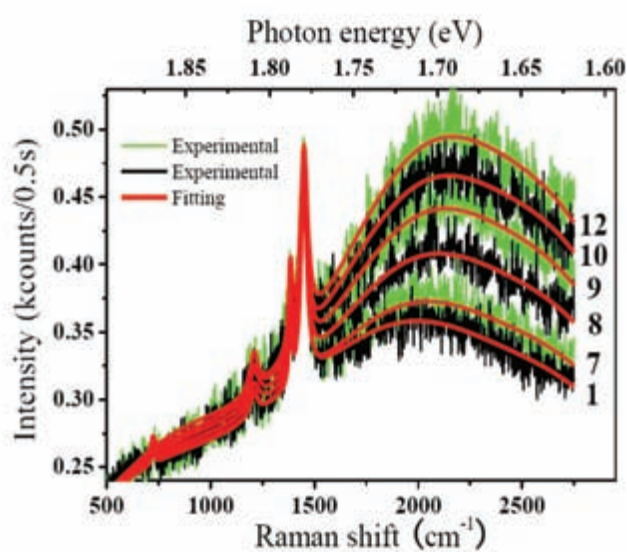
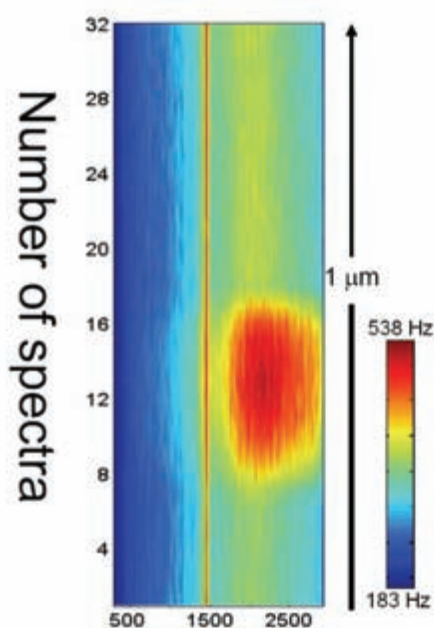


BUNSEN MAGAZIN



- Leitartikel
“Chemie am Ende der Wertschöpfungskette“ S.125
- Aspekte
High-Resolution Near-Field Optical Microscopy and Spectroscopy S. 127
- Bunsentagung/Aktuelles
Rede des Ersten Vorsitzenden bei der Bunsentagung 2011 S.138

IMPRESSUM

Bunsen-Magazin

Heft 5 Jahrgang 13

Herausgeber:

Vorstand der Deutschen
Bunsen-Gesellschaft
Martin Quack
Wolfgang von Rybinski
Wolfgang Grünbein

Schriftleiter:

Rolf Schäfer
Eduard-Zintl-Institut für Anorganische
und Physikalische Chemie
Technische Universität Darmstadt
Petersenstr. 20
D-64287 Darmstadt
Tel.: 06151 / 16 27 07 oder 16 24 98
Fax: 06151 / 16 60 24
E-Mail: bunsenmagazin@bunsen.de

Geschäftsführer der Deutschen Bunsen-Gesellschaft

Florian Ausfelder
Theodor-Heuss-Allee 25
D-60486 Frankfurt
Tel.: 069 / 75 64 620
Fax: 069 / 75 64 622
E-Mail: ausfelder@bunsen.de

Technische Herstellung:

VMK-Druckerei GmbH
Faberstraße 17
D-67590 Monsheim
Tel.: 06243 / 909 - 110
Fax: 06243 / 909 - 100
E-Mail: info@vmk-druckerei.de

Marcell Peuckert

„CHEMIE AM ENDE DER WERTSCHÖPFUNGSKETTE“



Die Synthese neuer Moleküle und Strukturen ist seit jeher das prägnante Betätigungsfeld des forschenden Chemikers. In der industriellen Anwendung werden hieraus im weitesten Sinne Wirkstoffe, Werkstoffe und Kraftstoffe, die dem Nutzen der Menschen dienen sollen. Und dann?

Dass mit der chemischen Produktion auch der Anfall von Reststoffen in Form von Abwasser und Abluft verbunden ist, ist uns allen bewusst. Und dass deren Auswirkungen hinsichtlich Toxikologie und Umweltverträglichkeit kritisch und verantwortungsvoll betrachtet werden müssen, ist heute schon längst nicht mehr nur Gegenstand einer „Randdisziplin Umweltchemie“, sondern selbstverständlich im Bewusstsein aller Chemiker. Allerdings ist dieses Bewusstsein meist geprägt von der Vorstellung von Spuren in Dimensionen ppm oder mg pro m³. Erst die allgegenwärtige Diskussion um die Klimaveränderung hat deutlich gemacht, dass es sich bei Reststoffen eben nicht nur um Spuren, sondern tatsächlich auch um ein absolutes Mengenthema in beachtlichen Ausmaßen handelt. Immerhin liegen die CO₂-Emissionen allein in Deutschland in der Größenordnung von 800 Mio. Tonnen pro Jahr mit dem Energiesektor als größter einzelner Quelle (alle Daten: Umweltbundesamt / Statistisches Bundesamt).

Aber wie sieht es denn mit den Feststoffen aus? Nun, in der Vergangenheit durften feste Abfälle „einfach“ auf Deponien gebracht werden und waren damit quasi verschwunden – aus den Augen, aus dem Sinn. Dem hat die Technische Anleitung „Siedlungsabfall“ seit Mitte 2005 endgültig einen Riegel vorgeschoben. Resultat dieses Paradigmenwechsels ist ein Rückgang der jährlichen Deponiegasemissionen (vor allem Methan) um ca. 30 Mio. Tonnen CO₂-Äquivalente zwischen Mitte der neunziger Jahre und heute, der größte Einzelbeitrag zur Erreichung der deutschen Klimaziele. Seither hat der feste Abfall reges Interesse gefunden in Forschung, verfahrenstechnischer Entwicklung und industrieller Anwendung. Nur wir Chemiker stehen dieser heterogenen, undefinierbaren Materie, so will es

scheinen, bisher etwas hilflos gegenüber. Dabei landet doch alles, was da an Werkstoffen, Textilien, Folien u.v.m. produziert und verwendet wird, früher oder später einmal auf dem Müll, rund 50 Mio. Tonnen Siedlungsabfälle und etwa noch einmal die gleiche Menge Abfälle aus Produktion und Gewerbe.

Als brave Bürger haben wir materialkundlich gelernt, Dinge, derer wir uns entledigen wollen, in graue, blaue, grüne und braune Tonnen, gelbe Säcke, dreifarbige Glascontainer, Sperrmüllhaufen etc. zu sortieren. Gleichzeitig wurden mechanische und physikalische Verfahren entwickelt, die eine weitgehend vollautomatische, kontinuierliche Trennung schaffen. Beides zusammen hat dazu geführt, dass in Deutschland im Mittel etwa 60% aller Abfälle recycelt werden, einzelne Kategorien wie Glas und Papier/Pappe sogar zu deutlich über 80%. Was danach noch übrigbleibt, lässt sich als Ersatzbrennstoff, d.h. in Substitution fossiler Brennstoffe, zur Energieerzeugung in speziellen Ersatzbrennstoffkraftwerken, Müllheizkraftwerken oder in der „Mitverbrennung“ in konventionellen Kohlekraftwerken und Zementwerken nutzen. Hier hat es in den letzten Jahren einen dramatischen Umbruch gegeben, der vor dem Hintergrund des politisch gewollten, kurzfristigen Ausstiegs aus der Atomenergie sicher noch weiter an Brisanz gewinnen wird. Ob also das Recycling der letzten Plastikfolie aus ökobilanzieller Sicht wirklich sinnvoller ist als eine thermische Verwertung mit hohem Wirkungsgrad, darf mit Fug und Recht bezweifelt werden. Auf jeden Fall sind Energie- und Entsorgungstechnik als Disziplinen inzwischen eng zusammengewachsen.

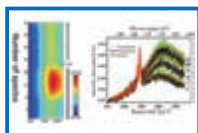
Einen ganz neuen Aspekt hat der sich abzeichnende Ressourcenengpass bei einigen strategischen Metallen wie z.B. Germanium, Indium, Niob, Tantal und den Seltenen Erden aufgeworfen. Hier wird nach verbesserten chemischen Verfahren zur Rückgewinnung der Rohstoffe aus Elektronikschrott, Batterien, Schlacken und Aschen gesucht, damit sich am Ende die Wertschöpfungskette wieder schließt.

Chemische und physikalische Expertise ist gefragt bei der Entwicklung neuer, effizienter Entsorgungs- und Energietechnologien – aber auch auf einer ganz anderen Ebene: in der vehementen legislativen Diskussion, die diesen Sektor kennzeichnet. Novellierungen zum Kreislaufwirtschaftsgesetz, Treibhausgas-Emissionshandelsgesetz, Erneuerbare-Energien-Gesetz und zur EU-Energiesteuerrichtlinie sind nur einige aktuelle Baustellen. Auch hier sind nach meiner persönlichen Meinung wir Physikochemiker gefordert und können einen qualitativen Beitrag leisten, und zwar als Naturwissenschaftler und *zoon politikon* in der Gesellschaft.

Dr. Marcell Peuckert
Thermal Conversion Compound Industriepark Höchst GmbH
Industriepark Höchst, C526, 65926 Frankfurt am Main
Tel.: +49-69-30521616
E-Mail: marcell.peuckert@infraser.com

Leitartikel		
	Marcell Peuckert „Chemie am Ende der Wertschöpfungskette“	125
Aspekte		
	Dai Zhang High-Resolution Near-Field Optical Microscopy and Spectroscopy	127
Bunsentagung/Aktuelles		
	Helmut Schwarz Grußwort von Prof. Dr. Helmut Schwarz, Präsident der Alexander von Humboldt-Stiftung, für die 110. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie in Berlin, 2. Juni 2011	136
	Martin Quack Rede des Ersten Vorsitzenden anlässlich der 110. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie in Berlin, 2. Juni 2011	138
	Impressionen Bunsentagung 2011 in Berlin	144
	Preise/Ehrungen	146
	Wolfgang G. Bessler Karriereplanung von promovierten Physikochemikern Ein Rückblick auf das Karriereforum der Bunsentagung 2011	155
	Vorstandsbericht	157
	Vermögensrechnung	160
	Ergebnisrechnung	162
	Bericht über die ordentliche Mitgliederversammlung 2011	163
	Einladung zur ordentlichen Mitgliederversammlung 2012	165
	Bunsentagung 2012 in Leipzig	166
Zeitschrift für Physikalische Chemie		
	Inhalt Heft 6 – 7 (2011)	167
Nachrichten		
	Katharina Kohse-Höinghaus, Jürgen Troe, Klaus Luther Horst Hippler zum 65. Geburtstag	168
	Personalia	170
	Veranstaltungen/Events	171
	Ankündigungen	171
	Ausschreibungen	172
GDCh		
	Nachhaltiges auf dem Wissenschaftsforum 2011	175

Zum Titelbild



Nanometer scale spectroscopic imaging of the active layer in polymer organic solar cell (Copyright (2010) by Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. Pictures adapted from ref. [48].) Left: Thirty-two enhanced spectra from a line-mapping (1 μm) of P3HT:PCBM solar cell blends. The presence of PCBM aggregate is revealed by its strong luminescence signal at ca. 2100 cm⁻¹. Right: Six Raman spectra selected from picture left for a better illustration of the PCBM luminescence. See the article by Dai Zhang on page 127.

Dai Zhang

HIGH-RESOLUTION NEAR-FIELD OPTICAL MICROSCOPY AND SPECTROSCOPY

1. INTRODUCTION

Optical microscopy is a technique that uses light and a series of optical elements, such as lenses, to amplify and visualize small objects. Such idea has been pursued since centuries; the first vision aid called reading stone was invented more than 1000 years ago, which was simply a glass sphere. Benefited from the development of glass making techniques, optical microscopy steps from simple single-lens based design to more complicated compound microscope configuration, by which the amplification capability is largely improved and chromatic aberrations are decreased. During its development since centuries, the resolution issue has always been the center consideration in optical microscopy. It is influenced by factors such as imperfections in the lenses or misalignment. However, one of the most fundamental limiting factors lies in the light diffraction, which defines the best-focused light spot (Airy disc) that a perfect lens with a circular aperture can manage. The Abbe diffraction limit, $d = 0.61 \lambda / n \sin \theta$, further describes the fundamental resolution limitation of any optical system [1]. In modern optics, numerical aperture ($n \sin \theta$) can reach to about 1.4, which indicates the diffraction - limited optical resolution is about the half of the excitation wavelength λ . Taking into consideration of the wavelength of ultraviolet - visible light that commonly used as the light source, the resolution of optical microscopy lies at the scale of hundreds of nanometers.

With the prosperous developments of nanoscience and nanotechnology, researchers pursue new discoveries and understandings not only from macroscopic point of view but also at nanometer scale. The applicability of optical microscopy has been hence doubted due to its limited resolution. To tackle this problem, a variety of new methods have been introduced either from a fundamental way, such as stimulated emission depletion microscopy (STED) [2-4] and stochastic optical reconstruction microscopy (STORM) [5,6]; or from an indirect way, such as the near-field optical microscopy [7,8]. As has already been well-demonstrated, STED and STORM contribute revolutionary to the field of life science in which fluorescence microscopy finds its great popularity. In the year of 2009, an optical resolution as 5.8 nm has been reported by STED using color

centers of nanocrystals as the fluorescing unit [9]. Notably, due to their intrinsic working principles, STED and STORM work only for fluorescence microscopy. In this paper I will introduce another type of high-resolution optical microscopic technique, near-field optical microscopy, that finds its way to obtain nanometer optical resolution and single molecule detection sensitivity based on not only fluorescence signal, but also other processes, such as Raman scattering.

2. PRINCIPLE

2.1 GET AROUND THE DIFFRACTION LIMITATION

To improve the resolution of optical microscopy, one needs to bear in mind two considerations: 1) how to confine the optical field into a small spot to overcome the diffraction limitation? 2) How to maintain detectable signal from a small illuminated area without sacrificing the high optical resolution? To answer these two questions, the concept of localized surface plasmon has been integrated to optical microscopy.

Plasmons are quanta of collective oscillations of free electron gas density in the bulk material, responding to an external electric field, such as the polarization of an incident light. The plasmon properties can be predicted by the classic Maxwell's equation; and the plasmon frequency can be determined by free electron gas density and effective mass [10]. Surface plasmons, also known as surface plasmon polaritons, are surface electromagnetic waves that propagate in a direction parallel to a metal/dielectric interface. Vertical to the interface, surface plasmon is an evanescent field with its field strength decaying exponentially into the space. The basis for localized surface plasmon is the free electron oscillation in small metal nanoparticles or rough metallic surfaces upon the resonant excitation by an incident light, matching both the momentum and energy constrains. The free electrons oscillating periodically at small particle create there an oscillating electric field. Different from the surface plasmon, localized surface plasmon loses its propagating electromagnetic wave property, and is confined at the proximate of the metallic particle; hence de-

depends sensitively on its shape, geometry and size [11,12]. Localized surface plasmon, also known as the origin for 'hot spots', has been widely used to enhance the Raman scattering or fluorescence emission. Single molecule Raman scattering sensitivity has been reported benefited from the highly concentrated electric field at the 'hot spots' [13].

High-resolution near-field optical microscopy has borrowed such concept. Instead of using a metallic particle or roughened metallic substrate to create the localized surface plasmon, a metallic tip is used, of which the sharp tip apex can be regarded as a nano-particle. The excitation of the tip apex concentrates the optical field of the diffraction-limited far-field focus to a much smaller spot, creating there a near-field focus, named after its distinctive evanescent field property. The electromagnetic near-field around the tip apex is highly enhanced in comparison to the electromagnetic field of the incident laser. This increases even weak optical processes, such as Raman scattering, of an adsorbate by many orders of magnitude and thus enables to spectroscopically identify and detect a small number of molecules adsorbed on atomically smooth single-crystalline metal surfaces [14,15]. In addition, due to the tight confinement of the electromagnetic near-field around the tip apex (down to tens of nanometer in diameter), the enhancement right below the tip apex is significantly higher than other area, which is one

of the essential reasons of how near-field optical microscopy gets around the diffraction limitation. In this way, near-field optical microscopy combines excellent spectroscopic sensitivity with high spatial resolution in the nanometer range.

Notably, the distance between the sharp tip and the substrate as well as the dielectric constant of the substrate influence also the resolution of the near-field optical microscopy, which will be discussed in details below.

2.2 INFLUENTIAL FACTORS

2.2.1 TIP-SAMPLE DISTANCES

We have studied the influence of the tip-sample distances on the near-field optical signals using a combination of scanning tunneling microscope and an optical microscope [16,17].

The experimental system is monolayer guanine and HClO_4 coadsorbed on Au (111) surface. Due to the small cross-section of the Raman process, no normal Raman signal has been detected from this sample surface. A p -polarized He-Ne laser (632.8 nm) has been used to excite the near-field at a sharp Au tip apex. As shown in figure 1 I), with the tip in tunneling position (1 nm away from the substrate), perchlorate shows a char-

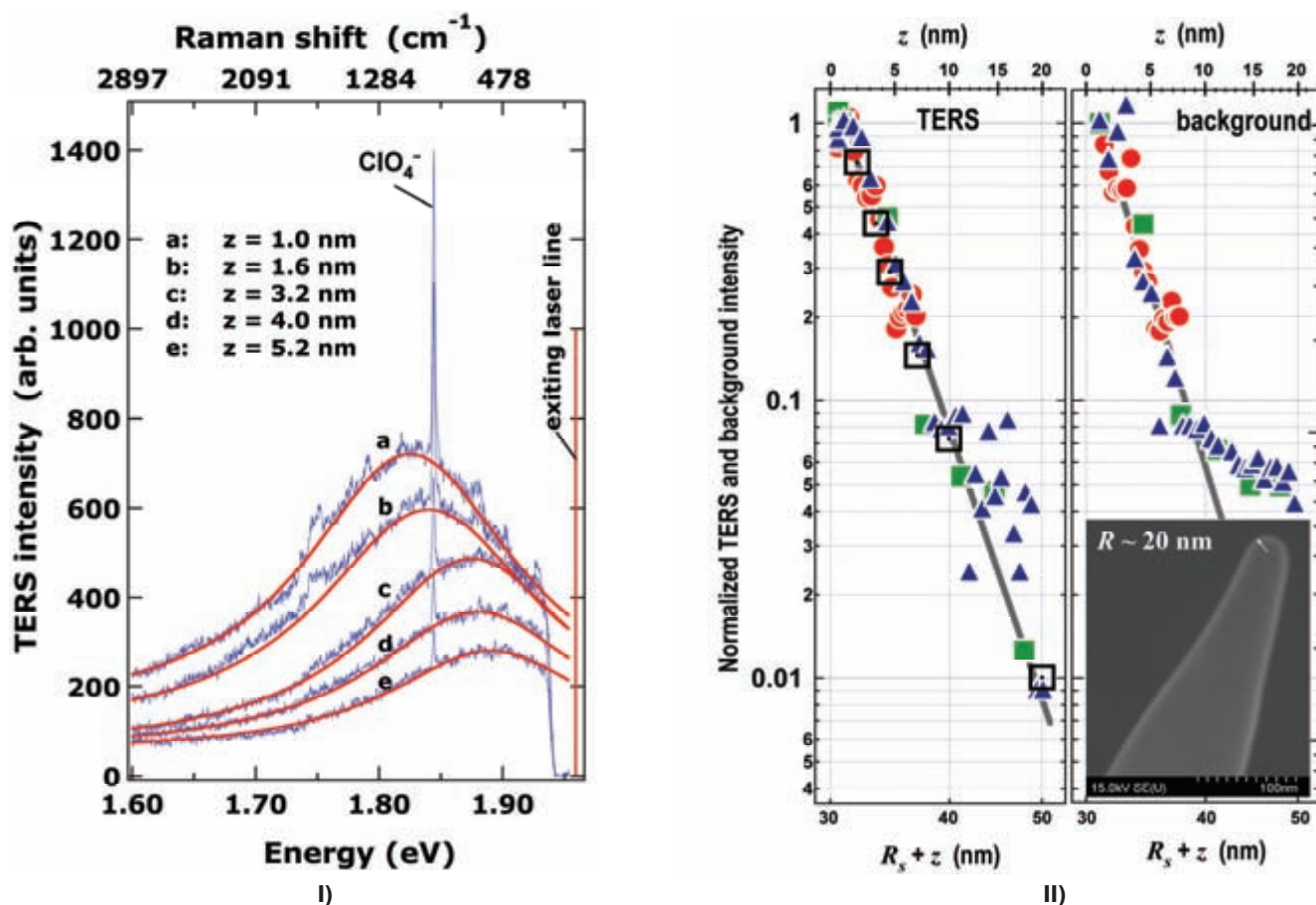


Figure 1 I) Near-field enhanced Raman spectra (TERS) for coadsorbed guanine and ClO_4^- for different distances z of the STM tip to the surface. (a)–(e): $z = 1 - 5.2$ nm. Retraction speed (the speed of lifting up the tip from the surface): 0.16 nm/s. Smooth red lines: background curves from a Lorentzian fit. II) Plot of the TER and background intensities for varying distance parameter $R_s + z$, where R_s is the effective radius of the tip apex (30 nm), z is the gap width (distance of the STM tip to the surface). Retraction speeds: green box: 1.6 nm/s, blue triangle: 0.32 nm/s, red bullet: 0.16 nm/s Grey line: fitting curve. Inset: SEM image of the STM tip. Excitation laser: 632.8 nm. Copyright (2009) by Elsevier B. V. Pictures adapted from ref. [17].

acteristic intense band at 930 cm^{-1} , assigned to its A1 breathing mode. With the increase of the tip-sample distance, the perchlorate Raman band intensity drops to nearly zero after approximately 10 nm tip – retraction (for tip radius = 20 nm). The above experiments demonstrated that to achieve a high sensitivity using near-field optical microscopy, the sample has to be positioned at the proximity of the tip apex, e.g. in the range of less than 5 nm. To realize such a precise sample positioning, Scanning probe microscopic (SPM) feed-back, either based on tunneling current or force can be implemented to optical microscopy. Such a combination endows an additional advantage over other microscopic techniques by its capability of simultaneously obtaining optical and topography information at nanometer scales [18,19].

2.2.2 SUBSTRATE MATERIALS

Depending on the polarizability of the substrate material, the oscillating electric field at the tip apex induces a complementary oscillating field inside the substrate, named as its mirror image. When the sample is positioned within a couple of nanometer away from the excited tip apex, the substrate material starts to be influential to the near-field at the tip apex via the coupling between the oscillation field and its mirror image.

As shown in figure 1I), all the spectra exhibit strong and broad Lorentzian-shaped background. At tip-sample distance of 1 nm, the background maximum is located at energy of 1.836 eV and has a half width of about 0.19 eV. The broad inelastic background are at least partially originates from the Au photoluminescence (PL) [20], and its intensity can be regarded as an indicator of the local near-field strength. This background intensity decreases with the increase of the tip-sample distance. Different from the total disappearance of the Raman peak from perchlorate at large tip-sample distance (larger than 15 nm), there is approximately 10 % of the enhanced background intensity still present that is originated from the PL of the excited tip apex (Fig. 1 II)). In addition, during approaching the tip from 5.2 nm to 1 nm away from the substrate, the background profile shifts significantly towards lower energies from about 1.882 eV to 1.836 eV (Fig. 1 I), spectra e to a). The increasing background intensity and the red-shift of the background-maximum energy with the decreasing tip-sample distance directly visualize the underlying effect of tip-substrate plasmonic coupling [21]. Such a coupling effect forms the so-called gap-mode, which confines and strengthens the near-field between the tip and sample much stronger than that of the tip alone.

Different from the free-electron model that applicable to the metallic substrate, semiconductor organic molecules, especially arranged in a crystalline structure, responds to the oscillating electric field in the form of collective polariton oscillation, leads to a tip-sample gap-mode via plasmon-polariton coupling [22]. Due to the lower polarizability of dielectric material, the oscillating surface charge at the tip apex induces weaker mirror charge as compared to metal and semiconductor, leading to a much weaker gap-mode formed between the tip antenna and the dielectric substrate. The near-field enhancement for this case is largely determined by the electric field confinement from the tip alone.

As discussed above, the level of tip-substrate interaction applies significant influence on the field strength concentrated between the tip and the sample. One has to take into serious account of the choice of substrate materials in order to optimize the performance of the high-resolution near-field optical microscopy. So far the single molecule detections using near-field optical microscopy are mostly reported with a gap-mode formed between a noble metallic tip and a noble metallic substrate [23,24]. In addition, the strong confinement of the electric field inside the gap-mode (by decreasing the tip-sample distance as well as using metallic tip and substrate) further decreases the effect area that the near-field enhancement applies, leading to an improvement of the optical resolution down to a scale of around 15 nm [23].

3. INSTRUMENTATIONS

3.1 TIP MATERIALS

The choice of suitable tips is one of the key issues in performing effective near-field optical measurements [25,26]. It depends on several considerations, such as the laser excitation wavelength, the mechanical and chemical stability, the complexity of the fabrication procedures. Pettinger et al. had reported that the Raman intensity of malachite green isothiocyanate (MGITC) adsorbed on Au (111) was increased by a factor of 2 when a He-Ne laser illuminated Ir tip was approached at a distance of 1 nm away from the molecules [27]. Under the comparable experimental condition, when the Ir tip was replaced by a Au tip, the average increase of the Raman intensity was about 8000 times. The explanation of the fewer enhancements from an Ir tip was that a significant damping of the confined electric field occurred despite the excitation of localized surface plasmon in the Ir / Au (111) crystal cavity. Ag and Au so far are two of the primary materials for producing suitable near-field tip due to the favorable surface plasmon excitation and sustention in the UV-visible range. However the fast oxidation of Ag under ambient atmospheric condition severely limits its practical usage. The local heating effect induced by the confined strong electric field may accelerate the oxidation rate. To minimize the oxidation, the prepared sharp Ag tips have to be stored and used either in a vacuum condition, or under inert atmosphere protection. As compared to Ag, Au has a distinct advantage of being chemically stable in ambient condition. Therefore, Au is so far the most popular material for tip fabrication. Notably, the choice of the tip material should be optimized also by the excitation frequency. For example, Al has been suggested as more proper than Au or Ag when using a short UV laser for the tip excitation [28].

3.2 TIP FABRICATION

Electrochemical etching Au or Ag wires to generate sharp tip apex is often used [26]. We used the following parameters to electrochemically etching a Au tip. The tips are produced by electrochemical etching the end of a 125 μm Au wire in concentrated hydrochloric acid (HCl, 37%). As counter electrode a platinum wire formed as a ring is used to generate a circular

constant field on the Au wire. The Au wire is placed in the center of the platinum ring. A frequency generator provides rectangular pulses with 8 V and duration of 30 μs at a repetition frequency of 3 kHz, which can be brought to the gold wire by a push button. With a wide-field microscope the tip can be observed from the side to stop the etching process. The tip is cleaned with distilled water and characterized with a SEM before using.

