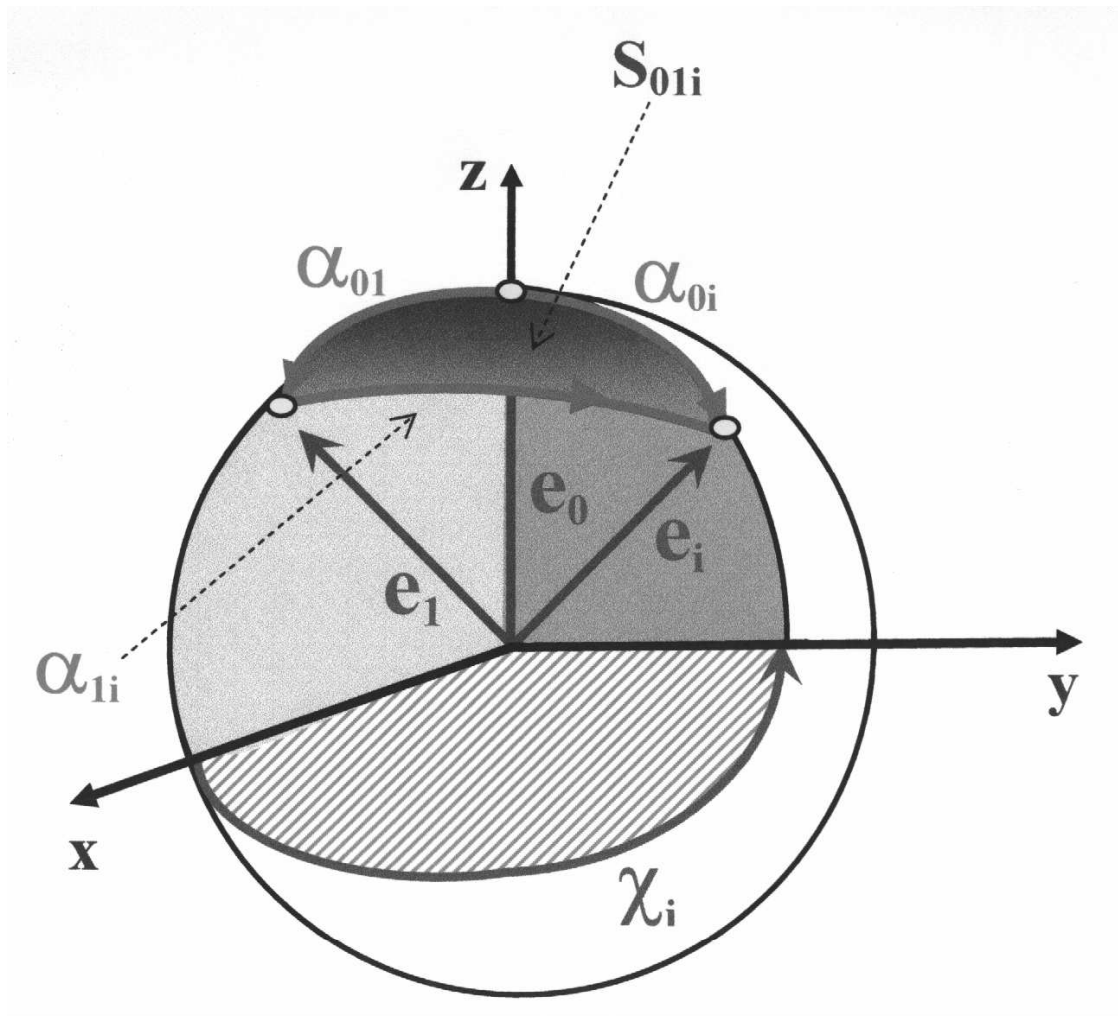


Info

Theoretische Chemie



Ausgabe November 2003

Inhalt

- Protokoll der Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie beim 39. Symposium für Theoretische Chemie in Gwatt
- Bericht vom 39. Symposium für Theoretische Chemie
- Theoretische Chemie und Computerchemie an der Heinrich–Heine–Universität Düsseldorf
- Theoretische Chemie in Freiburg
- Tagungsvorschau
- Klatsch und Tratsch

**Protokoll der Mitgliederversammlung
der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie
beim 39. Symposium für Theoretische Chemie in Gwatt**

Mittwoch, 1. Oktober 2003.

Beginn: 17.30 Uhr.

Tagesordnung:

1. Genehmigung der Tagesordnung
2. Protokoll zur Mitgliederversammlung 2002
3. Bericht des Vorsitzenden
4. Neuwahl der Jury für den Hellmann–Preis
5. Kassenbericht und Wahl des Kassenprüfers
6. Symposien 2004 und 2005
7. Verschiedenes

TOP 1

Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Änderung akzeptiert.

TOP 2

Das Protokoll zur Mitgliederversammlung 2002 war im Info TC (November 2002) abgedruckt. Es wird ohne Änderung genehmigt.

TOP 3

Der Vorsitzende berichtet zunächst über das Ergebnis der Briefwahl zum Vorstand (Dezember 2002 – Januar 2003, Wahlbeteiligung 70 %). Der Vorstand für 2003–2005 hat folgende Mitglieder: W. Thiel (Vorsitzender), W. Domcke (Stellvertreter), G. Frenking, B. Hess, M. Schreiber, V. Staemmler und H.–J. Werner.

