

Protokoll der Mitgliederversammlung der AGTC beim 58ten Symposium für Theoretische Chemie in Heidelberg am 21. September 2022

Beginn: 17:00 Uhr

Ende: 18:15 Uhr.

Sitzungsleitung: Prof. Dr. Peter Saalfrank (Universität Potsdam)

1. Eröffnung der Sitzung
 - Genehmigung der Tagesordnung
 - Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 22.09.2021
2. Bericht des Vorstands (Bericht)
3. Bericht des Kassenprüfers (Bericht / Beschluss)
4. Mitgliedsbeiträge (Bericht / Beschluss)
5. Neues von der DFG (Bericht)
6. Sonstiges

TOP 1: Eröffnung der Sitzung

- Die Tagesordnung wird einstimmig angenommen.
- Zum Protokoll der letzten Mitgliederversammlung der AGTC (Webkonferenz vom 22.09.2022), zu finden auf der Info-TC-Seite (2022/09) unter https://agtc.univie.ac.at/?page_id=54 gibt es keine Anmerkungen und es wird ohne Gegenstimme genehmigt.

TOP 2: Bericht des Vorstands

- *Mitgliedschaft:*

Zum Stichtag 31.12.2021 zählte die AGTC 240 Mitglieder (2020: 237, 2019: 231). Der Jahresbeitrag beträgt derzeit 13 EUR – siehe hierzu jedoch TOP 4. 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 bei GDCh/GÖCh, DPG oder DBG Mitglied zu sein. Details zur Mitgliedschaft finden sich unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=58.

Dort findet sich auch ein Beitrittsformular, welches an die DBG zu senden ist (unter geschaeftsstelle@bunsen.de oder per Post an Deutsche Bunsengesellschaft (DBG), z.Hd. Kate Weber, Varrentrappstr. 40-42, D-60486 Frankfurt).

- *Email-Verteiler:*

Es gibt einen Email-Verteiler unter agtc@lists.posteo.de, welcher moderiert wird. Direkte Emails an den Verteiler sind nicht möglich, sondern ergehen bitte entweder an Frau Kate Weber unter geschaeftsstelle@bunsen.de, oder an den AGTC-Vorsitzenden unter peter.saalfrank@uni-potsdam.de, von wo sie per Email-Verteiler den AGTC-Mitgliedern zugänglich gemacht werden.

- *AGTC-Website:*

Die AGTC-Website ist nach wie vor unter

<https://agtc.univie.ac.at>

zu erreichen. Die Administration wird derzeit von Rainer Neumann (rainer.neumann@uni-potsdam.de) übernommen.

- *Arbeitsgruppen, Nachwuchsgruppen auf der AGTC-Homepage:*

Der AGTC-Vorsitzende weist darauf hin, dass auf der AGTC-Homepage unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=62

mit der AGTC verbundene *Forschungsgruppen* (derzeit 69) und *Nachwuchsgruppen* (derzeit 20) gelistet sind.

Bezüglich der jeweiligen Definition der *Forschungsgruppen* und *Nachwuchsgruppen* gibt die Website ebenfalls genau Auskunft.

Es wird darum gebeten zu prüfen, ob diejenigen, die es wünschen, als Forschungsgruppe oder Nachwuchsgruppe gelistet sind oder nicht – im Bedarfsfall wende man sich bitte wiederum entweder an Frau Kate Weber unter geschaefsstelle@bunsen.de, oder an den AGTC-Vorsitzenden unter peter.saalfrank@uni-potsdam.de. Es erfolgen auch regelmäßige Emails der AGTC, in denen zu Meldungen zu den Nachwuchsgruppen aufgefordert wird.

- *Preise:*

Unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=39

sind die aktuell mit der AGTC verbundenen Preise gelistet:

- Der Sigrid-Peyerimhoff-Promotionspreis für Theoretische Chemie,
- der Hans G. A. Hellmann-Preis für Theoretische Chemie
- und der Erich-Hückel-Preis.

Die ersten beiden Preise werden von der AGTC vergeben (über die Vergabe entscheidet die “Hellmann-Preis-Kommission”), der dritte von der GDCh. Alle Preise werden auf dem jeweiligen Symposium für Theoretische Chemie vergeben. Die Regeln zum Vorschlag der Preisträger / Preisträgerinnen sind unter dem obigen Link zu finden, ebenso wie die “Ausstattung” der Preise.