3.3 OPTICAL MICROSCOPE CONFIGURATIONS

The commonly used experimental configurations for near-field optical microscopy, based on the arrangements of the optical paths for tip illumination and signal collection, can be divided into three main streams: transmission [29,30] side-illumination [14], top-illumination [31,32] Transmission configuration is the most classic design that relative easily combines the SPM unit and the transmission optical microscope. The bottleneck problem of this configuration is its limitation to transparent samples. Side-illumination and top-illumination are the two more flexible configurations that applicable to also non-transparent samples.

Side-illumination configuration (Fig. 2a) uses a *p*-polarized laser beam to illuminate the tip antenna from a tilted angle vs. the sample [14]. The tilted angle has been suggested theoretically as between 45 and 60 degree [33]. The tip can be approached to the sample surface at a desired distance via tunnelling current. Top-illumination configuration (Fig. 2b) uses a high numerical aperture (NA, NA = 1) parabolic mirror that is placed above the sample for laser focusing and signal collection [31,34]. Instead of the commonly used lineally polarized beam, higher order donut-shaped laser beam such as radially polarized beam has been used to symmetrically excite the tip apex. The tip is brought into the centre of the focus through an axial hole at the centre top of the parabolic mirror and is kept at a defined distance from the sample surface by shear-force control [31] or tunneling current [32]. Same to the side-illumination configuration, top-illumination also has no limitation regarding the sample transparency. Besides this, comparing with the common air

objective, a NA of 1 can be achieved by a parabolic mirror allowing an efficient and symmetric signal collection over a solid angle of 2π above the sample surface. Only a minor fraction of the signal is lost due to the small axial hole opened at the top of the parabolic mirror and the blockage of the tip shaft. In addition, a tighter focus that is slightly smaller than $\lambda/2$ can be achieved by a parabolic mirror, which helps to minimize the background signals from the far-field focus illuminated sample area [35]. A further advantage is that parabolic mirror focusing is based on reflection and is free from chromatic aberration, and thus adaptable to different laser wavelengths. Notably, different from objective lens that has wide field of view and high degree of correction function; parabolic mirror has limited off-axis imaging property. Slight deviation of the incident beam from the optical axis or from parallelism leads to large aberrations [36]. Therefore, the quality and the precise alignment of parabolic mirror are critical in such sort of configuration.

4. APPLICATIONS

4.1 SINGLE MOLECULE DETECTION

Single molecule detection based on fluorescence microscopy has been much often realized than microscopy based on Raman signal since the cross-section of fluorescence process is magnitudes larger than that of the Raman scattering. Typical cross section of normal Raman scattering for small, non-resonant molecules such as water lie in the range of 10^{-30} cm^2 . For the much larger dye molecule like MGITC, Raman cross-section of up to about 10^{-28} cm^2 is expected. Resonant effect of the Raman scattering process pushes up the effective cross section for a large resonant dye molecule by a couple of more magnitudes. To reach the single molecule detection level of around 10^{-16} cm^2 , additional electromagnetic enhancements has to be created [38].

Using the side-illumination set-up (figure 2 a)), we have demonstrated and compared the performances of near-field resonance Raman spectroscopy in single resonant and non-resonant mol-

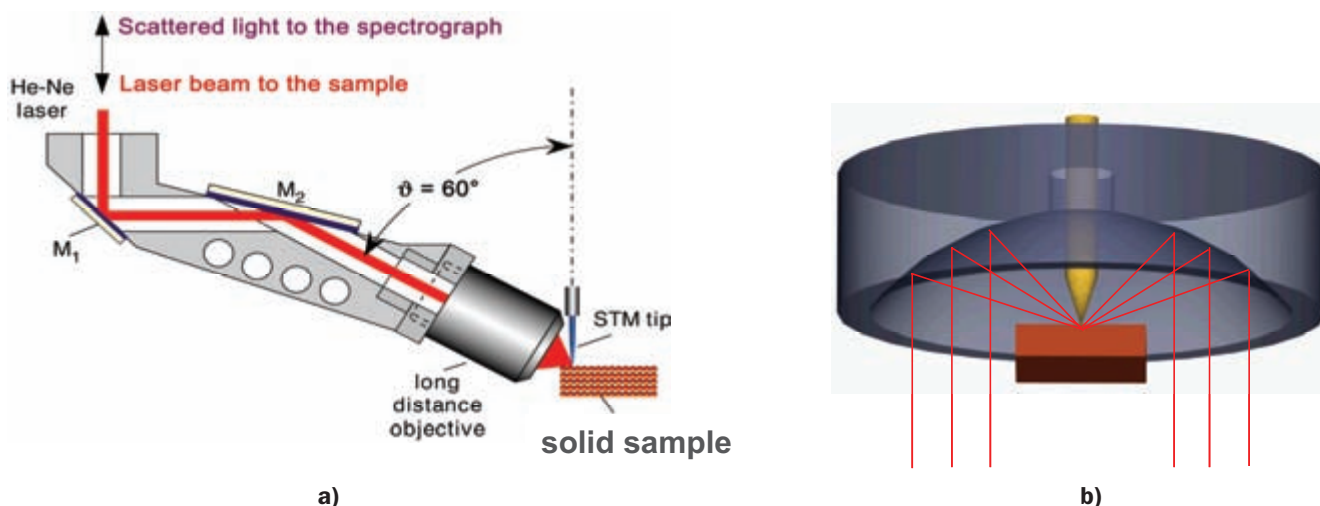


Figure 2 a) Scheme for a side-illumination configuration. Copyright (2009) by Elsevier B. V. Picture adapted from ref. [17]. b) Sketch of a parabolic mirror situated above a sample and the tip antenna approached through an axial hole into the focus of a radially polarized laser beam. The red lines indicate that the light is focused by reflection onto the tip apex and the sample surface. Copyright (2009) by John Wiley & Sons, Ltd. Picture adapted from ref. [18].

ecule detections. MGITC has its absorption maximum matching our excitation wavelength of 632.8 nm, and hence has been chosen for the study of the resonant effect [24]. Adenine, which has a maximum absorption in the UV range, has been used to study the non-resonant near-field enhanced Raman spectroscopy [37]. MGITC has been adsorbed for 1 hour at a Au (111) single crystal from six differently concentrated solutions: After the adsorption the crystals have been thoroughly rinsed with water. Due to the small surface coverage, Raman lines are not obtainable when there is no near-field enhancement presents. When an excited tip approaches to such sample surface at a distance of 1 nm, spectrum with distinctive Raman lines of MGITC appears (plotted in a semilogarithmic plot in figure 3 I). The spectra labelled by A, B, C, D, E and F are the near-field enhanced Raman spectra taken from samples prepared from 4.9×10^{-5} , 1.2×10^{-6} , 2.3×10^{-7} , 1.2×10^{-7} , 2.3×10^{-8} , 1.2×10^{-8} M MGITC solutions.

To calculate the number of scatterers (number of molecules excited) at each surface concentration, we take into account the maximum coverage and the corresponding spectral intensity. The area of the enhanced field is estimated according to the radius of the tip apex (~ 20 nm). Comparing the size and the orientation of a MGITC molecule, we estimate that one molecule occupies approximately 1 nm^2 [24]. The highest surface cover-

age of 1×10^{14} molecules/ cm^2 , which corresponds to around 1260 molecules, is expected to present in the near-field focus region. Following the linear dependence of the enhanced Raman band intensity on the surface concentration of MGITC, we calculate from the integrated Raman intensities the number of scatterers present for different concentrations. For example, the 1298 cm^{-1} band gives a total intensity of 9.84×10^5 cts/s for the highest adsorbate concentration (spectrum A in figure 3 I), which corresponding to 783 cts/s per molecule at the near-field focus region. Consequently, we calculate that only five molecules are present in the near-field focus at the lowest concentration considering the total intensity of 3800 cts/s from the 1298 cm^{-1} peak (spectrum F in figure 3 I).

To determine the near-field Raman detection limit for optically non-resonant species, we lowered the concentration of the adenine adsorption solution down to 7.6×10^{-8} M. The recorded Raman fingerprint allows the identification of adenine by the prominent band at 731 cm^{-1} assigned to its ring breathing mode [39]. According to the molecular dimensions and STM results [40,41], the largest packing density of adsorbed nucleobases is around 2-2.5 molecules/ nm^2 for the closest packed monolayer, which corresponding to ca. 3000 molecules at the near-field focus (radius of ca. 20 nm). Figure 3 II) compares (a) the near-field Raman spectrum obtained from full coverage, that is, maximal around 3000 molecules present in the near-field focus, and (b) the one from submonolayer coverage. The integrated ring-breathing mode band intensities are 16500 cts/s in spectrum a and 730 cts/s in spectrum b. Taking into account of the linear relation between the number of non-resonant scatterers and the band intensity, that is 5.5 cts/s per molecule, we are able to detect around 130 adenine molecules with near-field Raman spectroscopy at the low coverage (spectrum b in Fig. 3 II).

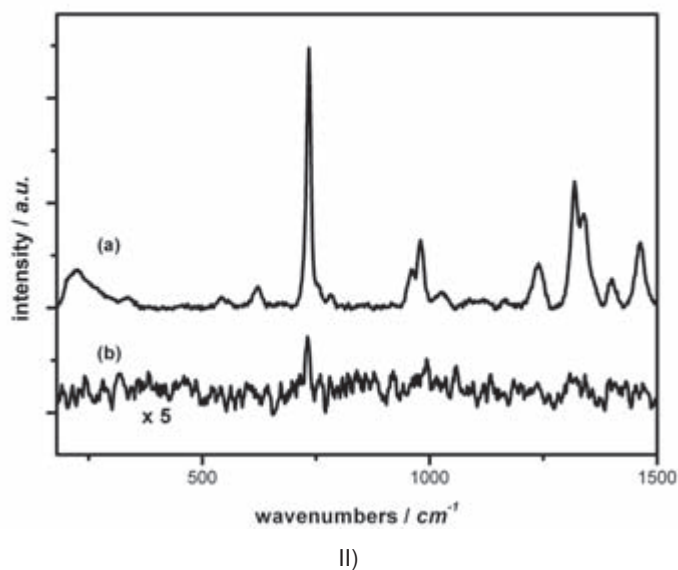
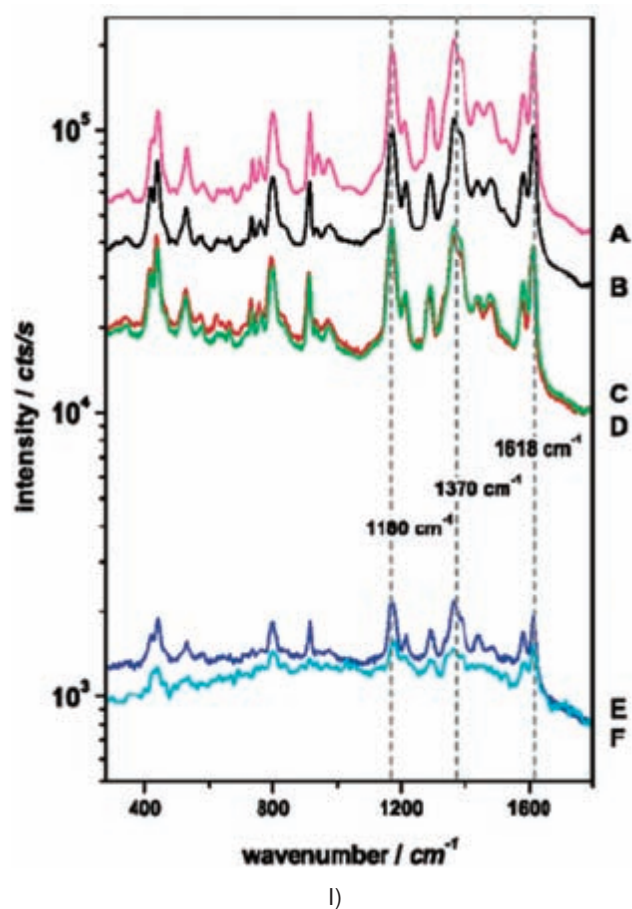


Figure 3 I) Average enhanced spectra of MGITC/Au(111) at different adsorbate concentrations A-F, normalized to full laser power (2 mW at sample) and 1 s integration time. Copyright (2006) by American Chemical Society. Picture adapted from ref. [24]. II) Near-field enhanced spectra of adenine adsorbed at Au(111) normalized to 1 s integration time at 2 mW incident power: (a) monolayer coverage of around 3000 molecules present in the enhanced-field region; (b) submonolayer coverage of around 130 molecules present in the enhanced-field region; intensity multiplied by a factor of 5 for easier band comparison. Excitation laser: 632.8 nm. Copyright (2007) by American Chemical Society. Picture adapted from ref. [37].

Employing the same near-field microscope for the measurements of adenine as for the MGITC enables us to compare the detection sensitivity of near-field Raman spectroscopy regarding resonant and nonresonant scatterers. Based on the scattering intensities per molecule obtained from the largest band of adenine (5.5 cts/s per molecule) and of the dye (783 cts/s per molecule) [24,37], we find that the near-field enhanced scattering cross-section of the non-resonant molecule is about 140 times smaller in comparison to the one of the resonant species. This is the direct experimental evidence for the pure resonance contribution to the Raman enhancement. The difference in the detection limit for resonant (single molecule) and non-resonant molecules (130 molecules) agrees very well with this number.

4.2 SEMICONDUCTOR ORGANIC SOLAR CELL BLEND

Photovoltaic is one of the important techniques that have been successfully used to convert solar energy into electric energy. Based on conjugated semiconductor polymers, organic solar cell is a promising candidate for new generation of low-cost and flexible photovoltaic devices. The blends of poly(3-hexylthiophene) and [6, 6]-penyl-C61 butyric acid methyl ester (P3HT:PCBM) have been intensely used as electron donor and acceptor in organic solar cells devices [42, 43]. One of the main factors affecting the power conversion efficiency of P3HT:PCBM solar cells is the efficiency of creation and dissociation of electronically excited states (excitons)[44]. Whilst exciton creation is determined by the absorption efficiency of P3HT, exciton dissociation at the donor/acceptor interface is highly related to the local morphology and distribution of P3HT and PCBM. The ideal blend should phase-segregate to form bulk-heterojunctions endowing bicontinuous dispersion of P3HT and PCBM with the mean domain size commensurate with the exciton diffusion length (5-10 nm) and a maximum interfacial area for exciton dissociation [45]. Each of the two phases should be highly crystalline, thus enabling effective hole and electron transport. Thermal annealing is widely employed as an effective post-production treatment for achieving this goal [46]. However, up to date the selection of optimal annealing time and temperature is achieved only empirically due to the lack of sufficient information about the internal order of the active layer and the regional organization of the composites on a scale matching the ideal length scale for exciton diffusion/dissociation and electron/hole transport. Therefore, a better understanding of the blend film morphology evolution upon post-production treatment is essential [47].

Near-field optical microscopy could simultaneously provide optical and topographic information both at nanometer scales, which naturally make it a promising candidate for studying the morphology related topophysics processes in organic solar cell blends. Using the top-illumination set-up (figure 2 b)), we carried out near-field optical imaging of the P3HT:PCBM blend film [48]. Figure 4 shows the correlated topographical and near-field spectroscopic mapping images obtained from the blend film which has been thermally annealed for 30 min [48]. The scanning area is 1000 x 750 nm² (32 x 24 data points). In the middle of the topographic image (Fig. 4a), an ellipsoidal island with a max. width of 300 nm and max. height of

500 nm is observed. The corresponding near-field mapping image (Fig. 4b), obtained by summing the total spectral intensity from 283 cm⁻¹ to 2926 cm⁻¹ shows intense optical signals at the places where the island is located. Gradually decreasing optical intensity from the maximum height of the island to the flat area is clearly resolved. Figure 4c stacks 32 Raman spectra taken from a one-line near-field spectroscopic map (1 μm) along the arrow indicated in figure 4b. Whilst the P3HT Raman peak at 1450 cm⁻¹, represented by the red line across figure 4c, indicates the presence of P3HT molecules throughout this region, a clear optical signal evolution in the range from 1600 to 2600 cm⁻¹, corresponding to PCBM PL, is observed following the one-line scan.

A more detailed inspection of the spectra numbered with the same sequence as in figure 4c, are plotted in figure 4d as green and black curves. The fitted spectra are shown as red curves. For all the fitting curves shown in figure 4, the positions and the FWHM are fixed to the values derived from pristine P3HT and PCBM whilst leave the parameter of peak area free-adjusted so that the best fitting can be achieved. The maximum PL emissions from P3HT and PCBM appear at 1.74 eV (Raman shift of 1750 cm⁻¹ vs. the He-Ne laser line) and 1.70 eV (Raman shift of 2100 cm⁻¹ vs. the He-Ne laser line), respectively. The Raman peaks are fitted according to those from the pristine P3HT at 1450, 1380, 1210, and 724 cm⁻¹. From spectra No.7 to 12, PCBM tends to aggregate more and more severely as supported by the PCBM PL increase and the topographically obvious clustering. The approximate PL ratios of PCBM against P3HT and the FWHM of the P3HT C=C stretching Raman vibrational peak along this one-line are presented in figure 4e. The FWHM of the C=C stretching Raman peaks is broadened where the PL ratio of PCBM against P3HT is larger. From spectra No.1 to 12, the PL ratio of PCBM against P3HT increases six times. Correspondingly, the FWHM of the P3HT C=C stretching Raman vibration peak increases by ca. 10 cm⁻¹, indicating that the increasing clustering of PCBM induces reduced crystallinity of the P3HT domain [49]. The information reported above cannot be obtained by confocal spectroscopic mapping due to the diffraction limited laser focus size. This is demonstrated in figure 4f, where the blue curve labeled with open circles indicates the PCBM PL variations along the arrow shown in figure 4b using near-field spectroscopic mapping technique whilst the red curve labeled with dots showing no obvious optical signals changes is obtained using confocal spectroscopic mapping.

Besides the optical contrasts revealed along the one-line mapping, figure 4b demonstrates even stronger optical contrast at positions numbered as I, II, III and IV. To clarify the origin of the optical contrast, spectra collected from these different positions are shown in figure 4g. The inset in figure 4g shows the enlarged spectra ranging from 1350 cm⁻¹ to 1550 cm⁻¹. All the red bold curves are fitting curves. The spectral background collected at position III is dominated by the PL of PCBM with the max. appearing at ca. 2100 cm⁻¹. The spectrum collected from position I exhibits a spectral line shape with a PL max. at ca. 1750 cm⁻¹ which is typical for the P3HT PL emission line profile. The spectra collected at position II and IV present strong background intensity over the whole spectral range with the max. between ca. 1750 to 2100 cm⁻¹ indicating that both, P3HT and PCBM PL contribute to

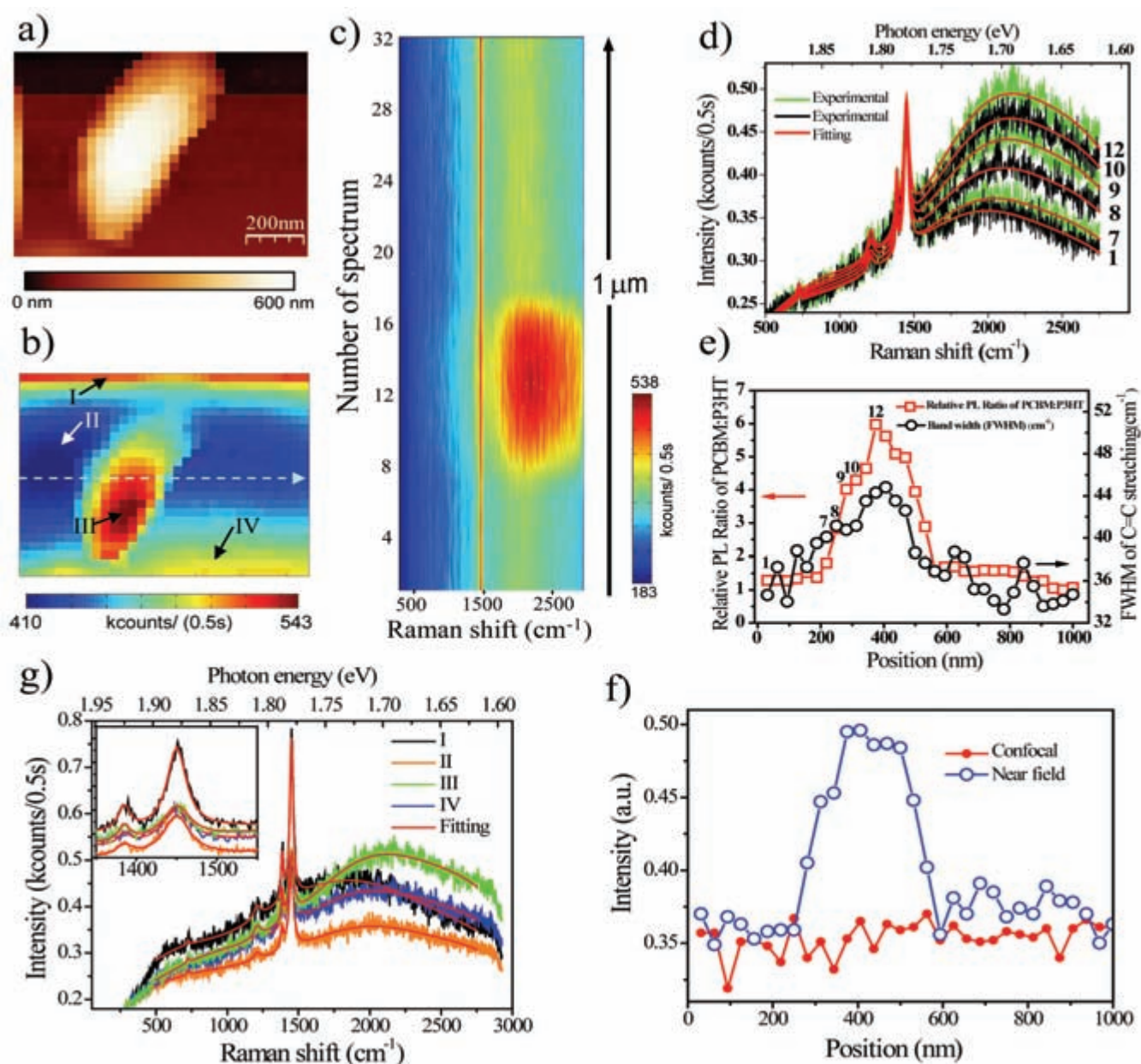


Figure 4 a) Topographical image. b) near-field spectroscopic mapping images obtained by summing the total spectral pixel intensity from 283 cm^{-1} to 2926 cm^{-1} . c) 32 Spectra extracted from a line scan ($1\text{ }\mu\text{m}$) the position of which is indicated in figure b by a dashed arrow. d) Comparisons of several spectra extracted from the Raman line mapping sequence shown in figure c. The green and black spectra are the experimental data whilst the red curves are the fitted spectra (The fitting parameters are shown in the text.). e) The relative PL ratios between PCBM and P3HT (curves labelled with red open rectangles) and the FWHM changes of the P3HT C=C stretching Raman peaks (curves labelled with black open circles) along the line indicated in figure b. f) Comparison of the near-field and confocal spectroscopic mapping along the same line indicated in figure b. The optical signals plotted here are derived from the PCBM PL intensities. g) Near-field spectra collected at positions I, II, III and IV as indicated in figure b. The red curves are the fitted spectra. The inset shows the enlarged spectra from 1350 cm^{-1} to 1550 cm^{-1} . Sample is thermally annealed at $140\text{ }^{\circ}\text{C}$ for 30 min. Scan area: $1\text{ }\times\text{ }0.75\text{ }\mu\text{m}$. Excitation laser: 632.8 nm . Laser power: $250\text{ }\mu\text{W}$. Acquisition time: 0.5 s per spectrum. Copyright (2010) by Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. Pictures adapted from ref. [48].

the spectral intensity. In addition, as shown in the inset of figure 4g, the FWHM increases in the sequence of positions I, II, IV and III, indicating regio-regularity of P3HT is best at position I.

4.3 SEMICONDUCTOR ORGANIC THIN FILM

Semiconducting organic materials have been studied intensively due to their interesting opto-electronic properties, giving rise to a broad range of applications such as organic field effect transistors¹, organic light emitting diodes or organic solar

cells. Diindenoperylene (DIP) is one of the promising organic semiconductor materials since it forms closed films with high structural order if deposited under suitable conditions on silicon [50]. The electronic properties of a DIP thin film are significantly different from its monomer or bulk crystal properties; moreover, they depend strongly on the microscopic film morphology, such as grain boundaries or localized defects [51, 52]. Therefore, understanding the influence of surface morphology on the electronic and optical properties of the organic thin film is helpful for the design and development of organic semiconductor devices with improved efficiency.

Using the top-illumination set-up (figure 2 b)), we have performed the high-resolution near-field microscopy of a diindenoperylene (DIP) thin film based on the plasmon-polariton coupling between the excited gold tip and the semiconductor film [22]. A near-field optical image of the DIP film and the simultaneously recorded topographic image are shown in figure 5a and b. The very high dot (marked as 1) appearing in the figure 5 a) is probably dust particle from the ambient condition. The near-field optical image shows bright lines, spots and dark regions appearing as if random structured. However, a careful comparison with figure 5 a) reveals that the bright features correlate mostly with the DIP domain boundaries, such as the regions labelled as 2, 3, 4 and 5. A sharp optical resolution of ca. 17 nm (indicated between the two red arrows in figure 5b) at one molecular boundary is demonstrated. The DIP molecular domain boundaries being one to four molecular layers (1.5 ~ 6 nm) high are resolved topographically (the contour filled by the green colour) by a shear-force scanning tip and optically by the enhanced PL (the black line profile) (figure 5b). Optical image with such detailed information is not possible for conventional optical microscopy due to the diffraction-limited optical resolution.

Spectrum II in figure 5c) shows the Raman spectrum collected from this DIP thin film without the presence of tip generated near-field, besides the two Si Raman peaks no DIP Raman lines are visible. Upon approaching an excited Au tip close to the DIP film, a series of intense tip enhanced Raman lines (spectra III and IV, figure 5c) appear at 1291, 1401, 1466 and 1615 cm^{-1} corresponding to the breathing modes of DIP molecule. In addition, the PL intensity of DIP also significantly increased upon the tip approaching (background of spectrum III in figure 5 c). A PL enhancement factor of up to 6×10^5 has been achieved. Furthermore, with the increase of the tip-sample distances, the PL maximum shifts to higher energy, which is similar to what has been observed in figure 1a) where a Au tip is retracted away from a Au (111) crystal. In the highly ordered DIP film, the π -electrons provide the major contribution of the dielectric constant [53,54]. Therefore, in response to the plasmon oscillation in the tip, we have a coherent local oscillation of the π -electrons in the film leading to an exciton-polariton coupled to the gap field. The boundary of the DIP thin film appears to be brighter due to a stronger tip-sample coupling as compared to that of inside the thin film, which is visualized by the more intense and red-shifted spectral background in spectrum II than those of spectrum I (figure 5e).