Der Vorsitzende dankt allen Mitgliedern, die sich für die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie (AGTC) engagieren. Das Info TC wird bis Ende 2003 noch von P. Botschwina und danach ab 2004 von B. Hess herausgegeben, es ist über das Internet allgemein zugänglich (Beiträge sind willkommen). Daneben ist die Arbeitsgemeinschaft auch auf eigenen Webseiten präsent (www.theochem.de). Beiträge für die aktuellen Notizen in den "Blauen Blättern" werden durch D. Marx (Dynamik) und G. Frenking (Elektronenstruktur) koordiniert, die beide für Vorschläge dankbar sind (am besten direkt einen kurzen zusammenfassenden Text der gewünschten Länge einreichen). Für die Jahresrückblicke in den "Blauen Blättern"

haben sich in diesem Jahr R. de Vivie–Riedle, T. Klüner und G. Rauhut als Autoren zur Verfügung gestellt.

Als besonders bemerkenswerte Ereignisse im vergangenen Jahr werden die zahlreichen Tagungen zur Theoretischen Chemie in Deutschland hervorgehoben, insbesondere der 11th International Congress of Quantum Chemistry in Bonn mit insgesamt fünf Satellitentagungen. Die AGTC hat im Rahmen des Bonner Kongresses am 23.7.2003 eine öffentliche Abendveranstaltung mit zwei allgemeinverständlichen Vorträgen zur Femtochemie (W. Domcke) und zur Biokatalyse (U. Röthlisberger) organisiert, als Beitrag zum "Jahr der Chemie".

Der Vorsitzende berichtet über die anstehende Wahl der DFG–Gutachter im November 2003 und betont deren Bedeutung. Die Vorschläge der AGTC sind bei der Aufstellung der Kandidatenlisten durch die DFG weitgehend berücksichtigt worden. Nach einer Übersicht über die relevanten Fachkollegien und die Kandidaten aus dem Kreis der AGTC werden die AGTC–Mitglieder aufgerufen, von ihrem Stimmrecht Gebrauch zu machen.

Abschließend werden die Empfehlungen der GDCh zur inhaltlichen Ausgestaltung des Bachelor–Studiengangs in der Chemie besprochen. Bei dem aktuellen Entwurf ist vorgesehen, dass die Theoretische Chemie im Wahlpflichtbereich angesiedelt wird und sich mit einem weiteren Fach die 15 Credit–Points für diesen Bereich teilt (von insgesamt 180 Credit–Points). In der Diskussion besteht Einigkeit, dass die Theoretische Chemie angesichts ihrer zunehmenden Bedeutung ein Pflichtfach im Bachelor–Studiengang sein muss (etwa im Umfang von 10 Credit–Points). Der Vorstand ist aufgerufen, eine entsprechende Stellungnahme an die betreffende GDCh–Kommission zu richten.

TOP 4

Für die Neuwahl zur Jury für den Hellmann–Preis legt der Vorstand eine Liste von 7 Kandidaten vor, die zur Mitwirkung bereit sind. Es wird ein weiterer Kandidat vorgeschlagen. Zu wählen sind 5 Mitglieder und 2 Ersatzmitglieder, wobei die Jury laut Satzung Vertreter aus Deutschland, Österreich und der Schweiz umfassen soll. In geheimer schriftlicher Abstimmung werden gewählt: A. Görling (Bonn), H. Lischka (Wien), C. Marian (Düsseldorf), U. Röthlisberger (Lausanne) und J. Sauer (Berlin) als Mitglieder sowie L. Cederbaum (Heidelberg) und J. Manz (Berlin) als Ersatzmitglieder.

TOP 5

F. Mark (Mülheim) hat unsere bei der Deutschen Bunsengesellschaft (DBG) geführten Konten geprüft. Da er nicht am Symposium teilnehmen kann, hat er einen ausführlichen schriftlichen Bericht vorgelegt, den der Vorsitzende erläutert. Herr Mark hat alle bei der vorjährigen Kassenprüfung aufgetretenen Unklarheiten ausräumen können und keinen Grund für Beanstandungen gefunden. Ende 2002 beträgt der Kassenstand beim AGTC-Konto 7427.91 Euro und beim Hellmann-Fonds 17939.04 Euro. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die DBG die AGTC-Beiträge für Doppelmitglieder jeweils erst im folgenden Kalenderjahr überweisen kann. Die Mitgliederversammlung billigt den Kassenbericht und wählt F. Mark erneut zum Kassenprüfer.

Der Vorsitzende berichtet ergänzend, dass der Spendenaufruf der Vorsitzenden der Hellmann-Jury (C. Marian) in 2003 bislang Spenden von mehr als 4000 Euro für den Hellmann-Fonds erbracht hat. Er weist darauf hin, dass weitere Spenden nötig sind, um den Hellmann-Fonds auf eine ähnliche Höhe zu bringen wie andere Preis-Fonds innerhalb der DBG. Spenden sind in jeder Höhe willkommen, eine steuerliche Spendenbescheinigung wird durch die DBG ausgestellt.

TOP 6

G. Frenking berichtet über den Stand der Vorbereitungen zum Symposium 2004, das vom 19.–23. September 2004 in Suhl (Thüringen) stattfinden wird. Als Schwerpunktthema ist "Computational Chemistry" vorgesehen.

Zur Organisation des Symposiums 2005 in Österreich hat sich B. M. Rode (Innsbruck) bereit erklärt. Die Mitgliederversammlung begrüßt dies einhellig und überträgt ihm die Ausrichtung des Symposiums.

TOP 7

Es liegen keine Wortmeldungen vor.

