik, hat insbesondere sein Œvre ab Mitte 2000 zur Matrixformulierung des Dirac Operators und der daraus resultierenden quasirelativistischen Theorie eine beeindruckende Resonanz in der aktuellen Literatur erzeugt.

Dies zeigt, daß Werner Kutzelnigg auch noch bis ins hohe Alter wissenschaftlich in der obersten Liga gespielt hat, und sich nach seiner Emeritierung eben nicht primär mit historischen Rückblicken oder Übersichtsarbeiten abgegeben hat. Dazu passt auch der Titel des Bochumer Festkolloquiums im Oktober 2013, den Werner Kutzelnigg für dieses internationale Symposium zu seinem 80. Geburtstag gewählt hat: *40 Years of Concepts in Theoretical Chemistry from the Bochum Perspective*.

Werner Kutzelnigg wird als Grandseigneur seines Fachs noch lange Zeit im kollektiven Gedächtnis der Theoretischen Chemie – aber auch darüber hinaus – lebendig bleiben und durch sein Werk weiterhin tief in die Quantenchemie hinein wirken.

Dominik Marx
Lehrstuhl für Theoretische Chemie
Ruhr-Universität Bochum

Walter Thiel

7. 3. 1949 – 23. 8. 2019

Emeritiertes Wissenschaftliches Mitglied des
Max-Planck-Instituts für Kohlenforschung,
Mülheim an der Ruhr



Am 23. August 2019 verstarb unerwartet im Alter von 70 Jahren Prof. Dr. Walter Thiel, emeritierter Direktor am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung. Walter Thiel zählte zu den renommiertesten Vertretern der Theoretischen Chemie weltweit und hat in unserem Forschungsgebiet tiefe und nachhaltige Spuren hinterlassen. Sein plötzlicher Tod hat im Kreise seiner vielen Freunde, Bekannten und Kollegen tiefe Betroffenheit ausgelöst. Wir verlieren mit Walter Thiel, einen großen, wichtigen Wissenschaftler und einen besonders wertvollen Menschen und Kollegen.

Walter Thiel wurde am 7. März 1949 in Treysa geboren und fiel bereits in frühen Jahren durch seine hervorragenden intellektuellen Fähigkeiten auf. Motiviert durch seinen Chemielehrer entschied er sich für ein Studium der Chemie, das er 1966 an der Universität Marburg aufnahm und 1973 mit dem Doktorat abschloss. Seine Dissertation fertigte er in der Gruppe von Armin Schweig an, in der er über Intensitäten in Photoelektronenspektren forschte. Diese Arbeit fand stets in enger Kooperation mit dem Experiment statt, was für das gesamte wissenschaftliche Leben Walter Thiels charakteristisch bleiben sollte.

Walter Thiel wurde am 7. März 1949 in Treysa geboren und fiel bereits in frühen Jahren durch seine besonderen intellektuellen Fähigkeiten auf. So erlangte er sein Abitur bereits im Alter von 17 Jahren und entschied sich, motiviert durch seinen Chemielehrer Kurt Freytag, für das Studium der Chemie, welches er in Marburg im Jahre 1966 aufnahm und im Jahre 1973 mit dem Doktorat abschloss. Bereits in dieser Zeit engagierte er sich aktiv in Gremien und war als Fachschaftsvertreter maßgeblich an der Erneuerung des Studiengangs Chemie in Marburg beteiligt. Das uneigennützige Engagement für die Belange seines Faches hat Walter Thiel lebenslang begleitet und geprägt. Seine Doktorarbeit fertigte er in der Gruppe von Armin Schweig an, in der er über Intensitäten in Photoelektronenspektren forschte. Diese Arbeit fand in sehr enger Kooperation mit dem Experiment statt, ein weiteres Charakteristikum von Walter Thiels gesamtem wissenschaftlichem Leben.

Seine Doktorarbeit motivierte Walter Thiel dazu, eine wissenschaftliche Karriere anzustreben, die er folglich als Postdoktorand in der Gruppe von Michael Dewar in Austin/Texas fortführte (1973-1975), wo er sich mit semi-empirischer Quantenchemie beschäftigte. Dies erschien als eine sehr logische Wahl, da Walter Thiel an der Lösung von konkreten chemischen Problemen interessiert war und diese noch weit außerhalb der Reichweite von den ab initio Verfahren der Quantenchemie lagen. In seiner Postdoktorandenzeit entwickelte Walter Thiel die „Modified Neglect of Differential Overlap (MNDO)“ Methode. Diese Namensgebung erfolgte wohl mit der ihm eigenen Bescheidenheit, da sie die Fortführung einer existierenden Methodik impliziert. Während die Dewar Gruppe in der Tat weltweit führend in der Entwicklung von semi-empirischen Rechenverfahren war, stellte die MNDO Methode einen radikalen Neuanfang in diesem Forschungsgebiet dar, der es in der Folge zu einer ungeahnten Blüte verhalf. Walter Thiels Entwicklung war, wie alles was er im Laufe seiner Karriere unternahm, von absoluter Präzision und technischer Brillanz geprägt. So etablierte er in der Entwicklung der MNDO

Methode kreative neue Integralnäherungen und behob fundamentale Schwächen der Vorgängermethoden wie fehlende Rotationsinvarianz. Die beiden wichtigsten Arbeiten, welche die MNDO Methode in der Chemie verankerten, wurden im *Journal of the American Chemical Society* veröffentlicht und sind bis heute 6670 und 2303 mal zitiert worden. Diese Arbeiten zählen damit noch heute zu den meist zitiertesten Arbeiten in diesem für die Chemie zentralen Journal.

In der Folge seines extrem erfolgreichen Postdoktorates kehrte Walter Thiel nach Marburg zurück, wo er sich in den Jahren 1975-1982 in Theoretischer Chemie habilitierte. In dieser Zeit entwickelte er semi-empirische Verfahren weiter und etablierte sich als weltweit führender Forscher in diesem Gebiet – eine Position, die er lebenslang beibehielt. In diese Zeit fällt unter anderem die Entwicklung der ersten „korrelierten“ semi-empirischen Methode (MNDOC), welche eine Erweiterung und Verbesserung der MNDO Methode darstellt. In seinen eigenen Erinnerungen hatte sich Walter Thiel mehr Freiheit und Eigenständigkeit in seiner Habilitationsphase gewünscht – eine Freiheit, die er später immer wieder seinen eigenen Mitarbeiter gewährt hat indem er sie mit einem Höchstmaß an Uneigennützigkeit unterstützte.

Im Jahre 1982 erhielt Walter Thiel seinen ersten Ruf auf eine C3 Professur an der Universität Wuppertal, dem er auch folgte. Motiviert durch den SFB 42, der sich mit hochauflösender Spektroskopie beschäftigte, begann Walter Thiel sich neben seinen Forschungen in der semi-empirischen Quantenchemie auch mit hochgenauen ab initio Verfahren zu beschäftigen, welche er auf die Vorhersage und Interpretation von hochaufgelösten rovibronischen Spektren anwendete. Auf der semi-empirischen Seite entstand in dieser Zeit die MMNDO/d Methoden, welche die semi-empirische Quantenchemie auf d-Elemente anwendbar machte und auch deutliche Verbesserungen für hypervalente Verbindungen darstellte.

Dank seiner mittlerweile exzellenten Reputation erhielt Walter Thiel im Jahre 1992 einen Ruf an die Universität Zürich, an welcher er bis 1999 forschte. Dort führte er seine Gruppe im Wesentlichen in zwei Forschungszweigen, welche sich mit hochgenauer ab initio Quantenchemie und semi-empirischen Methoden beschäftigte. Hier wurden auch die OM2 Methoden entwickelt, welche eine deutliche Verbesserung der MNDO Methoden darstellen. Neben seinen vielfältigen Anwendungen in der organischen Chemie trat aber in Zürich die kombinierte Quantenmechanik/Molekülmechanik (QM/MM) auf den Plan. Diese Methodik beruht auf einer Idee von Arieh Warshel, welcher auch 2013 unter anderem dafür mit dem Nobelpreis für Chemie ausgezeichnet wurde. Walter Thiel erkannte als einer der ersten Forscher weltweit das ungeheure Potenzial dieser Methode, welche erstmals erlaubte, Makromoleküle auf der Basis der Quantentheorie zu behandeln. Insbesondere erkannte Walter Thiel diese sehr anspruchsvolle Methodik als ein zukünftiges Anwendungsgebiet der semi-empirischen Quantenchemie, welche in diesen Jahren, bedingt durch den Einzug der Dichtefunktionaltheorie in die Chemie und die dramatische steigenden Rechnerleistungen, langsam an Boden verlor.