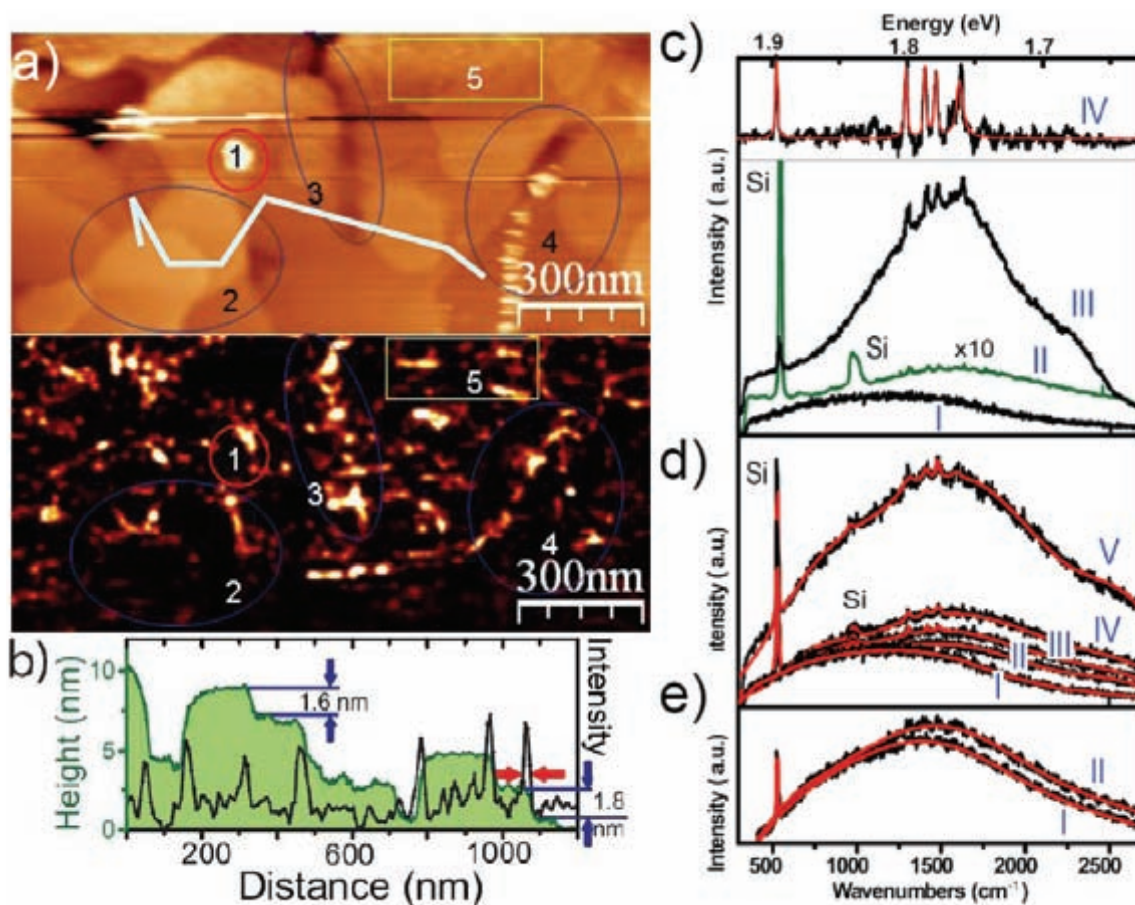


Figure 5 a) Simultaneously recorded topographic (upper panel) and near-field optical images (lower panel). Scan area $1.5 \times 0.7 \text{ mm}^2$, laser power at the focus: 170 mW, tip-sample distance: 3 nm. b) Line profile (position indicated as the light-blue line in figure a)) through the topographic image with its correlated optical intensity. c) Confocal far-field PL-spectrum (I) of a tip alone integrated for 10 s, (II) of DIP film integrated for 900 s, and (III) tip-enhanced spectrum integrated for 10 s at a tip-DIP distance of 3 nm. Excitation power: 170 mW. (IV) Tip-enhanced Raman spectrum obtained from (III) after subtraction of PL-background with fitted spectrum (red curve, only use to guide the eyes). (d) Spectra collected at different tip-sample distance. II, 3 nm; III, 2.5 nm; IV, 2 nm; V, 1.5 nm and I: spectrum of tip alone. Integration time: 10 s. (e) PL spectra, (I) from inside a domain and (II) from a domain edge. Tip-sample distance: 3 nm. Excitation power: 170 mW. Acquisition time: 30 s. Copyright (2010) by American Physical Society. Picture adapted from ref. [22].

5. CONCLUSIONS AND OUTLOOK

Benefited from the concept of localized surface plasmon, near-field optical microscopy solves the questions concerning how to achieve a tighter confinement of the optical field and how to maintain a high sensitivity from a nanometer-sized illuminated area. In addition, in near-field optical microscopy, the sharp tip and the sample/substrate form an integrated unit, of which the tip material, the tip-sample distance and the substrate material are all key factors that need to be seriously taken care of in order to achieve an effective performance. From the instrumentation point of view, designs such as the side-illumination and the top-illumination help to break the limitation concerning the transparency of the sample/substrate, which enable the applications of high-resolution near-field optical microscopy in a variety of fields ranging from fundamental research to industry-oriented topics. Furthermore, the combination of optical microscopy and SPM in near-field optical microscopy provides correlated optical information and topography information both at the nanometer scale, which defines its extraordinary function as compared to conventional optical microscopy. Though several factors, such as the reproducibility of tip fabrication, the imaging speed and the application to aqueous condition, still need to be improved, high-resolution near-field optical microscopy is finding its way to broad acceptances and applications.

REFERENCES

1. E. Abbe, *J. Royal Microsc. Soc.* 23 (1883) 790.
2. S.W. Hell, M. Kroug, *Appl. Phys. B: Lasers and Optics* 60 (1995) 495.
3. S.W. Hell, J. Wichmann, *Opt. Lett.* 19 (1994) 780.
4. S.W. Hell, *Science* 316 (2007) 1153.
5. X. Zhuang, *Nat. Photo.* 3 (2009) 365.
6. B. Huang, M. Bates, X. Zhuang, *Ann. Rev. Biochem.* 78 (2009) 993.
7. U. Doring, D. W. Pohl, F. Rohner, *J. Appl. Phys.* 59 (1986) 3318.
8. R. M. Stockle, Y. D. Suh, V. Deckert, R. Zenobi, *Chem. Phys. Lett.* 318 (2000) 131.
9. E. Rittweger, K. Y. Han, S. E. Irvine, C. Eggeling, S. W. Hell, *Nat. Photo.* 3 (2009) 144.
10. B. Mark; S. Vladimirov, *Science* 328 (2010) 440.
11. P. Nordlander, N. A. Mirin, K. Bao, *J. Phys. Chem. A* 113 (2009) 4028.
12. M. A. El-Sayed, P. K. Jain, S. Eustis, *J. Phys. Chem. B* 110 (2006) 18243.
13. Moskovits, M., *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy: a Brief Perspective*. In *Surface-Enhanced Raman Scattering – Physics and Applications* 2006; pp. 1–18.
14. B. Pettinger, K.F. Domke, D. Zhang, R. Schuster, G. Ertl, *Phys. Rev. B* 76. (2007) 113409.
15. D.Zhang, K. F. Domke, B. Pettinger, *ChemPhysChem*, 11 (2010) 1662.
16. B. Pettinger, K. F. Domke, D. Zhang, R. Schuster, G. Ertl, *Phys. Rev. B*, 2007, 76, 113409.
17. B. Pettinger, K. F. Domke, D. Zhang, G. Picardi, R. Schuster, *Surf. Sci.* 603 (2009) 1335.
18. D. Zhang, X. Wang, K. Braun, H.-J. Egelhaaf, M. Fleischer, L. Henne-mann, H. Hintz, C. Stanciu, C. J. Brabec, D.P. Kern, A. J. Meixner, *J. Raman Spectrosc.* 40 (2009) 1371.
19. A. Hartschuh, E. J. Sanchez, X. S. Xie, L. Novotny, *Phys. Rev. Lett.* 90 (2003) 095503.
20. M. R. Beversluis, A. Bouhelier, L. Novotny, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 115433.
21. P. Johansson, H. X. Xu, M. Käll, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 035427.
22. D. Zhang, U. Heinemeyer, C. Stanciu, M. Sackrow, K. Braun, L. E. Hen-nemann, X. Wang, R. Scholz, F. Schreiber, A. J. Meixner, *Phys. Rev. Lett.* 2010, 104. 056601.
23. J. Steidtner, B. Pettinger, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 236101.
24. K. F. Domke, D. Zhang, B. Pettinger, *J. Am. Chem. Soc.* 128 (2006) 14721.
25. B.-S. Yeo, J. Stadler, T. Schmid, R. Zenobi, W. H. Zhang, *Chem. Phys. Lett.* 472 (2009) 1.
26. B. Ren, G. Picardi, B. Pettinger, *Rev. Sci. Instrum.* 75 (2004) 837.
27. B. Pettinger, B. Ren, G. Picardi, R. Schuster, G. Ertl, *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 096101-1.
28. A. Taguchi, N. Hayazawa, K. Furusawa, H. Ishitobi, S. Kawata, *J. Ra-man Spectrosc.* 40 (2009) 1324.
29. N. Hayazawa, Y. Inouye, Z. Sekkat, S. Kawata, *Chem. Phys. Lett.* 335 (2001) 369.
30. E. Bailo, V. Deckert, *Angew. Chem. Int. Ed.* 47 (2008) 1658.
31. C. Stanciu, M. Sackrow, A. J. Meixner, *J. Microsc.* 229 (2008) 247.
32. J. Steidtner, B. Pettinger, *Rev. Sci. Instrum.* 78 (2007) 103104.
33. A. Downes, D. Salter, Elfick A, *J. Phys. Chem. B* 110 (2006) 6692.
34. M. Sackrow, C. Stanciu, M. A. Lieb, A. J. Meixner, *ChemPhysChem*, 9 (2008) 316.
35. J. Stadler, C. Stanciu, C. Stupperich, A. J. Meixner, *Opt. Lett.* 33 (2008) 681.
36. M. A. Lieb, A. J. Meixner, *Opt. Exp.* 8 (2001) 458.
37. K. F. Domke, D. Zhang, B. Pettinger, *J. Am. Chem. Soc.* 129 (2007) 6708.
38. K. Kneipp, H. Kneipp, V. B. Kartha, R. Manoharan, G. Deinum, I. Itzkan, R. R. Dasari, M. S. Feld, *Phys. Rev. E* 57 (1998) R6281.
39. B. Giese, D. McNaughton, *J. Phys. Chem. B* 106 (2001) 101.
40. N. J. Tao, J. A. DeRose, S. M. Lindsay, *J. Phys. Chem.* 97 (1993) 910.
41. S. Piana, R. Otero, M. Schock, L. M. Molina, E. Laegsgaard, I. Stens-gaard, B. Hammer, F. Besenbacher, *Angew. Chem., Int. Ed.* 44 (2005) 2270.
42. W. L. Ma, C. Y. Yang, X. Gong, K. Lee, A. J. Heeger, *Adv. Funct. Mater.* 15 (2005) 1617.
43. G. Li, V. Shrotriya, J. S. Huang, Y. Yao, T. Moriarty, K. Emery, Y. Yang, *Nat. Mater.* 4 (2005) 864.
44. T. Erb, U. Zhokhavets, G. Gobsch, S. Raleva, B. Stuhn, P. Schilinsky, C. Waldauf, C. J. Brabec, *Adv. Funct. Mater.* 15 (2005) 1193.
45. X. N. Yang, J. Loos, S. C. Veenstra, W. J. H. Verhees, M. M. Wienk, J. M. Kroon, M. A. J. Michels, R. A. J. Janssen, *Nano Lett.* 5 (2005) 579.
46. F. Padinger, R. S. Rittberger, N. S. Sariciftci, *Adv. Funct. Mater.* 13 (2003) 85.
47. M. Campoy-Quiles, T. Ferenczi, T. Agostinelli, P. G. Etchegoin, Y. Kim, T. D. Anthopoulos, P. N. Stavrinou, D. D. C. Bradley, J. Nelson, *Nat. Mater.* 7 (2008) 158.
48. Wang X., Zhang D., Braun K., Egelhaaf H.-J., Brabec C. J., Meixner A. J. *Adv. Fun. Mater.* 20 (2010) 492.
49. J. J. Yun, J. Peet, N. S. Cho, G. C. Bazan, S. J. Lee, M. Moskovits, *Appl. Phys. Lett.* 92 (2008) 251912.
50. A. C. Dürr et al., *Appl. Phys. Lett.* 81 (2002) 2276.
51. T. W. Kelley, C. D. Frisbie, *J. Phys. Chem. B* 105 (2001) 4538.
52. M. A. Loi, E. D. Como, F. Dinelli, M. Murgia, R. Zamboni, F. Biscarini, M. Muccini, *Nat. Mater.* 4 (2005) 81.
53. U. Heinemeyer, R. Scholz, L. Gisslen, M. I. Alonso, J. O. Osso, M. Garriga, A. Hinderhofer, M. Kytka, S. Kowarik, A. Gerlach, F. Schreiber, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 085210.
54. L. Gisslen, R. Scholz, *Phys. Rev. B* 80 (2009) 115309.

GRUSSWORT VON PROF. DR. HELMUT SCHWARZ, PRÄSIDENT DER ALEXANDER VON HUMBOLDT-STIFTUNG, FÜR DIE 110. HAUPTVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN BUNSEN-GESELLSCHAFT FÜR PHYSIKALISCHE CHEMIE IN BERLIN, 2. JUNI 2011

Herr Vorsitzender, lieber Martin,
verehrte Mitglieder der Bunsen-Gesellschaft,
liebe Gäste,

Ich freue mich und fühle mich geehrt, als Präsident der Alexander von Humboldt-Stiftung einige Worte der Begrüßung an Sie richten zu dürfen, nicht zuletzt deshalb, weil die Stiftung in den letzten 20 Jahren knapp 650 Physiko-Chemiker – gar nicht zu reden von den *reinen* Chemikern und Physikern – durch Stipendien und Forschungspreise gefördert bzw. geehrt hat – als jüngstes Beispiel mag die Berufung von Alex Wodtke auf eine Humboldt-Professur für Physikalische Chemie in Göttingen gelten. Also, der Präsident, der – manche im Saal mögen dies nicht glauben – Mitglied der Bunsen-Gesellschaft ist, fühlt sich bei Ihnen zu Hause, obwohl er etwas irritiert war, im Programmheft seinen Namen, so wie in den U. S. A. üblich, mit „tz“ geschrieben zu finden – der Vormarsch des Englischen scheint nicht zu stoppen zu sein!

Spaß zur Seite: Die diesjährige Tagung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft ist etwas Besonderes, und dies nicht nur, weil sich der Geburtstag Robert Bunsens gerade zum 200. Mal gejhrt hat. Es gibt gewichtigere Gründe für diese Bewertung.

Ähnlich wie Alexander von Humboldt war auch Bunsen ein Universalgenie. Die Wege dieser beiden Titanen des 19. Jahrhunderts haben sich zwar kaum einmal direkt gekreuzt – lediglich 1847 bat Bunsen den schon hoch betagten, fast 80-jährigen Humboldt in einem Brief um einige Tuffgesteinproben aus Südamerika, um seiner (Bunsens) heiß geliebten „Nebenbeschäftigung“ – der Geologie – mit der Untersuchung authentischen Materials nachgehen zu können.

Was beide in erster Linie jedoch verband, war die von ihnen mit größter Selbstverständlichkeit und mit Leidenschaft betriebene Grundlagenforschung, und zwar auf den unterschiedlichsten Gebieten der Naturwissenschaften. „Interdisziplinär“ würde dieser Ansatz heute benannt werden, ohne damit aber den Intentionen dieser beiden Wissenschaftler auch nur ansatzweise gerecht zu werden. Die Ausdifferenzierung der Wissenschaften war zu Bunsens und Humboldts Lebzeiten zwar schon in vollem Gange nicht zuletzt dank der Ergebnisse dieser und anderer hochproduktiver Wissenschaftler des 19. Jahrhunderts, aber das tiefere Verstehen des eigenen Gebietes und die dadurch ermöglichten Eingrenzungen hat bei Humboldt und Bunsen nie dazu geführt, dass sich ihr Blick verengte. Im Gegenteil: beide führten ihre Disziplinen nicht nur zu

höchster Blüte und bestanden auf fachlicher Kompetenz und Exzellenz, denn inter- oder transdisziplinär kann überhaupt nur erfolgreich arbeiten, wer seine oder ihre Disziplin beherrscht – nein, beide forderten und förderten die vertiefte Zusammenarbeit an den Grenzen der Fächer, und sie taten dies in einer auch heute noch vorbildlichen Weise.

Überdies waren beide, Humboldt und Bunsen, in einem europaweiten Netzwerk exzellenter Wissenschaftler eingebunden und pflegten oft zu denselben Forschern unterschiedlicher Generationen enge und fruchtbare Kontakte – der Fortschritt des einen ist, damals wie heute, ohne die Erkenntnisse des anderen, und vor allem, ohne den ständigen Austausch miteinander undenkbar!

Auch die mittlerweile 110. Bunsentagung bietet solch ein hochkarätiges Forum für den Austausch zwischen Chemie und Physik – und dies natürlich längst mehr nicht nur für Vertreter aus Deutschland allein.

Im Gegenteil: Die diesjährige Bunsen-Tagung schlägt durch die Kooperation mit der European Association for Chemical and Molecular Science (EuCheMS) und der dort gerade gegründeten Division of Physical Chemistry ein neues Kapitel auf, und spürbare Impulse einer vertieften Förderung der Physikalischen Chemie in einem sich anbahnenden, langsam Gestalt annehmenden gemeinsamen Europäischen Forschungsraum dürfen auch hiervon erwartet werden.

Die Verfolgung gemeinsamer wissenschaftlicher Interessen und die Suche nach Antworten zu Fragen weit über das eigene Fachgebiet hinaus, stellen Forscher immer wieder vor neue Herausforderungen – hierzu gehört auch die Bereitschaft zu persönlicher Mobilität. Zweifellos ist die gezielte Förderung von Mobilität innerhalb Europas und weltweit heute mehr geboten denn je. Die Alexander von Humboldt-Stiftung widmet sich dieser Aufgabe seit nunmehr bald 60 Jahren durch die Vergabe von Forschungsstipendien und Forschungspreisen an ausländische Spitzenwissenschaftlerinnen und -wissenschaftler. An die Förderung schließt sich ein lebenslanger Nachkontakt an, getreu einem modifizierten Oxbridge-Motto: „Einmal Humboldtianer, immer Humboldtianer“. Heute umfasst das Netzwerk der Stiftung 25.000 Wissenschaftler in

über 130 Ländern, darunter 44 Nobelpreisträger, zahlreiche Field- und Abel-Medaillisten – aber auch Persönlichkeiten wie Papst Benedikt oder der Energieminister der Obama-Regierung, der Physik-Nobelpreisträger Professor Chu, den die Stiftung lange vor der Stockholmer Würdigung mit einem Humboldt-Forschungspreis ausgezeichnet hatte. Ermöglicht wird unsere Arbeit nicht nur durch die Unterstützung unserer öffentlichen Zuwendungsgeber – denn wir besitzen ja kein nennenswertes Stiftungsvermögen – sondern vor allem durch die unentgeltlich geleistete Arbeit zahlreicher Wissenschaftler, die in den Auswahlgremien und als Gutachter tätig sind. Viele von Ihnen, liebe Kolleginnen und Kollegen, gehören als Gutachter und wissenschaftliche Gastgeber selbst zum Humboldt-Netzwerk, und vermutlich befinden sich auch einige der eingangs erwähnten 646 Forschungsstipendiaten oder Forschungspreisträger der Stiftung heute unter uns, und Ihnen gilt ein herzliches Dankeschön!

Unsere zentrale Aufgabe, unser Satzungsauftrag besteht in der Förderung und Vernetzung der besten Wissenschaftler unterschiedlicher Karrierestufen weltweit. Um diese Aufgabe zu erfüllen, passen wir unser Förderportfolio den sich verändernden Randbedingungen an und schaffen neue Förderinstrumente, ohne jedoch unserem Prinzip untreu zu werden, nämlich: Individuen zu fördern und keine Programmskizzen zu bedienen. So haben wir, um Humboldt-Stipendiaten noch gezielter mit Humboldt-Preisträgern in Kontakt zu bringen, die Bonner Humboldt-Preisträger-Foren geschaffen. In wenigen Monaten, vom 12. – 16. Oktober 2011, wird das erste Bonner Preisträger-Forum zum Thema „Frontiers in Macromolecular and Material Sciences“ stattfinden. Als Leiter des wissenschaftlichen Komitees konnte Hans-Werner Schmidt von der Universität Bayreuth gewonnen werden. Wir erwarten Humboldtianer aus aller Welt – darunter einige der führenden Vertreter ihrer Fachrichtungen. Den Eröffnungsvortrag wird der schon vor 15 Jahren mit einem Humboldt-Forschungspreis

bedachte und im letzten Jahr mit dem Nobelpreis für Chemie gekürte Professor Ei-ichi Negishi von der Purdue University halten. An zwei Konferenztagen werden Humboldt-Stipendiaten unterschiedlichster Nationalitäten Gelegenheit haben, Vorträge von ca. 20 Forschungspreisträgern zu hören, ihre eigenen Projekte in Poster-Sitzungen zu präsentieren und mit einigen der Besten ihres Faches zu diskutieren. Junge Talente und erfahrene peers wollen wir auf diese Weise zusammenbringen.

Neben dieser lebendigen Vernetzung der Humboldtianer muss sich die Stiftung auch ständig die Frage stellen, wie neue Adressatenkreise weltweit erschlossen werden können. Deshalb werde ich in zwei Wochen im Rahmen des Internationalen Jahrs der Chemie in Beijing und in Tokio Gelegenheit haben, junge asiatische Chemiker auf die vielfältigen Fördermöglichkeiten der Alexander von Humboldt-Stiftung und die Forschungslandschaft in Deutschland aufmerksam zu machen. Ich tue dies primär nicht für die Humboldt-Stiftung, die als Institution ja keinen Selbstzweck darstellt, sondern die einfach die Aufgabe hat, als Katalysator (was im Chinesischen mit Heiratsvermittler übersetzt wird) zu wirken, damit sich Talente für einen Forschungsaufenthalt in Deutschland, in Europa interessieren. Bitte, lassen auch Sie keine Gelegenheit aus, weltweit den jungen Genies die Idee zu vermitteln, dass es sich lohnt, zu Forschungsaufenthalten einmal das eigene Land zu verlassen und beispielsweise zu uns zu kommen. Denn: Bildung ist nichts anderes, als sich die fremde Welt anzueignen. Auch hier darf Humboldt noch einmal zitiert werden, als er bemerkte, dass nichts schrecklicher sei als die Weltanschauung jener Menschen, die die fremde Welt nie mit eigenen Augen gesehen hätten. Junge Kolleginnen und Kollegen gezielt in Netzwerke einzubeziehen, Wissenschaft auch als Diplomatie des Vertrauens zu betreiben: Vorbilder, wie Robert Bunsen und Alexander von Humboldt, haben dies schon vor langer Zeit getan und würden diese Haltung nur begrüßen – herzlichen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Prof. Dr. Drs. h.c. H. Schwarz
Technical University Berlin
Institute of Chemistry, Sekr. C 4
Straße des 17. Juni 115
10623 BERLIN
Phone: +49 30 314 23483
FAX: +49 30 314 21102
E-Mail: Helmut.Schwarz@mail.chem.tu-berlin.de
<http://www.chem.tu-berlin.de/Helmut.Schwarz/>

REDE DES ERSTEN VORSITZENDEN ANLÄSSLICH DER 110. HAUPTVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN BUNSEN- GESELLSCHAFT FÜR PHYSIKALISCHE CHEMIE IN BERLIN, 2. JUNI 2011

Ladies and Gentlemen, dear members of the Bunsen Society for Physical Chemistry, dear guests,

It is my honour and great pleasure to welcome you in the name of the board of our society to our 110th annual meeting, known as the "Bunsentagung", in Berlin 2011. I start this welcome as an exception in English, as we are honoured to host this year the first EuCheMS Forum of Physical Chemistry in conjunction with the constituting meeting of the EuCheMS Physical Chemistry Division. I thus extend a warm welcome to our international guests. In particular, I would also like to welcome Professor Michael Ashfold as President of our British sister society, formerly the Faraday Society, now the Faraday Division of the Royal Society of Chemistry.

De plus, j'aimerais aussi tout particulièrement souhaiter la bienvenue à nos participants venant des pays francophones.

Liebe Mitglieder und Freunde der Bunsen-Gesellschaft, liebe Gäste, meine sehr verehrten Damen und Herren

Ich möchte Sie im Namen des Vorstandes unserer Gesellschaft sehr herzlich in Berlin begrüßen und es ist mir eine Ehre und Freude, die Bunsentagung 2011 hiermit offiziell zu eröffnen. Das Aduma Saxophon Quartett mit Miriam Dirr, Helen Hinrichs, Marina Elsner und Kathrin Sommer hat unserer Tagung einen besonders schönen musikalischen Auftakt gegeben, wofür ich mich bei den Musikerinnen herzlich bedanke.

Ich freue mich, dass so viele unserer Einladung zur Bunsentagung 2011 gefolgt sind – es sind mehr als 700 – wie jedes Jahr unter Einschluss des Himmelfahrtsfeiertages, und ich wünsche Ihnen allen intensive und fruchtbare wissenschaftliche Diskussionen, dass Sie alte Kontakte vertiefen und neue knüpfen können.

Prof. Dr. Dr. h. c. Martin Quack
ETH Zürich
Laboratorium für Physikalische Chemie
Wolfgang-Pauli-Strasse 10, CH-8093 Zürich, Schweiz
Tel.: +41 44 632 44 21, Fax: +41 44 632 10 21
E-Mail: Martin@Quack.ch



Besonders begrüßen möchte ich unsere anwesenden Ehrenmitglieder, Professor Helmut Baumgärtel, Professor Gerhard Ertl, Professor Jürgen Troe und Professor Heinz Georg Wagner. Der Präsident der Gesellschaft Deutscher Chemiker, Herr Professor Dr. Michael Dröscher, ist bekanntlich unserer Gesellschaft auch als ehemaliger erster Vorsitzender besonders verbunden und ich heiße ihn sehr herzlich willkommen, ebenso auch Frau Dr. Johanna Kowol-Santen, die die Deutsche Forschungsgemeinschaft vertritt. Herrn Professor Dr. Helmut Baumgärtel danke ich für seine freundlichen Begrüßungsworte, die er im Namen der gastgebenden Freien Universität Berlin an uns gerichtet hat.

Dem Präsidenten der Alexander von Humboldt-Stiftung, Herrn Professor Dr. Dres h. c. Helmut Schwarz danke ich für seine tiefgehenden und sehr passenden Grußworte, mit meiner Entschuldigung auch für einen Druckfehler im ersten Programm, auf den er zu Recht hinweist, der allerdings im heutigen Eröffnungsprogramm schon korrigiert wurde.