Ende der Mitgliederversammlung: 18.00 Uhr

gez. W. Thiel

Tagungsbericht: 39. Symposium für Theoretische Chemie

Das 39. Symposium für Theoretische Chemie (STC 2003) fand unter dem Titel "Molecular Spectroscopy and Dynamics" vom 28. 9. bis 2. 10. 2003 in Gwatt am Thuner See (Schweiz), einem landschaftlich äußerst attraktiven Tagungsort, statt. Organisiert wurde es von Hans-Peter Lüthi (ETH Zürich), Martin Quack (ETH Zürich) und Jürgen Stohner (ZHW Winterthur). Zum zehnten Mal wurde das Symposium für Theoretische Chemie von Schweizer Kollegen konzipiert, denen der herzliche Dank der Teilnehmer für die Organisation galt.

Die Konferenzsprache war wie bereits auf den vergangenen Tagungen Englisch. In 28 fünfundvierzigminütigen Vorträgen wurde die Intention der Veranstalter umgesetzt, Theorie und Experiment zusammenzubringen und einen Überblick über den aktuellen Stand der Forschung zu bieten. Dabei wurde von der Tradition abgewichen, neben Hauptvorträgen auch Kurzbeiträge zuzulassen und somit dem wissenschaftlichen Nachwuchs die Möglichkeit zur Präsentation eigener Ergebnisse zu geben. Die insgesamt 127 Poster aus allen Bereichen der Theoretischen Chemie wurden in zwei Abendsitzungen lebhaft diskutiert.

Die Teilnehmerzahl befand sich mit etwa 160 Personen im Rahmen des letztjährigen Symposiums in Bremen. Das direkt am Thuner See gelegene Gwatt-Zentrum bot eine sehr angenehme Atmosphäre. Ein Ausflug auf das Stockhorn (2190 m) wird sicherlich vielen Teilnehmern lange in der Erinnerung bleiben.

Schon am Ankunftsabend wurden zwei Vorträge gehalten: **Jürgen Troe** (Göttingen) zeigte, dass das Model statistischer adiabatischer Reaktionskanäle (*statistical adiabatic channel model*, SACM) für Dissoziations- und Assoziationsreaktionen in Verbindung mit klassischen Trajektorien-Rechnungen mitunter bis hinab in den Mikro-Kelvin-Bereich aussagekräftige Ergebnisse liefern kann. **Martin Jungen** (Basel) betrachtete einige Systeme, in denen bis zu zwei Elektronen durch negative Myonen (207-fache Elektronenmasse) ersetzt waren, und mahnte Vorsicht hinsichtlich der Anwendbarkeit der Born-Oppenheimer-Näherung an.

Eindrucksvoll demonstrierte **Wim Klopper** (Karlsruhe), dass explizit korrelierte Methoden der Elektronenstrukturtheorie ausgezeichnete Ergebnisse für sehr kleine Moleküle liefern können. Für Anwendungen an Systemen mit 50 oder mehr Atomen sind jedoch vereinfachte explizit korrelierte Coupled-Cluster-Modelle, wie CC2-R12 oder CCSD(R12), erforderlich, die ausgiebig diskutiert wurden, insbesondere

auch im Hinblick auf die Verwendung von Hilfsbasissätzen in der Darstellung des Einheitsoperators. **David Luckhaus** (Göttingen) behandelte die sechsdimensionale intramolekulare Dynamik von Systemen vom Typ HONO, die eine cis–trans–Isomerisierung aufweisen. Adiabatische Kontraktionstechniken erlauben es, die Dynamik bei sehr hohen Energien (bis zum sechsten Oberton der OH–Streckschwingung) zu studieren. Die dabei verwendete Potentialhyperfläche wurde aus Dichtefunktional–Rechnungen erhalten.

Im ersten von zwei spektroskopischen Experimentalvorträgen sprach **John Maier** (Basel) über elektronische Spektren von Kohlenstoffketten sowie deren Kationen und Anionen, wobei er die Implikationen für die Astrophysik einerseits und die Nanotechnologie andererseits herausstellte. Elektronische Anregungsspektren sehr langer Polyacetylenketten wurden mittels Zweiphotonen–Ionisation studiert. Maiers Schweizer Kollege **Frederic Merkt** (Zürich) sprach über Fortschritte in der hochauflösenden Vakuum–Ultraviolett–, der Millimeterwellen– und der Photoelektronen–Spektroskopie. Die Kombination von VUV und Millimeterwellen–Anregung erlaubt die Bestimmung der Eigenschaften von hochliegenden Rydberg–Zuständen.

Hans–Joachim Werner (Stuttgart) berichtete über bahnbrechende Fortschritte bei der Behandlung der lokalen Elektronenkorrelation mit linearer Skalierung. Die besonders kostenintensive Transformation von Zweielektronen–Integralen kann durch eine lokale Dichteanpassung (*local density fitting*) erheblich verbessert werden. Werner zeigte Anwendungen bei lokalen störungstheoretischen (LMP2) und Coupled–Cluster–Methoden (LCCSD) auf. Ebenfalls über Coupled–Cluster–Verfahren sprach **Jeppe Olsen** (Aarhus), wobei höhere Anregungen im Mittelpunkt standen [CCSD(T), CCSDT und CCSDTQ]. Die teils sehr kostenintensiven Methoden wurden auf zweiatomige Moleküle angewandt. Dabei zeigte sich, dass Ergebnisse mit Fehlern unter 1 kcal mol^{-1} im Allgemeinen nicht erhältlich sind, wenn man sich auf die genannten Methoden beschränkt.