Es ist sicherlich nicht übertrieben zu sagen, dass Walter Thiels Beiträge für die Etablierung der QM/MM Methodik in der Chemie von entscheidender Bedeutung sind. Es ist von daher nicht überraschend, dass seine Arbeiten in der Pressemitteilung des Nobel-Komitees bezüglich der Verleihung des Nobelpreises 2013 an Arieh Warshel zusammen mit Martin Karplus und Michael Levitt für die „Entwicklung von Multiskalenmethoden für die Behandlung chemischer Reaktionen“ ausführlich gewürdigt wurden. Es lässt sich trefflich darüber spekulieren, ob ohne Walter Thiels hochpräzise Beiträge, die QM/MM Methodik über den Status einer guten Idee hinausgekommen wäre. Großartige Ideen in praktisch anwendbare Werkzeuge zu überführen benötigt die einzigartigen Eigenschaften, die Walter Thiel so sehr auszeichneten: Die Verbindung von technischer Brillanz, Pragmatismus und bedingungsloser Präzision. Walter Thiels Beiträge zur QM/MM Methodik sind von bleibendem Wert und in dem Programmpaket ChemShell zusammengefasst, welches er in Kollaboration mit Forschern in Daresbury/England entwickelte.

Walter Thiels rasant steigende internationale Reputation sowie seine besondere Nähe zur Chemie führte zu einem Ruf an das Max Planck Institut für Kohlenforschung im Jahre 1999, welches er mit

großer Umsicht und Hingabe bis zum Ende seines Lebens führte und mit gestaltete. In seiner Mülheimer Zeit trieb Walter Thiel die semi-empirische Quantenchemie sowie die Entwicklung der QM/MM Methodik immer weiter voran. Sehr charakteristisch ist aber, dass Walter Thiel es nie bei der reinen Methodenentwicklung beließ, sondern immer nach höchst anspruchsvollen Anwendungen suchte, welche die Macht seiner Methoden demonstrierten. Besonders zu erwähnen sind hier sicherlich seine bahnbrechenden Arbeiten zur Chemie des Cytochrom P450 gemeinsam mit Sason Shaik und seine Arbeiten zur gerichteten Evolution gemeinsam mit Manfred Reetz. Seinen Kollegen war Walter Thiel als für alle Fragen der Chemie offener Kooperationspartner ein kongenialer Begleiter ihrer Forschung, welche zu vielen unerwarteten Einsichten und wichtigen gemeinsamen Publikationen führte. In den Jahren vor seiner Emeritierung beschäftigte sich Walter Thiel unter anderem mit der Dynamik von elektronisch angeregten Zuständen. Diese wurden durch die semi-empirische Quantenchemie zugänglich und liegen bis heute außerhalb der Reichweite von ab initio Verfahren.

Trotz aller Erfolge und seiner enormen internationalen Reputation ist Walter Thiel immer im höchsten Maße bescheiden geblieben. Ob als Wissenschaftler oder in den vielen Gremien, in welchen er segensreich gewirkt hat, zeichneten sich seine Beiträge immer durch ein Höchstmaß an Kenntnis und Sachlichkeit aus. Walter Thiel stellte nie seine Person in den Mittelpunkt, sondern immer der Sache, der er diente. Seine Argumentationen waren immer sachlich und in der Regel so fundiert, dass er das seltene Talent hatte, auch sehr zerstrittene Gremien zu einem friedlichen Konsens zu bewegen. So hat er über die Jahre als Vorsitzender der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie (AG-TC), als Präsident der World Association of Theoretically Oriented Chemists (WATOC), als Fachgutachter der Deutschen Forschungsgemeinschaft oder als Vorsitzender des beratenden Rechnerausschusses der Max Planck Gesellschaft (neben vielen anderen) in vielerlei Hinsicht sein Fach befördert und gestaltet.

Zu Recht war Walter Thiel bei seinen Kollegen einhellig höchst geschätzt und respektiert, was sich auch in seinen zahlreichen Preisen und Ehrungen widerspiegelt. Unter anderem sind hier die Liebig Münze der Gesellschaft Deutscher Chemiker und die Schrödinger Medaille der WATOC zu erwähnen, sowie Mitgliedschaften in den wichtigsten Akademien wie der Leopoldina oder der International Academy of Quantum Molecular Sciences.

Auch nach seiner Emeritierung war Walter Thiel bereit, sich weiter für die Belange seines Institutes einzusetzen, als er in einer Notlage die kommissarische Leitung der Verwaltung des Max Planck Institutes für Kohlenforschung übernahm.

Walter Thiel hat im Laufe der Jahre in sehr selbstloser Weise viele junge Forscher gefördert, beraten und in ihren Karrieren unterstützt. Ich erlaube mir an dieser Stelle einige persönliche Worte, denn auch mein eigener beruflicher Werdegang wäre ohne seine Unterstützung nicht vorstellbar gewesen. Nachdem ich fast fünf Jahre erfolglos nach einer Position in der anorganischen Chemie gesucht hatte, war es Walter Thiel, der mich ermunterte es mit Theorie zu versuchen und der später sehr aktiv an meiner Berufung an den Bonner Lehrstuhl mitgewirkt hat. Von den sehr vielen Eigenschaften, die ich an Walter Thiel geschätzt und bewundert habe, stechen sein glasklares Urteilsvermögen und seine bedingungslose Fairness besonders heraus. Walter war in seinen Gedanken immer einen Schritt voraus. Sein Handeln war von bestechender Logik und von menschlicher Wärme und Empathie geprägt. Sein Nachfolger sein zu dürfen ist eine besondere Ehre, aber auch eine große Inspiration die Forschungsarbeit in seinem Sinne zu gestalten und weiterzuführen.

Walter Thiel war brillant, kreativ, selbstlos, gütig und weise. Mit ihm verlieren wir einen Kollegen, Mentor und Freund, der im besten Sinne des Wortes ein großes Vorbild für die nachfolgenden Generationen darstellt. Sein Rat fehlt bitterlich, aber seine Beiträge zur Wissenschaft werden uns für lange Zeit in die Zukunft begleiten.

Frank Neese,

Max Planck Institut für Kohlenforschung

Im April 2020



Georg Hohlneicher

13. März 1937 - 10. März 2020

Am 10. März 2020 verstarb nach schwerer Krankheit unser hochgeschätzter Lehrer, Kollege und Freund im Alter von 83 Jahren in München.

Georg Hohlneicher wurde am 13. März 1937 in München geboren. Dort legte er im Jahr 1956 die Abiturprüfung ab und begann noch im selben Jahr mit dem Studium der Physik an der damaligen Technischen Hochschule. Er entschied sich zunächst für die Studienrichtung „Technische Physik“, die er im April 1961 mit dem Grad Diplom-Ingenieur abschloss. Eine hierfür anzufertigende Ingenieursarbeit resultierte in seiner

ersten eigenständigen Publikation mit dem Titel „Ein Kryostat für tiefe Temperaturen mit weitem Einstellbereich“. Der Entschluss, die Diplomarbeit mit dem Thema „Zur Konstitution der Chinolylmethane“ am Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie anzufertigen, erwies sich als entscheidende Weichenstellung für seinen gesamten weiteren Werdegang. Direktor dieses Institutes war Prof. Dr. Günter Scheibe.

Georg Hohlneicher fertigte auch die Dissertation unter der Anleitung von Günter Scheibe an. Das Thema dieser Arbeit lautet „Anwendung der erweiterten π -Elektronentheorie nach Hartmann-Ruch auf ungesättigte Kohlenwasserstoffe und Farbstoffe - kritische Untersuchungen zur Mesomerieenergie“. Es handelt sich also um eine theoretische Arbeit mit Nutzung der damals noch wenig bekannten Hückel-Methode. Die Promotion mit Auszeichnung erfolgte im Dezember 1962, kaum anderthalb Jahre nach dem Diplom. Noch während der Arbeit an der Dissertation heiratete er Hildegard Kindsmüller, die in München als Dolmetscherin arbeitete. Aus dieser Ehe gingen zwei Töchter hervor.

Georg Hohlneicher hatte ein Gespür für das Potential neuer theoretischer Verfahren entwickelt. Besonders interessierte ihn deren Anwendung auf die Interpretation von spektroskopischen Experimenten. Als nächstes griff er die aktuellen Konzepte in der π -Elektronentheorie jenseits von Hückel auf. Im Jahre 1967 habilitierte er sich für das Fach Physikalische Chemie mit der Habilitationsschrift „Zur theoretischen Interpretation der Elektronenspektren ungesättigter Verbindungen auf der Basis der Modelle von Pariser, Parr und Pople (PPP)“. Eine Neuheit war die Erweiterung des Verfahrens um die Berücksichtigung von nichtbindenden Orbitalen, um auch $n\pi^*$ Übergänge beschreiben zu können. Inzwischen war Friedrich Dörr zum Nachfolger von Scheibe auf den Lehrstuhl an der TU München berufen worden. Als junger Privatdozent baute Georg Hohlneicher eine kleine Arbeitsgruppe auf, die sich hauptsächlich mit theoretischen Fragestellungen zu spektroskopischen Phänomenen befasste, die am Lehrstuhl von Friedrich Dörr experimentell, insbesondere mittels Polarisationsgradspektroskopie untersucht wurden. Der theoretischen Analyse und Beschreibung dieser Spektren widmete sich Georg Hohlneicher daher auch nach der Habilitationszeit, vor allem mit den PPP- und MIM- (molecules in molecules) Verfahren. Vermutlich angeregt durch einen Forschungsaufenthalt in der Gruppe von Edgar Heilbronner in Basel kam bald das Interesse an der theoretischen Beschreibung von Photoelektronenspektren hinzu. Hierfür wurde der Formalismus der Green'schen Funktionen implementiert und weiterentwickelt, um Ionisierungsenergien über das Koopmannsche Theorem hinaus zu beschreiben.