Die Deadline für die Bewerbung zum Sigrid-Peyerimhoff-Promotionspreis ist jeweils der **1. Februar** eines Jahres, wobei die Promotion im Jahr zuvor abgeschlossen worden sein muss. Es erfolgt Selbstbewerbung, die an den AGTC-Vorsitzenden zu senden ist. Der Preis wird gemäß den Richtlinien für hervorragende wissenschaftliche Leistungen aus dem Gesamtbereich der Theoretischen Chemie an (bis zu zwei) jüngere Nachwuchswissenschaftlerinnen / Nachwuchswissenschaftler verliehen, die ihre Doktorarbeit an einer Einrichtung in Deutschland, Österreich oder der Schweiz abgeschlossen haben.

Die beiden Preisträger des Jahres 2022 (mit Promotion im Jahr 2021), sind Dr. Johannes Tölle (Westfälische Wilhelms-Universität Münster) und Dr. Sebastian Spicher (Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn). Die Preisträgerinnen und Preisträger sind gelistet unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=70

Die Deadline für den Vorschlag zum Hans G. A. Hellmann-Preis ist jeweils der **15. März** eines Jahres. Vorschläge sind an den AGTC-Vorsitzenden zu senden. Der Hellmann-Preis

wird nach Möglichkeit jährlich vergeben. Die Voraussetzungen für den Hellmann-Preis sind ein Lebensalter von maximal 40 Jahren, eine herausragend abgeschlossene Habilitation oder äquivalente Leistung, und bisher keine Lebenszeit-Professur. Der Bewerber / die Bewerberin sollte mit der deutschsprachigen Forschungslandschaft verbunden sein. Die Preisträgerinnen und Preisträger sind gelistet unter

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=68

Nachtrag:

Der Preisträger für das Jahr 2022 ist Dr. Sergey Bokarev von der Universität Rostock.

Der Erich-Hückel-Preis wird zweijährig (in geraden Jahren) von der GDCh vergeben, die auch Vorschläge entgegennimmt. Die früheren Preisträger sind Werner Kutzelnigg (2016), Hans-Joachim Werner (2018) und Gernot Frenking (2020). Die Preisträgerin für das Jahr 2022 ist Frau Prof. Sigrid D. Peyerimhoff (Bonn), siehe

<https://www.gdch.de/gdch/preise-und-auszeichnungen/gdch-preise/erich-hueckel-preis.html>

Die GDCh würdigt mit dem Erich-Hückel-Preis hervorragende Arbeiten von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie. Der Preis wird nur auf Vorschlag an die GDCh verliehen – siehe hierzu den obigen Weblink. Die Vorschläge für das Jahr 2024 sind bis **1. Oktober 2023** zu unterbreiten. Über die Preisverleihung entscheidet eine Auswahlkommission (siehe Website).

Nachtrag: Die Auswahlkommission für den Erich-Hückel-Preis wird derzeit neu zusammengesetzt.

- *Jahresrückblicke / Trendberichte 2022:*

Die Trendberichte 2022 für die Theoretische Chemie in den “Nachrichten aus der Chemie” der GDCh wurden von Philipp Marquetand (U Wien), Mariana Rossi (MPI für Struktur und Dynamik der Materie, Hamburg) und Stella Stopkowicz (seit Oktober 2022 an der Universität des Saarlandes in Saarbrücken) vorbereitet.

Nachtrag: Diese sind erschienen und können, wie alle Trendberichte, unter

<https://onlinelibrary.wiley.com/topic/vi-categories-18680054/virtual-issues/18680054>

eingesehen werden. Die Autorinnen und Autoren für die Trendberichte des Jahres 2023 wurden bereits angefragt.

- *Info Theoretische Chemie:*

Die letzte Ausgabe der Info TC, 2022/09, entstand unter der Federführung von Leticia González (Wien). Diese und die früheren Ausgaben der Info TC sind einzusehen unter:

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=54

Auf der Mitgliederversammlung entspinnt sich eine Diskussion darüber, ob die “Info TC” in der bisherigen Form noch zeitgemäß sei. Im Ergebnis wird beschlossen, die “Info TC” bis auf Weiteres weiterzuführen. Frau Prof. González, die auch für die nächste(n) Ausgabe(n) verantwortlich zeichnet, bittet hierzu, ebenso wie der AGTC-Vorsitzende, dringlichst um Zuarbeit.