Gernot Frenking (Marburg) beschäftigte sich mit der Interpretation der chemischen Bindung. Um zwischen elektrostatischen und kovalenten Bindungsanteilen zu unterscheiden, bediente er sich dabei der Energie–Aufteilungs–Analyse (*energy partitioning analysis*, EPA). Veranschaulicht wurde diese Vorgehensweise u.a. an Übergangsmetallkomplexen, wobei insbesondere auch die Frage diskutiert wurde, ob bestimmte Bindungen Einfach– oder Mehrfachbindungscharakter aufweisen.

Den von der Zeitschrift *Physical Chemistry Chemical Physics* (PCCP) finanzierten Vortrag (PCCP-Vortrag) hielt der Japaner **Kimihiko Hirao** (Tokio). Unter dem beziehungsreichen Titel *Recent Advances in Electronic Structure Theory* (*Aktuelle Fortschritte in der Elektronenstrukturtheorie*) berichtete er u.a. über Rechnungen zu spektroskopischen Konstanten und Strukturen kleiner Moleküle, elektronisch angeregten Zuständen von Übergangsmetallkomplexen und Wasser-Clustern.

Von eindrucksvollen zustandsaufgelösten Experimenten an Molekül-Oberflächen-Reaktionen berichtete **Rainer Beck** (Lausanne). Die Chemisorption von Methan an einer Nickel-Oberfläche wurde für mehrere Schwingungsanregungen des Adsorbats untersucht. Deutlich verschiedene Reaktivitäten unterschiedlicher, aber nahezu isoenergetischer Schwingungsniveaus legen den Schluss nahe, dass statistische Methoden zur Beschreibung dieser Chemisorption nicht geeignet sind.

Roberto Marquardt (Marne-la-Vallée) trug über Wellenpaketstudien in mehratomigen Systemen vor, wobei der Schwerpunkt auf der Behandlung von Bewegungen mit großen Amplituden und von Rotationseffekten lag. Eine detaillierte Analyse galt der Inversion des Ammoniak-Moleküls. Über die Theorie optimaler Kontrolle (*Optimal Control Theory*) referierte **Regina de Vivie-Riedle** (München). Mit Hilfe optimal gewählter Laserfelder können chemische Reaktionen in eine gewünschte Richtung geschoben werden. Anwendungen im Hinblick auf Quantencomputer wurden ebenfalls erwähnt.

Samuel Leutwyler (Bern) präsentierte eine experimentelle Studie des komplizierten Protonentransfers entlang drahtförmiger, wasserstoffbrückengebundener Komplexe. Die resonanten Zweiphotonen-Ionisationsspektren der $S_1 \leftarrow S_0$ Übergänge und die $S_1 \rightarrow S_0$ Fluoreszenzspektren von im Überschalldüsenstrahl abgekühltem 7-Hydroxychinolin-(NH_3)₃ wurden im Hinblick auf eine Keto-Enol-Tautomerisierung ausführlich diskutiert. Experimentelle Untersuchungen an wasserstoffbrückengebundenen Komplexen waren auch das Thema von **Martina Havenith** (Bochum). Mittels hochaufgelöster IR-Spektroskopie wurde das Ameisensäure-Dimer mit besonderem Hinblick auf die mit dem Protonentransfer verbundene Tunnelaufspaltung studiert. Erstmals wurde ein Disaccharid in der Gasphase spektroskopiert, wobei relativ starre Wasserstoffbrückenbindungen gefunden wurden.

Marius Lewerenz (Paris) zeigte am Beispiel des Thiiran-HF-Dimeren, dass die

Einbeziehung der Kopplung an niederfrequente Moden essentiell zur Behandlung der experimentell und theoretisch untersuchten Verschiebung der hochfrequenten HF-Mode ist. Eine effiziente direkte Quanten-Monte-Carlo-Methode wurde für die quantitative Bestimmung der Teilchendelokalisierung in $(\text{NeHe}_n)^+$ eingesetzt. **Walter Thiel** (Mülheim) referierte über qualitativ hochwertige *ab initio* Potentialhyperflächen, die in störungstheoretischen und variationellen Verfahren zur Berechnung der Schwingungs-Rotations-Struktur verwendet wurden. Das Schwergewicht des Vortrags lag auf der genauen Berechnung von kleinen Molekülen, z.B. $\text{F}_2\text{C}=\text{C}$, BiH_3 und NH_3 .

Über chirale Erkennung sprach **Martin Suhm** (Göttingen) in seinem *Vibrational Dynamics of Molecular Handshakes* betitelten Vortrag. Mittels Ragout-Jet FTIR-Spektroskopie wurden Dimere mit einer, zwei und drei Wasserstoffbrückenbindungen studiert, wobei die Notwendigkeit genauer *ab initio*-Rechnungen zum vollen Verständnis der beobachteten Phänomene unterstrichen wurde. Über Fortschritte in der Dichtefunktionaltheorie berichtete **Tomasz Wesolowski** (Genf) und präsentierte Anwendungen von auf einem Gesamtenergie-Bifunktional basierender DFT auf schwach gebundene Komplexe sowie Berechnungen von lokalisierten angeregten Zuständen in kondensierter Phase.