Im Dezember 1972 wurde Georg Hohlneicher zum ordentlichen Professor an der Universität zu Köln ernannt. Er hatte nun zunächst einen Lehrstuhl für Theoretische Chemie im Institut für Organische Chemie inne, wechselte dann aber 1992 auf einen Lehrstuhl im Institut für Physikalische Chemie

Als Georg Hohlneicher den neuen Lehrstuhl für Theoretische Chemie übernahm, mußte er nochmals eine Gruppe ganz von vorne aufbauen, da keiner von der Münchener Gruppe aus dem attraktiven Potential dieser Stadt nach Köln zu bewegen war. Dabei setzte er auf eine Doppelstrategie, Theorie und Experiment mit gleichem Gewicht und mit gegenseitiger Verflechtung zu betreiben. Neben der Polarisationsgradspektroskopie war das vor allem die Photoelektronenspektroskopie. Die größte Investition ging in ein neues, zusammen mit der Firma Leybold entwickeltes Photoelektronenspektrometer. Kurz danach wurde ein durchstimmbarer Farbstofflaser für die Zweiphotonenspektroskopie beschafft. Im Laufe der Jahre kamen hinzu: Matrixisolation in Edelgasen, Elektronen-Energie-Verlust-Spektroskopie an Triplett-Zuständen (EELS), VUV Spektroskopie mit Synchrotronstrahlung (am BESSY in Berlin) und Ultrakurzzeitspektroskopie an kalten Molekülen im Düsenstrahl. Auch die untersuchten molekularen Systeme spannen einen weiten Bogen, von organischen Farbstoffen über metallorganische Verbindungen zu anorganischen Halbleitern und Ionenkristallen. Im Zentrum standen jedoch immer zyklisch konjugierte π -Elektronensysteme. Dem Generalthema dieser in wissenschaftlicher Hinsicht ersten Liebe, dem Studium der elektronischen Übergänge ungesättigter Kohlenwasserstoffe mit experimentellen und theoretischen Methoden, ist Georg Hohlneicher immer treu geblieben, wenn auch im Laufe der Jahre weitere Themen und vor allem neue Methoden hinzukamen. Die tiefe Verbundenheit mit diesen Fragen prägte selbst noch seinen 80sten Geburtstag, als er sich bei seinen Gäste mit einem Vortrag zur Aromatizität und Antiaromatizität für die Glückwünsche bedankte.

Die Untersuchung der Elektronenstruktur chemischer Verbindungen mit spektroskopischen und quantenmechanischen Methoden zieht sich wie ein roter Faden durch Georg Hohlneichers Forschung. Die Theorie lernte er von der Pike auf, beginnend mit Hückel und PPP, später die semiempirischen Verfahren und schließlich die ab-initio Methoden. Neue Methoden wurden aufgegriffen und jeweils bis zur Leistungsgrenze der gerade verfügbaren Computer umgesetzt. All dies wurde immer mit dem Ziel unternommen, experimentelle Ergebnisse zu verstehen und nach Möglichkeit auch quantitativ zu beschreiben. Die Green'schen Funktionen zur Berechnung von Ionisierungsenergien wurden schon erwähnt. Damit ließen sich Photoelektronenspektren von solchen Systemen beschreiben, in denen Reorganisation und Relaxation nicht mehr vernachlässigbar sind. Konfigurationswechselwirkung mit mehrfach angeregten Konfigurationen wurde benötigt, um Zweiphotonenspektren zu interpretieren. Für die Analyse von Elektronen-Energie-Verlust Spektren mussten Triplett-Zustände berechnet werden, und für die Simulation der Schwingungsrelaxation elektronisch angeregter Zustände wurden Potentialflächen von hoher Qualität benötigt.

Georg Hohlneicher hat es immer verstanden, fähige Studenten für die Theorie und die Spektroskopie zu begeistern und als Mitarbeiter zu gewinnen. Jeder neue Mitarbeiter bekam eine eigene Fragestellung, die oft mit dem Aufbau und der Pflege einer eigenen Apparatur verbunden war. Thematisch steckte er einen weiten Rahmen ab, innerhalb dessen man sich frei entfalten und seine eigenen Ideen verfolgen konnte. Verbindende Klammer und Grundlage vielfältiger Diskussionen innerhalb der Gruppe waren die quantenchemischen Rechenverfahren, die die gemeinsame Sprache zur Interpretation der verschiedenartigen Experimente lieferte. Dieser Führungsstil, den Mitarbeitern weitgehende Freiheit zu lassen, hat sicher dazu beigetragen, daß so viele aus seiner Gruppe erfolgreich die akademische Laufbahn einschlugen. Georg Hohlneicher hat den Kontakt zu seinen ehemaligen Doktoranden, Habilitanden aber auch den technischen Mitarbeitern immer gehalten. Bei der Feier seines 80sten Geburtstages sind viele zu der Veranstaltung im Institut in Köln und zu der Feier im Anschluss daran erschienen. Von seinem Haus in Obermenzing aus hat er rege am wissenschaftlichen Leben der umliegenden Universitäten teilgenommen.

Seit seiner Studentenzeit hat sich Georg Hohlneicher aktiv in der Hochschulpolitik engagiert. Der ASTA der TH München und ein Sitz im Senat der TH als Nichtordinarienvvertreter waren seine ersten Ämter, denen noch viele folgen sollten. An der Universität zu Köln bekleidete er das Amt des Dekans der Naturwissenschaftlichen Fakultät in den Jahren 1978 bis 1980, von 1984 bis 1986 und nochmals von 1993 bis 1996 war er Wahlsenator, von 1993 bis 1998 wissenschaftlicher Direktor des Rechenzentrums der Universität zu Köln. Den Fachausschuss Molekülphysik der Deutschen Physikalischen Gesellschaft leitete er von 1973 – 1976. In den Jahren 1980 bis 1983 war er Mitglied des ständigen Ausschusses der Bunsengesellschaft, von 1979 bis 1982 Sprecher der Konferenz der Fachbereiche Chemie an den wissenschaftlichen Hochschulen der Bundesrepublik, von 1994 bis 1998 Vorsitzender bzw. stellvertretender Vorsitzender des Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultäten-Tages. Sein besonderes Engagement galt der Gestaltung und Reform des Chemiestudiums. So leitete er die Unterrichtskommission der Bunsengesellschaft von 1976 – 1978 und nochmals ab 1996. Er war Mitglied der Studienreformkonferenz des Landes Nordrhein-Westfalen (1980 – 86) und Vorsitzender der Fachkommission Chemie bei der dortigen Landesrektorenkonferenz (1994 – 98). Als Mitglied der GDCh-Kommission zur Neuordnung des Chemiestudiums wirkte er zudem an den 1998 veröffentlichten Empfehlungen zum Basisstudium Chemie mit.

Georg Hohlneicher war bis zuletzt sportlich sehr aktiv. Neben Skifahren und Bergsteigen sowie Golf, das er in den letzten Jahren vor seinem Ruhestand begann, spielte er Tennis. Mehrfach hat er die Vereinsmeisterschaft in seinem Weidener Verein errungen. Den Diplomanden und Doktoranden sind die regelmäßigen Tischtennisrunden zur Auflockerung nach dem Mittagessen noch in guter Erinnerung. Nach seinem Umzug von Köln zurück nach München hat er auch weiter Tennis gespielt, trotz seiner beiden Hüftoperation. Er war Mannschaftsführer der Herren über 70 in seinem Tennisclub Blütenburg, weniger als 2 km von seinem Haus in Obermenzing entfernt.

Wir nehmen Abschied von Georg Hohlneicher und verlieren einen hochgeschätzten Lehrer, Kollegen, und Freund den wir vermissen werden und dem wir ein besonderes Andenken bewahren wollen.

Lorenz S. Cederbaum/Heidelberg
Bernhard Dick/Regensburg
Hans-Joachim Freund/Berlin
Klaus Meerholz/Köln
Klaus Müllen/Mainz
Siegfried Schneider/Erlangen
Petra Swiderek/Bremen

Bernd Schimmelpfennig

(1965-2019)

Am 13. September 2019 verstarb plötzlich und völlig unerwartet Dr. Bernd Schimmelpfennig im Alter von 54 Jahren. Sein wesentlicher Beitrag zum Gebiet der theoretischen Chemie waren seine Arbeiten im Rahmen der relativistischen Quantenchemie - und dort insbesondere zur Spin-Bahn Kopplung. Die Anwendungen seiner theoretischen Methoden im Bereich der nuklearen Entsorgung sind eine große wissenschaftliche Bereicherung für dieses Fachgebiet.