Traditionsgemäß beginnt die Bunsentagung mit einer Rede des ersten Vorsitzenden. Da ich dieser Tradition folgen werde, müssen Sie nun in den kommenden Minuten diese *Worte des ersten Vorsitzenden* anhören. Allerdings will ich die Rede mit einigen Zitaten etwas auflockern – selbstverständlich stets unter Angabe der Quelle, muss ich hier in Berlin im Jahr 2011 wohl hinzufügen. Ich beginne gleich mit dem ersten Zitat, denn die „*Worte des Vorsitzenden*“ haben für meine Generation einen etwas speziellen Klang. Ich zitiere in freier deutscher Übersetzung aus dem chinesischen Vorspann von Lin Biao zur ersten deutschen Auflage des bekannten Büchleins [1]: „*Studiert die Werke des Vorsitzenden, hört auf seine Worte und handelt nach seinen Weisungen*“. Da man weiß, dass dem wohl zu viel Folge geleistet wurde, mit bekannten Folgen, möge dieses Zitat einer gewissen Relativierung solcher Worte dienen.

Das bringt mich dann gleich zum zweiten Zitat, es sind die Worte des Organisators unserer Tagung an der Freien Universität Berlin, Herr Professor Dr. Eckart Rühl in seiner Korrespondenz an mich zu dieser Rede: „*Die Reden der ersten Vorsitzenden sind im Laufe der Zeit kürzer geworden. Vor ca. 15 Jahren erinnere ich mich an lange und sehr programmatische Reden. Die Ent-*

scheidung treffen Sie, lieber Herr Quack“. Nun, meine Rede wird nicht sehr lang sein, aber auf einen programmatischen Punkt, der mir besonders am Herzen liegt, werde ich am Schluss kurz eingehen. Beginnen will ich hier aber mit meinem sehr herzlichen Dank an Eckart Rühl für die hervorragende, große Arbeit, die er mit seinen Kolleginnen und Kollegen für uns in der Vorbereitung dieser Tagung geleistet hat. Mein Dank gilt auch dem neuen Geschäftsführer der DBG, Dr. Florian Ausfelder mit seinem Frankfurter Team, für seine Hilfe und Unterstützung.

Das Hauptthema der Bunsentagung in diesem Jahr lautet: „Analysis and Control of Ultrafast Photoinduced Reactions“. Die wissenschaftliche Vorbereitung wurde von Prof. Vlasta Bonačić-Koutecký und Professor Nikolaus Ernsting, Humboldt Universität zu Berlin, von Prof. Joshua Jortner, Universität Tel Aviv, Prof. Jörn Manz, Prof. Eckart Rühl und Prof. Ludger Wöste, alle drei an der Freien Universität Berlin, übernommen, denen ich bei dieser Gelegenheit auch meinen Dank ausspreche.

Das in diesem Jahr für Berlin gewählte Thema erinnert auch an eine berühmte Tagung an der FU Berlin 1993, die erste Tagung über „Femtosecond Chemistry“, zu der die zwei Mitglieder Jörn Manz und Ludger Wöste unseres diesjährigen Programmkomitees damals ein zweibändiges Sammelwerk herausgegeben haben [2]. Ich kann der Versuchung nicht widerstehen, jeweils die ersten Sätze aus dem ersten und letzten Kapitel dieses zweibändigen Tagungsberichtes zu zitieren. Das erste Zitat stammt von Lord George Porter in seinem ersten Kapitel „Flash Photolysis into the Femtosecond – a Race against Time“ [3]: „*The study of chemical events that occur in the femtosecond timescale is the ultimate achievement in half a century of development of techniques for the study of fast reactions and, although many future events will be run over the same course, chemists are near the end of the race against time*“. Das war also die Meinung des Lords, der ja bekanntlich für seine Arbeiten zu Beginn des von ihm erwähnten Rennens im Jahre 1967 den Nobelpreis mit Norrish sowie mit unserem Ehrenmitglied Manfred Eigen zur schnellen Kinetik teilte. Lord George sieht also im Jahr 1993 das Ende des Rennens fast erreicht.

Demgegenüber beginnt im zweiten Band das letzte Kapitel 27 „Molecular Femtosecond Quantum Dynamics Between Less than Yoctoseconds and More than Days: Experiment and Theory“ [4] mit der folgenden Aussage: „*The motion of molecules, intramolecular quantum dynamics, is the primary process of chemical reactions. Considering the possible time scales of molecular processes, it becomes clear that femtosecond (fs) resolution can only be a short time intermediate level in research and our goal must be to approach the yoctoseconds (10^{-9} fs) and beyond. Possibilities for this are outlined.*“ Diese diametral entgegengesetzte Aussage konnte damals revolutionär erscheinen („Yoctosekunde“, 10^{-24} s, war selbst als Begriff praktisch allen Teilnehmern der damaligen Tagung noch unbekannt) und die Erwähnung dieser kurzen Zeit war letztlich in einem zur gewöhnlichen Kurzzeitkinetik komplementären Ansatz begründet, auf den ich hier nicht eingehen kann (er schlägt auch eine Brücke zwischen Molekülphysik und Hochenergiephysik, siehe [4, 5, 6]). Es ist mir aber eine ganz besondere Freude, dass ich im Anschluss an die Eröffnung heute noch unseren Festredner Prof. Paul Corkum, Ottawa, Kanada, auch Träger der Gerhard

Herzberg Goldmedaille, mit seinem Festvortrag „Laser Induced Molecular Imaging“ einführen darf. Paul Corkum hat mir auch von seinen Erinnerungen an die Berliner Tagung 1993 berichtet. Paul gehört zu den bedeutendsten Pionieren, die den nächsten Schritt der Kurzzeitkinetik in Richtung Attosekunden vollzogen haben [7-9] und wir freuen uns besonders auf seinen Vortrag, in dem er auch hierüber berichten wird. Natürlich darf hier nicht unerwähnt bleiben, dass auch A. H. Zewail, der diesmal nicht bei uns sein kann, 1993 an der Tagung [10] teilnahm, er wurde später mit dem Nobelpreis ausgezeichnet (im Jahr 1999) [11].

Kommen wir nun wieder zum Jahr 2011. Weitere Berichte über neueste Fortschritte zur Kurzzeitkinetik und Kontrolle chemischer Reaktionen werden wir im Laufe der Tagung in den Plenarvorträgen von Ferenc Krausz, (Garching/München), Jean-Pierre Wolf (Genf), Marc Vrakking (Berlin) und Gustav Gerber (Würzburg) hören. Fortschrittsberichte zum Hauptthema von Thomas Baumert (Kassel), Kazu Takatsuka (Tokyo), Wolfgang Zinth (München, LMU), Wolfgang Domcke (TU München), Uwe Borensiepen (Duisburg-Essen) und André Bandrauk (Sherbrooke, Québec, Kanada, aber ein gebürtiger Berliner) ergänzen dies wie ebenso zahlreiche Beiträge zum Hauptthema. Wichtig sind auch immer die Beiträge aus allen Bereichen der physikalischen Chemie sowie das traditionelle Industriesymposium. Das „EuCheMS Forum for Physical Chemistry“ habe ich schon erwähnt. Sehr wichtig sind auch die zahlreichen Poster, die am Freitag in einer langen Abendsitzung mit reichlich flüssiger Verpflegung vorgestellt werden. Eine Kommission wählt dabei Posterpreisträgerinnen und -träger aus, die am Samstag ihre Poster auch kurz mündlich vorstellen werden und einen Geldpreis erhalten, der von unserer Hauszeitschrift PCCP (Physical Chemistry Chemical Physics) zur Verfügung gestellt wird, die wir gemeinsam mit zahlreichen europäischen und außereuropäischen wissenschaftlichen Gesellschaften herausgeben. Die Posterpreise schließen auch die gebührenfreie Teilnahme an der Bunsentagung 2012 in Leipzig ein.

Eine bedeutsame neue Aktivität ist die Arbeitsgemeinschaft „Bunsen-Karriereforum“, die Herr Kollege Wolfgang Bessler (DLR Stuttgart) in den vergangenen Jahren ihrer vorbereitenden Entwicklung als Vorsitzender begleitet hat, wofür wir ihm sehr danken (siehe auch [12]). Am Freitag wird das Karriereforum seine formell konstituierende Sitzung um 12³⁰ Uhr haben und die Satzung verabschieden [13]. Ein wesentliches Ziel des Karriereforums ist die Förderung der wissenschaftlichen Karrieren unserer jüngeren Mitglieder sowohl in Industrie als auch an den Hochschulen und Forschungsinstituten.

Die Bunsen-Gesellschaft hat im vergangenen Jahr zahlreiche neue Mitglieder gewonnen, die in Tabelle 1 aufgeführt sind. Aber wir trauern auch um 19 Mitglieder, die seit der Bunsentagung in Bielefeld 2010 verstorben sind (Tabelle 2). Wir wollen ihr Andenken in Ehren halten und ich bitte Sie, sich in Erinnerung an unsere verstorbenen Mitglieder zu erheben.

Die Deutsche Bunsen-Gesellschaft trägt neben der Bunsentagung zahlreiche weitere nationale und internationale Tagungen mit. Ich möchte hier als internationale Bunsen-Diskussionstagungen erwähnen „Förster resonance energy transfer in the life sciences“ (Göttingen, 29.–31.3.2011), „Molecular Modelling of Thermophysical Properties – Science meets Engineering“ (15.–16.9.2011,

Neue Mitglieder in der Bunsen-Gesellschaft	
Marion Adam	Juny Koo
Alexander Braun	Andreas Kilian Molberg
Frederic Luis Condin	Susann Kutzner
Dipl.-Phys. Jessica Dielmann-Geßner	Marcus Müller
Dr. Michael Dreja	Dr. Daniel Rohr
Dr. Malte Drescher	Janine Seeliger
Dipl.-Chem. Andre Düvel	Daniel Sievers
Dr. Maik Eichelbaum	Dr. rer. nat. Michael Schmitt
Mirko Erkamp	Dipl.-NanoSc. Jan H. Schröder
Marco Esters	Dr. Thomas Schultz
Sebastian Grobelny	Prof. Dr. Jörg-Elmar Tatchen
Shobhna Kapoor	Alexander Werkmüller
Dr. Bettina Keller	Thomas Werzer
Susann Kittler	Prof. Dr. Hans Jakob Wörner
	Philipp Wysotzki

Tabelle 1: Neue Mitglieder

Seit der letzten Bunsentagung sind verstorben
Prof. Dr. Kurt Breitschwerdt, Heidelberg
Prof. Dr. Erhard W. Fischer, Mainz
Dr. Rudolf Gambert, Wismar
Prof. em. Dr. Kurt Hedden, Rosdorf
Prof. Dr. Walter Heitz, Böhl-Iggelheim
Dr. Horst Huck, Freiburg
Prof. Dr. Walther Jaenicke, Erlangen
Dr. Hans-Werner Jochims, Berlin
Prof. em. Dr. Karl Kordesch, Graz
Prof. Dr. Horst Langemann, Paderborn
Prof. Dr. Klaus Müller, Trento
Prof. Dr. Wolfgang Pechhold, Erbach
Prof. Dr. Lothar Riekert, Karlsruhe
Prof. Dr. Jürgen Sauer, Sinzig
Prof. Dr. Fritz Peter Schäfer, Hannover
Prof. Dr. Frank Schneider, Siegen
Dr. Karin Schwind, Schifferstadt
Prof. Dr. Wolfgang Swodenk, Odenthal
Prof. Dr.-Ing. Roger Thull, Würzburg

Tabelle 2: Im letzten Jahr verstorbene Mitglieder

Dortmund, gemeinsam mit der DECHEMA), und „Photokatalyse“ (13.–14.10.2011, Heidelberg). Bunsen-Kolloquien behandeln die Themen „Grenzflächen in Lithiumionenbatterien“ (24./25.3.2011 in Goslar) und „Photoelectrochemistry: From Fundamentals to Solar Applications“ (5. Gerischer Symposium, 22.–24.6.2011 in Berlin). Ganz besonders hervorzuheben ist natürlich das von Prof. Michael Grunze vorbereitete Bunsen-Kolloquium in Heidelberg „Frontiers in Physical Chemistry“ am 12.10.2011, das zum 200jährigen Jubiläum des Namensgebers unserer Gesellschaft stattfinden soll (geboren am 30. März 1811, siehe [14]). Die Bunsen-Gesellschaft hat anlässlich dieses Jubiläums die jährliche Robert-Bunsen-Vorlesung eingerichtet, die erstmals für dieses Festkolloquium am 12.10.2011 an Prof. Jürgen Troe verliehen wurde.

2011 ist in der Tat ein mehrfach hervorstechendes Jubiläumsjahr für unsere Gesellschaft: Es ist das UNO-Jahr der Chemie

und wir dürfen uns fragen, was hat die Physikalische Chemie der Chemie insgesamt gegeben? Vielleicht der wichtigste Beitrag ist die Spektroskopie, die als Spektrallinie auch unser Logo prägt [15]. Die Spektroskopie hat 2011 in gewissem Sinne ihr 150jähriges Jubiläum. Die grundlegende Entdeckung der Atom-spektroskopie wird zwar schon in einem Brief von Bunsen an seinen Freund Roscoe erwähnt (vom November 1859, siehe [15]) und wie so oft in der Wissenschaft gibt es Vorläufer (siehe [15, 16]), aber die beiden grundlegenden Publikationen von Kirchhoff und Bunsen erschienen in den Jahren 1860 und 1861, mit dem Jahr 1861 als Höhepunkt dieser Entdeckungen [17, 18]. Vielleicht nicht zufällig hat unsere britische Schwes-tergesellschaft eine Faraday Discussion 150 „Frontiers in Spectroscopy“ in Basel 2011 organisiert und es erscheint in diesem Jahr auch ein dreibändiges „Handbook of High Resolu-tion Spectroscopy“ [19]. Das Sonnenspektrum mit den dunklen Fraunhoferlinien als vor 1860 ungelöstes wissenschaftliches Rätsel bildete ja bekanntlich den Ausgangspunkt der Arbeiten von Kirchhoff und Bunsen 1860/61, es wurde wegen seiner Schönheit für den Einband des Handbuchs gewählt [19] und soll aus demselben Grund auch hier gezeigt werden.

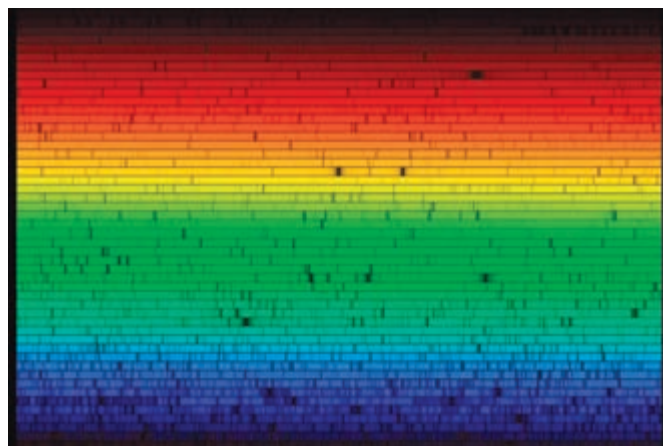


Abb. 1: Das Sonnenspektrum mit den dunklen Fraunhofer-Linien (aus [20] mit Genehmigung).

Wegen der besonderen Bedeutung des Jubiläums der Spektroskopie 2011 und des 200. Geburtstages eines ihrer Mitbe-gründer hat die Bunsen-Gesellschaft auch eine Sonderbrief-marke herausgegeben (Abb. 2).

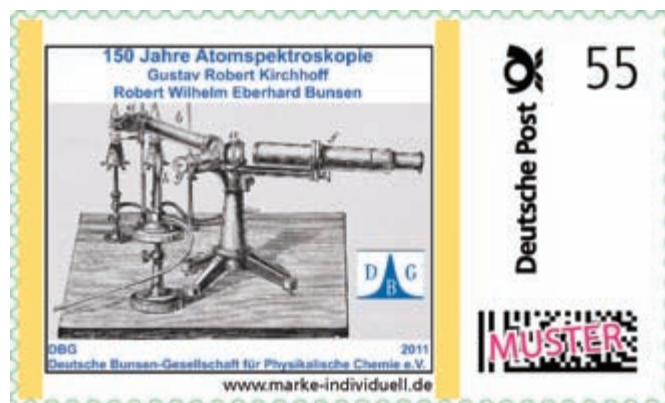


Abb. 2: Sonderbriefmarke der Bunsen-Gesellschaft als Beitrag zum Jubiläum 2011 und zum Jahr der Chemie.

Als Mitglieder-Zeitschrift spielt das Bunsenmagazin eine besondere Rolle unter unseren Publikationen. Es enthält viele interessante Leitartikel und Informationen und ich möchte hier die Gelegenheit nutzen, dem Schriftleiter Prof. Dr. Rolf Schäfer, TU Darmstadt meinen sehr herzlichen Dank auszusprechen.

Auch die Zeitschrift PCCP hat in den Jahren seit ihrer Gründung eine ganz bemerkenswerte Entwicklung zu einer der wichtigsten Zeitschriften im Gebiet der Physikalischen Chemie und Chemischen Physik erfahren. Das ist in den letzten Jahren maßgeblich *Philip Earis und seinem Team bei der Royal Society of Chemistry* zu verdanken, mit der gemeinsam wir diese Zeitschrift herausgeben (auch gemeinsam mit jetzt insgesamt 16 wissenschaftlichen Gesellschaften). Wir sind Philip Earis, der auch hier anwesend ist, zu größtem Dank verpflichtet und wünschen ihm und seinem Team weiterhin Erfolg bei dieser wichtigen Unternehmung.

Während der Bericht bis zu diesem Punkt in meiner Rede zu den (durchaus angenehmen) Pflichten des ersten Vorsitzenden zählt, möchte ich zum Abschluss noch die eingangs erwähnte programmatische Kür hinzufügen. Eine Sonderpublikation der Bunsen-Gesellschaft erschien 2011 zum Jahr der Chemie, gemeinsam mit DECHEMA, GDCh und VCI herausgegeben und schon unter meinem Vorgänger Prof. Wolfgang von Rybinski in die Wege geleitet. Sie betrifft die Rolle des Kohlendioxids – CO₂ – als für das Erdklima wichtiges Spurengas in der Atmosphäre und soll einen Beitrag zur sachlichen Diskussion besonders auch aus der Sicht der Physikalischen Chemie leisten, aber unter Berücksichtigung auch vieler anderer Aspekte [21]. Ich möchte hier aus meiner persönlichen Sicht etwas zu den aktuellen Diskussionen zu dieser Thematik sagen, die mir häufig auf fehlgeleiteten Argumentationen zu beruhen scheinen. Kurz zusammengefasst ist meine hier schon einmal vorweggenommene Schlussfolgerung, dass trotz großer Unsicherheiten in der Vorhersage des Erdklimas die wissenschaftlichen Grundlagen für eine rationale politische Entscheidungsfindung seit Jahrzehnten schon bestehen und schon längst hätten zu konsequentem Eingreifen führen müssen. Das dringend nötige Handeln heute gehört zweifellos zu unseren dingendsten Pflichten in der Vorsorge für die Zukunft der Menschheit. Ich will versuchen, dies mit einigen kurzen Erläuterungen verständlich zu machen.

Die wissenschaftliche Grundlage für den Einfluss von CO₂ auf das Erdklima ist seit weit über 100 Jahren bekannt und geht maßgeblich auf eine Publikation von Svante Arrhenius aus dem Jahr 1896 zurück [22]. Arrhenius hatte auf der Grundlage der Infrarotspektren von CO₂ die Änderung der mittleren Erdtemperatur bei größeren Änderungen des CO₂-Gehaltes (Erhöhung oder Erniedrigung um einen Faktor 2 etc) abgeschätzt und dies als eine mögliche Erklärung für das Entstehen und Beenden von Eiszeiten vorgeschlagen. Seine quantitativen Abschätzungen der Beziehung zwischen CO₂-Gehalt und Erdklima sind gar nicht so sehr verschieden von den besten Rechnungen, die wir heute hierfür besitzen. Arrhenius war übrigens am 6.6.1895 zum Ehrenmitglied unserer Gesellschaft ernannt worden (offensichtlich ohne Bezug zum Klimaproblem!). Ich kann hier nicht auf Details eingehen und werde die geschichtliche Entwicklung überspringen, aber seit über 50 Jahren gibt es gut gesicherte regelmäßige Messungen der Änderung des CO₂-Gehaltes der Atmosphäre, die einen sehr erheblichen Anstieg dokumentieren.

Vom Jahr 1960 bis 2010 entspricht die Zunahme des CO₂-Gehaltes der Erdatmosphäre als Molenbruch ausgedrückt etwa einem mehr als linearen Wachstum von ca. $x = 0.000315$ (0.315 mmol/mol oder „315 ppmV“ 1960) auf ca. $x = 0.000385$ (0.385 mmol/mol oder „385 ppmV“ 2010, Daten aus [23, 24] und dort zitierte Literatur). Der CO₂-Gehalt ist direkt messbar und mit nur geringen Unsicherheiten behaftet. Der Anstieg ist nicht nur ungebremst, sondern die Geschwindigkeit der Zunahme wächst tendenziell. Nicht direkt messbar, aber aus dem Weltverbrauch fossiler Energieträger abschätzbar, ist der jährliche „anthropogene“ CO₂-Ausstoß (durch Verbrennung). Dieser betrug nach [23] um 1940 ca. 4 Gt/a (d.h. 4 Milliarden Tonnen CO₂ pro Jahr), um 1980 ein wenig mehr als 20 Gt/a und gemäß IEA-Bericht vom 30. Mai 2011 [25] im Jahr 2008 29.3 Gt/a und 2010 30.6 Gt/a. Die viel zitierten Anstrengungen zur Reduktion des CO₂-Ausstoßes haben also nicht nur nichts bewirkt, sondern der Ausstoß wächst praktisch ungebremst weiter, statt der behaupteten Reduktion ist nicht einmal ein konstanter Wert erreicht. Man kann hier von einem völligen Versagen der Politik sprechen.

Nun kann man gelegentlich die Aussage finden, es gebe ja auch gar keine hinreichend gesicherte wissenschaftliche Grundlage für weitreichende politische Maßnahmen. Die durch Klimamodelle vorhergesagten, durch Treibhausgase bedingten, globalen Temperaturerhöhungen von mehreren Grad Celsius im 21. Jahrhundert seien unsicher und anzuzweifeln. Ich will hier zeigen, dass diese Aussage auf einer völlig fehlerhaften Einschätzung der Bedeutung der durchaus bestehenden wissenschaftlichen Unsicherheiten bei den Klimavorhersagen beruht. Zunächst einmal will ich durch ein Zitat meine Aussage belegen, dass die nötigen wissenschaftlichen Grundlagen für politisches Handeln seit Jahrzehnten vorliegen und auch der Öffentlichkeit zugänglich gemacht wurden. Als ein Beispiel diene hier eine Broschüre, die auf der Grundlage von Unterlagen der Nationalen Schweizerischen UNESCO-Kommission erstellt und schon 1983 weit verbreitet wurde (es gibt natürlich anderwärts weitere Beispiele). In dieser Broschüre kann man (mit den damals vorhandenen Daten) praktisch alles vorfinden, was in den aktuellen Diskussionen (oft als „neu“) weitere Verbreitung findet wie z.B. im Film von Al Gore, *An Inconvenient Truth* (siehe auch [24]). Am Ende der Broschüre [23] wird Hans Oeschger mit den Worten zitiert: „Bleibt die Menschheit kurzsichtig? – Es ist heute noch nichts davon zu erkennen, dass sich das Handeln an einer längerfristigen Planung orientiert. Die Diskussionen um den Komplex Energie-Umwelt sind oft in Detailfragen erstarrt, doch nur die Sicht der Gesamtheit der Probleme und der kritische Vergleich der Möglichkeiten können zu optimalen Lösungen führen. Auch hat die Gesellschaft bisher immer erst auf Krisen reagiert, wenn sie spürbar aufgetreten sind. Im Falle der CO₂-bedingten Erwärmung ist jedoch ein Handeln erforderlich, bevor die Krise einsetzt.“ Wir wissen heute fast drei Jahrzehnte nach dieser Aussage, dass die Menschheit in der Tat kurzsichtig geblieben ist. Den Grund hierfür sehe ich in einer Fehleinschätzung der Bedeutung der vorliegenden wissenschaftlichen Information für mögliche, politische Handlungsoptionen. Hierzu fasse ich nochmals die Hauptpunkte als gut begründbare (hier nicht im Detail begründete) Thesen zusammen.

1. Der prinzipielle Zusammenhang zwischen der Infrarotabsorption von Spurengasen (CO₂, CH₄, ...) und dem „Treibhauseffekt“ ist verstanden (teils seit über 100 Jahren).

2. Das Anwachsen des Kohlendioxidgehaltes der Erdatmosphäre ist sicher nachgewiesen (durch Untersuchungen während mehr als 50 Jahren).
3. Der anthropogene Ursprung des Wachstums des CO₂-Gehaltes der Erdatmosphäre durch Verbrennung fossiler Energieträger ist sicher nachgewiesen.
4. Die Voraussage der Klimaentwicklung mit globalen Temperaturerhöhungen zwischen 2 und 6 °C über das 21. Jahrhundert hinweg, je nach Modell, bleibt unsicher, und Skepsis ist hier in der Tat angebracht.

Grund für die Unsicherheiten ist trotz sehr guter Fortschritte in der Klimamodellierung die große Komplexität des Systems Erde und die verbleibenden Unsicherheiten bei einigen Basisdaten. Diese berechnete Skepsis kann aber nicht dazu führen, dass man nicht jetzt schon wüsste, was zu tun wäre, und ich zitiere hier einen Vergleich, den ich seit vielen Jahren zu diesem Thema verwende und der anlässlich einer Doktoratsfeierrede auch verschiedentlich im Druck erschienen ist [26]. „Oft wird fälschlich vermutet, unvollständige wissenschaftliche Erkenntnis schliesse aus, dass man wisse, was zu tun ist. Die Klimaproblematik ist ein gutes Beispiel hierfür. Auch heute weiß man wissenschaftlich durchaus noch nicht mit Sicherheit, wie sich das Erdklima durch den anthropogenen CO₂-Ausstoß verändern wird. Man muss das aber gar nicht wissen, um eine vernünftige Entscheidung zu fällen. Man weiß nämlich schon lange, dass die sicher nachgewiesene anthropogene Erhöhung der CO₂-Konzentration ein *sehr hohes Risiko* für eine gefährliche Veränderung des Erdklimas birgt. Wie beim russischen Roulette, wo das Todesrisiko ja auch nur 1/6 ist (und im Einzelfall das Ergebnis bei ehrlichem Spiel nicht vorhersehbar), sollte die Kenntnis des Risikos ausreichen, um sich vernünftigerweise nicht auf ein solches Spiel einzulassen. Es gäbe auch seit langem einfache gangbare Wege, um den CO₂-Ausstoß zu verringern. Man müsste fossile Brennstoffe nur an der Quelle (bei Einfuhr) sehr hoch besteuern. Man kann das schrittweise tun bis das Ziel, der Verringerung des CO₂-Ausstoßes erreicht wird. Das hätte im Übrigen den Vorteil, dass die Gelder in den Nutzerländern verblieben und nicht in die Produzentenregionen abfließen würden, was potentiell sehr problematisch ist. Dies alles wusste man schon vor Jahrzehnten, es wurde aber nichts unternommen (auch heute effektiv nicht, obwohl viel darüber geredet wird)“.