Über theoretische Untersuchungen an katalytisch wirkenden Übergangsmetalloxiden sprach **Joachim Sauer** (Berlin). Für Vanadiumoxid, das bei der Oxidation von Methanol zu Formaldehyd verwendet wird, wurde mittels Dichtefunktional-Methoden der Einfluss der Teilchengröße des Katalysators, von der idealen Kristalloberfläche bis zum Gasphasen-Cluster, studiert. **Claude Daul** (Fribourg) beschrieb mit Dichtefunktionaltheorie erhaltene Ergebnisse zu magnetischen und spektroskopischen Eigenschaften koordinierter Verbindungen.

Jürgen Gauss (Mainz) referierte über den störungstheoretischen Zugang zu Parametern spektroskopischer Hamiltonoperatoren mit *ab initio* Methoden. Hierbei wurden analytische Berechnungen erster und zweiter sowie numerische Bestimmungen dritter und vierter Ableitungen der elektronischen Energie verwendet. Die erste spektroskopische Beobachtung des Oxadisulfans (HSOH) aufgrund einer theoretischen Vorhersage der Rotationskonstanten wurde präsentiert. **Markus Reiher** (Erlangen) stellte eine iterative Methode vor, mit der es möglich ist, aufgrund analytischer zweiter Ableitungen ausgewählte Normalschwingungen von großen Systemen zu berechnen. Anhand von Beispielen (Kohlenstoff-Nanoröhren und

Übergangsmetallkomplexe) wurde die Effizienz des Verfahrens illustriert.

Lorenz Cederbaum (Heidelberg) berichtete über intermolekularen Zerfall und ultraschnellen Energietransfer in Clustern und schwach gebundenen Systemen. Der Mechanismus des intermolekularen Coulomb-Zerfalls (*Intermolecular Coulomb Decay*, ICD) in molekularen Komplexen nach Innerschalen-Ionisierung wurde im Einzelnen begründet. **William Miller** (Berkeley), zweiter nichteuropäischer Referent neben Hirao, sprach über die praktische Implementierung semiklassischer Theorie in klassischen Molekulardynamiksimulationen und ihre Anwendung auf komplexe molekulare Systeme.

Die photophysikalischen Eigenschaften verschiedener Guanin-Tautomere untersuchte **Nikos Doltsinis** (Bochum) unter Anwendung von Dichtefunktionalmethoden, wobei sich herausstellte, dass die Methylierung eines speziellen Tautomers zu drastisch unterschiedlichen Geometrien in elektronischem Grund- und angeregtem Zustand führt. Mittels nicht-adiabatischer Car-Parinello-Verfahren erhaltene dynamische Ergebnisse wurden vorgestellt. **Michele Parinello** (Zürich) trug über die Berechnung von Hyperflächen der freien Energie in klassischer und *ab initio* Molekulardynamik vor und führte dabei eine grobkörnige Nicht-Markov-Dynamik oder Metadynamik ein, wodurch komplexe chemische Prozesse mit hohen Energiebarrieren mit relativ geringem Zeitaufwand simuliert werden können.

Während des Symposiums wurde zum fünften Male der Hellmann-Preis verliehen. Diesjähriger Preisträger war **Georg Kresse** (Wien). Der Titel seines traditionell in deutscher Sprache gehaltenen Vortrages lautete *The importance of single electron orbitals for the description of CO adsorption on surfaces* (Die Bedeutung von Einelektronen-Orbitalen für die Beschreibung der Kohlenmonoxid-Adsorption auf Oberflächen). Den Preis bekam Kresse für "die quantenmechanische Behandlung komplexer Systeme der kondensierten Materie". Mit der Weiterentwicklung von Dichtefunktionalmethoden für ebene Wellen und ihrer effizienten programmtechnischen Implementierung habe Georg Kresse der *first principles*-Simulation von Festkörpern und Festkörperoberflächen einen weiten Kreis neuer Anwendungen erschlossen.

Das 40. Symposium für Theoretische Chemie wird von Gernot Frenking vom 19. 9. bis 23. 9. 2004 in Suhl (Thüringen) organisiert werden.

M. Mladenovic und S. Schmatz, Institut für Physikalische Chemie, Abteilung für Theoretische Chemie, Universität Göttingen

Theoretische Chemie und Computerchemie an der Heinrich–Heine–Universität Düsseldorf

Das Institut für Theoretische Chemie der Universität Düsseldorf wurde 1974 gegründet. Prof. Hans–Herbert Schmidtke stand dem Institut bis 1994 vor. Das Forschungsgebiet, das er mit seiner Arbeitsgruppe präparativ, spektroskopisch und theoretisch bearbeitete, waren Übergangsmetallkomplexe. Bekannt geworden ist Prof. Schmidtke vor allem durch das Angular Overlap Model, eine erweiterte Ligandenfeldtheorie. Unter der Ägide seines Nachfolgers, Prof. Wolfgang Domcke, änderte das Institut entscheidend sein Gesicht. Präparativ chemische Arbeiten wurden komplett eingestellt, die experimentelle Spektroskopie erheblich reduziert. Zentraler Gegenstand der Forschung von Wolfgang Domcke waren die theoretischen Grundlagen ultraschneller photochemischer Reaktionen. Nach nur drei Jahren folgte Wolfgang Domcke 1999 einem Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie der TU München. Seit Ende 2001 ist Prof. Christel Marian Inhaberin des Lehrstuhls für Theoretische Chemie an der HHU Düsseldorf. Die Forschungsaktivitäten ihrer Arbeitsgruppe erstrecken sich sowohl auf quantenchemische Fragestellungen als auch auf die Entwicklung und Anwendung von Computersimulationsmethoden. Experimentell spektroskopische Arbeiten werden am Institut nicht mehr durchgeführt. Ebenfalls zum WS 01/02 wurde Prof. Walter Thiel (MPI für Kohleforschung Mülheim/Ruhr) zum Honorarprofessor für Theoretische Chemie an der HHU Düsseldorf ernannt. Im Jahre 2002 wurde das Institut entsprechend seiner Neuorientierung in Institut für Theoretische Chemie und Computerchemie umbenannt.