Dr. Schimmelpfennig wurde am 19.5.1965 in Bad Honnef geboren. Er studierte Physik an der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität zu Bonn und promovierte dort am Institut für Theoretische Chemie unter der Leitung von Prof. Dr. S. D. Peyerimhoff. Nach seiner Arbeit im Rahmen der Dissertation zur Lebensdauer autoionisierender Zustände nach Innerschalenanregung wandte sich Bernd Schimmelpfennig dem Gebiet der relativistischen Effekte und der Chemie bzw. Spektroskopie schwerer Elemente, insbesondere der Actiniden zu. Dies führte ihn an verschiedene Universitäten und Institute, Universität Münster, Universität Stockholm, Universität Tromø, Universität Toulouse, Max-Planck-Institut Stuttgart.

Am 1. Juli 2003 ist Dr. Schimmelpfennig in das Institut für Nukleare Entsorgung (INE) der damaligen Forschungszentrum Karlsruhe GmbH (heute Campus Nord des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)) eingetreten. Als theoretischer Chemiker und ausgewiesener Experte für quantenchemische Berechnungen der elektronischen Struktur und Bindungseigenschaften der schweren Elemente der „Actinid“-Reihe des Periodensystems wurde er vom damaligen Institutsleiter Prof. Thomas Fanghanel mit dem Aufbau einer Quantentheoriegruppe am INE betraut. Dies geschah vor dem Hintergrund der Erkenntnis, dass die am INE angestrebte umfassende und vielfältige experimentelle Aufklärung molekularer Strukturen von möglicherweise mobilen Radionuklid-Spezies im Zusammenhang mit der Bewertung von Endlagerkonzepten für radioaktive Abfälle durch eine theoretische Beschreibung untermauert werden muss.

Bernd Schimmelpfennig war Mitautor von 121 wissenschaftlichen Publikationen. Er war an der Entwicklung spezieller quantenchemischer Programme unter Berücksichtigung relativistischer Effekte auf die elektronischen Zustände der schweren Actinid-Elemente beteiligt und wurde dadurch Mitautor der Quantenchemieprogramme MOLCAS, DALTON und DIRAC, die alle die von ihm entwickelte Atomic-Mean-Field (AMFI) Approximation verwenden, um Spin-Bahn Beiträge zu berechnen. Er stand als einer der weltweit wenigen Experten in diesem speziellen Teilgebiet der theoretischen Chemie im ständigen Austausch mit nationalen und internationalen Fachleuten. Er hat mit hohem persönlichen Einsatz und großem fachlichen Können zahlreiche wichtige Impulse in seinem Fachgebiet gegeben. Mit seinen wissenschaftlichen Beiträgen hat Dr. Schimmelpfennig unschätzbare Beiträge im Bereich der relativistischen Quantenchemie und deren Anwendung im Bereich der nuklearen Entsorgung geleistet.

Mit Bernd Schimmelpfennig verlieren wir einen kritischen, kreativen, engagierten und hochintelligenten Wissenschaftler, der durch seine fachliche Kompetenz bei Kolleginnen und Kollegen, Vorgesetzten sowie Kooperationspartnern anerkannt und sehr geschätzt war. Sein wissenschaftliches Vermächtnis wird uns immer begleiten.

Jörg Rothe, Robert Polly

Institut für nukleare Entsorgung (INE), Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

55th Symposium on Theoretical Chemistry "Spectroscopy and Photoinduced Dynamics"

Organizers

Prof. Dr. Oliver Kühn

Dr. Sergey Bokarev

Prof. Dr. Ralf Ludwig

Overview

Topic: Spectroscopy and Photoinduced Dynamics

Place: University of Rostock

Participants: 283 / 18 countries

Invited talks: 13

Contributed talks: 26

Posters: 196

Poster prizes: Fabian Berger (Berlin), Janine George (Louvain-la-Neuve), Moritz Heindl (Wien), Van Anh Tran (Mühlheim), Dr. Fulu Zheng (Dresden), Dr. Rainer Hegger (Frankfurt/M).

Hellmann-Prize: Dr. Thomas Jagau (München)

Program

Boat trip along Warnow and walk through Warnemünde

Conference dinner: restaurant "Kurhaus"

In September 2019, the University of Rostock has hosted the 55th Symposium on Theoretical Chemistry. The symposium represented one of the highlight events during the celebration of the 600th anniversary of the foundation of the University of Rostock in 1419. The focus of the conference has been put on '**Spectroscopy and Photoinduced Dynamics**.' Spectroscopy in time- and frequency-domain provides a primary tool for the detailed investigation of molecular processes ranging from simple gas-phase reactions to biomolecular catalysis. With the advent of novel techniques such as two-dimensional spectroscopy and light sources in the X-ray regime, spectroscopy is pushing the borders, not only in terms of applications but also as far as theoretical methods are concerned. The challenge is open for theoretical chemistry, and the STC2019 has reflected the current status, covering techniques and applications from the infrared to the X-ray regime.

Sponsors and Funding

AGTC, Wiley, Megware, GDCh, DBG, DFG-SPP1807, DFG-SPP2102, Uni Rostock



About 300 participants from 18 countries came on occasion of the 600th anniversary of Rostock University to the 55th Symposium on Theoretical Chemistry. This year's motto of the symposium has been 'Spectroscopy and Photoinduced Dynamics'.

Day 1

After the registration, all the participants were invited to a welcome reception in the historic city hall of the hanseatic city of Rostock, where they have been served a dinner buffet and a selection of beverages.



Welcome reception in the historical city hall.

Day 2

After the opening, the scientific program has started with reports on the ultrafast predominantly electron dynamics, which spans the timescale from hundreds of attoseconds to several femtoseconds. A special guest, **Hans Jakob Wörner** from ETH Zürich, has discussed the recent highlights of the experimental studies in his talk "Attosecond soft-X-ray spectroscopy in the gas and liquid phases." His invited lecture focused on three main subtopics: the characteristic timescale of photoionization, ultrafast charge migration in molecules triggered by quasi-instantaneous electron removal, and pump-probe X-ray experiments on small molecules in the gas phase, enabled by high harmonic generation setups. Along these lines, he also discussed the close connection of the experiment to theoretical developments and mentioned some challenges to be attacked by quantum chemists in the future.

The subsequent talk by **Jörn Manz** from FU Berlin enhanced on the theoretical description of charge migration and addressed the problem of nuclear decoherence/recoherence. **Jean Christophe Tremblay** from the University of

Lorraine in Metz explained how the light-induced many-electron dynamics and the electron currents accompanying chemical reactions could be visualized and analyzed employing hydrodynamic-like charge transport equation.

The second session of this day was devoted to the discussion of the photoinduced dynamics in a broader context. It was opened by **Oriol Vendrell** from Heidelberg University with his invited talk "Towards Nuclear-Electronic Dynamics without Potential Energy Surfaces." He described a hybrid approach where the nuclei and electrons are represented in the first and second quantization formalism, respectively. The implementation of a new method within the MCTDH framework allowed to study coupled electron-nuclear dynamics in one shot as has been exemplified for the proof-of-the-principle HeH^+ photodissociation process. This development fills in the gap between conventional dynamics involving adiabatic or diabatic bases on the one pole and the demanding treatment of both electrons and nuclei on the same footing on the other.

Afterward, **Nirmalendu Acharyya** from the Max Born Institute Berlin discussed the coupling of a system to the environment going beyond the Condon approximation that has been demonstrated to open new dynamic regimes on the example of the spin-boson model. **Saeed Armirjalayer** from the University of Münster presented insights into the design of novel molecular switches as provided by a combination of QM/MM simulations and time-resolved experiments.



Oliver Kühn greets the participants of STC 2019 with an opening word.



Oral session in the AudiMax on day 2

After lunch, **Regina de Vivie-Riedle** from LMU in Munich delivered a talk on "Photostability of Uracil affected by RNA environment or shaped light." The main question considered in her talk was the rate of the relaxation back to the ground state, being of primary importance for photodegradation of RNA in living organisms. She explained with the help of classical QM/MM simulations and hybrid wave-packet/molecular dynamics that the RNA strand can both accelerate and decelerate such relaxation dynamics. Further, she showed how pulse tailoring, e.g., control of carrier-envelope phase, might help to decrease the destructive impact of light radiation.

Valérie Brenner from University Paris-Saclay continued the discussion of photostability, presenting the results of simulations of non-adiabatic dynamics in capped peptides and proteins. **Ralph Welsch** from the DESY Hamburg presented an extension of path-integral ring polymer molecular dynamics to describe non-equilibrium processes such as non-adiabatic photoinduced dynamics and bimolecular reactions.

After the coffee break, **Marco Garavelli** from Università di Bologna gave a lecture entitled "Modelling Accurate Photoinduced Events and Transient Spectroscopies in Biomolecules: the Paradigmatic Case of Retinal Systems." His research is based on the COBRAMM software package, which uses CASPT2 energy

calculations and aims at simulating non-linear response functions, i.e., for the reproduction of pump-probe experiments, of multi-chromophoric systems embedded in an environment. The protocol is exemplified for the application to the photodynamics of rhodopsin and its isomers and derivatives.

