

Bericht der Klausurtagung (Hüttenseminar) des AK Fischer

Vom 26. Februar bis 3. März organisierte der Arbeitskreis (AK) von Ingo Fischer, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Würzburg ein Hüttenseminar mit dem Titel MOLEKÜLSPEKTROSKOPIE UND MOLEKÜLDYNAMIK MIT LASERN UND SYNCHROTRONSTRAHLUNG. Das Hüttenseminar fand im Marburger Haus im winterlich verschneiten Hirschegg statt. Mit dabei waren auch Mitarbeiter der Gruppe von Roland Mitric (Theoretische Chemie) sowie ausgewählte Kooperationspartner als externe Gäste. Vormittags und abends wurden wissenschaftliche Vorträge gehalten und angeregt diskutiert, wobei sich die Themenblöcke „Photochemie mit kurzweilliger Strahlung“, „Dynamik und Fragmentation“, „zeitaufgelöste Spektroskopie“ und „Schwingungsspektroskopie“ im Programm fanden. Im Zentrum standen die Spektroskopie und Dynamik reaktiver Moleküle und schwach gebundener Aggregate, zentrale Forschungsthemen der Gruppen Fischer und Mitric. Ein wichtiges Anliegen des Seminars war es, die Kooperation zwischen experimentell und theoretisch arbeitenden Nachwuchswissenschaftlern zu fördern, daher wurde in allen Vorträgen Wert auf eine ausführliche Einleitung gelegt, mit einer Beschreibung der Motivation und der verwendeten Methoden. Zum Erfolg dieses Ansatzes trug beispielsweise der Vortrag von Jens Petersen bei, der eine *Einführung in die Simulation der gekoppelten Kern-Elektronen-Dynamik in Molekülen* gab, die den Experimentatoren einen Einblick in die Grundlagen moleküldynamischer Methoden vermittelte, aber auch in ihre Möglichkeiten und Grenzen. Umgekehrt profitierten die Theoretiker von den ausführlichen Beschreibungen der Experimente.

In die Zukunft gerichtet war der Vortrag von Dennis Mayer (DESY) *Studying Ultrafast Molecular Dynamics at X-Ray Free-Electron Lasers*, in der er aktuelle Experimente an Thiouracil am Freien Elektronen Laser (FEL) Flash in Hamburg vorstellte. Die Diskussionen im Anschluss flossen bereits in die Planung eines FEL-Projekts des AK Fischer ein. Daneben bereicherten Vorträge das Seminar, in denen Verbindungen zu anderen Forschungsgebieten hergestellt wurden. So berichtete Patrick Hemberger vom Paul Scherrer Institut in seinem Vortrag *The Ins and Outs of Lignin Catalytic Pyrolysis* darüber, wie die von vielen Anwesenden verwendeten experimentellen Techniken dazu beitragen können, die Umwandlung von Biomasse in nachhaltige Kraftstoffe oder in Grundchemikalien zu optimieren.

Im letzten Vortrag am Donnerstagabend mit dem Titel *Chemistry from a Different Star - A Chemists View on Astrophysics* gab Domenik Schleier (Laboratory for Astrophysics, Leiden University/Universität Paderborn) dann einen Überblick über aktuelle Fragen der Astrochemie, insbesondere über die Suche nach den Verursachern der „Unidentified Infrared Bands“. Er schloss seinen Vortrag mit einem Vergleich der Öffentlichkeitsarbeit zwischen Astrophysik und Molekülphysik, der auch beim anschließenden Bier an der Bar zu angeregten Diskussion führte.

Um den Blick für Themen außerhalb der Wissenschaft zu weiten gab es an einem Abend eine Übersicht über *Interessantes aus der Welt der Kommunikation*, in der den Teilnehmern Themen wie die vier Ohren nach Schulz von Thun, Ich-Botschaften, das Beziehungskonto und gewaltfreie Kommunikation nähergebracht und auf die Kommunikation in Teams angewendet wurden.

Das wissenschaftliche Programm wurde durch sportliche Aktivitäten wie gemeinsame Schneewanderungen und Skifahren ergänzt, die dazu beitrugen, dass sich ein echtes Gruppengefühl einstellte. Ausführliche Diskussionen mit zahlreichen Fragen im Anschluss an die Vorträge, aber auch vertiefende Gespräche am Nachmittag und am Abend nach den Vorträgen zeigten, dass das Konzept des Seminars voll aufging. Bei praktisch allen Vorträgen wurde die vorgesehene Diskussionszeit überschritten. Es herrschte Einigkeit darüber, dass ein solches Hüttenseminar sowohl für die Weiterbildung von Masterstudenten und Doktoranden als auch für die Förderung von Kooperationen ideal geeignet ist. Alle Teilnehmer und Teilnehmerinnen bedanken sich daher herzlich bei der Heraeus-Stiftung für die finanzielle Unterstützung.

Titel der Vorträge

Name	Titel
Michael Bühler	Quantenchemische Rechnungen an B,N-substituierten Aromaten
Ingo Fischer	Molekülspektroskopie und Moleküldynamik mit Lasern und Synchrotronstrahlung
Petra Fischer	Interessantes aus der Welt der Kommunikation
Jonas Fackelmayer	What is (velocity map) ion-imaging?
Lukas Faschingbauer	Algorithmen für die Inversion von Detektorbildern
Marius Gerlach	Grundlagen der Auger-Elektronenspektroskopie
Patrick Hemberger	The Ins and Outs of Lignin Catalytic Pyrolysis
Klaus Hofmann	Aufbau und Funktion eines Raman Optical Activity Spektrometers
Emil Karaev	Threshold Photoelectron Spectroscopy– an Overview
Lasse Kreimendahl	Berechnung der IR/UV Spektren von Naphthyridin und Chinolin
Xincheng Miao	Ultraschneller Ringschluß von <i>cis</i> -Stilben in der Gasphase
Dennis Mayer	Studying Ultrafast Molecular Dynamics at X-Ray Free-Electron Laser
Jens Petersen	Simulation der gekoppelten Kern-Elektronen-Dynamik in Molekülen
Tobias Preitschopf	IR/UV Doppelresonanzspektroskopie - Grundlagen und Anwendungen
Doro Schaffner	Fragmentation following inner shell ionization - Investigation by Auger electron-photoion coincidence spectroscopy
Domenik Schleier	Chemistry from a Different Star - A Chemists View on Astrophysics
Floriane Sturm	Zeitaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an Heteroaromaten
Katharina Theil	Zirkulardichroismus von biomimetischen Nanoröhren
Lea Wiehl	Modellierung der Reaktionskinetik von $C_4H_5 + O_2$
Lilith Wohlfart	Grundlegende Prozesse der Photofragmentationsdynamik

Gruppenfoto



Von links nach rechts; **Hinten:** Lukas Faschinbauer, Jonas Fackelmeyer, Lea Wiehl, Marius Gerlach, Michael Bühler, Lasse Kremendahl, Emil Karaev; **Mitte:** Patrick Hemberger, Dennis Mayer, Jens Petersen, Katharina Theil, Floriane Sturm, Dorothee Schaffner, Xincheng Miao; **Vorne:** Domenik Schleier, Ingo Fischer, Petra Fischer, Lilith Wohlfart, Tobias Preitschopf, Klaus Hofmann.