Die Arbeitsgruppe Marian umfasst derzeit zehn Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen (AOR Dr. Thomas Schönherr, Dr. Timo Fleig als Habilitand, eine Postdoktorandin und sieben Doktoranden bzw. Doktorandinnen), einen Systemadministrator (Herr Klaus Eifert) und im Sekretariat Frau Karin Schuck.

Ein Forschungsschwerpunkt der Arbeitsgruppe ist die Entwicklung und Anwendung effizienter quantenchemischer Methoden für spinabhängige Prozesse (Phosphoreszenz, Inter–System Crossing, Nullfeld–Aufspaltungen, g–Tensoren). Das Spin–Orbit Coupling Kit SPOCK umfasst mittlerweile sowohl ein störungstheoretisches Modul als auch ein MRCI–Programm mit Spin–Bahn–Kopplung (MRSOCI). Es baut auf Turbomole und das bewährte DFT/MRCI–Verfahren von Stefan Grimme (Münster) auf. Vergleichsrechnungen an kleinen Molekülen mit älteren, hochgenauen Methoden

(BNSOC Programmpaket) zeigen, dass das neu entwickelte Verfahren kaum eine Einbuße an Genauigkeit, aber ein Vielfaches an Effizienz mit sich bringt. Pharmakologisch interessante Anwendungsbeispiele sind Psoralene, die als Medikamente gegen Psoriasis und Hautkrebs eingesetzt werden. Diese photosensitiven Spezies möchten wir dahingehend optimieren, dass nach Bestrahlung möglichst viele Moleküle den ersten angeregten Triplettzustand populieren. Als weitere biologisch relevante Anwendungsbeispiele untersuchen wir die Elektronenspektren von Nucleobasen und Aminosäuren, die in der Physikalischen Chemie von den Kollegen Kleinermanns und Weinkauff spektroskopiert werden.

Die Entwicklung relativistischer Elektronenkorrelationsmethoden, die vornehmlich in einer Spinorbasis arbeiten, sind das Spezialgebiet von Timo Fleig. Die meisten Entwicklungsarbeiten wurden und werden über das EU geförderte Netzwerk DIRAC, zu dem auch der Standort Düsseldorf gehört, durchgeführt. Hier besteht insbesondere zu Jeppe Olsen (Aarhus), Lucas Visscher (Amsterdam) und Hans Jørgen Aa. Jensen (Odense) ein enger Kontakt. Mittlerweile stehen Multireferenzprogramme für CI im skalaren und spinabhängigen Formalismus sowie ein vierkomponentiges MCSCF-Programm in der Anwendung. Die Ausweitung von Multireferenz-Ansätzen auf die relativistische Coupled-Cluster-Methode ist ein aktueller Forschungsschwerpunkt in diesem Bereich.

Auf dem Gebiet der Computersimulation haben wir uns in den letzten beiden Jahren etwas umorientiert, da das wissenschaftliche Umfeld an der HHU sehr stark medizinisch/biologisch ausgerichtet ist. An der Universität Bonn und am Fraunhofer SCAI hatten wir im Rahmen des SFB 408 an der Modellierung amorpher kovalenter Netzwerke gearbeitet, speziell an Borosilazan-Keramiken. Dies sind neuartige hochtemperaturstabile amorphe Werkstoffe, deren Einsatz als Fasern oder Beschichtungen in Verbundmaterialien industriell erprobt wird. Experimentell werden sie durch kovalente Vernetzung von molekularen Vorläufern und Pyrolyse der entstehenden Polymere synthetisiert. Zur Aufklärung von Strukturmerkmalen der keramischen Materialien verfolgen wir verschiedene Ansätze: Quantenchemische Untersuchung von Reaktionen molekularer Vorläufer, Entwicklung von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen für NMR-Verschiebungen, Anpassung von empirischen Potenzialen für MD- und MC-Simulationen sowie Reverse Monte Carlo-Optimierung von Strukturmodellen. Wir sind derzeit dabei, diese Forschungsprojekte abzuschließen bzw. auf andere Anwendungsbereiche zu fokussieren.

Einer dieser neuen Anwendungsbereiche ist die Optimierung von Bewertungsfunktionen für das Docking von Liganden in Proteinbindetaschen und in artifizielle Rezeptoren. Als Docking-Tool verwenden wir das Programm FlexX der Firma Biosolve.it, St. Augustin. Die Bewertungsfunktion von FlexX ist sehr schnell auszuwerten und erlaubt ein virtuelles high-through-put screening (HTPS) von Ligandendatenbanken. Komplex-Geometrien werden in der Regel gut vorhergesagt, Vorhersagen von Bindekonstanten verschiedenartiger Liganden sind dagegen schwierig. Dies ist ein allgemeines Problem der heute gängigen Dockingverfahren. Die Verbesserung der Bewertungsfunktionen hat deshalb große Bedeutung für die Pharmazeutische Industrie. In diesem Projekt arbeiten wir eng mit dem MPI für Informatik in Saarbrücken und mit dem Institut für Bioinformatik der LMU München zusammen. Gute lokale Kontakte in diesem Forschungsbereich pflegen wir mit dem AK Höltje (Theoretische Pharmazie).