Further, **Tobias Kramer** from the Zuse Institute Berlin reported in his contributed talk about how neural networks can be used together with a hierarchical equation of motion for simulation of two-dimensional electronic spectra. **Romain Berraud-Pache** from the MPI Mülheim an der Ruhr presented results on the modeling of photophysical and spectroscopic properties of boron-based dyes.

This day's oral presentation section has been closed by the talk by **Frederike Hanke** from the Marine Science Center in Rostock. This talk contrasted in its topic to the previous discussions but excited a lively interest among theoretical chemists. In her lecture "Living at and in the sea – how the senses contribute to harbor seal orientation, navigation, and foraging," she explained how marine mammals can use different effects to orient themselves in, on the one hand, dynamically changing and, on the other hand, featureless environment, leaving humans with their praised intellect far behind.

The day ended with a poster slam and a poster session, which for some of the participants lasted almost until midnight because of exciting discussions. Participants were offered wine, beer, and a small snack.

Day 3

The day started with the rector's welcome speech devoted to the 600th anniversary and history of the University of Rostock. In continuation of the topic of the previous day, **Christel Marian** from Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf held an invited lecture "DFT/MRCI, SPOCK & VIBES: An Efficient Toolbox for Theoretical Spectroscopy." The special focus of her talk was on calculations of spin-orbit and spin-spin coupling and their influence on photodynamics, for instance, rates of

phosphorescence and non-radiative transitions. In particular she emphasized that the prediction of singlet and triplet states of charge-transfer and local character in carotenoids, platinum complexes, and boron-based dyes with the same level of accuracy requires some caution.



Christel Marian zooms into the problem of intersystem crossing

Christoph Holzer from the Karlsruhe Institute of Technology reported on new developments in the field of two-component spin-current DFT being scalable to treat large systems containing heavy atoms. **Benjamin Helmlich-Paris** from the MPI Mülheim an der Ruhr presented the benchmark of the linear-response CASSCF for the prediction of excited electronic states and respective spectra.

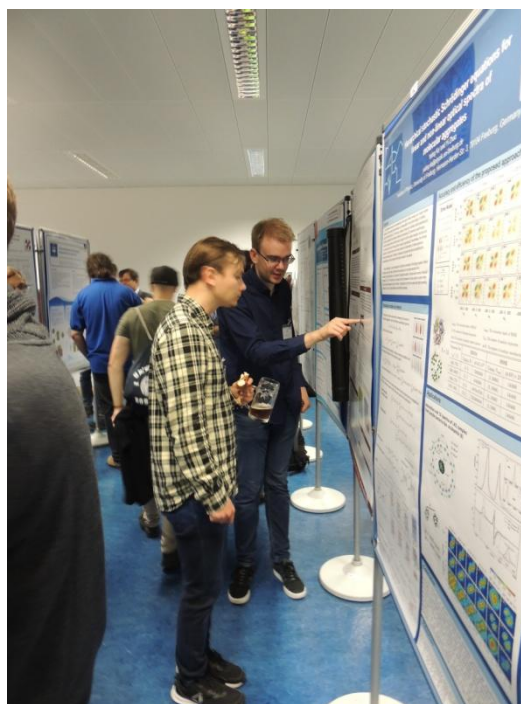
The topic of the next two sessions was the dynamics in extended systems, gently turning into theoretical material science. The first invited talk by **Oleg V. Prezhdo** from the University of Southern California under the title "Time-Domain Atomistic Studies of Excitation Dynamics in Halide Perovskites" concentrated on 3D and 2D perovskite systems and the description of their non-adiabatic dynamics using semi-classical methods, e.g., surface hopping. This methodology has been applied to study the influence of different dopants and adsorbates on the lifetime of charge carriers, to describe Auger decay as well as superexchange and plasmon-driven energy and charge transfer in nanomaterials including quantum dots.

Merle Röhr from the University of Würzburg reported on the multistate metadynamics using collective electronic coordinates to explore

conical intersections automatically. **Christoph Bannwarth** from Stanford University presented a GPU-realization of a hybrid of active space and tight-binding methods for photochemistry of extended systems.

After the lunch, **Bernd Engels** from the University of Würzburg gave his invited contribution "Simulation of Photo-induced Processes at Organic-organic Interfaces" describing the progress in the investigation of thin organic films relevant for optoelectronics such as solar cells and light-emitting devices. He has demonstrated that a supermolecule approach can provide valuable insights into the nature of disorder near amorphous interfaces and discussed the interpretation of the time-resolved second harmonic generation experiments.

Further, exciton dynamics in conjugated polymers addressed with the help of multi-layer MCTDH has been described by **Robert Binder** from the University of Frankfurt in his contributed talk. **Johannes Töle** from the University of Münster presented a new formulation of an exact subsystem TDDFT, being able to describe charge-transfer transitions.



Exciting discussions during the poster sessions.

The last session of this day has been devoted to the vibrational dynamics and spectra. In his

invited talk, **Dominik Marx** from the Ruhr-Universität Bochum zoomed into the "Theoretical Spectroscopy of Large-Amplitude Motion" as revealed by the molecular dynamics simulations. Along with the description of the progress achieved during the last decade, the focus was on dynamics-based mode decomposition which requires nanosecond sampling that substantially exceeds the time needed to reconstruct the vibrational spectrum itself. Preliminary work to employ neural networks to accomplish this task has also been presented.

Continuing on this topic, **Martin Brehm** from the University of Halle reported the calculations of the circular dichroism Raman spectra of the bulk phase based on molecular dynamics simulations. The final talk of **Carolín König** from the University of Kiel was devoted to the fragment approach for efficient construction of potential energy surfaces.

After the AGTC meeting and poster slam, the day ended with a poster session.

Day 4

Hellmann prize was awarded to **Thomas Jagau** from LMU München for his developments of the coupled cluster methods to describe electronic resonances. With the implementation of complex absorbing potentials into the quantum chemistry method, including analytic derivatives, he was able to describe autoionization, dissociative electron attachment, and high harmonic generation processes.

The program continued with **Robert Grotjahn** from TU Berlin who presented an implementation of the gradients for the local hybrid functionals. It was followed by **Jonas Feldt** from the University of Twente who reported on efficient force calculations using quantum Monte Carlo methods for potential use in biomedical applications.



This year the Hellmann prize was awarded to Thomas Jagau (in the centre) from LMU München for his contribution in development of coupled clusters methods for description of electronic resonances. From left to right: Oliver Kühn, Leticia González, Sergey Bokarev, Ralf Ludwig.



Conference dinner in the restaurant "Kurhaus".

The focus of the next session was laid on the density functional theory. It has been opened by **Stephan Kümmel** from Bayreuth University with his invited talk "Charge transfer in Density Functional Theory: new solutions to a long-standing problem." In this lecture, after an overview of the problem and possible solutions, e.g., including the exact exchange to a functional in a gentle way, he presented a new meta-GGA functional, which is also orbital-dependent but in a semi-local manner. This allows to correct the derivative discontinuity problem in a way that is efficient enough to be applied to material science.

Kati Finzel from the TU Dresden described new systematic approaches to the approximation of the kinetic energy within the orbital-free density functional theory. The talk by **Jannis Erhard** from the University of Erlangen focused on the hierarchy of approximations to the correlation kernel based on the adiabatic connection fluctuation theorem.

The dynamics and spectroscopy involving excitation in optical/UV as well as infrared domains have been considered during day 2 and day 3, respectively. The last session of day 4, in turn, was devoted to X-ray spectroscopy. **Michael Odelius** from Stockholm University presented an invited contribution "Modelling X-ray spectra, which probe hydrogen bonding and ultra-fast dynamics." In his talk, he showed that the resonant inelastic X-ray scattering experiments with the vibrational resolution,

being equipped with proper theoretical support, can be used to study ground-state potential energy surfaces far beyond the capabilities of infrared spectroscopy. This fact was illustrated for the liquids forming hydrogen bonds, such as water, using the mixed quantum-classical theoretical description.

Thomas Fransson from the University of Heidelberg reported on the influence of electron relaxation on the X-ray spectra, and **Daria Gorelova** from DESY Hamburg discussed theoretical approaches to the angular- and time-resolved photoelectron spectroscopy.

After the session, the group photo of all the participants has been taken. The evening program consisted of a boat tour from the city harbor to Warnemünde accompanied by a historical excursion. After a short walk on the promenade along the Baltic seashore, the participants arrived at the restaurant "Kurhaus" for a conference dinner. During the dinner, the AGTC poster prizes have been awarded to Fabian Berger (Berlin), Janine George (Louvain-la-Neuve), Moritz Heindl (Wien), Van Anh Tran (Mühlheim), Fulu Zheng (Dresden). Rainer Hegger (Frankfurt/M) received the Wiley poster prize. The winners received a bottle of wine dedicated to the 600th anniversary of Rostock University.

Day 5

The final day started with a discussion of coupled clusters techniques. In particular, **Sonia Coriani** from the Technical University of Denmark talked about "Coupled Cluster methods for X-ray spectroscopy". Response theory together with the coupled cluster technique allowed for reliable calculation and interpretation of various kinds of spectra including absorption, emission, circular dichroism, photoelectron, resonant inelastic scattering for molecules like nucleobases at edges of different elements.