Das Gleichnis des russischen Roulette ist bei der Klimafrage sehr angebracht: Die genaue Vorhersage der Klimaentwicklung mag noch mit Unsicherheiten behaftet sein. Die Existenz eines *grossen Risikos einer gefährlichen Klimaänderung* ist jedoch sicher! Hinzu kommen noch hier nicht näher ausgeführte, schwer abschätzbare Sekundärrisiken durch Übersäuerung der Meere bei Erhöhung der CO₂-Konzentration. Beim russischen Roulette ist die Vorhersage des Todesfalles für das Einzelexperiment unsicher, aber das *hohe Risiko* eines Todesfalls ist sicher. Das sollte allen als Grundlage für eine vernünftige Entscheidung genügen.

Warum wird die vernünftige Entscheidung in der Klimafrage nicht getroffen? Eine mögliche Antwort ist generell die menschliche Torheit (hierzu gibt es ein bekanntes Einstein-Zitat). Man kann dies aber noch etwas subtiler begründen mit dem fehlerhaften Umgang mit Einzelrisiken für sehr große Schäden, deren Eintretenswahr-

scheinlichkeit schwer abschätzbar und der unmittelbaren Einsicht deshalb nicht transparent ist (beim Beispiel des russischen Roulette wird sie transparent und damit verständlich gemacht). Dieses fehlerhafte Vorgehen wird oft auch wissenschaftlich mit scheinbar rationalen „Risikoabschätzungen“ verbrämt. Das möchte ich noch mit einem neuerdings zirkulierten Beispiel erläutern [24, 27]. Tabelle 3 gibt einen abgeschätzten Risikovergleich bezogen auf die im statistischen Mittel verlorenen Lebensjahre der Bevölkerung durch Erzeugung von 1 TWh Energie (3600 TJ).

Energiequelle	Verlorene Lebensjahre/TWh
Kohle	138
Öl	359
Erdgas	42
Kernenergie	25
Photovoltaik	25
Wind	3

Tab. 3: Risikovergleich durch statistische Abschätzung verlorener Lebensjahre pro TWh Energieerzeugung (10⁹ kWh) nach [24, 27] aus den betreffenden Energieträgern (Schätzung für Deutschland). Ergänzend sei bemerkt, dass in Deutschland 2010 ca. 56% der Erzeugung elektrischer Energie auf fossilen Energieträgern beruhte, 23% auf Kernenergie, ca. 16 % auf erneuerbaren Quellen (plus Rest ca. 5% „andere“, Daten aus FAZ vom 12.4.2011)

Selbst wenn man die Möglichkeit einer solchen Abschätzung für gegeben annimmt (Skepsis ist auch hier angebracht), wird hierbei gewissermaßen der statistische „Normalbetrieb“ erfasst, nicht der außergewöhnliche Unfall. Das lässt sich anhand zweier Beispiele der Tabelle erläutern: Neben den verlorenen Lebensjahren durch Kernenergieerzeugung im statistischen Mittel des „Normalbetriebs“ muss man sich auch fragen, ob man das Risiko eines größeren Unfalls mit Verstrahlung (und in der Folge der notwendigen Absperrung) eines Gebietes im Radius von ca. 30–100 km akzeptieren will (ca. 3000–30'000 km², entsprechend einem erheblichen Bruchteil der Fläche etwa des Rhein-Main-Gebietes oder der Schweiz. Viele werden zum Schluss kommen (wie ich auch), dass das in dichtbesiedelten Gebieten vermutlich nicht vernünftig ist. Immerhin muss man hier auch sagen, dass mit einer typischen Wahrscheinlichkeit für solche Unfälle bei weiterem Ausbau der Kernenergie grob geschätzt etwa maximal 0,2 Prozent der gut nutzbaren Erdoberfläche in den nächsten 100 Jahren betroffen wäre. Man hätte also sicher 100 Jahre Zeit, sich zu überlegen, ob das vernünftig ist, ohne dass es ein wirklich globales Risiko von Zerstörungen gäbe (das ist nicht zynisch gemeint, ich würde das Abwarten wie gesagt auch hier nicht empfehlen).

Demgegenüber betrifft die Möglichkeit einer dramatischen globalen Klimaänderung in den kommenden 100 Jahren die Erde als Ganzes, die Schäden sind nicht lokal begrenzt, potentiell enorm und überhaupt nicht sicher abschätzbar. Vielleicht sind sie kleiner als in den besten aktuellen Modellen abgeschätzt, vielleicht aber auch viel größer. *Diese Unkenntnis bei sehr hohen potentiellen Schäden* sollte zwingend zum Schluss führen, dass ein solches globales Risiko vermieden werden muss (Abb. 3). Neben dem immer noch bestehenden globalen Risiko eines Weltkrieges mit Nuklearwaffen ist das Klimarisiko die größte bekannte potentielle Bedrohung der Menschheit in

Das globale Risiko ist vermeidbar und muss vermieden werden

Russisches Roulette ist zu vermeiden.



Spurengase
OCO
Methan
NNO
FCKW
Ozon

Abb. 3: Das globale Risiko, ein russisches Roulette mit der gesamten Erde, ist vermeidbar und muss vermieden werden (Bild aus [28]).

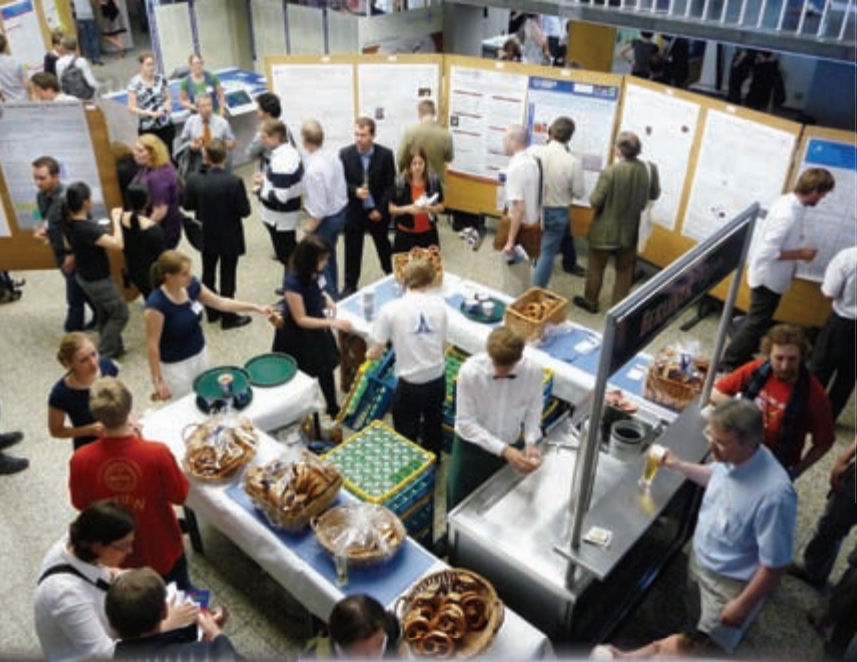
diesem Jahrhundert. Es wäre völlig verantwortungslos, dieser Bedrohung nicht entgegenzutreten, in Wort und Tat.


Das Klimarisiko könnte in der Tat relativ leicht vermieden werden, es gibt weder wissenschaftlich-technische noch zwingende wirtschaftliche Gründe [29], die das verhindern könnten (siehe Zitat aus der Doktoratsfeierrede). Wenn ich zum Ende meiner Rede an einer Bunsentagung für Physikalische Chemie diesen Punkt zum Programm meiner Kür gemacht habe, dann weil Physikochemikerinnen und Physikochemiker in der Diskussion mit der Öffentlichkeit eine besondere Kompetenz und Verantwortung haben. Es war Svante Arrhenius, ein Physikochemiker und Ehrenmitglied unserer Gesellschaft, der die frühen Grundlagen zur wissenschaftlichen Erkenntnis des Risikos gelegt hat. Dies geschah mit Hilfe der Spektroskopie, einer physikalisch-chemischen Methode, die wesentlich durch Robert W. Bunsen, den Namensgeber unserer Gesellschaft mitbegründet wurde.

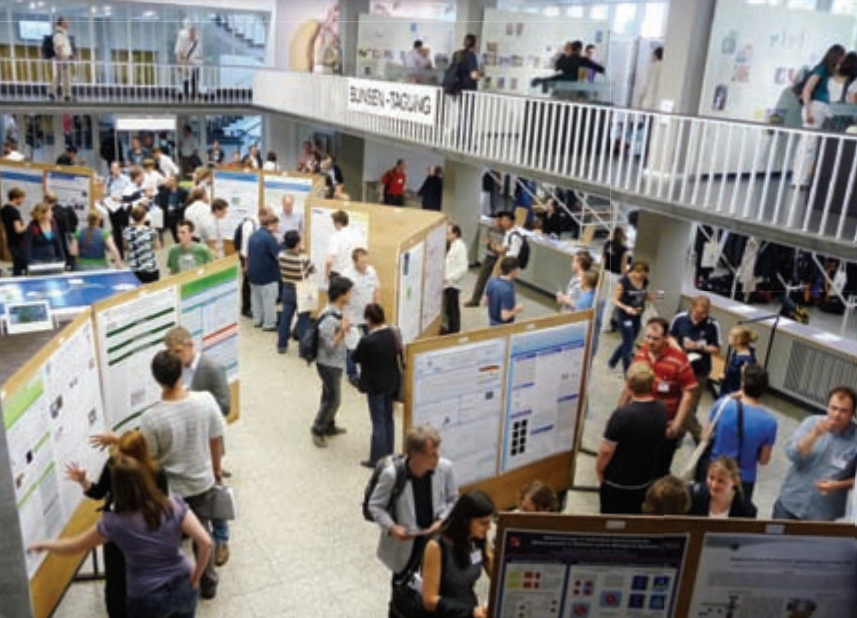
Martin Quack

QUELENNACHWEIS

1. Worte des Vorsitzenden Mao Tse-Tung, Erste Auflage, Verlag für fremdsprachige Literatur, Peking 1967 (der gezeigte chinesische Originalvorspann wurde aus Copyrightgründen hier nicht abgebildet).
2. «Femtosecond Chemistry», Herausgeber J. Manz und L. Wöste, VCH Weinheim 1995 (Proceedings of the Berlin Conference 1993). (siehe Vorwort ebendort pp. V-IX).
3. G. Porter «Flash Photolysis into the Femtosecond, A Race against Time», Kapitel 1 in ref. [2], 1995, pp. 3-13.
4. M. Quack, „Molecular Femtosecond Quantum Dynamics Between Less than Yoctoseconds and More than Days: Experiment and Theory“, Kapitel 27 in ref. [2] (1995), pp. 781-818.
5. M. Quack und W. Kutzelnigg, «Molecular-Spectroscopy and Molecular-Dynamics - Theory and Experiment», *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 1995, **99**, 231-245
6. M. Quack, «Molecules in Motion», *Chimia*, 2001, **55**, 753-758
7. P. B. Corkum, «Plasma Perspective on Strong-Field Multiphoton Ionization», *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **71**, 1994-1997
8. P. B. Corkum und F. Krausz, «Attosecond Science», *Nature Physics*, 2007, **3**, 381-387
9. H. J. Wörner und P. B. Corkum, *Attosecond Spectroscopy*, in *Handbook of High Resolution Spectroscopy*, eds. M. Quack and F. Merkt, John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, 2011, Band 3, Kapitel 50, pp. 1781-1803.
10. A. H. Zewail, «FemtoChemistry, Concepts and Applications», Kapitel 2 in ref [2], pp. 15-128.
11. A. H. Zewail, «Femtochemistry: Atomic-Scale Dynamics of the Chemical bond using ultrafast lasers - (Nobel lecture)», *Angew. Chem.-Int. Edit.*, 2000, **39**, 2587-2631, *Angew. Chem.*, 2000, **112**, 2688-2738.
12. G. Jung, «Nachlese zur Bunsentagung 2009 in Köln aus der Sicht des Karriereforums», *Bunsen-Magazin*, 2009, **11**, 163-164
13. Dr. Melanie Schnell wurde weiterhin am Freitag als neue Vorsitzende gewählt.
14. M. Quack, «Wann wurde Robert Wilhelm Bunsen geboren?», *Bunsen-magazin*, 2011, **13**, 56-57
15. M. Quack, Leitartikel, *Bunsenmagazin*, 2011, **13**, 1-2., Hier findet sich auch das volle Zitat des Briefes von R. W. Bunsen an H. Roscoe «Im Augenblick bin ich und Kirchhoff mit einer gemeinsamen Arbeit beschäftigt, die uns nicht schlafen lässt. Kirchhoff hat nämlich eine wunderschöne, ganz unerwartete Entdeckung gemacht, in dem er die Ursache der dunklen Linien im Sonnenspektrum aufgefunden und diese Linien künstlich im Sonnenspektrum verstärkt und im linienlosen Spektrum hervorgebracht hat und zwar der Lage nach mit den Fraunhofer'schen identischen Linien.»
16. M. Quack, *Frontiers in Spectroscopy (Concluding Paper to Faraday Discussion 150, 2011)*, in *Faraday Discuss.*, 2011, Band 150, pp. 533-565.
17. G. Kirchhoff und R. Bunsen, 1. Abhandlung Chemische Analyse durch Spectralbeobachtungen, *Poggend. Ann.* 110, 161-169 (1860). Nachdruck in «Ostwalds Klassiker der Exakten Wissenschaften, Bd. 72 mit einem Kommentar von W. Ostwald, 2. Auflage, Verl. Harri Deutsch, Thun und Frankfurt 1996.
18. G. Kirchhoff und R. Bunsen, 2. Abhandlung *Poggend. Ann.* 113, 337-(1861). Nachdruck in «Ostwalds Klassiker der Exakten Wissenschaften, Bd. 72 mit einem Kommentar von W. Ostwald, 2. Auflage, Verl. Harri Deutsch, Thun und Frankfurt 1996.
19. M. Quack und F. Merkt, Hrg., *Handbook of High Resolution Spectroscopy*, Wiley, Chichester, New York, 2011, 3 Bände, ISBN 978-0-470-06653-9. (Das «Handbook» wurde auch an einer Wiley-Veranstaltung am Samstag 4.6.11 vorgestellt).
20. N. A. Sharp, NOAO/NSO/Kitt Peak FTS/AURA/NSF http://www.noao.edu/image_gallery/html/im0600.html
21. Feuerlöscher oder Klimakiller? Kohlendioxid CO₂ – Facetten eines Moleküls, Herausgegeben von der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie, Frankfurt (2011) unter Mitwirkung der DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie, der Gesellschaft Deutscher Chemiker und des Verbandes der Chemischen Industrie.
22. S. Arrhenius, «On the Influence of Carbonic Acid in the Air on the Temperature on the Ground», *Philos Mag* 5, 1896, **41**, 237-276
23. F. Auf der Maur, *Wie wir unsere Erde zum Treibhaus machen (Brochure)*, Bern, 1983
24. B. Richter, *Beyond Smoke and Mirrors. Climate Change and Energy in the 21st Century*, Cambridge University Press, Cambridge, 2010
25. Neue Zürcher Zeitung 31. Mai 2011
26. M. Quack, Doktoratsfeierrede 2004, neuerer Wiederabdruck in VSH Bulletin zum Jahr der Chemie 2011, Bulletin der Vereinigung der Schweizerischen Hochschuldozierenden VSH/AEU, 2011, **37**, 7-14.
27. W. Krewitt, F. Hurley, A. Trukenmüller und R. Friedrich, «Health Risks of Energy Systems», *Risk Analysis*, 1998, **18**, 377-383
28. Modified picture reproduced after original blue marbles series, by permission, see nasa.gov (<http://www.isc.nasa.gov/policies.html#guidelines>)
29. A. Merkel, *Der Preis des Überlebens*, Deutsche Verlags-Anstalt, Stuttgart 1997



Deutsche Bunsen-Gesellschaft 
Impressionen
Bunsentagung 2011
110. Hauptversammlung der
DBG
Berlin
featuring a special European EuCheMS Forum
on Physical Chemistry





Fotos:
Florian Ausfelder
Ulrike Rockland
Erika Wöhler

Auf der diesjährigen Bunsen-Tagung in Berlin wurden vom Ersten Vorsitzenden der Bunsen-Gesellschaft Prof. Dr. Martin Quack der Nernst-Haber-Bodenstein-Preis und die Walther-Nernst-Denk Münze verliehen.
Hier Ausschnitte aus der Würdigung der Preisträger

VERLEIHUNG DER WALTHER-NERNST-DENKMÜNZE AN DR. RIEGER



Die Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie verleiht in diesem Jahr die Walther-Nernst-Denk Münze an Dr. Jens Rieger. Die Bunsen-Gesellschaft ehrt damit die herausragenden Verdienste eines hochrangigen Wissenschaftlers in Würdigung seiner vielfältigen wissenschaftlichen Arbeiten der angewandten Physikalischen Chemie besonders zu Struktur-Wirkungsbeziehungen bei polyme-

ren Materialien und Hybridsystemen und die sehr erfolgreiche Verbindung von Grundlagenforschung mit industriellen Anwendungen auf neuen Entwicklungsgebieten.

Laudatio:

Sehr geehrte Damen und Herren,

es ist mir eine besondere Freude, anlässlich der Verleihung der Walther-Nernst-Denk Münze an Herrn Dr. Jens Rieger einige Worte zur Person und zu der wissenschaftlichen Karriere unseres Preisträgers auf der Eröffnung der diesjährigen Bunsen-Tagung sprechen zu dürfen.

Die Walther-Nernst-Denk Münze wird an Persönlichkeiten verliehen, welche die Ziele der angewandten Physikalischen Chemie in hervorragender Weise gefördert haben. Dies ist bei unserem diesjährigen Preisträger in besonderer Weise erfüllt, dessen Arbeit durch die enge Verbindung von einer anwendungsorientierten Forschungstätigkeit in der Industrie mit physikalisch-chemischen Grundlagenuntersuchungen auch in intensiver Zusammenarbeit mit Hochschulen und Forschungsinstituten gekennzeichnet ist und der zudem die physikalisch-chemische Sichtweise in einem interdisziplinären Ansatz auf neue Gebiete übertragen hat.

Kurz zur wissenschaftlichen Karriere unseres Preisträgers: Herr Dr. Rieger hat seine wissenschaftliche Ausbildung mit seiner Promotion in Theoretischer Physik an der Universität des Saarlandes abgeschlossen. Im Jahr 1989 ging er zur Fa. BASF nach Ludwigshafen in die Gruppe Polymerphysik. 1995 übernahm er das Labor zur Röntgenstreuung, mit dem er auch externe Aktivitäten mit anderen Streumethoden in Projekten

für die BASF koordinierte. Er war für zahlreiche Forschungsprojekte in so unterschiedlichen Anwendungen wie pharmazeutischen Formulierungen, Kosmetika, Lacke und Farben sowie Kunststoffen verantwortlich.

Heute ist er als Senior Vice President/Executive Expert bei der BASF tätig. Für die BASF ist er verantwortlich für die Forschung in „Emerging Systems“ auf den Gebieten der „Printed Organic Electronics“ und Materialien für medizinische Anwendungen mit Labors in Ludwigshafen, Basel, Singapur und Tarrytown, New York. Daneben leitet er die BASF Advanced Research Initiative an der Harvard University zusammen mit Dave Weitz und George Whitesides.

Herr Dr. Rieger hat in seiner Laufbahn in der industriellen Forschung die für einen erfolgreichen Forscher in der Industrie übliche Zahl von Patenten. Es ist aber bemerkenswert, dass er mehr als 60 wissenschaftliche Publikationen und weitere Beiträge in wissenschaftlichen Büchern hat. Die hohe Zahl von wissenschaftlichen Publikationen ist für einen Forscher in der Industrie sehr ungewöhnlich und zeigt, dass er eine Brücke zwischen der Grundlagenforschung und anwendungsorientierter Forschung geschlagen hat. Dies wird auch in der intensiven Kooperation mit Hochschulpartnern deutlich.

Seine Forschungsgebiete sind:

- die Kristallisation und Phasenseparation in Materialien
- Struktur-Wirkungsbeziehungen in Polymeren und Hybridsystemen
- Nanoformulierungen für pharmazeutische Anwendungen
- Oberflächen mit antimikrobiellen Eigenschaften

Viele seiner Arbeiten hat er mit unterschiedlichen Hochschulpartnern und Forschungsinstituten in Kooperationen durchgeführt. Ich möchte in sehr subjektiver Auswahl drei Publikationen aus der jüngeren Vergangenheit erwähnen:

Eine Arbeit aus Langmuir, 2004:

Complexation of Polyacrylates by Ca^{2+} Ions. Time-Resolved Studies Using Attenuated Total Reflectance Fourier Transform Infrared Dialysis Spectroscopy.

Eine Arbeit aus dem Journal of Physical Chemistry, 2005:

Structural changes and chain radius of gyration in cold-drawn polyethylene after annealing: small- and wide-angle X-ray scattering and small-angle neutron scattering studies.

Sowie eine weitere Arbeit aus Langmuir, 2008:

Analysis of the Nucleation and Growth of Amorphous CaCO_3 by Means of Time-Resolved Static Light Scattering.

Alle diese genannten Arbeiten zeigen, dass Streumethoden sowie spektroskopische Methoden und die sehr erfolgreiche Übertragung auf Anwendungen sein Kernforschungsthema sind und er damit angewandte Physikalische Chemie im besten Sinne vertritt.

Ich möchte nicht schließen, ohne den Vortrag von Herrn Dr. Rieger auf der letzten Bunsentagung in Bielefeld mit dem Thema: Polymers and Peptides at interfaces: mimicking nature?

zu erwähnen, an den sich wahrscheinlich einige aus diesem Kreis erinnern.

Sehr geehrte Damen und Herren, ich glaube, dass ich Ihnen mit diesen wenigen Beispielen sehr gut darstellen konnte, wie Herr Dr. Jens Rieger in einzigartiger Weise anwendungsorientierte forschersche Tätigkeit in der Industrie mit Grundlagenforschung verbunden hat und in der Kooperation mit Hochschulen neue Gebiete in der angewandten physikalischen Chemie erschlossen hat. Ich freue mich auf die Verleihung der Auszeichnung an ihn.

Prof. Dr. Wolfgang von Rybinski

VERLEIHUNG DES NERNST-HABER-BODENSTEIN- PREISES AN DR. EGGELING



Der Nernst-Haber-Bodenstein-Preis wird von der Bunsen-Gesellschaft jährlich ausgeschrieben und zur Anerkennung hervorragender wissenschaftlicher Leistungen in der Physikalischen Chemie im Gedächtnis an Max Bodenstein, Fritz Haber und Walther Nernst an jüngere Wissenschaftler verliehen. Der Nernst-Haber-Bodenstein-Preis ging in diesem Jahr an Herrn Dr. Christian Eggeling, Göttingen. Mit

dem Preis wurden seine grundlegenden Beiträge zur Entwicklung der Fluoreszenzkorrelationsspektroskopie (FCS) mit beugungsunbegrenzter Auflösung (STED-FCS, Stimulated Emission Depletion - Fluorescence Correlation Spectroscopy) und zur Anwendung dieses Verfahrens auf die Diffusionsdynamik von Biomolekülen in lebenden Zellen ausgezeichnet.

Als Physiker mit physikalisch-chemischer Ausbildung hat Christian Eggeling bereits in jungen Jahren herausragende Beiträge zur Fluoreszenzspektroskopie und -Mikroskopie erzielt. Bereits in seiner Doktorarbeit in der Arbeitsgruppe von Claus Seidel (damals am MPI für Biophysikalische Chemie, Abteilung Troe) konnte er vielbeachtete Arbeiten zur Fluoreszenz-Detektion und -Spektroskopie einzelner Moleküle durchführen, insbesondere der Quantifizierung der Photozerstörung der eingesetzten Farbstoffe (sowohl in 1- als auch in 2-Photonenanregung). Dabei griff er auf die FCS zurück, mit deren Hilfe er wichtige Hinweise für die optimierte Verwendung von Fluorophoren in der Fluoreszenz-Mikroskopie und -Analytik lieferte.

Anschließend wechselte er zur Firma Evotec OI AG nach Hamburg, wo er Methoden der Fluoreszenz-Mikroskopie und -Spektroskopie für die industrielle Verwendung in der Arzneimittel-Suche weiterentwickelte.

Im Jahre 2003 nahm er ein Angebot an, in die Wissenschaft zurückzukehren, und zwar zurück zum MPI für Biophysikalische Chemie, in die Abteilung von Stefan Hell, nicht zuletzt um mit seinem Wissen die Etablierung der Fluoreszenz-Korrelationspektroskopie jenseits der Beugungsgrenze (STED-FCS) zu realisieren. Christian Eggeling hat seitdem entscheidende Beiträge zur Entwicklung dieses sehr vielversprechenden Verfahrens geliefert.

Christian Eggeling war für die erste Anwendung der STED-Fluoreszenzkorrelations-Spektroskopie (STED-FCS) in den Lebenswissenschaften verantwortlich. Wie Eggeling und Kollegen in einer in Nature 2009 publizierten grundlegenden Studie zeigen konnten, lässt sich STED-FCS in einer lebenden Zelle bis zu einer Auflösung von 30 nm experimentell realisieren, um zum Beispiel Dynamiken von Lipiden und Proteinen in der Plasmamembran der Zelle schnell und quantitativ zu erfassen. So konnte er mit Hilfe der STED-FCS zum ersten Mal direkt nachweisen, dass Lipide zweier verschiedener Klassen unterschiedliches Diffusionsverhalten auf Nanometerskalen aufweisen. Konkret konnte er zeigen, dass sich Phospholipide freier bewegen als Sphingolipide. Letztere zeigen kurze und punktuell begrenzte cholesterin-abhängige Interaktionen mit anderen Molekülen in der Zelle auf. STED-FCS hat ein noch kaum absehbares Potential, um Diffusions- und Interaktionskinetiken in lebenden Zellen zu untersuchen. Christian Eggelings Beiträge haben beispielhaft einen neuen Weg aufgezeigt, die raum-zeitliche Dynamik von Molekülen (Lipiden, Proteinen etc.) auf der Nanometerskala der lebenden Zelle zu erfassen. De facto begründen diese Studien einen neuen Ansatz für die Untersuchung der Plasmamembran, der in den nächsten Jahren fundamentale Durchbrüche verspricht. Christian Eggeling hat wichtiges wissenschaftliches Neuland für die physikalische Chemie erschlossen.

Für seine Arbeiten wurde er auf der Bunsentagung in Berlin mit dem Nernst-Haber-Bodenstein-Preis ausgezeichnet.

POSTERPREISE UND HOT-TOPICS PREISE DER BUNSENTAGUNG 2011

Über 300 Poster präsentierten einen wesentlichen Teil der Bunsentagung 2011. Die Poster wurden durch ein Gutachtergremium hinsichtlich der Qualität der wissenschaftlichen Ergebnisse, der Qualität der Aussagekraft der Präsentation und der Originalität der Arbeit beurteilt. Vergeben wurden drei Posterpreise und 10 „Hot Topics“ Poster.