Die derzeitige Hardwareausstattung in Düsseldorf ist gut. Ende 2002 haben wir aus HFBG-Mitteln einen Linux-Cluster beschaffen können. Er besteht aus einem Itanium 2 mit 4 1GHz-Prozessoren, 12 GB RAM und zwei 73 GB SCSI-Platten sowie 25 Xeon 2.4GHz Doppelprozessorknoten mit jeweils 2GB RAM. Der Xeon-Server ist mit zwei 36 GB SCSI-Platten und einem Raid mit sechs 146GB SCSI-Platten ausgestattet. Alle anderen 24 Knoten haben eine 4GB IDE-Platte als Scratch-Device. Intern sind die Rechner mit Gigabit Ethernet vernetzt. Mit Hilfe der ParaStation-Software kann der Cluster zentral installiert und administriert werden. Aus Berufungsmitteln wurden in den Jahren 2001 und 2002 zwölf moderne Arbeitsplatzrechner mit Flachbildschirmen, ein Linux-NFS-Server, ein zentraler Win4Lin-Server für Windows-Applikationen sowie ein A0-Farbplotter für Poster beschafft. In unserem eigenen CIP-Raum stehen für Fortgeschrittenenpraktika 8 Arbeitsplätze zur Verfügung. Größere Gruppen können ohne Probleme im RZ betreut werden.

In der Lehre ist die Theoretische Chemie und Computerchemie in Düsseldorf gut bis sehr gut verankert. Wir bieten Lehrveranstaltungen für alle drei Chemiestudiengänge (Diplomchemie, Diplomwirtschaftschemie, BS/MS Biochemie) an. Auch im Rahmen des gerade im Aufbau befindlichen BS/MS-Studiengangs Informatik kann Theoretische Chemie und Computerchemie als Vertiefungsfach gewählt werden.

Theoretische Chemie I (Einführung in die Grundlagen der Quantenchemie und Gruppentheorie, 2 SWS Vorlesung + 2 SWS Übungen am Computer) ist für alle

Studierenden des Fachs Chemie vor dem Vordiplom obligatorisch. Leider ist für diese Veranstaltung in der derzeit gültigen Diplomprüfungsordnung kein Leistungsnachweis vorgesehen, was dazu führt, dass ein nicht unerheblicher Teil der Studierenden ihre Zeit in den Übungen eher absitzt, als aktiv mitzuarbeiten. Wir hoffen, dieses Problem spätestens bei der zu erwartenden Umstellung auf Bachelor/Master–Studiengänge in den Griff zu bekommen.

Im Hauptstudium kann Theoretische Chemie neben Biochemie oder Makromolekulare Chemie als Wahlpflichtfach (4. Fach) gewählt werden. Zusätzlich zu einer zweisemestrigen Vorlesung mit Übungen (Theoretische Chemie II und III) muss dazu ein Computerpraktikum (5SWS) mit Aufgaben aus dem Bereich der Quantenchemie absolviert werden. In diesen Veranstaltungen werden nach Einführung der grundlegenden Näherungsverfahren der Quantenchemie im Wesentlichen Hartree–Fock und Elektronenkorrelationsmethoden behandelt. Eine Düsseldorfer Besonderheit ist das Spezialisierungsstudium im 7. und 8. Semester. Wer sich für das Fach interessiert, kann in dieser Zeit ein zweisemestriges Vertiefungspraktikum Theoretische Chemie und Computerchemie in unserer Arbeitsgruppe oder in der Arbeitsgruppe Thiel absolvieren. Es ist auch möglich, im Spezialisierungsstudium zwei Fächer zu kombinieren, z.B. Theoretische Chemie mit Physikalischer oder Organischer Chemie etc.

Für die Studierenden der Wirtschaftschemie bieten wir im Hauptstudium als Wahlpflichtfach Molekülmodellierung (2 SWS Vorlesung + 8 SWS Computerpraktikum) an. Hier stehen eher Anwendungen im Vordergrund. Quantenchemische Aufgaben (Geometrieoptimierung und Übergangszustandssuche mit DFT oder semiempirischen Methoden, Schwingungsspektren) werden durch Übungen zu Molekülmechanikmethoden, Molekulardynamik, Konformationssuche mit Monte–Carlo–Verfahren sowie Docking in einen Rezeptor ergänzt.

Düsseldorf, im Oktober 2003

Christel Marian

Theoretische Chemie in Freiburg

Die Theoretische Chemie ist in Freiburg seit Beginn des Jahres 2001 durch eine C3-Professur am Institut für Physikalische Chemie vertreten. Während andere Universitäten bereits eine sich häufig auch in den Forschungsrichtungen niederschlagende Historie in diesem Fach besitzen, wies Freiburg den besonderen Reiz einer späten Erstbesetzung auf. Neben den Kernfächern der Chemie prägen die Makromolekulare Chemie, die Biochemie und die Materialwissenschaften das Bild der Chemie an der Albert-Ludwigs-Universität.