Winners of the poster prizes, organizers, and Lisa Pecher (Wiley).

Next, **Andreas Köhn** from the University of Stuttgart presented a second-order approximation to the internally contracted multi-reference coupled cluster method. **Alberto Baiardi** from the ETH Zürich reported on the implementation of the time-dependent density matrix renormalization group approach to predict real-time electronic and vibrational dynamics.

After a coffee break, theoretical developments in a more exotic dynamical and spectroscopic regimes have been presented. In her invited talk "Interaction of intense laser pulses with matter" **Stefanie Gräfe** from the Friedrich Schiller University Jena described how the near-field enhancement could be used to record "local" Raman spectra across the molecule. She also demonstrated how the carrier-envelope phase of

incoming light affects ionization and fragmentation of small molecules.

Elke Fasshauer from Aarhus University presented a method to access the time-resolved description of the spectator resonant interatomic Coulombic decay. The last talk by **Daniel Muñoz-Santiburcio** from San Sebastián focused on the simulations of proton radiation damage in ice.

In his closing speech, Ralf Ludwig expressed the gratefulness from the organizing team to all participants, sponsors and helpers. In particular, he thanked Ms. Anika Wilhelms for successfully guiding the STC 2019 organization team.

Text: Sergey Bokarev

Photos: ITMZ Rostock, Sebastian Fritsch

Mitgliederversammlung 55. Symposium für Theoretische Chemie 2019 in Rostock

Mitgliederversammlung

55. Symposium für Theoretische Chemie 2019 in Rostock

Beginn: 24.09.2019 16:50 Uhr

Ende: 24.09.2019 18:30 Uhr

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

- 1) Genehmigung der Tagesordnung
- 2) Protokoll der Mitgliederversammlung 2018
- 3) Bericht des Vorstands
- 4) Ergebnisse der Neuwahl des Vorstands 2019
- 5) Kassenprüfung 2018
- 6) Neues aus der DFG
- 7) NFDI – Nationale Forschungsdateninfrastruktur
- 8) Verschiedenes

Eine Schweigeminute wird für die verstorbenen Mitglieder Prof. Dr. Walter Thiel und Dr. Bernd Schimmelpfennig abgehalten.

TOP1

Die Tagesordnung wird einstimmig angenommen.

TOP2

Zum Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC anlässlich des 54. Symposiums für Theoretische Chemie in Halle (zu finden auf der Info-TC: <http://www.theochem.de/agtc.infotc.html>) gibt es keine Anmerkungen und es wird ohne Gegenstimme genehmigt.

TOP3

Bericht des Vorstands

– Mitgliedschaft

Am 1. September 2019 zählte die AGTC 228 Mitglieder. Es wurden 5 Austritte 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 ist auch eine Mitgliedschaft möglich, ohne beim GDCh/GÖCh, DPG oder DBG Mitglied zu sein.

– Homepage

Die Homepage [ww.theochem.de](http://www.theochem.de) soll auf Aktualität überprüft werden. Bezüglich Informationen und Nachrichten für den Emailverteiler wird an Silke Lohmann (lohmann@kofo.mpg.de) verwiesen. Alle Mails, die an den Verteiler geschickt werden sollen, sollen an sie oder an der Vorsitzende (leticia.gonzalez@univie.ac.at) gesendet werden. Diese werden dann an die ganze AGTC weitergeleitet. Antworten direkt an den Verteiler sind nicht möglich.

– Social Media

Die AGTC war auf folgenden Plattformen vertreten: Facebook, Linked-in, und Xing. Es wird nach neuen Vertretern für diese Plattformen gesucht, um diese auch weiterhin aktuell zu halten. Es kommt zu dem Entschluss, dass sowohl Linked-in als auch Xing nicht mehr weiter betrieben werden. Facebook wird von Elke Fasshauer administriert werden, Christoph Jacob möchte Twitter weiter bzw. neu betreiben.

– 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 herausragend 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. 2020 an den AGTC-Vorsitzenden zu senden. Eine Selbstbewerbung sowie Nachnominierungen sind nicht möglich. Die Hellmann Jury besteht aus: Irene Burghardt, Jürgen Gauss, Johannes Kästner, Oliver Kühn, Robert Berger, Bernd Engels, Beate Paulus (Vorsitz). Die letzten 3 genannten Personen haben sich bereit erklärt, die nächste Wahlperiode weiterzumachen. Keine Vorschläge aus dem Publikum für neue KandidatInnen werden genannt, ebenso keine Einsprüche. 3 Enthaltungen aus dem Publikum sind zu vermerken.

– Nachwuchsgruppen

Die AGTC führt eine Nachwuchsgruppen Liste, 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 früherem Stadium ausgesetzt werden kann. Nähere Informationen 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 Euro dotiert und wurde erstmals 2016 an Werner Kutzelnigg verliehen. 2018 erhielt Hans-Joachim Werner den Preis. Die Deadline für die Einreichung von Nominierungen für den Erich-Hückel-Preis 2020 war offiziell der 25. September 2019. Nominierungen für den Erich-Hückel-Preis 2020 sind erwünscht. Alte Nominierungen der Vorjahre bleiben erhalten und neue Nominierungen sollen an die GDCh gerichtet werden. Die Deadline für die Einreichung von Nominierungen für den Erich-Hückel Preis 2022 wird im Jahr 2020 bekannt gegeben.

– Jahresrückblicke / Trendberichte 2019

Die Trendberichte in 2019 wurden von Ville Kaila, Sandra Luber und Stefan Knecht vorbereitet.

– INFO-TC

Das Informationsblatt INFO-TC wurde im Jahr 2019 von Thomas Kühne et al. (Paderborn) verfasst. Der Vorstand dankt ihm für seine Mühe. In Zukunft wird es von Andreas Dreuw (Hei-

delberg) 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 2019 in Rostock unter der Ausrichtung von Prof. Oliver Kühn, Prof. Ralf Ludwig, Dr. Sergey Bokarev statt. Ihnen wird für die Ausrichtung gedankt. Im nächsten Jahr findet die STC 2020 in Innsbruck (Österreich) von 14.-17. September 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 vom 19.-23. September 2021 abgehalten werden, 2022 unter der Organisation von Prof. Andreas Dreuw in Heidelberg (Deutschland). Im Jahr 2023 soll die STC in der Schweiz abgehalten werden.

– **Andere Theorie Konferenzen**

Die WATOC 2020 findet am 16.-21. August in Vancouver (Kanada) statt. Die CESTC 2020 findet von 21.-24. September in Sopron (Ungarn) statt. Die Bunsentagung 2020 unter dem Thema „Dispersion interactions“ findet von 1.-3. April in Giessen statt. Die ICQC findet von 21.-26. Juni 2021 in Bratislava (Slowakei) statt.

TOP4

Ergebnisse der Neuwahl des Vorstandes 2019

Der Vorstand 2017-2019 war: L. González (Vorsitzende), W. Klopper (Stellvertreter), C. Ochsenfeld, M. Reiher, Marian, S. Grimme (GDCh), D. Marx (DPG) und W. Thiel (DBG). Für die Periode von 2019-2021 werden folgende Personen im Vorstand vertreten sein: L. González (Vorsitzende), W. Klopper (Stellvertreter), M. Reiher, P. Saalfrank, C. Marian, S. Grimme (GDCh), D. Marx (DPG) und C. Ochsenfeld (DBG). Der Vorstand wurde mit einer Wahlbeteiligung von 45.3% (105 Personen von 232 Wahlberechtigten) gewählt. Der Vorstand dankt noch einmal Walter Thiel für seine langen Dienste im Vorstand der AGTC.

TOP5

Kassenprüfung der AGTC 2018

Der Bericht wird von den Vorsitzende, Leticia González erklärt, die Kassenprüfung wurde von Alexander A. Auer (MPI für Kohlenforschung) durchgeführt. Seit 2015 gab es keinen Kassaabschluss. 2015 gab es einen Buchungsfehler beim Hellmann-Fonds-Konto. Im Kontoauszug 2016 wurde diese Korrektur nicht vorgenommen, sondern erst im Jahr 2017. Jedoch wurden 520 Euro zu viel angeführt, die Finanzen der AGTC um 58 Euro zu wenig berechnet. 2018 erfolgte ein intensiver Austausch mit Herrn Berz. Nach etwaigen Fehlern und Korrekturen sollte Ende 2018 eine endgültige Korrektur erfolgen.

Das momentane Kapital beträgt 8804,37Euro. Die Zahlen sind dieses Jahr alle korrekt. 2018 wurden folgende Abgänge notiert: -80.91Euro Stückzinsen aus Wertpapierkäufen, -8.54Euro Kursverluste, -516.70Euro Einstellung in freie Rücklagen. Gesamt wurden also -606.15Euro notiert. Ausgaben waren weiteres für das Abschiedsgeschenk von Herr Mark und den Hellmann-Preis entstanden. Da der Scheck des Hellmann-Preises 2018 bis zum Stichtag nicht eingelöst wurde, wird ab 2019 die Zahlung des Hellmann-Preises nur noch per Überweisung stattfinden. Der Posten von 2018 taucht daher noch nicht auf. Generell wird ein höheres Vermögen als letztes Jahr vermerkt. Vorschläge für Ausgaben sind willkommen. Herr Auer empfiehlt, den Kassenabschluss für 2018 zu akzeptieren. Der Kassenabschluss wurde einstimmig angenommen. Keine Enthaltungen sind vermerkt.