(Foto: Dr. Ulrike Rockland, Berlin)

POSTERPREISE

P 6.01

Coverage and temperature dependent isomerization of tetra-tert-butyl-imine on Au(111)

Felix Leyssner¹, Matthias Koch¹, Stephan Meyer¹, Ying Luo², Rainer Haag², and Petra Tegeder¹

¹Physics Department, Freie Universität Berlin, Arnimallee 14, Berlin, Germany

²Chemistry Department, Freie Universität Berlin, Takustraße 3, Berlin, Germany

Our research is on the understanding and the optimization of molecular switching processes on surfaces which can be induced and controlled by an external stimulation.^[2,3] High resolution electron energy loss spectroscopy (HREELS) is employed to analyze thermally activated changes in the geometrical structure of the photochromic molecular switch tetra-tert-butyl-imine (TBI) adsorbed on Au(111)^[1]. Depending on the coverage we observe a different behaviour in the thermally activated

trans/cis-isomerization of the adsorbed TBI molecules. Furthermore we gain insight into the ground state potential energy landscape which is strongly influenced by the adsorption. Our findings show that the functionality of the adsorbate covered surface is governed by a complex interplay between substrate-adsorbate and lateral interactions which is crucial to consider for the development of functional molecular architectures.

- [1] J. Mielke *et al.*, „Imine derivatives on Au(111): Evidence for “inverted” thermal isomerization”, *ACS Nano* **5**, (2011) 2090-2097.
- [2] F. Leyssner *et al.*, „Photoisomerization ability of molecular switches adsorbed on Au(111): Comparison between azobenzene and stilbene derivatives“, *J. Phys. Chem. C*, **114** (2010) 1231-1239.
- [3] M. Piantek *et al.*, „Reversing the thermal stability of a molecular switch on a gold surface: ring-opening reaction of nitro-spiropyran“, *J. Am. Chem. Soc.*, **131** (2009) 12729-12735.

P 7.02

Surface chemistry vs. performance

Ghislain M. Rupp, Markus Kubicek, Andreas Limbeck, Jürgen Fleig, Technische Universität Wien/A

In this work dense $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{CoO}_{3.5}$ (LSC) cathode thin films (200nm) were prepared via pulsed laser deposition on YSZ substrates. Different deposition parameters and further treatments were investigated by electrochemical impedance spectroscopy. In addition, inductively coupled plasma optical emission spectroscopy (ICP-OES) was modified to a surface sensitive method by dynamically etching the LSC thin films and quantitative on-line analysis of the eluate cation composition. Hence, a depth profile could be obtained for the cathode material (Fig. 1), in which the resolution could be optimized to show sub-nm changes. First results reveal strontium enrichments at the surface compared to the bulk with increasing annealing time (Fig. 1b), indicating formation of a Sr rich layer or precipitate. This correlates with an increase of the polarization resistance.

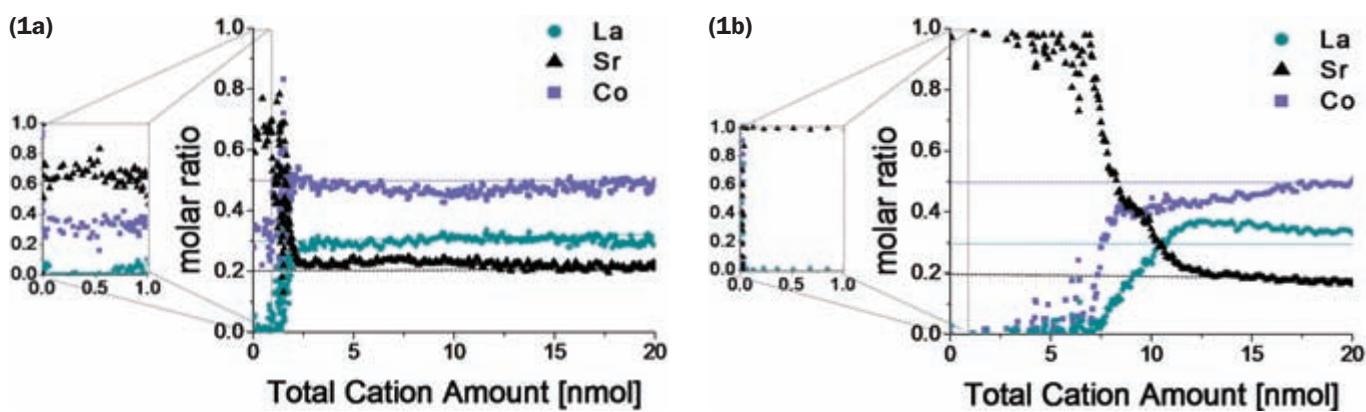


Fig. 1: ICP-OES, molar ratio vs. total cation amount (1 nmol cations \sim 0.9 nm LSC), (a) 0 h annealed, (b) 72 h annealed at 550 °C

P 8.06

Development of a Neural Network Potential-Energy Surface for the Water Dimer

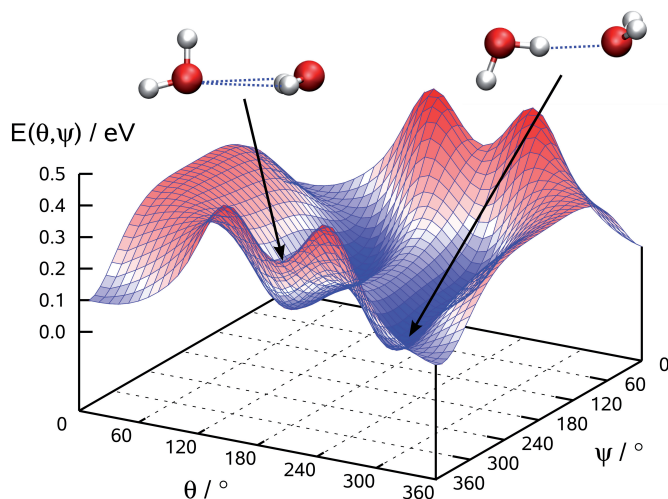
Tobias Morawietz, Vikas Sharma, Jörg Behler, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum/D

Understanding the properties of water still represents a significant challenge for theory and experiment. Investigations using computer simulations, e.g. by molecular dynamics, require a reliable description of the atomic interactions. Artificial neural networks (NNs) represent an accurate and efficient tool to construct high-dimensional potential-energy surfaces (PESs) by interpolating first-principles data^[1,2]. In order to explore the applicability of this method to water, we have constructed a full-dimensional NN PES for the water dimer. Comparing the structural and vibrational properties of several stationary points, we show that the NN potential is in excellent agreement with reference electronic structure calculations. This work represents the first step towards the construction of a NN PES for liquid water, which is currently in progress.

[1] J. Behler, and M. Parrinello, "Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces", *Phys. Rev. Lett.* **98**, 146401 (2007).

[2] N. Artrith, T. Morawietz, and J. Behler, "High-dimensional Neural-Network Potentials for Multicomponent Systems: Applications to Zinc Oxide", *Phys. Rev. B* **83**, 153101 (2011).

sion spectroscopy (ICP-OES) was modified to a surface sensitive method by dynamically etching the LSC thin films and quantitative on-line analysis of the eluate cation composition. Hence, a depth profile could be obtained for the cathode material (Fig. 1), in which the resolution could be optimized to show sub-nm changes. First results reveal strontium enrichments at the surface compared to the bulk with increasing annealing time (Fig. 1b), indicating formation of a Sr rich layer or precipitate. This correlates with an increase of the polarization resistance.



2D potential-energy surface of the water dimer as a function of two angles describing the relative orientation of the monomers.

HOT TOPICS POSTER

P 1.24

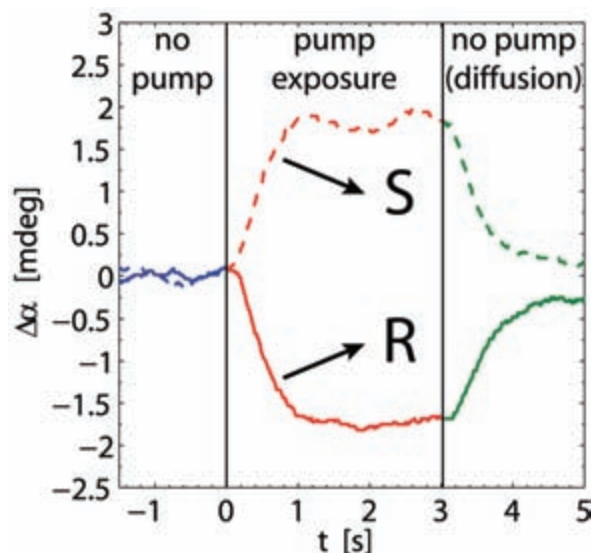
Precise and rapid detection of optical activity for femtosecond spectroscopy

Andreas Steinbacher, Johannes Buback, Patrick Nuernberger, and Tobias Brixner

Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Würzburg, 97074 Würzburg, Germany;

We demonstrate the detection of optical rotation of light polarization based on the common-path optical heterodyne interferometry method [1] in a configuration which is suitable for femtosecond spectroscopy. A femtosecond pump and a polarimeter probe beam are combined with the accumulative technique [2] that enhances sensitivity with respect to single-pulse methods. By using a pair of pump pulses, a time-resolution on the femtosecond timescale can be attained. The minimum rotation angle that can be resolved is determined experimentally to be 0.10 milli-degrees for a measurement time of one second and an interaction length of only 250 μm . The concept is demonstrated on the photodissociation of the R- and S-enantiomers of methyl p-tolyl sulfoxide [3] (see figure).

- [1] J. Lee and D. Su, *Opt. Commun.* **256**, 337–341 (2005).
 [2] F. Langhojer, F. Dimler, G. Jung, and T. Brixner, *Opt. Lett.* **32**, 3346–3348 (2007).
 [3] Y. Guo and W. S. Jenks, *J. Org. Chem.* **62**, 857–864 (1997).



Optical rotation measurement for the R- and S-enantiomer respectively. Before illumination (blue part) a constant signal is acquired, referring to zero optical rotation change. During the pump exposure (red part) the optical rotation increases (decreases) rapidly due to the photodecomposition of the chiral reactants. After the end of illumination (green part) the optical rotation change vanishes again due to diffusion effects.

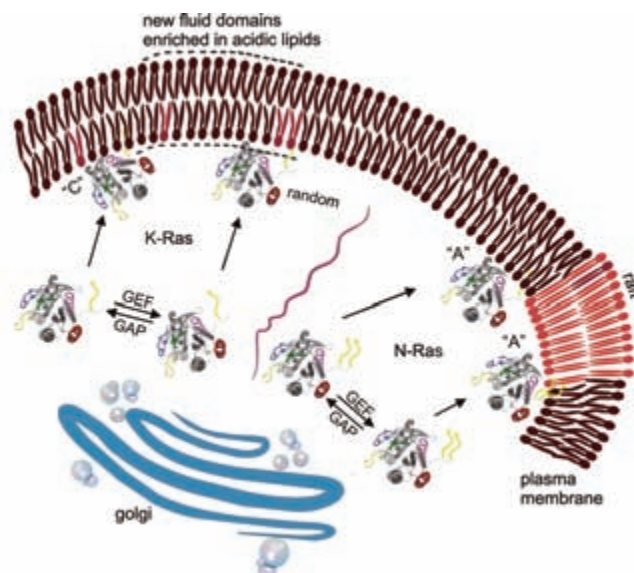
P 2.08

Conformational selection in membrane-bound Ras proteinsShobhna. Kapoor¹, Katrin Weise¹, Technische Universität Dortmund/D; Gemma Triola², Herbert Waidmann², Max Planck Institut für molekulare Physiologie, Dortmund/D; Roland Winter¹

¹Physical Chemistry I – Biophysical Chemistry, Faculty of Chemistry, TU Dortmund University, Otto-Hahn-Str. 6, 44227 Dortmund, Germany
²Chemical Biology, Max Planck Institute of Molecular Physiology, Otto-Hahn-Strasse 11, and TU Dortmund University, Otto-Hahn-Str. 6, D 44227 Dortmund, Germany

In this biophysical approach, the structure and reorientational changes of N-Ras and K-Ras upon membrane binding have been investigated using infrared reflection absorption, Fourier-transform infrared (FTIR) and polarized attenuated total reflectance FTIR spectroscopy. In addition, visualization of the membrane insertion process for both Ras isoforms was accomplished by using atomic force microscopy. The study strengthens the hypothesis that Ras isoforms have different modes of interaction with the model raft membranes, depending on factors such as membrane anchorage, bound nucleotide, membrane microstructure, and electrostatic interaction, selecting a particular conformation with a specific orientation with respect to the membrane, thus supporting the view of conformational selection being a critical mechanism for the functioning of membrane-associated Ras proteins.

- [1] Weise K, Kapoor S, Denter C, Nikolaus J, Opitz N, Koch S, Triola G, Herrmann A, Waldmann H, Winter R. *J. Am. Chem. Soc.* **133**: 880-887 (2011)



Schematic model showing the isoform specific Ras membrane orientation and localization at the plasma membrane. (i) Expulsion of N-Ras to the interfacial region with nucleotide exchange leading to a stronger interaction with similar orientation (designated as "A"), however. (ii) For K-Ras, effective lipid sorting mechanism through electrostatic interactions and formation of new fluid domains enriched in K-Ras. Nucleotide exchange (GDP to GTP) triggers orientational change from "C" to random "D".

P 3.06

Network formation in soggy sand electrolytes

C. Pfaffenhuber¹, S. Sörgel², K. Weichert¹, T. Munding³, M. Bele⁴, D. Samuelis¹, and J. Maier¹

¹Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart, Germany

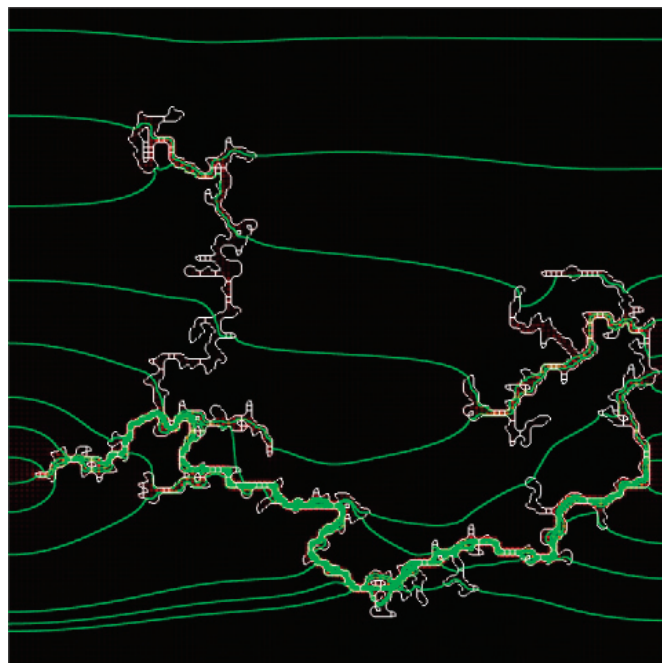
²Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Stuttgart, Germany

³Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart, Germany

⁴National Institute of Chemistry Slovenia, 1000 Ljubljana, Slovenia

„Soggy sand electrolytes“ are a promising class of Li salt-containing liquids which are heterogeneously doped with insulating nanoparticles (SiO₂).

While the local mechanism is anion adsorption at the silica particle surfaces causing increased dissociation of ion pairs and thus enhances Li surface conductivity, the long range ion transport requires formation of percolating networks. Earlier work by us investigated network stability and coarsening kinetics. Here we are concerned with the formation kinetics that can be followed using very low SiO₂ volume fractions. The ionic conductivity increases slowly with time before a constant value is reached. Under these conditions, the network formation is slow enough to be observed in situ as shown by Dynamic Light Scattering, Fluorescence Microscopy, as well as by time dependent measurements of conductivity and Zeta potential. The results are modeled by Finite Element methods (FEM).



FEM calculation of the current density on a nanoparticles cluster resulting from a Monte Carlo simulation.

P 4.06

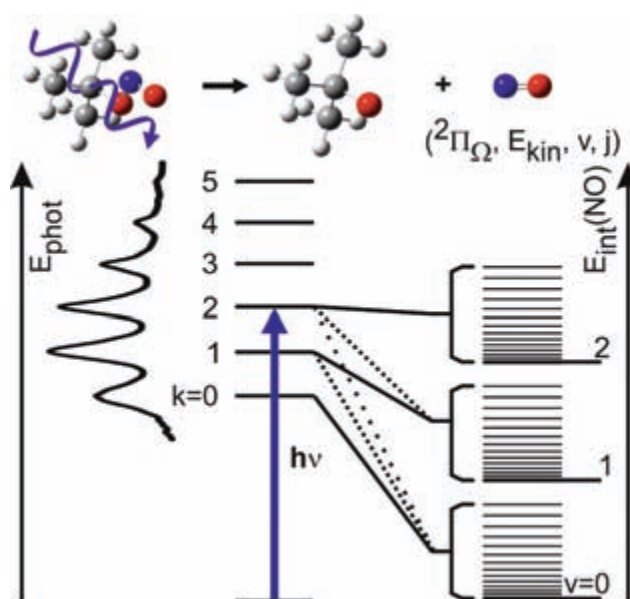
Photolysis of t-butyl nitrite via Excitation to the S1 and S2 States Studied by Velocity-Map Ion-Imaging & 3D-REMPI Spectroscopy

Andreas M. Wenge^(ab), Torsten Obernhuber^(a), Andreas Schmaunz^(a), Uwe Kensy^(a), Bernhard Dick^(a)

^(a) Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Regensburg, 93053 Regensburg, Germany

^(b) School of Chemistry, University of Bristol, Bristol BS8 1TS, UK

The photodissociation of t-butyl nitrite was studied with velocity map imaging and 3D-REMPI, probing hundreds of rovibrational quantum states of NO. Excitation into the vibronic progression bands of the S₀ → S₁ transition – assigned to the NO stretch vibration – results in vibrationally excited NO with conservation of the vibrational quantum number. All velocity distributions are monomodal with negative anisotropy (β = -1). 46% of the excess energy is converted to kinetic energy of the fragments. The populations of the rotational states of NO show a maximum at j = 30.5 for all vibrational states. NO fragments from excitation to S₂ are produced in the vibrational states v = 0 and 1, rotational distributions with maximum near j = 59.5, and anisotropy β ≈ 0.8. It is concluded that dissociation from both electronic states occurs very fast on repulsive potential energy surfaces.



Photodissociation dynamics of t-butyl nitrite: Excitation to the first absorption band leads to fast and vibrationally excited NO fragments (v=k mainly) with high recoil anisotropy and monomodal rotational population distributions for all v states.

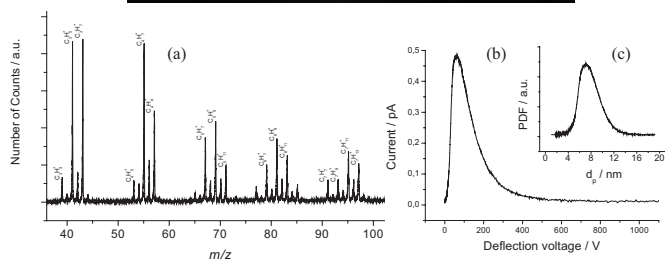
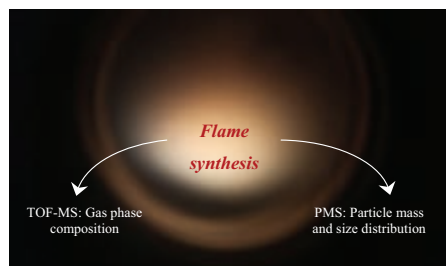
P 4.39

Combined particle- and time-of-flight- mass spectrometry in flame-based nanoparticle synthesis

A. Faccinetto, C. Schulz, H. Wiggers, Universität Duisburg-Essen/D

Nanoparticle synthesis in the gas phase is governed by a complex interplay between homogeneous gas-phase reactions, particle inception and growth, and surface chemistry. So far, gas-phase chemistry has been studied mostly independent of the particle formation progress. The goal of this project is to simultaneously observe the gas-phase composition and the forming nanoparticles as a function of reaction time and flame composition in laminar, premixed, low-pressure flames doped with gaseous precursors.

To this purpose, a novel experimental facility has been set up that combines a low-pressure flame reactor with molecular beam sampling, in-line particle mass spectrometry (PMS) and in-line time-of-flight mass spectrometry (TOF-MS). While the particle mass spectrometer provides particle size distributions, the time-of-flight mass spectrometer provides information about the gas-phase species in parallel. This information will be used to identify and quantify gaseous intermediates for the development and the validation of kinetics models for precursor decomposition, particle formation and growth.



Overview of the measurements associated with the flame-synthesis of semi-conducting oxidic nanoparticles. (a) Gas-phase composition of an acetylene/oxygen flame obtained by TOF-MS (b) PMS raw signal (detector current vs. deflection voltage) and probability density function (PDF) vs. particle diameter from the flame synthesis on iron oxide nanoparticles.

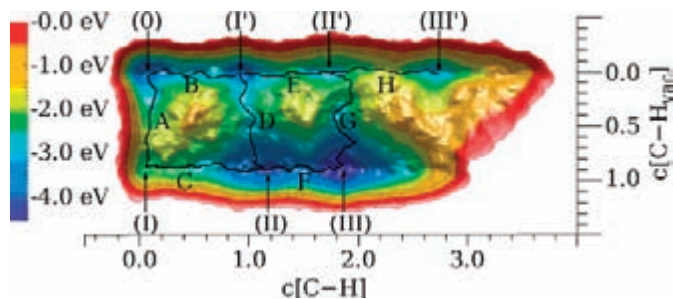
P 5.02

Methanol synthesis on ZnO(000 $\bar{1}$): Free energy landscapes, reaction pathways, and mechanistic insights

Janos Kiss, Johannes Frenzel, Ruhr-Universität Bochum/D.; Nisanth N. Nair, Indian Institute of Technology, Kanpur/IND; Bernd Meyer, Universität Erlangen-Nürnberg/D; Dominik Marx, Ruhr-Universität Bochum/D

The interplay of physical and chemical processes in the heterogeneous catalytic synthesis of methanol on the ZnO(000 $\bar{1}$) surface give rise to a complex free energy landscape. A manifold of species and pathways has been proposed for the reduction of CO on this catalyst at high T and p conditions as required in the industrial process. Here, the underlying complex reaction network from CO to methanol is generated in the first place by using ab *initio* metadynamics for computational heterogeneous catalysis. Having “synthesized” the previously discussed intermediates in addition to finding novel ones, mechanistic insights into this network of surface chemical reactions are obtained based on exploring the global free energy landscape, which is refined by investigating individual reaction pathways.

see: J.Kiss *et al.*, *J.Chem.Phys.*, **134** (2011), 064710.
johannes.frenzel@theochem.rub.de



Free energy landscape of CO hydrogenation at the partially hydroxylated ZnO(000 $\bar{1}$) surface hosting an F^o/H₂ oxygen vacancy: explorative multiple walker ab initio metadynamics sampling (540ps AIMD time) of coordination numbers of carbon to hydroxylic H^{*} atoms c[C-H] and to the hydric H^{*} inside the vacancy c[C-H_{vac}] (collective variables).

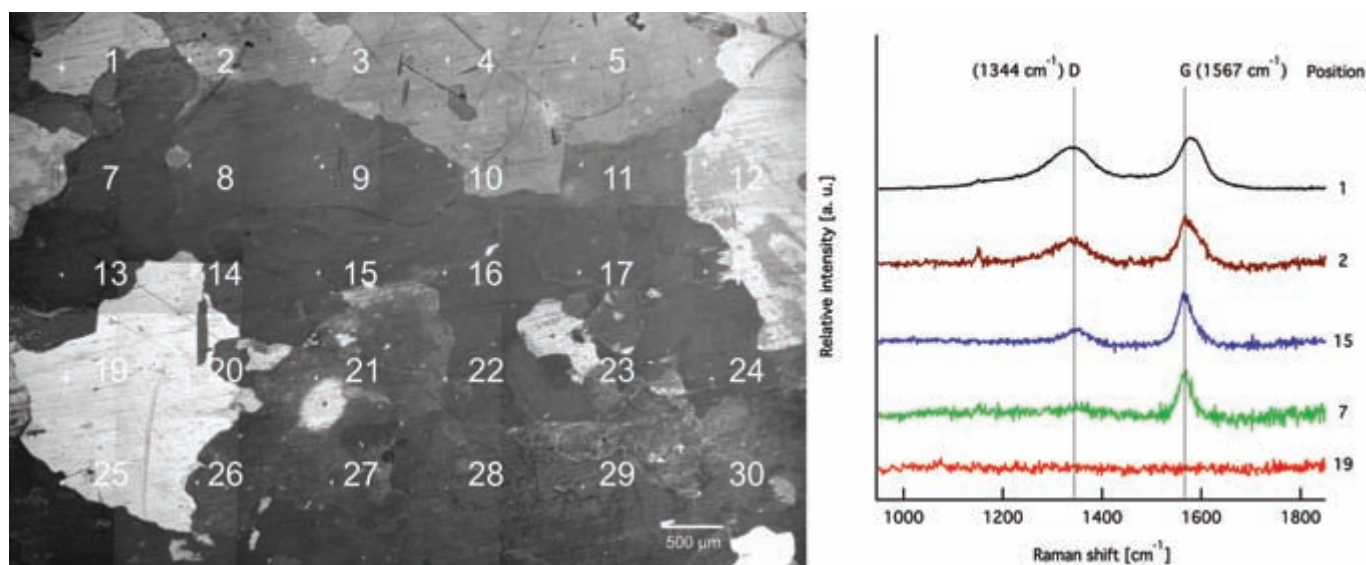
P 5.32

Carbon formation in catalytic partial oxidation of methane on platinum: Model studies on a polycrystalline Pt foil

O. Korup, M. Geske, R. Schlögl, R. Horn, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin/D

A polycrystalline Pt foil has been investigated as model catalyst in methane catalytic partial oxidation (CPO) to synthesis gas. It is demonstrated that a substantial amount of carbonaceous deposits forms on the Pt foil upon reaction light-off blocking a large fraction of Pt surface atoms. By using in situ Raman spectroscopy

and quantitative spectral analysis the evolution and spatial distribution of these carbonaceous compounds with reaction temperature and reaction time have been characterized. The chemical composition of the carbon material changes from highly reactive and strongly disordered directly after reaction light-off to highly ordered, oxidation and steam reforming resistant after several hours time on stream at 800 °C reaction temperature. Remarkably the carbon distribution at the Pt surface was found to be inhomogeneous and related to the nature of the microcrystals forming the polycrystalline foil in a yet unknown manner.



Left: Light-optical micrograph of the polycrystalline platinum foil serving as model catalyst in methane CPO under reaction conditions at $T = 800\text{ °C}$ reactor cell temperature. The bright laser spots indicate the Raman sampling positions. Right: Selected in situ Raman spectra recorded during methane CPO on a polycrystalline platinum foil.