Die von uns bearbeiteten Themen können unter dem Oberbegriff Theoretische Chemie Komplexer Systeme zusammengefasst werden. Von der Systemseite zählen hierzu ungeordnete und dotierte Festkörper, elektronisch leitfähige Polymere, Fluide und komplexe Moleküle wie Proteine. In diesen Systemen interessieren uns Phänomene wie Elektronentransfer, Polaronenbildung, die unordnungsinduzierte Lokalisierung von Eigenfunktionen (sogenannte Anderson-Lokalisierung), starke Elektron-Elektron-Wechselwirkung und der Metall-Nichtmetall-Übergang. Aufgrund der Größe und Komplexität der untersuchten Systeme kommen als theoretische Ansätze nur vereinfachte, aber chemisch spezifische Modelle in Frage; diese entwickeln wir – wie das polaronenttransformierte Su-Schrieffer-Heeger-Modell oder einen Variationsansatz zur Energetik des Elektronentransfers im Grundzustand – auch theoretisch weiter. Quantenchemische Rechnungen auf *ab-initio*-Niveau bleiben als Hilfsmittel zur Parametrisierung dieser Modelle unentbehrlich; in Planung sind weiterhin Hybride aus DFT- und *tight-binding*-Verfahren. Von der Anwendungsseite betrachtet stehen die mit den oben genannten Phänomenen eng verbundenen Leitfähigkeits- und Transporteigenschaften von Materialien im Mittelpunkt.

Eine besonders intensive lokale Zusammenarbeit besteht mit der Theoretischen Polymerphysik (Prof. A. Blumen) auf den Gebieten der elektronischen und mikroskopischen Struktur von Makromolekülen sowie deren Dynamik auf einer viele Größenordnungen umfassenden Zeitskala. Daneben interessiert uns in Kooperation mit den Arbeitskreisen des Lehrstuhls II für Physikalische Chemie (Prof. P. Gräber,

PD A. Labahn) die Möglichkeit, mit Hilfe von Infrarotspektren isotopensubstituierter Polypeptide Strukturinformationen über Membranproteine zu erhalten. Auch hier spielt das Konzept lokalisierter elementarer Anregungen – in diesem Falle vibronischer Natur – eine wichtige Rolle. Außerhalb Freiburgs besteht vor allem Kontakt zu Arbeitsgruppen aus der Festkörperchemie.

Auch in der Lehre wurde mit der Theoretischen Chemie in Freiburg Neuland betreten: in das Curriculum integrierte Wahlpflichtvorlesungen, ein neu eingerichteter Computerversuch zur Quantenchemie im Fortgeschrittenenpraktikum Physikalische Chemie, die Mitgestaltung eines CIP-Pools und die Möglichkeit, die Theoretische Chemie durch ein Mitarbeiterpraktikum oder eine Tätigkeit als wissenschaftliche Hilfskraft kennenzulernen wurden von den Studierenden rege wahrgenommen.

Die oben beschriebenen Aktivitäten wären ohne engagierte Mitarbeiter – hier seien Johanna Becker, Tobias Cramer, Matthias Rateitzak und Nadine Utz hervorgehoben – ebensowenig möglich wie ohne die Unterstützung der DFG, insbesondere im Rahmen des SFB 428 *Strukturierte makromolekulare Netzwerksysteme*.

Prof. Dr. Thorsten Koslowski
Institut für Physikalische Chemie II
Universität Freiburg
Albertstrasse 23a
D-79104 Freiburg im Breisgau

Tel.: (+49)761-203-6182

Fax: (+49)761-203-6189

URL: <http://pc2-em6.physchem.uni-freiburg.de/koslowski>

Tagungsvorschau (Januar – Juli 2004)

SASP 2004

The XIV SYMPOSIUM ON ATOMIC, CLUSTER AND SURFACE PHYSICS

Planibel Hotel (La Thuile, Aosta, Italy) , February, 1–6

www.chm.unipg.it/chimgen/mb/cong/SASP2004.html

Arbeitstagung für Theoretische Chemie

17. bis 20. Februar 2004 in Mariapfarr, Salzburg, Österreich.

Methods for Electron Correlation and Relativistic Effects

www.kfunigraz.ac.at/thwww/sax/mariapfarr/home_d.html

68. Physikertagung und Frühjahrstagung des Arbeitskreises

Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (AMOP) der DPG

(mit Physik- und Buchausstellung) 22.– 26. März 2004 in München

<http://dpg2004.physik.uni-muenchen.de>

Faraday Discussion 127 , Non-Adiabatic Effects in Chemical Dynamics

St Catherine's College, Oxford, UK, 5 – 7 April 2004

<http://www.rsc.org/lap/confs/fara127.htm>

103. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft

für Physikalische Chemie e.V. vom 20. bis 22. Mai 2004 in Dresden.

Hauptthema: "Biomolekulare Grenzflächen"

<http://www.bunsentagung.tu-dresden.de/home.html>

Klatsch und Tratsch

Dr. Georg Jansen ist seit dem Wintersemester 2002/03 Professor für Theoretische Organische Chemie (C3) an der Universität Duisburg–Essen, Standort Essen.

Prof. Dr. Werner Kutzelnigg feierte am 10. September 2003 seinen 70. Geburtstag.

Dr. Arne Lüchow (bisher HHU Düsseldorf) wurde an der RWTH Aachen zum C3–Professor für Theoretische Physikalische Chemie ernannt.

Prof. Dr. Wilfried Meyer, FB Chemie der Universität Kaiserslautern, feiert am 10. November 2003 seinen 65. Geburtstag.

Priv.–Doz. Dr. Regina de Vivie–Riedle hat auf der 102. Bunsentagung in Kiel den Bodenstein–Preis 2003 erhalten.