TOP6

Neues aus der DFG

– Bericht von Wim Klopper

Von 21. 10.-18.11. 2019 finden Neuwahlen für das Fachforum Chemie statt. Es gibt eine Änderung, sodass die Theoretische Chemie als eigenes Fach vertreten sein wird. Den Kollegen aus dem jetzigen Fachforum wird gedankt. In diesem eigenständigen Fach Theoretische Chemie wird es zwei Unterfächer geben. Zum Unterfach 32701 (Fokus auf theoretische Methoden): Die Kandidierenden sind auf der homepage aufgelistet. Es wird angemerkt, dass Frank Neese aus persönlichen Gründen nicht mehr als Kandidat zur Verfügung steht, somit stehen nur die 4 verbleibenden Personen zur Wahl. 2 Kandidaten werden schlussendlich gewählt werden. Zum Unterfach 32702 (Fokus auf chemische Systeme (Moleküle, Materialien und Oberflächen)) sollen 3 Kandidaten gewählt werden. Es wird gebeten, dass die MitgliederInnen an der Wahl teilnehmen werden. Wim Klopper stellt die Frage, ob es etwas zur Diskussion gibt. Die Frage zur Wahlberechtigung kommt auf: Man muss an einer Universität tätig sein und promoviert sein. Weiteres sind alle DFG Mitglieder wahlberechtigt. Prof. Dominik Marx (DPG) merkt an, dass eine deutsche Nationalität keine Voraussetzung für die Wahlberechtigung ist. Für nähere Infos wird auf die Homepage der DFG verwiesen.

– Codex zu den Leitlinien zu guter wissenschaftlichen Praxis

Im letzten Jahr wurde ein neuer Codex beschlossen. Es wird das Thema Softwarepakete angesprochen. Leitlinie 7 besagt, dass der Code zu öffentlich zugänglicher Software gut dokumentiert und zitierfähig sein muss. Die offene Frage, was ein öffentlich zugänglicher Code ist, wird aufgeworfen. Leitlinie 13 besagt, dass man den Quellcode selbst programmierter Software sowie die Ergebnisse, die öffentlich publiziert sind, zugänglich machen muss. Es wird vorgeschlagen, dieses Thema noch nicht ausführlich zu diskutieren, da noch nicht bekannt ist, was dies für die Community bedeuten wird. Es soll eine Seite mit Fallbeispielen und oft gestellten Fragen erstellt werden. Der Vorstand der AGTC schlägt vor verschiedene Fälle mit der DFG durchspielen, um zu erfahren, was dies für die Theoretische Chemie bedeuten wird. Mails für Beispiele sind willkommen und es wird versucht, verschiedene Fallbeispiele zu konstruieren. Die Idee hinter dieser Leitlinie ist, dass wissenschaftlich publizierte Ergebnisse direkt verifizierbar und nachrechenbar sind. Die praktische Umsetzung ist jedoch noch fraglich. Alle Universitäten und Forscher werden diese Leitlinien umsetzen müssen. Es wird darum gebeten, in diesem Kontext aufmerksam zu sein und die Leitlinien in lokale Richtlinien umzusetzen. Im Zuge der Erklärung wird angemerkt, dass diese Richtlinie eine gewisse Asymmetrie zwischen Experimentatoren und Theoretikern aufweist. Veranschaulicht wird dies an dem Beispiel, dass ein Spektroskopiker doch nur den Bauplan für einen Laser zur Verfügung stellen muss, das Gerät aber nicht, während bei einem Theoretiker sozusagen Bauplan und Gerät identisch sind. Jegliche Diskussion wird unterbrochen und auf einen späteren Zeitpunkt verwiesen.

TOP7

NFDI – Nationale Forschungsdateninfrastruktur von Ricardo Mata

Die NFDI ist ein kooperatives Netzwerk von Konsortien, das über einen Zeitraum von drei Jahren ab 2019 in drei aufeinanderfolgenden Auswahlrunden aufgebaut wird. In der NFDI wird versucht, ein Konsortium zu konstruieren, wie man mit Daten und deren nachhaltiger Lagerung umzugehen hat. In den nächsten 10 Jahren wird in etwa 1 Mrd. Euro investiert. Die Finanzierung geht über 5 Jahre mit 2-5 Mio. Euro pro Jahr pro Konsortium. R. Mata hat sich dem NFDI4Chem angeschlossen. Er zeigt auf, welche Institutionen teilnehmen. Hauptthemen: APIs, Software and Tools, Repositories, Electronic lab notebooks, Standard and formats, communities and legal aspects. Die 4 „Key objectives“ sind:

- 1: Repositories (Vernetzung und Entwicklung fehlender Daten-Repositories)
- 2: Minimum Information (MI) Standards für Daten und maschinen-lesbare Metadaten
- 3: Implementation von elektronischen Labor-Notebooks (ELN)

4: FAIRes Datenmanagement im Bewusstsein der Community verankern

Anträge für die 1. Phase können mit 15. Oktober 2019 eingereicht werden. Andere ähnliche Formate mit mangelnder Beteiligung werden angesprochen: FAIRmat und NFDI4Cat.

Leticia González fragt nach offenen Fragen aus dem Publikum. Elke Fasshauer fragt, was der Stand zur Öffentlichkeit ist, also wie zugänglich diese Daten sein werden. Verliert ein Forscher Zugriff zu diesen Daten wenn er z.B. zu einer ausländischen Universität wechselt? Antwort: Momentan gibt es noch keine Regeln – diese werden nicht von den Konsortien entschieden.

Eine weitere Frage tritt auf: Christoph Bauer fragt nach der Interessensvertretung der theoretischen Chemie entweder über explizite Vertreter oder Personen, denen die Bedürfnisse und Notwendigkeiten der theoretischen Chemie bewusst sind, in diesen Konsortien. Antwort: Momentan gibt es in diesen Konsortien drei Vertreter, die der theoretischen Chemie nahe stehen.

Es folgt eine Zusammenfassung der wichtigsten Diskussionspunkte und Fragen aus dem Publikum: Gibt es eine Bewegung eigene Repositories aufzubauen, oder wird empfohlen, sich bestehenden (wie zB NOMAD) anzuschließen? Antwort: NFDI4Chem wird nicht verwendet, um ein Repository aufzubauen, sondern die vorhandene Infrastruktur weiterzubilden oder andere Standards zu promoten. Am Ende sollte die Community entscheiden, welche Projekte für sinnvoll erachtet werden, ist die Antwort von R. Mata. Es folgt eine Diskussion. Vor allem wird angesprochen und kritisiert, dass die Arbeit für öffentlich zugängliche Daten bei uns verbleibt – also in der Lehre, Vermittlung von Möglichkeiten, Metadaten sinnvoll zu erstellen, etc. - der Benefit liegt jedoch woanders.

Weiteres wird kritisiert, dass die Theorie in solchen Fragestellungen gegenüber Experimenten benachteiligt ist. Experimentelle Forscher können nicht ihre Laser, etc. öffentlich zugänglich machen, jedoch müssen Theoretiker ihre Codes publizieren. Dies beinhaltet einen enormen Mehraufwand, da der Code meist erst überarbeitet werden muss, damit ihn andere nachvollziehen können und problemlos anwenden können. Weiteres wird die Problematik angesprochen, dass kleine Arbeitsgruppen nicht mehr die Möglichkeit besitzen, ihre Programme für ihre eigene Forschung zu halten und erst nachdem sie ihre Ideen erforscht haben, dem Rest der Community zugänglich zu machen. Größere Gruppen mit mehr Personal haben also die Möglichkeit open source software zu beziehen und schneller neue Ergebnisse zu veröffentlichen, also diejenigen, die den Code entwickelt haben, jedoch limitiert im Personal sind.

Die NFDI folgt einem bottom-up approach, soll also von der community ausgehen. Dies ist auch einer der Gründe, warum momentan viel Verwirrung herrscht, da außer einem gesetzten Endziel wenig Konkretes vorliegt. Zusammenfassend wird angemerkt, dass die Personen, die schon in Konsortien partizipieren, die während der Versammlung eingebrachten Ideen und Vorschläge zu kommunizieren sowie den momentanen Stand zu vermitteln. Es kam auf, dass jeder einzelne eine Mail verfassen sollte mit Wünschen, Kritiken und Ähnlichem. Dieser Vorschlag wurde jedoch mit vielen Gegenstimmen kritisiert.

TOP 8

Verschiedenes

Es gibt keine Anmerkungen.

Es gibt keine weiteren Anliegen.