- *Genealogieprojekt der AGTC:*

Der AGTC-Vorsitzende weist auf des “Genealogieprojekt der AGTC” hin, siehe

https://agtc.univie.ac.at/?page_id=93

Dort sind derzeit ca. 4500 Personen eingetragen. Meldungen / Aktualisierungen können jederzeit an Prof. Karl Jug oder Dr. Dirk Andrae gerichtet werden, unter Jugthc@mbox.theochem.uni-hannover.de und dirk.andrae@fu-berlin.de.

Der AGTC-Vorsitzende dankt den beiden Verantwortlichen für die jahrelange, wertvolle Gestaltung und Aktualisierung der Website und bittet um Zuarbeit.

- *Symposien für Theoretische Chemie:*

Das diesjährige Symposium, STC 2022, findet / fand vom 18.-22. September 2022 in Heidelberg statt, zum ersten Mal seit 2020 wieder in Präsenz. Die Organisation der STC 2021 wurde von Prof. Andreas Dreuw und Prof. Oriol Vendrell durchgeführt. Die AGTC dankt den Organisatoren für eine überaus gelungene Konferenz, mit einer neuen Rekord-Teilnehmerzahl.

Die nächsten Organisatoren des Symposium für Theoretische Chemie sind:

- STC 2023: Sandra Luber, Jeremy Richardson, Zürich (CH), 10.09.-14.09.2023
- STC 2024: Christoph Jacob (D)
- STC 2025: Beate Paulus, Bettina Keller (D), 22.-26.9.2025
- STC 2026: Daniel Boese (A)
- STC 2027: Robert Berger (D)

- *Vorstand der AGTC:*

Die Mitglieder des Vorstands der AGTC in den Jahren 2021-2023 sind:

- P. Saalfrank (Vorsitzender)
- M. Reiher (stellv. Vorsitzender)
- L. González
- W. Klopper
- Ch. Marian
- S. Grimme (für die GDCh)
- A. Groß (für die DPG)
- Ch. Ochsenfeld (für die DBG)

TOP 3: Kassenprüfung der AGTC für das Jahr 2021

Die Kassenprüfung wurde von Alexander A. Auer (MPI für Kohlenforschung) durchgeführt. Herr Auer muss kurzfristig die Teilnahme an der AGTC absagen – an seiner Stelle berichtet der AGTC-Vorsitzende. Die Kernpunkte sind:

- Das Gesamtvermögen im Hellmann-Fonds beträgt 86.946,84 EUR (2020: 74510,37 EUR).
- Das Guthaben der AGTC per 31.12.2021 beträgt 73.589,69 EUR (2020: 59826,09 EUR).
- Wie in den letzten Jahren haben sich das Gesamtvermögen im Hellmann-Fonds und das Guthaben der AGTC erneut erhöht. Die beträchtlichen Zugänge in diesem Jahr hängen v.a. mit einer zweckgebundenen Spende für den Sigrid-Peyerimhoff-Preis (12.000,00 EUR) und einer Spende für den Hellmann-Fonds (12.000,00 EUR) zusammen.

Der Kassenprüfer empfiehlt, den Kassenabschluss für 2021 zu akzeptieren, “da formal alle Summen nachvollziehbar sind”.

Die Mitgliederversammlung stimmt dem Vorschlag ohne Gegenstimme zu.

TOP 4: Mitgliedsbeiträge

Der AGTC-Vorsitzende verliest aus einem Schreiben der DBG vom 12.07.2022, in der der Schatzmeister der DBG, Herr Dr. Ott, ankündigt, dass die DBG ab 2023 einen Beitrag zur Kostendeckung für Verwaltungsaufgaben der DBG gegenüber der AGTC erheben möchte. Konkret soll die AGTC pro Jahr eine Verwaltungsgebühr von 20 EUR pro Mitglied, welches *nicht gleichzeitig* DBG-Mitglied ist, entrichten. Derzeit beträfe das 145 Mitglieder, es wäre also ein Beitrag von ca. 3000 EUR/Jahr zu leisten, was in etwa dem Gesamtbeitrag der Mitgliederbeiträge entspricht, die die AGTC erhebt (derzeit ca. 3200 EUR). Herr Dr. Ott schlägt vor, die derzeit geringen Mitgliederbeiträge der AGTC zu erhöhen.