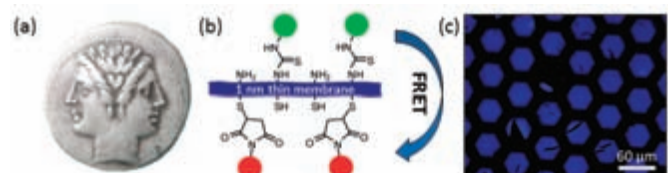
P 6.19

Janus nanomembranes: surfaces without bulk, functionalized on both sides

A. Turchanin, Z. Zheng, C.T. Nottbohm, H. Muzik, A. Beyer, M. Heilemann, Universität Bielefeld/D; M. Sauer, Universität Würzburg/D; A. Götzhäuser, Universität Bielefeld/D

Free-standing two-dimensional (2D) nanomaterials, i.e. sheets or membranes with a thickness of only one or few molecules or atoms, have recently received an enormous attention. For the first time we demonstrate that 1 nm thin free-standing “Janus Nanomembranes” with amino functionalities on their top sides and thiol functionalities on their bottom sides can be generated from aromatic self-assembled monolayers and used as the platform for 2D directional chemistry. We selectively functionalize both faces of these nanomembranes with two different fluorophores: The amino side was modified with tetramethylrhodamine and the thiol side was functionalized with ATTO647N. The free-standing nanomembranes can be fabricated on the large scale, which facilitates many applications and, e.g., enables a simple detection of the fluorophore interactions (fluorescence resonant energy transfer, FRET).

With this proof-of-concept experiment we show that Janus nanomembranes possess great potential for the use in ultrathin sensors or actuators as well as for mimicking of proton-, electron-, or ion biological pump systems (for more details see Z. Zheng et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 49 (2010) 8493).



Janus Nanomembranes. (a) Two-faced Roman god Janus. (b) Schematic representation of the fabricated Janus nanomembranes. (c) FRET intensity of the free-standing nanomembrane (bright areas) placed on a metal grid (dark areas).

P 6.42

Hochleistungskatalysatoren aus dem Baukasten – funktionalisierte nanoporöse Goldkatalysatoren mit einer ausgezeichneten katalytischen Aktivität und Temperaturstabilität

A. Wichmann, A. Wittstock, M. Bäumer, Universität Bremen/D

Nanoporöse Goldmaterialien (npAu) erregten in den letzten Jahren großes Aufsehen, da diese für Anwendungen in der Optik, der Aktuatorik/Sensorik, heterogenen Katalyse und der Elektrochemie ein großes Potential aufgezeigt haben. Dieses vielseitige monolithische Goldsubstrat ist u.a. durch seine praktisch stufenlose Einstellung der Porengröße und Dichte gekennzeichnet, die durch Temperaturbehandlung erzielt wird. Es ist ebenfalls möglich, die Ausgangsporenstruktur (ca. 40 nm) bei Temperaturen von über 400 °C zu konservieren, indem man Oxide wie beispielsweise TiO_2 in das Material einbringt. Das leicht reduzierbare Metalloxid und das Goldsubstrat ergänzen sich hinsichtlich katalytischer Aktivität (CO-Oxidation) hervorragend: sehr hohe Umsätze zu CO_2 sowie die gute Temperaturstabilität machen den TiO_2 @npAu-Katalysator beispielsweise für die Abgaskatalyse hochinteressant.



Durch Einstellen der Porengröße des npAu-Substrats und der Einbringung verschiedener Deponate ist eine große Bandbreite an Anwendungen realisierbar.

P 7.44

Solution-Liquid-Solid (SLS) Growth of Nanowires (NWs) Using Nanoclusters as Precursors

Zhe Wang, Sebastian Schäfer, Zhen Li, Andreas Kornowski, and Alf Mews

Institute of Physical Chemistry, University of Hamburg, Germany

Semiconductor NWs have been prepared by the SLS^{1,2} method where low melting point metal bismuth (Bi) nanoparticles are used as catalysts and the soluble molecular precursors dissolve into Bi to form NWs after supersaturation.^{3,4} In our work we found a modified SLS scheme where the pre-formed CdSe and CdTe nanoclusters were used as single-source precursors to form NWs with diameters below the exciton dimensions in the presence of Bi. Combining molecular and cluster precursors from different materials resulted in a high local concentration of cluster material at the tip of NW. This suggests that the clusters initiate the NW nucleation during the SLS growth mechanism.⁵ Therefore, we prepared NW axial heterostructures (i.e. CdSe/CdTe NWs) by adding the cluster and molecular precursors subsequently. This generates type II heterojunctions along the axis, which can possibly be used as building blocks for nanoscale diodes.

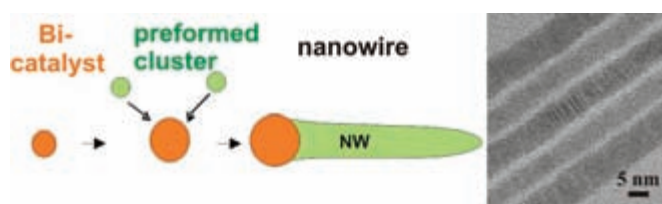


Illustration of NWs growth using clusters as precursors; the TEM image of representative CdSe NWs formed by this approach.

- [1] Yu, H.; Li, J. B.; Loomis, R. A.; Gibbons, P. C.; Wang, L. W. and Buhro, W. E., *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 16168.
- [2] Grebinski, J. W.; Hull, K. L.; Zhang, J.; Kosel, T. H. and Kuno, M., *Chem. Mater.* **2004**, *16*, 5260.
- [3] Li, Z.; Kornowski, A.; Myalitsin, A. and Mews, A., *Small* **2008**, *4*, 1698.
- [4] Li, Z.; Kurtulus, Ö.; Fu, N.; Wang, Z.; Kornowski, A.; Pietsch, U. and Mews, A., *Adv. Funct. Mater.* **2009**, *19*, 3650.
- [5] Wang, Z.; Li, Z.; Kornowski, A.; Ma, X.; Myalitsin, A. and Mews, A., *Small* **2011** in press.

Wolfgang G. Bessler

KARRIEREPLANUNG VON PROMOTIERTEN PHYSIKOCHEMIKERN

Ein Rückblick auf das Karriereforum der Bunsentagung 2011

Das Karriereforum feierte auf der 110. Bunsentagung an der FU Berlin einen besonderen Geburtstag: Die Diskussionsveranstaltung für junge Physikochemiker/innen fand nicht nur zum fünften Mal statt (Abb. 1), sondern wurde heuer auch als offizielle Nachwuchs-Förderorganisation in die Bunsen-Gesellschaft integriert. Zeit für einen kurzen Rückblick.

Das Symposium Karriereforum wurde im Jahr 2007 von Andreas Brockhinke (Universität Bielefeld) ins Leben gerufen. Im Rahmen der Bunsentagung in Graz fand erstmalig eine Diskussion zu Karrierefragen des wissenschaftlichen Nachwuchses der Physikalischen Chemie statt. Aus dieser und den folgenden Veranstaltungen heraus wuchs ein aktiver Kern von etwa zehn Frauen und Männern, um die herum das Karriereforum aufblühte. Die nächste Station war 2008 in Saarbrücken (Leitung: Jochen Küpper, jetzt Deutsches Elektronen-Synchrotron Hamburg). Hier wurde, wie auch in den darauffolgenden zwei Jahren, ein Vortrag der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) zu „Förderangeboten für den wissenschaftlichen Nachwuchs“ angeboten. Im Jahr 2009 in Köln (Leitung: Gregor Jung, Universität des Saarlandes) wurde die Veranstaltung von einem Vortrag des Deutschen Hochschulverbandes (DHV) über „Bewerbung und Berufung“ eingeleitet. Höhepunkt war eine Podiumsdiskussion zum Thema „Zukunft der Hochschulen“, die Freitag nachmittags im Mittelpunkt der Bunsentagung stattfand. In Bielefeld (Leitung: Harry Hoster, jetzt TU München) stand 2010 – nach Vorträgen von DFG und DHV – eine Diskussion über „Karrierewege zwischen Industrie und Hochschule“ im Mittelpunkt. Im Mai 2011 in Berlin schließlich widmete sich das Karriereforum (Leitung: Wolfgang Bessler, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Stuttgart) dem Thema „Mentoring“ und diskutierte

über verschiedene Aspekte der akademischen Karriereplanung. Die Aktivitäten wurden in den letzten Jahren durch Publikations-tätigkeit, unter anderem im Bunsen-Magazin, abgerundet.

Vor diesem Hintergrund darf es als weiterer Meilenstein gelten, dass das Karriereforum dieses Jahr als offizielle Nachwuchs-Förderorganisation in die Bunsen-Gesellschaft integriert wurde. Die „Arbeitsgemeinschaft Bunsen-Karriereforum“ konstituierte sich am 3.6.2011 am Rande der Bunsentagung nach einer einjährigen Vorbereitungszeit, in der gemeinsam mit dem Vorstand, der Geschäftsführung und dem Ständigen Ausschuss der Bunsen-Gesellschaft die Aufgaben definiert und eine Satzung erarbeitet wurde. Durch den Status einer Arbeitsgemeinschaft werden die Möglichkeiten verbessert, die Interessen junger Physikochemiker/innen sowohl innerhalb der Bunsen-Gesellschaft als auch nach außen zu vertreten: Das Symposium Karriereforum wird verstetigt, Veröffentlichungen bekommen mehr Gewicht, und die Arbeitsgemeinschaft ist in den Gremien der Bunsen-Gesellschaft vertreten. Für das „Bunsen-Jahr“ 2011/2012 wurde Melanie Schnell (Center for Free-Electron Laser Science, Hamburg) zur Sprecherin der Arbeitsgemeinschaft gewählt.

Doch zurück zum eigentlichen Symposium Karriereforum, das am Donnerstag, 2. Juni, von 11:30 bis 15:00 stattfand. Die Veranstaltung wurde mit einem einstündigen Vortrag zum Thema „Mentoring – Unterstützung auf dem Karriereweg“ von Barbara Baumann (Praxis für Supervision, Coaching und Fortbildung, Herzogenrath) eröffnet. Es wurden die vielfältigen Möglichkeiten und Konstellationen des Mentoring erarbeitet – von reinen Forschungs- über Forschungs/Industrie- bis hin zu Industrie/Industrie-Partnerschaften gibt es alle Modelle, eben-



Abb. 1: Das Karriereforum feiert seinen 5. Geburtstag – der Bunsenbrenner ist geliebt

so wie spezialisierte Programme z. B. für Frauen oder für den wissenschaftlichen Nachwuchs. Zwischen Mentor und Mentee herrscht dabei ein besonderes Vertrauensverhältnis. Der Mentor ist ehrenamtlich tätig, sein Engagement wird jedoch durch vielfältige, bereichernde Erfahrungen entlohnt. Im Mittelpunkt der anschließenden Diskussion stand die Frage, ob ein Mentoringprogramm innerhalb der Bunsen-Gesellschaft möglich und erwünscht sei. Insbesondere ein gemischtes Forschungs-/Industrie-Programm wurde als attraktiv angesehen.

Nach einem reichhaltigen Mittags-Imbiss (danke an Eckhardt Rühl, FU Berlin) ging die Veranstaltung in den Diskussionsteil: In mehreren Impulsreferaten aus dem aktiven Kern des Karriereforums wurden Karrierefragen junger Physikochemiker/innen angerissen und anschließend im Plenum erörtert. Timo Jacob (Universität Ulm) diskutierte in seinem Vortrag „Nachwuchsgruppen: Karrierevoraussetzung für die Professur?“ einige typische (und untypische) Karrierewege, die oft über diverse Nachwuchsgruppenprogramme führen (Emmy-Noether, Max-Planck, Helmholtz, ERC etc.). Der in Abb. 2 gezeigte rechte Zweig kann damit im günstigsten Fall umgangen werden.

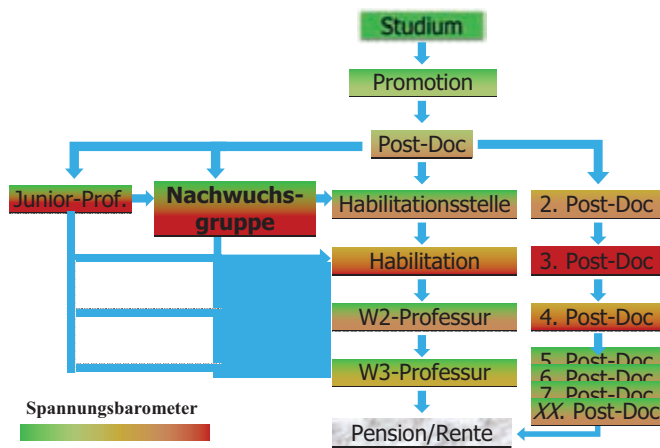


Abb. 2: Mit steigender Spannung auf akademischen Karrierewegen (Bild: Timo Jacob)

Melanie Schnell (Center for Free-Electron Laser Science, Hamburg) widmete sich dem Thema „Wenn zwei das gleiche tun: Karrierepaare und Karrierefamilien“, welches seit einigen Jahren auch in der öffentlichen Diskussion verstärkt Aufmerksamkeit erhält. War es in der Vergangenheit noch so, dass vor allem Frauen in „Karrierepaaren“ und „-familien“ lebten, nehmen in den letzten Jahren Doppelkarrierepaare mit und ohne Kindern rapide zu. Wie auch in der anschließenden Diskussion angemerkt wurde, ist es hier besonders wichtig, dass beide Partner gleichberechtigt ihrer Karriere- und ihrer Familienarbeit nachgehen können. Gerade hier ist noch Umdenken vonnöten, damit die besonderen Arbeitsbedingungen aktiver Eltern in unserer Leistungsgesellschaft besser akzeptiert werden.

„Die Juniorprofessur: Eine echte Alternative zur Habilitation?“ – dieser Frage ging Gregor Jung (Universität des Saarlandes) nach. Erörtert wurde unter anderem, ob die größere Unabhängigkeit eines Juniorprofessors im Vergleich zu einem Habilitanden zum Vorteil oder doch eher zum Nachteil genügt. Die Qualitätssicherung wurde als ansonsten wenig beachteter Aspekt

besonders diskutiert: Die Entscheidung zur Übernahme in ein Dauerverhältnis (tenure track) erfolgt bei der Juniorprofessur wesentlich früher (3-5 Jahre nach der Promotion) als bei der klassischen Habilitation (6-10 Jahre nach der Promotion). Kann nach einer solch relativ kurzen Zeit bereits über die wissenschaftliche Qualität des Kandidaten entschieden werden? Dennoch das Fazit von Gregor Jung: Ohne Tenure-Track-Option ist die Juniorprofessur unattraktiv.



Abb. 3: Karriereforum an der Freien Universität Berlin

Die etwa 40 Zuhörer/innen trugen mit Ihren Beiträgen, oft auch aus der eigenen Erfahrung, zu einer guten und lebendigen Diskussion bei (Abb. 3). Es zeigte sich wieder, dass sich das Symposium Karriereforum großer Beliebtheit erfreut, und dies trotz der nicht ganz günstigen zeitlichen Lage am eigentlichen Anreisetag zur Bunsentagung. Für alle Aktiven, die in den letzten Jahren zum Gelingen dieser Veranstaltung beigetragen haben, ist dies der schönste Dank für ihr Engagement. Die Gründung der Arbeitsgemeinschaft Bunsen-Karriereforum wird der Veranstaltung in Zukunft zu Kontinuität und noch mehr Sichtbarkeit verhelfen. Freuen wir uns also auf weitere Karriere-Kontroversen!

Die Arbeitsgemeinschaft Bunsen-Karriereforum

Alle jungen Physikochemikerinnen und Physikochemiker der Bunsen-Gesellschaft sind herzlich eingeladen, Mitglied der Arbeitsgemeinschaft Bunsen-Karriereforum zu werden und so zu einem aktiven, lebendigen, jungen Netzwerk beizutragen. Die Anmeldung geschieht unkompliziert per E-Mail an die Bunsen-Geschäftsstelle (woehler@bunsen.de).

Priv.-Doz. Dr. Wolfgang G. Bessler
 Institut für Technische Thermodynamik
 Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.
 in der Helmholtz-Gemeinschaft
 Pfaffenwaldring 38-40
 70569 Stuttgart / Germany
 Tel.: +49 711 6862-603
 Fax: +49 711 6862-747
 E-Mail: wolfgang.bessler@dlr.de
 Internet http://bessler.info/ und http://www.dlr.de/tt/ec

Vorstandsbericht

für die ordentliche Mitgliederversammlung
anlässlich der 110. Hauptversammlung
am 2. Juni 2011 in Berlin
(abgeschlossen am 11. Mai 2011)

Tagesordnung laut Satzung für die Mitgliederversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e. V. am Donnerstag, 2. Juni 2011, Freie Universität Berlin

1. Bericht des Vorstandes über das abgelaufene Geschäftsjahr
2. Bericht des Schatzmeisters über den Jahresabschluss und über das laufende Geschäftsjahr
3. Entlastung des Vorstandes
4. Bericht über das europäische Journal PCCP
5. Vornahme der erforderlichen Wahlen
6. Festsetzung des Jahresbeitrages
7. Beschluss über Ort und Zeit der nächsten Hauptversammlungen
8. Beschluss über eingegangene Anträge
9. Verschiedenes

TODESFÄLLE

Im Jahr 2010 und in den ersten Monaten dieses Jahres hat die Deutsche Bunsen-Gesellschaft durch den Tod folgende Mitglieder verloren:

Dr. Hans-Werner [Jochims](#)
(verstorben am 08. Mai 2010)

Prof. Dr. Lothar [Riekert](#)
(verstorben am 06. Juli 2010)

Prof. Dr. Frank [Schneider](#)
(verstorben im Juli 2010)

Prof. em. Dr. Kurt [Hedden](#)
(verstorben am 24. Juli 2010)

Dr. Karin [Schwind](#)
(verstorben am 22. August 2010)

Prof. Dr. Wolfgang [Swodenk](#)
(verstorben am 10. September 2010)

Prof. Dr. Wolfgang [Pechhold](#)
(verstorben am 19. Juni 2010)

Prof. Dr. Walther [Jaenicke](#)
(verstorben am 13. Oktober 2010)

Prof. Dr. Kurt [Breitschwerdt](#)
(verstorben am 29. September 2010)

Dr. Rudolf [Gambert](#)
(verstorben 2010)

Prof. em. Dr. Karl [Kordes](#)
(verstorben am 12. Januar 2011)

Prof. Dr. Horst [Langemann](#)
(verstorben am 15. Januar 2011)

Prof. Dr. Walter [Heitz](#)
(verstorben im Februar 2011)

Dr. Horst [Huck](#)
(verstorben am 20. Februar 2011)

Prof. Dr. Jürgen [Sauer](#)
(verstorben am 10. März 2011)

Prof. Dr. Erhard W. [Fischer](#)
(verstorben im März 2011)

Prof. Dr. Klaus [Müller](#)
(verstorben am 01. April 2011)

Prof. Dr.-Ing. Roger [Thull](#)
(verstorben am 25. März 2011)

Prof. Dr. phil. Dres. h. c. Fritz Peter [Schäfer](#)
(verstorben am 25. April 2011)

MITGLIEDERSTAND

Zum 31. Dezember 2009: 1.509
Zum 31. Dezember 2010: 1.480

EHRUNGEN (2010)

Anlässlich des 65. Geburtstages wurden im Bunsen-Magazin Glückwunschwünsche veröffentlicht von:

Prof. Dr. Michael [Buback](#): 16. Februar
Prof. Dr. Alfred [Blume](#): 27. Februar
Prof. Dr. Gerhard [Kreysa](#): 21. September

VORSTAND UND STÄNDIGER AUSSCHUSS

Gemäß den Beschlüssen der Mitgliederversammlung anlässlich der 109. Hauptversammlung in Bielefeld haben Vorstand und Ständiger Ausschuss ab 1. Januar 2011 folgende Zusammensetzung:

VORSTAND

Erster Vorsitzender:

Prof. Dr. Martin **Quack**, ETH Zürich, Laboratorium für Physikalische Chemie, Wolfgang-Pauli-Str. 10, CH-8093 Zürich

Zweiter Vorsitzender:

Prof. Dr. Wolfgang von **Rybinski**, Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V., Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt

Schatzmeister:

Prof. Dr.-Ing. Wolfgang **Grünbein**, Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V., Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt

STÄNDIGER AUSSCHUSS

Prof. Dr. Katharina **Al-Shamery**, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, Fakultät V, Institut für Reine- und Angewandte Chemie, Physikalische Chemie, Carl-von-Ossietzky-Str. 9-11, 26129 Oldenburg

Prof. Dr. Matthias **Ballauff**, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, F-12 Soft Matter and Functional Materials, Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin

Dr. Paula **Barreleiro**, Henkel AG & Co. KGaA, Advanced Materials, Technology Brokerage, Henkelstraße 67, 40191 Düsseldorf

Prof. Dr. Wolfgang **Domcke**, Technische Universität München, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, 85747 Garching

Prof. Dr. Michael **Dröscher**, Senior Advisor Innovation Management Chemicals, Homeoffice, Hetkerbruch 34, 46286 Dorsten

Dr. Holger **Egger**, Bayer Technology Services GmbH, Process Technology, Bldg. E41, 51368 Leverkusen

Prof. Dr. Klaus **Funke**, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Institut für Physikalische Chemie, Correnstr. 30-36, 48149 Münster

Prof. Dr. Markus **Gerhards**, TU Kaiserslautern, Physikalische und Theoretische Chemie, Geb. 52, Erwin-Schrödinger-Str., 67663 Kaiserslautern

Dr. Klaus **Griesar**, Merck KGaA, Geb. C10, HPC: C010/102, Frankfurter Str. 250, 64293 Darmstadt

Prof. Dr. Wolfgang **Kautek**, Universität Wien, Institut für Physikalische Chemie, Währingerstr. 421090 Wien/A

Prof. Dr. Katharina **Kohse-Höinghaus**, Universität Bielefeld, Fakultät für Chemie Physikalische Chemie I, Universitätsstr. 25, 33615 Bielefeld

Dr. Johanna **Kowol-Santen**, Deutsche Forschungsgemeinschaft, Chemie und Verfahrenstechnik, Kennedyallee 40, 53175 Bonn

Dr.-Ing. Egbert S. J. **Lox**, Vice-President, Group Research and Development, Umicore Research, Kasteelstraat 7, 2250 Olen, Belgien

Prof. Dr. Markus **Reiher**, ETH Zürich, Laboratorium für Physikalische Chemie, HCI G229, Wolfgang-Pauli-Str. 10, 8093 Zürich/CH

Prof. Dr. Eckart **Rühl**, Freie Universität Berlin, Institut für Chemie und Biochemie- Biologie, Chemie und PharmazieTakustr. 3, 14195 Berlin

GESCHÄFTSFÜHRER

Dr. Florian **Ausfelder**, Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V., Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt

PREISKURATORIUM

NERNST-HABER-BODENSTEIN PREIS

Erster Vorsitzender und Zweiter Vorsitzender

Weitere Mitglieder im Kuratorium:

Prof. Dr. Hans-Joachim **Freund**, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Abteilung Chemische Physik, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin

Prof. Dr. Karl **Kleinermanns**, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie, Gebäude 26.43.02, Universitätsstr. 1, 40225 Düsseldorf

Prof. Dr. Manfred **Kappes**, Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Physikalische Chemie II, Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

Prof. Dr. Eckart **Rühl**, Freie Universität Berlin, Institut für Chemie und Biochemie- Biologie, Chemie und PharmazieTakustr. 3, 14195 Berlin

PREISKURATORIUM VAN'T HOFF

Erster Vorsitzender und Zweiter Vorsitzender

Weitere Mitglieder im Kuratorium:

Prof. Dr. Dr.h.c. Gerhard **Ertl**, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin

Prof. Dr. Regine von **Klitzing**, Technische Universität Berlin, Sekr. TC9, Stranski-Laboratorium für Physikalische und Techn. Chemie, Straße des 17. Juni 124, 10623 Berlin

Prof. Dr. Manfred **Kappes**, Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Physikalische Chemie II, Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

Prof. Dr. Joachim **Maier**, Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstr. 1, 70569 Stuttgart

Prof. Dr. Joachim **Sauer**, Humboldt-Universität Berlin, Institut für Chemie, Unter den Linden 6, 10117 Berlin

THEMENKOMMISSION

Prof. Dr. Matthias **Ballauff**, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, F-12 Soft Matter and Functional Materials, Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin (Vorsitz)

Prof. Dr. Helmut **Bertagnoli**, Im Waldhof 14, 79117 Stuttgart

Dr. Alexander **Haunschild**, BASF Coatings GmbH, Glasuritstraße 1, 48165 Münster

Dr. Johanna **Kowol-Santen**, Deutsche Forschungsgemeinschaft, Chemie und Verfahrenstechnik, Kennedyallee 40, 53175 Bonn

Prof. Dr. Martin **Muhler**, Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Technische Chemie, Fakultät für Chemie, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum

Prof. Dr. Florian **Müller-Plathe**, Technische Universität Darmstadt, Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie, Petersenstr. 20, 64287 Darmstadt

Prof. Dr. Jürgen **Popp**, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Chemisch-Geowissenschaftliche Fakultät, Institut für Physikalische Chemie, Helmholtzweg 4, 07737 Jena

Dr. Peter Stöckel, **Boehringer** Ingelheim, Pharma GmbH & Co. KG, Global Funktion Launch, Bingerstr. 173, 55216 Ingelheim

Prof. Dr. Peter **Vöhringer**, Rh. Fr.-Wilhelms-Universität Bonn, Molekulare Physikalische Chemie, Wegelerstr. 12, 53115 Bonn

UNTERRICHTSKOMMISSION

Prof. Dr. Eckhard **Bartsch**, Universität Freiburg, Institut für Physikalische Chemie, Albertstr. 21, 79104 Freiburg

Prof. Dr. Marcus **Bäumer**, Universität Bremen, Institut für Angewandte und Physikalische Chemie, Postfach 330440, 28334 Bremen

Prof. Dr. Gerd **Buntkowsky**, TU Darmstadt, Physikalische Chemie III, Petersenstr. 20, 64287 Darmstadt

Prof. Dr. Alexander **Eychmüller**, Technische Universität Dresden, Physikalische Chemie, Bergstr. 66B, 01062 Dresden

Prof. Dr. Regine von **Klitzing**, Technische Universität Berlin, Sekr. TC9, Stranski-Laboratorium für Physikalische und Technische Chemie, Straße des 17. Juni 124, 10623 Berlin

Prof. Dr. rer.nat.habil. Jörg **Kreßler**, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Naturwissenschaftliche Fakultät, Institut für Chemie, Hoher Weg 7, 06120 Halle

Prof. Dr. Christian **Ochsenfeld**, LMU München, Institut für Chemie, Theoretische Chemie, Butenandtstr. 7C, 81377 München

Prof. Dr. Walter **Richtering**, RWTH Aachen, LS für Physikalische Chemie II, Landoltweg 2, 52074 Aachen (Vorsitz)

PD Dr. Wolfgang **Schärftl**, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Institut für Physikalische Chemie, Jakob-Welder-Weg 11, 55128 Mainz

Prof. Dr. Joachim **Wagner**, Universität Rostock, Institut für Chemie - Physikalische Chemie, Dr.-Lorenz-Weg 1, 18059 Rostock

BUNSEN-MAGAZIN

Herausgeber: Der Vorstand der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e. V.