Die Sitzung wird durch die Vorsitzende L. González beendet.
STC 2019 in Rostock, 24. September 2019

Nachwuchsgruppen stellen sich vor

Computational Carbon Chemistry (CCC) group

Dr. Ganna (Any) Gryn'ova

Heidelberg Institute for Theoretical Studies (HITS gGmbH)

Schloß-Wolfsbrunnenweg 35, 69118 Heidelberg, Germany

and

Interdisciplinary Center for Scientific Computing (IWR)

Heidelberg University

phone: +49-6221-533-241

fax: +49-6221-533-298

email: ganna.grynova@h-its.org

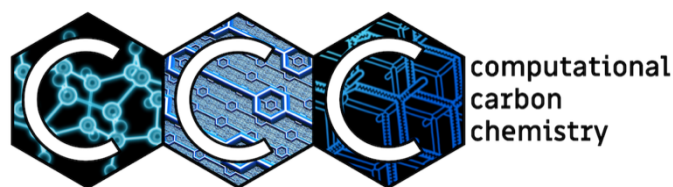
email2: ganna.grynova@uni-heidelberg.de

<https://www.h-its.org/research/ccc/>



The Computational Carbon Chemistry (CCC) group was established in April 2019 when Ganna (Any) Gryn'ova came to the Heidelberg Institute for Theoretical Studies to lead the new junior group. The other three current members joined the group in September-October 2019. Since June 2019, the group is also affiliated with the Interdisciplinary Center for Scientific Computing at Heidelberg University.

The primary interest of the CCC group is in applying diverse state-of-the-art computational chemistry techniques to simulate and rationalise the chemical features of various organic molecules and compounds with the ultimate goal of building structure-property-function frameworks. Pursuit of the fundamental physical principles that determine chemical behaviour is closely associated with the targeted practical applications and the collaborative experimental testing efforts.



Graphene chemistry is one of the core research topics in the group. Together with its many chemically modified derivatives (graphene oxide, reduced graphene oxide, doped and/or functionalised graphene oxide), graphene has recently emerged as an attractive alternative to silicon and transition-metal-based materials in the areas of efficient and selective carbocatalysis for a broad

range of chemical reactions. Further advantages of graphene-based materials (GBMs) include their natural biocompatibility and nontoxicity, infinite structural variability, and relative ease of fabrication and functionalisation. Biomass transformation and environmental protection represent some of the most attractive practice-oriented applications of GBMs and are the central focus of the CCC research. Firstly, an extensive benchmarking study of representative graphene chemistries (*Figure 1A*) across a spectrum of model systems using a variety of theoretical approaches is being undertaken so as to establish a reliable and transferable *in silico* protocol with the best accuracy-to-efficiency ratio.

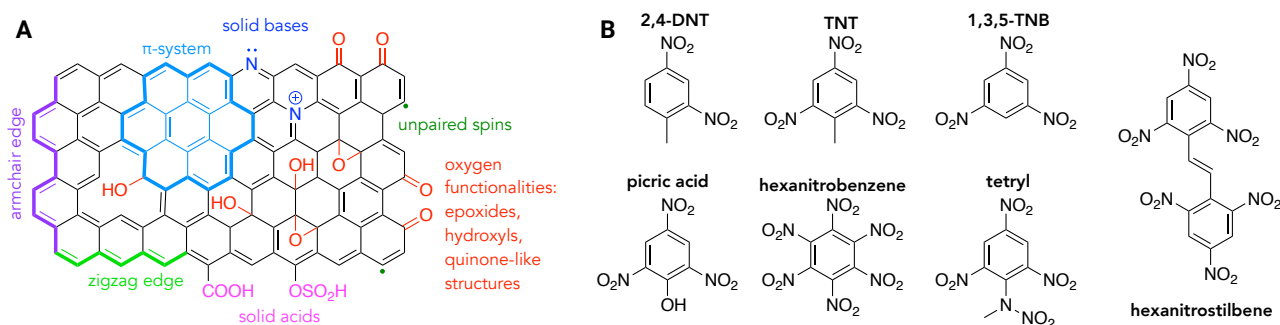


Figure 1: (A) Common active sites in graphene-based catalysts. **(B)** Examples of common toxic and mutagenic nitroaromatic pollutants (with their colloquial names) from the EU- and USA priority pollutants lists.

Secondly, significant effort in the CCC group is focussed on the use of GBMs to detect nitrogen-containing aromatic compounds (NACs, *Figure 1B*), which are the main components of military explosives representing a serious hazard to human health. The detection of small quantities of NACs – especially in water – typically involves electrochemical reduction of the nitro groups to amino functionalities. The development of the graphene-based electrochemical sensors is attracting particular interest due to their low cost, robust performance and high sensitivity. While a number of GBMs have been tested in such devices, their rather diverse sensitivities and selectivities are yet to be rationalised. By addressing this knowledge gap, we aim to deduce a set of design guidelines for custom graphene-based sensing materials for the highly sensitive and selective detection of different NAC pollutants. Finally, we also aim to clarify the underlying mechanisms by which graphene and its derivatives catalyse this reductive transformation of NACs. Although, according to a recent report, virtually any dopant (even guano) boosts the catalytic activities of the GBMs, the actual mechanisms and the role of metal impurities in these processes is still largely speculative. To provide theoretical rigor, we are combining a range of computational approaches to gain a quantitative insight into the relevant carbocatalytic cycles, establish catalyst design principles and lay the groundwork for a systematic improvement of catalytic efficiencies and selectivities.

Chemistry of stable organic free radicals is another principal research avenue in the CCC group. In particular, we aim to establish the systematic design criteria for non-conventional non-aufbau free radicals. The aufbau principle dictates that molecular orbitals are filled with electrons in an order of increasing energy, which implies that the unpaired electron in free radicals occupies the orbital with

the highest energy (*Figure 2A*). However, a number of species have been reported over the years to violate this principle, thereby allowing for an unconventional application in molecular electronics. We are currently pursuing this research in several directions. We are also exploring the relationship between the electronic configuration and the electroluminescence properties of various derivatives of the polychlorotriphenylmethyl (PTM) radical (*Figure 2B*).

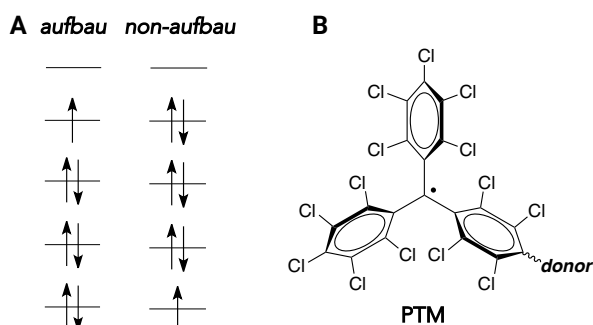


Figure 2: (A) Aufbau and non-aufbau molecular orbital configurations. (B) Polychlorotriphenylmethyl radical with a donor substituent.

Apart from these key topics, the CCC group is working on projects centred around stable organic polyradical species, as well as charge and spin transport phenomena in unimolecular electronics. More generally, our applied computational research aims to bridge the fundamental principles of physical-organic chemistry with the practical use of functional organic materials in electronics- and environment-focussed applications.

Klatsch und Tratsch

Berufungen

- Ralf Tonner von der Philipps-Universität Marburg hat den Ruf an die Universität Regensburg auf die Professur “Theoretische Chemie” (Nachfolge Schütz) angenommen und einen Ruf an die Technische Universität Chemnitz auf die Professur “Angewandte Quantenchemie und Computational Chemistry” abgelehnt.
- Thomas Jagau von der LMU München hat einen Ruf an die KU Leuven auf eine Professur für Theoretische Chemie angenommen und zum 1. April 2020 angetreten.

Preise

- Le Fèvre Medal für Dr Lars Goerigk
Dr Lars Goerigk—Senior Lecturer an der University of Melbourne—wurde im November letzten Jahres mit einer „Le Fèvre Medal“ ausgezeichnet. Die Medaille wird von der Australian Academy of Science verliehen und wird als der höchste australische Chemiepreis für Jungwissenschaftler in den ersten zehn Jahren nach ihrer Dissertation angesehen. Der Preis erkennt Grundlagenforschung in der Chemie an, die unabhängig und in Australien durchgeführt wurde.
- Leticia González von der Universität Wien wurde zum korrespondierenden Mitglied der Österreichischen Akademie der Wissenschaften gewählt und hat den Preis für Forschungsexzellenz der Spanischen Königlichen Gesellschaft für Chemie erhalten. Außerdem hatte sie die Ehre die diesjährige Robert Bunsen-Vorlesung an der Universität Kassel zu halten.

Weitere Nachrichten

- Oliver Kühn (Rostock), Thomas Kühne (Paderborn), Thomas Heine, Axel Gross (Ulm) und Andreas Dreuw (Heidelberg) sind als Fachkollegiaten in das Fachforum Chemie gewählt worden und vertreten nun dort die Theoretische Chemie. Wir danken Stefan Grimme (Bonn), Peter Saalfrank (Potsdam), Dominik Marx (Bochum) sowie Frank Neese (Mülheim), deren Amtszeit beendet ist, für ihren Einsatz und hervorragende Arbeit.