Nach einer Protestmail des AGTC-Vorsitzenden antwortet Herr Dr. Ott, ebenfalls per Email, am 17.08.2022 mit folgendem Kompromissvorschlag: Für die Jahre 2023 und 2024 sollen zunächst nur 10 EUR/DBG-Nichtmitglied erhoben werden, ab 2025 dann der volle Betrag von 20 EUR/DBG-Nichtmitglied.

Das Ansinnen der DBG wird ausführlich diskutiert. Im Ergebnis wird ein Anspruch der DBG für moderate Verwaltungsgebühren anerkannt. Allerdings soll der AGTC-Vorsitzende noch einmal mit der DBG verhandeln, auch Alternativen prüfen sowie bei der DBG auf höhere Transparenz (Verwendung der Gelder, regelmäßige Zusendung der AGTC-Mitgliederlisten) drängen. Eine Erhöhung des Mitgliedsbeitrags für AGTC-Mitglieder auf 20 EUR/Jahr wird angeregt.

Beschluss: Es wird von der Vollversammlung ohne Gegenstimme eine Erhöhung des Mitgliedsbeitrags für AGTC-Mitglieder auf 20 EUR/Jahr beschlossen.

Nachtrag: Inzwischen fanden zum Thema weitere Gespräche statt. In einer ausführlichen Email an Herrn Dr. Ott vom 14.11.2022 schlug der AGTC-Vorsitzende vor:

- Abschätzung der Verwaltungskosten gegenüber AGTC.
- Zustimmung zur Erhebung von Verwaltungskosten, jedoch in geringerem Umfang als geplant, Vorschlag: Maximal 10 EUR/Jahr für Nicht-DBG-Mitglieder, also maximal ca. 1500 EUR/Jahr.
- Zustimmung zu Übergangsregel für die Jahre 2023 und 2024 (also 10 EUR/Jahr für Nicht-DBG-Mitglieder).
- Regelmäßige Zusendung von AGTC-Mitgliederlisten an die AGTC.

Auf einer DBG-Sitzung vom 15.11.2022, an der auch der AGTC-Vorsitzende online teilnahm, wurde zugesichert, diese Vorschläge noch einmal zu prüfen. Die aktuelle AGTC-Mitgliederliste wurde der AGTC inzwischen zugesandt.

TOP 5: Neues von der DFG

Herr Dr. Markus Behnke, Programmdirektor der Gruppe Physik und Chemie bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft und u.a. zuständig für die beiden theoretisch-chemischen Fachkollegien FK 327-01 und FK 327-02, berichtet über aktuelle Entwicklungen bei der DFG, insbesondere theoretisch-chemische Aspekte betreffend. Kernpunkte:

- Antragssumme Chemie, insbesondere: Ca. 100 Anträge bei den FK 327/ Jahr. Aufforderung zur Stellung von Anträgen, da dadurch die Quotierung des Fachs im Folgejahr positiv beeinflusst wird.
- Problem der verringerten Bereitschaft innerhalb der Community, Gutachten für die DFG anzufertigen. Es wird gebeten, bereitwilliger auf Begutachtungsangebote zu reagieren.

- Die DFG ändert derzeit Antragstemplate, z.B. die Publikationsliste und den Lebenslauf betreffend.
- Es wird auf die anstehenden DFG-Fachkollegienwahlen verwiesen. Hierzu müssen bis 31.10.2022 Vorschläge der vorschlagsberechtigten Institutionen eingehen, die im März 2023 in einer ersten Lesung gewürdigt werden. Die Fachkollegienwahlen finden vom 23.10.2023-20.11.2023 online statt.

Anmerkung: Die AGTC selbst ist nicht vorschlagsberechtigt. Der AGTC-Vorstand hat jedoch eine Vorschlagsliste an die vorschlagsberechtigten Institutionen DPG, DBG und GDCh für die theoretisch-chemischen Fachkollegien übermittelt. Diese Vorschläge wurden von den genannten Institutionen wohlwollend berücksichtigt.

TOP 5: Sonstiges

- Jeremy Richardson stellt kurz die Planungen für das Symposium für Theoretische Chemie 2023 in Zürich vor.
- Der AGTC-Vorsitzende ruft noch einmal zur Zuarbeit für die “Info TC” an Leticia González auf.

Der Vorsitzende schließt die Sitzung.

Potsdam, den 15. Dezember 2022

gez.: Peter Saalfrank