Schriftleitung: Prof. Dr. Rolf **Schäfer**, Technische Universität Darmstadt, Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie, Petersenstr. 20, 64287 Darmstadt

PCCP

Ownership Board

Prof. Dr. Bernd **Brutschy**, Universität Frankfurt, Institut für Physikalische Chemie, Marie-Curie-Str. 11, 60439 Frankfurt

Prof. Dr.-Ing. Wolfgang **Grünbein**, Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie, Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt

MITGLIEDSBEITRÄGE

Der Beitrag für das Jahr 2010 betrug für persönliche Mitglieder 100,- € (bzw. 75,- € bei Doppelmitgliedschaft in DECHEMA, DPG und GDCh), für Mitglieder bis zu drei Jahren nach Studienabschluss 65,- €, für Studenten 30,- €, für nicht-persönliche Mitglieder (Institute, Firmen) 485,- €.

ABRECHNUNG

Der nachstehend veröffentlichte Jahresabschluss für das Rechnungsjahr 2010 wurde von der Wirtschaftsprüfungsgesellschaft Prof. Dr. K. Schwantag - Dr. P. Kraushaar GmbH, Frankfurt sowie von den ehrenamtlichen Rechnungsprüfern, Prof. Dr. Bernhard Brutschy, Frankfurt und Dr. Marcell Peuckert, Frankfurt, geprüft und in Ordnung befunden.

Vermögensrechnung zum 31. Dezember 2010**Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V., Frankfurt am Main****AKTIVA**

	<u>31.12.2010</u> <u>EUR</u>	<u>31.12.2009</u> <u>EUR</u>
A. <u>Anlagevermögen</u>		
I. <u>Sachanlagen</u>		
Betriebs- und Geschäftsausstattung	4.598,64	5.634,03
4.598,645.634,03
II. <u>Finanzanlagen</u>		
1. Beteiligungen	0,51	0,51
2. Wertpapiere des Anlagevermögens	753.864,92	892.808,92
753.865,43892.809,43
758.464,07898.443,46
B. <u>Umlaufvermögen</u>		
I. <u>Forderungen und sonstige Vermögensgegenstände</u>		
Sonstige Vermögensgegenstände	25.062,47	32.797,35
25.062,4732.797,35
II. <u>Flüssige Mittel</u>	399.737,50	249.250,29
424.799,97282.047,64
C. <u>Rechnungsabgrenzungsposten</u>	2.446,14	1.671,54
1.185.710,181.182.162,64

Vermögensrechnung zum 31. Dezember 2010**Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V., Frankfurt am Main****PASSIVA**

	<u>31.12.2010</u> EUR	<u>31.12.2009</u> EUR
A. <u>Vereinsvermögen</u>		
1. Freie Rücklage gem. § 58 Nr. 7a AO	170.258,01	165.538,78
2. Zweckgebundene Rücklage	<u>136.792,75</u>	<u>134.263,34</u>
307.050,76299.802,12
B. <u>Unselbständige Stiftungen</u>		
1. von Böttinger Stiftung	34.592,41	40.646,62
2. Robert-Bunsen Stiftung	284.675,65	298.501,14
3. Bonhoeffer-Eucken-Scheibe Vorlesung	88.824,29	91.531,20
4. Leo-Gans-Cassella Stiftung	74.752,96	79.606,05
5. Hellmann Fonds	59.433,07	42.973,13
6. van 't Hoff-Stiftung	278.539,31	267.221,54
7. Alfred-Saupe-Stiftung	<u>20.835,67</u>	<u>20.474,50</u>
841.653,36840.954,18
C. <u>Rückstellungen</u>		
1. Pensionsrückstellungen	20.171,00	19.870,00
2. Steuerrückstellungen	1.885,84	0,00
3. Sonstige Rückstellungen	<u>5.712,00</u>	<u>5.712,00</u>
27.768,8425.582,00
D. <u>Verbindlichkeiten</u>		
1. Erhaltene Anzahlungen auf Bestellungen	0,00	3.000,00
2. Sonstige Verbindlichkeiten	<u>9.237,22</u>	<u>12.824,34</u>
9.237,2215.824,34
	<u>1.185.710,18</u>	<u>1.182.162,64</u>

Ergebnisrechnung
für die Zeit vom 01.01.2010 bis 31.12.2010

Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V., Frankfurt am Main

	<u>2010</u> <u>EUR</u>	<u>2009</u> <u>EUR</u>
1. Ideeller Bereich		
Erträge		
Mitgliedsbeiträge	122.004,00	123.591,50
Spenden	21.321,16	37.550,00
Sonstige	0,00	157,15
	<u>143.325,16</u>	<u>161.298,65</u>
Aufwendungen		
Honorare	8.019,32	5.228,00
Honorare und Personalkosten	50.541,58	47.367,98
Reisekosten, Sitzungen	8.503,11	3.567,75
Stipendien	8.525,00	11.130,00
Büro- und Verwaltungskosten	22.873,31	22.155,78
Rechts- und Beratungskosten	5.712,00	5.712,00
Porto- und Telefonkosten	9.686,40	7.384,68
Ehrungen	12.268,53	26.000,00
Abschreibungen	1.035,39	1.222,20
Druckkosten	55.892,19	41.024,17
Sonstige	3.288,96	1.723,06
	<u>186.345,79</u>	<u>172.515,62</u>
Ergebnis ideeller Bereich	<u>-43.020,63</u>	<u>-11.216,97</u>
2. Vermögensverwaltung		
Erträge	88.382,55	68.672,26
Aufwendungen	<u>62.838,52</u>	<u>1.733,28</u>
Ergebnis Vermögensverwaltung	<u>25.544,03</u>	<u>66.938,98</u>
3. Steuerbegünstigte Zweckbetriebe		
Erträge	46.360,11	37.551,46
Aufwendungen	<u>29.974,82</u>	<u>30.605,11</u>
Ergebnis steuerbegünstigte Zweckbetriebe	<u>16.385,29</u>	<u>6.946,35</u>
4. Wirtschaftliche Geschäftsbetriebe		
Erträge	40.964,01	33.830,89
Aufwendungen	<u>31.924,88</u>	<u>29.388,99</u>
Ergebnis wirtschaftliche Geschäftsbetriebe	<u>9.039,13</u>	<u>4.441,90</u>
5. Ergebnis vor Verwendung	7.947,82	67.110,26
6. Entnahme		
aus der freien Rücklage gem. § 58 Nr. 7a AO	8.114,73	0,00
aus unselbständigen Stiftungen	<u>54.140,92</u>	<u>36.630,50</u>
	<u>62.255,65</u>	<u>36.630,50</u>
7. Zuführung		
zur freien Rücklage gem. § 58 Nr. 7a AO	-12.833,96	-9.859,54
zur zweckgebundenen Rücklage	-2.529,41	-16.473,81
zu unselbständigen Stiftungen	<u>-54.840,10</u>	<u>-77.407,41</u>
	<u>-70.203,47</u>	<u>-103.740,76</u>
8. Ergebnis nach Verwendung	0,00	0,00
	::: :::	::: :::

Bericht

über die ordentliche Mitgliederversammlung
anlässlich der 110. Hauptversammlung der
Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V.
am 2. Juni 2011 in der FU Berlin

Tagesordnung

1. Bericht des Vorstandes über das abgelaufene Geschäftsjahr
2. Bericht des Schatzmeisters über den Jahresabschluss und über das laufende Geschäftsjahr
3. Entlastung des Vorstandes
4. Bericht über das europäische Journal PCCP
5. Vornahme der erforderlichen Wahlen
6. Festsetzung des Jahresbeitrages
7. Beschluss über Ort und Zeit der nächsten Hauptversammlungen
8. Beschluss über eingegangene Anträge
9. Verschiedenes

Beginn: 15:00 Uhr
Ende: 15:55 Uhr
Teilnehmer: 40 Mitglieder

Der 1. Vorsitzende der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie (DBG), Prof. Dr. Martin Quack (Zürich), begrüßte die Teilnehmer, dankte dem Organisator der Bunsentagung 2011, Prof. Dr. Rühl, und leitete die Versammlung. Die Mitgliederversammlung wurde im „Bunsen-Magazin Heft 5/10, Seite 211“, ordnungsgemäß angekündigt.

Unter Punkt 9 Verschiedenes wurde folgendes Thema diskutiert: Bericht über das Karriereforum 2011, PD Dr. Wolfgang Bessler, Stuttgart.

TOP 1: Bericht des Vorstandes über das abgelaufene Geschäftsjahr

Allen Anwesenden lag der Bericht des Vorstandes (abgeschlossen am 11. Mai 2011) schriftlich vor. Darin werden aufgeführt:

- Mitgliederstand
- Todesfälle seit der letzten Mitgliederversammlung
- Glückwunschartikeln zum 65. Geburtstag (im Bunsen-Magazin veröffentlicht)
- Zusammensetzung des Vorstandes und des Ständigen Ausschusses im Jahr 2010
- Mitglieder der Preiskuratorien Nernst-Haber-Bodenstein Preis und van't Hoff Preis, der Themen- und der Unterrichtskommission
- Redaktion Bunsen-Magazin und PCCP Ownership Board
- Geschäftsführung
- Mitgliedsbeiträge
- Einnahmen- und Ausgabenrechnung sowie Vermögensübersicht für 2010

Der erste Vorsitzende Prof. Dr. Martin Quack berichtete über die Entwicklung der DBG:

Für das Karriereforum 2011 liegen ca. 170 Anmeldungen vor (siehe auch Punkt 9: Verschiedenes).

Ein Industrie-Symposium wird parallel zu den Vorträgen der Bunsentagung organisiert.

TOP 2: Bericht des Schatzmeisters

Eine Übersicht über die Einnahmen- und Ausgabenrechnung 2010, die Vermögensübersicht 2010 sowie die jeweiligen Vergleichszahlen aus dem Vorjahr lagen den Anwesenden gemeinsam mit dem Bericht des Vorstandes vor. Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Grünbein berichtete, dass die Vermögenslage der DBG weiterhin stabil sei, bei leicht sinkenden Mitgliederzahlen.

I. Ideeller Bereich

Die Einnahmen für 2010 liegen mit rund 143.000 € unter denen des Vorjahres, die Ausgaben ca. 8 % über den Ausgaben des Vorjahres.

II. Vermögensverwaltung

Aus der Vermögensverwaltung floss der Gesellschaft 2010 im Saldo ein Überschuss in Höhe von rund 25.000 € zu. Dieser lag unter dem des Vorjahres.

III. Einnahmen und Ausgaben von Zweckbetrieben und wirtschaftlichen Geschäftsbetrieben

In der Abrechnung wird wie in den Vorjahren zwischen wissenschaftlichen Tagungen und anderen Veranstaltungen, darunter die prinzipiell umsatzsteuerpflichtigen Rahmenprogramme, unterschieden. Diese beiden Bereiche werden als „Steuerfreie Zweckbetriebe“ bzw. „Steuerpflichtige wirtschaftliche Geschäftsbetriebe“ bezeichnet.

IV. Das Vereinsergebnis ermittelt sich aus den Ergebnissen

- Ideeller Bereich
 - Vermögensverwaltung
 - Steuerbegünstigter Zweckbetrieb und
 - Steuerpflichtiger wirtschaftlicher Geschäftsbetrieb
- und schloss mit einem Guthaben von rund 7.000 € ab.

V. Vermögensübersicht zum 31.12.2010

Die Finanzanlagen der DBG beliefen sich zum Stichtag 31.12.2010 auf rund 1.186.000 €, im Vorjahr auf ca. 1.182.000 € bezogen auf die Anschaffungswerte.

Im Vorjahr wurde von einem Risiko-Anteil von 180.000 € als Folge der globalen Finanzkrise ausgegangen. Ein Teil dieses Risikos trat in 2010 ein, es wurde ein Verlust von 62.800 € realisiert.

Freie und zweckgebundene Rücklagen sind in 2010 ebenso gestiegen, wie die Vermögen der unselbständigen Stiftungen, mit denen Stipendien und Auszeichnungen finanziert werden.

Aus den Erträgen der angelegten Mittel der unselbständigen Stiftungen und aus Zustiftungen wurden in 2010 54.840,10 € dem Vermögen der unselbständigen Stiftungen zugeführt, bei einer Entnahme von 54.140,92 €. Es ergibt sich eine Erhöhung der Mittel der unselbständigen Stiftungen auf rund 841,6 T€.

Die sieben unselbständigen Stiftungen betreffende Kapitalausstattung setzt sich wie folgt zusammen (Angaben in T€):

	2010	2009
- von Böttinger-Stiftung	34,5	40,6
- Robert-Bunsen-Stiftung	284,6	298,5
- Bonhoeffer-Eucken-Scheibe-Vorlesung	88,8	91,5
- Leo-Gans-Cassella-Stiftung	74,7	79,6
- Hellmann-Fonds	59,4	42,9
- van't Hoff Stiftung	278,5	267,2
- Alfred-Saupe- Stiftung	20,8	20,4
Summe:	841,6	840,9

Die Summe der Mitgliedsbeiträge ist im Vergleich zu 2009, dem Trend der letzten Jahre folgend, rückläufig um 1,3 %. Die Altersstruktur der Mitglieder weist ein deutliches Maximum bei den 40 – 50-Jährigen auf. Erfreulich ist auch die große Zahl der 25 – 40-Jährigen. Es bleibt die eindringliche Aufforderung zur Werbung neuer Mitglieder, zu weiterhin höchster Sparsamkeit und zur Steigerung der Zahl der wissenschaftlichen Beiträge in PCCP.

Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Grünbein schloss seinen Bericht mit dem Hinweis auf die Unterstützung der Vorbereitungen der Berichtsprüfung durch die DECHEMA und die Prüfung selbst durch die Prof. Dr. K. Schwantag - Dr. P. Kraushaar GmbH, Wirtschaftsprüfungsgesellschaft, Frankfurt, die den uneingeschränkten Bestätigungsvermerk erteilt hat. Die Unterlagen wurden den ehrenamtlichen Rechnungsprüfern, Dr. Marcell Peuckert (Frankfurt) und Prof. Dr. Bernd Brutschy (Frankfurt) zur Verfügung gestellt, die die Ordnungsmäßigkeit bestätigten. Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Grünbein dankte diesen Herren ebenso wie Dr. Andreas Förster für die verantwortungsvolle und sparsame Geschäftsführung bis 31.12.2010, Herrn Dr. Florian Ausfelder für die Zeit danach sowie Frau Erika Wöhler für den gesamten Zeitraum. Seinen Dank richtete er ebenfalls an Prof. Dr. Rolf Schäfer als kommunikative Brücke zu den Mitgliedern, an die DECHEMA, Frau Heike Geiling, für die Unterstützung zur Durchführung der Bunsentagungen und an PCCP.

TOP 3: Entlastung des Vorstandes

Der Antrag auf Entlastung wurde von Prof. Dr. Jürgen Troe (Göttingen) gestellt und einstimmig bei Enthaltung der Vorstandsmitglieder und des Geschäftsführers angenommen. Damit sind Vorstand und Geschäftsführung entlastet.

TOP 4: Bericht über das europäische Journal PCCP

Das wissenschaftliche Journal Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP) wird von insgesamt 17 chemisch-wissenschaftlichen Gesellschaften getragen. Philip Earis (Cambridge) berichtete, dass der wissenschaftliche Erfolg ausgezeichnet ist und der Impact Factor mit 4,16 sich auf Rekordhöhe bewegt. Im Editorial Board ist die Bunsen-Gesellschaft durch M. Martin (Aachen) und M. Suhm (Göttingen) vertreten. Wie bereits bei vorherigen Bunsentagungen wurde von PCCP auch für die Bunsentagung in Berlin wieder ein Themed Issue aufgelegt und drei Posterpreise in Höhe von je 250 € zur Verfügung gestellt.

TOP 5: Vornahme der erforderlichen Wahlen

Ständiger Ausschuss Amtsperiode 2012/2013
 Frau Prof. Katharina Al-Shamery und Herr Prof. Wolfgang Domcke haben ihre maximale Amtszeit erreicht und werden deshalb Ende 2011 aus dem Ständigen Ausschuss ausscheiden. Prof. Martin Quack dankt ihnen sehr herzlich für ihre Unterstützung und viele wichtige Beiträge.

Zur Wiederwahl für zwei weitere Jahre standen an:
 Dr. Johanna Kowol-Santen, Bonn
 Prof. Dr. Wolfgang Kautek, Wien
 Zur Neuwahl hat der Ständige Ausschuss folgenden Kandidatenvorschlag ausgewählt:
 Prof. Dr. Monika Schönhoff, Münster

Die Zustimmung aller Kandidatinnen und Kandidaten liegt vor. Sie wurden alle einstimmig in offener Abstimmung für Wiederwahl oder Neuwahl ohne Gegenstimme unter Enthaltung der zur Wahl stehenden Person gewählt.

TOP 6: Festsetzung des Jahresbeitrages

Auf Vorschlag von Vorstand und Ständigem Ausschuss beschloss die Mitgliederversammlung einstimmig, die jährlichen Mitgliedsbeiträge ab 2012 wie folgt anzuheben:

Ordentliche Mitglieder	120 €
Doppelmitglieder	90 €
Mitglieder bis 3 Jahre nach Studienabschluss	75 €
studentische persönliche Mitglieder	30 €
nichtpersönliche Mitglieder	580 €

Ein reduzierter Beitrag für Senioren wurde nicht beschlossen.

TOP 7: Beschluss über Ort und Zeit der nächsten Hauptversammlungen

Die Orte für die Bunsentagungen 2012 (Leipzig) und 2013 (Karlsruhe) wurden bereits beschlossen. Tagungsorte für folgende Bunsentagungen wurden noch nicht vorgeschlagen.

TOP 8: Beschluss über eingegangene Anträge

Es lagen keine Anträge vor.

TOP 9: Verschiedenes

Bericht über das Karriereforum: "Karriereplanung von promovierten Physikochemikern". Unter diesem Thema fand die Veranstaltung in 2011 statt zu der sich 170 Teilnehmer angemeldet haben. Dr. Wolfgang Bessler (Universität Stuttgart) berichtete über die Ergebnisse der Veranstaltung und lädt zur konstituierenden Sitzung der Arbeitsgemeinschaft Bunsen-Karriereforum, die am nächsten Tag, Freitag, stattfindet, ein.

Das Karriereforum ist ein Informations- und Diskussionsforum für junge Physikochemiker/innen, die sich auf akademischen und nicht-akademischen Karrierewegen zwischen Promotion und Leitungsfunktionen an Hochschulen und Industrie befinden.

Der Erste Vorsitzende dankte allen Mitgliedern und schloss die Versammlung um 15.55 Uhr.

Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e. V.

Erster Vorsitzender

Geschäftsführer




Prof. Dr. Dr. h. c. Martin Quack

Dr. Florian Ausfelder

Frankfurt am Main, im Juni 2011

Die nächste Mitgliederversammlung findet am 17. Mai 2012 in Leipzig statt.

Einladung zur DBG-Mitgliederversammlung

gemäß § 10 der DBG-Satzung für

Donnerstag, 17. Mai 2012, 15.00 Uhr

Die Mitgliederversammlung findet in der
Universität Leipzig, 04103 Leipzig, statt.

Tagesordnung

1. Bericht des Vorstandes über das abgelaufene Geschäftsjahr
2. Bericht des Schatzmeisters über den Jahresabschluss und über das laufende Geschäftsjahr
3. Entlastung des Vorstandes
4. Bericht über das europäische Journal PCCP
5. Vornahme der erforderlichen Wahlen
6. Festsetzung des Jahresbeitrages
7. Beschluss über Ort und Zeit der nächsten Hauptversammlungen
8. Beschluss über eingegangene Anträge
9. Verschiedenes

Anträge aus der Mitgliedschaft (TOP 8) senden Sie bitte mit entsprechender Begründung bis spätestens

15. April 2012

an

Erika Wöhler (woehler@bunsen.de),
DBG-Geschäftsstelle,
Theodor-Heuss-Allee 25,
60486 Frankfurt am Main.

Deutsche Bunsen-Gesellschaft für
Physikalische Chemie e. V.
Der Erste Vorsitzende
Martin Quack

BUNSENTAGUNG 2012

111. HAUPTVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN BUNSEN- GESELLSCHAFT FÜR PHYSIKALISCHE CHEMIE E.V.

AM 17. - 19. MAI 2012 AN DER UNIVERSITÄT LEIPZIG

HAUPTTHEMA: IONISCHE FLÜSSIGKEITEN

Ionische Flüssigkeiten sind eine international mittlerweile gut akzeptierte Klasse von Lösemitteln mit einigen ungewöhnlichen Eigenschaften. Im weiteren Sinne versteht man darunter alle Flüssigkeiten, die nur aus Ionen bestehen, also auch die schon lange bekannten Hochtemperatursalzschnmelzen, im engeren Sinne solche, die sich gemäß der Einschätzung von Paul Walden zwar ähnlich wie Hochtemperatursalzschnmelzen verhalten aber Schmelzpunkte um oder unter 100 °C besitzen. Ihre besonderen Eigenschaften ermöglichen vielfältige Untersuchungen in der Physikalischen Chemie sowie neuartige industrielle Prozesse.

Einführungsvortrag

Kenneth Seddon, The Queen's University of Belfast/UK

Plenarredner

Masayoshi Watanabe, Yokohama National University/J

Douglas MacFarlane, Monash University, Victoria/AUS

Cinzia Chiappe, University of Pisa/I

Thomas Schubert, IoLITec GmbH, Heilbronn/D

Peter Schwab, EVONIK Goldschmidt GmbH, Essen/D

Programmkomitee

Bernd Abel, Leipzig/D

Markus Antonietti, Golm/D

Christian Eggeling, Göttingen/D

Frank Endres, Clausthal-Zellerfeld/D

Jürgen Gauß, Mainz/D

Barbara Kirchner, Leipzig/D

Peter Wasserscheid, Erlangen/D

Melanie Schnell, Hamburg/D

Martin Quack, Zürich/CH

Wolfgang von Rybinski, Düsseldorf/D

Rolf Schäfer, Darmstadt/D

Lokale Organisation

Bernd Abel, Leipzig/D

Reinhard Denecke, Leipzig/D

Barbara Kirchner, Leipzig/D



www.bunsen.de

UNIVERSITÄT LEIPZIG

INHALT HEFT 6 – 7 (2011)

- O. Ponta, L. Baia, M. Baia, S. Simon
Vibrational Spectroscopic Studies of Germanium-High Bismuthate Glasses and Vitroceramics 647
- X. Li, S. Liu, W. Li, Y. Mo, J. Hu
SERS Study and DFT Simulation of the Interaction of Cytosine with Copper Electrode 661
- S. Mishra, T. Meyer, J. Popp, R. K. Singh
Precise Analysis of Small Wavenumber Shift of Pyridine on Dilution with H₂O and D₂O Using RDS Technique 673
- A. Bröermann, S. Schlücker
Deep UV Resonance Raman Spectroscopy with a Tunable 4 kHz Nanosecond Solid-State Laser and a 1 mL Circulating Free-Flow System 691
- A. Schubert, V. Engel
Interference Effects in Vibronic 2D-Spectra of Diatomic Molecules 703
- K. H. Fischer, I. Fischer, A. Bodi
Threshold Photoelectron Spectrum of Isolated NTCDA 715
- S. Singh, D. K. Singh, S. K. Srivastava, B. P. Asthana
Study of Hydrogen Bonding Patterns of a Pharmaceutically Active Drug Molecule Paraldehyde: a Raman and DFT Study 723
- J. Meyer-Ilse, D. Akimov, B. Dietzek
Femtosecond Coherence Spectroscopic Study of the Onset of Chemical Denaturation of Myoglobin upon Addition of Minor Amounts of Urea 741
- T. Dörfer, T. Bocklitz, N. Tarcea, M. Schmitt, J. Popp
Checking and Improving Calibration of Raman Spectra using Chemometric Approaches 753
- J. Shen, A. Lerchl, P. Donfack, J. Hu, A. Materny
The Influence of Short-Day Photoperiods on Bone Composition of Hamsters: a Raman Spectroscopic Investigation 765
- S.-B. Li, L.-M. Li, J. R. Anema, J.-F. Li, Z.-L. Yang, B. Ren, J.-J. Sun, Z.-Q. Tian
Shell-Isolated Nanoparticle-Enhanced Raman Spectroscopy (SHINERS) Based on Gold-Core Silica-Shell Nanorods 775
- D. Singh, J. Popp, R. K. Singh
Fourier Transform Raman and DFT Study of Blue Shift C–H Stretching Vibration of Diazines on Hydrogen Bond Formation 785

HORST HIPPLER ZUM 65. GEBURTSTAG



Zum 23. September 2011 gratuliert die Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie Herrn Professor Dr. Dr. h.c. Horst Hippler zum 65. Geburtstag.

Gut eingefangen hat ihn das Foto. Es zeigt einen beeindruckenden, in sich ruhenden und auch angesichts der Würde und Bürden des Amtes verschmitzt lächelnden Menschen. Angekommen dort, wo er richtig ist – als Präsident einer der aufregendsten deutschen „Bildungs-Anstalten“, um das Wort von Friedrich Nietzsche¹ zu wählen. Die positive Platzierung in der dritten Linie der Exzellenzinitiative gleich im ersten Anlauf ist in seiner Amtszeit als Rektor der TH Karlsruhe gelungen, und das einzigartige KIT-Experiment, Fusion einer Universität mit einer Großforschungseinrichtung, ist das vielleicht markanteste Ereignis und bisheriger Kulminationspunkt seiner Präsidentschaft. Exzellenz auf internationalem Niveau zu beweisen ist eine mächtige Aufgabe, und es gibt auf diesem Weg auch für den Präsidenten noch viel zu tun.

Fast 140 Jahre ist sie alt, die Fünfte Rede Nietzsches vor der Akademischen Gesellschaft in Basel, die dem „forschenden Ausländer“ in Deutschland den sprechenden und lesenden Professor und den hörenden Studierenden gegenüberstellt¹: „Wenn ein Ausländer unser Universitätswesen kennenlernen will, so fragt er zuerst mit Nachdruck: ›Wie hängt bei euch der Student mit der Universität zusammen?‹ Wir antworten: ›Durch das Ohr, als Hörer.‹ Der Ausländer erstaunt. ›Nur durch das Ohr?‹ fragt er nochmals. ›Nur durch das Ohr,‹ antworten wir nochmals. Der Student hört. Wenn er spricht, wenn er sieht, wenn er gesellig ist, wenn er Künste treibt, kurz, wenn er lebt, ist er selbständig, das heißt unabhängig von der Bildungsanstalt. ... Der Lehrer aber spricht zu diesen hörenden Studenten. Was er sonst denkt und tut, ist durch eine ungeheure Kluft

von der Wahrnehmung des Studenten abgeschieden. Häufig liest der Professor, während er spricht. ... Wir, denen es einmal gestattet sein muß, dieses überraschende Phänomen nur als Bildungsinstitution zu berücksichtigen, berichten also dem forschenden Ausländer, daß das, was auf unsern Universitäten Bildung ist, aus dem Munde zum Ohre geht,...“.

Von den vorgestrigen Bildungs-Anstalten zur international auf höchstem Niveau sichtbaren Forschungsuniversität ist es ein langer Weg, und wer hier geschmunzelt hat, kann sich eines gewissen Bekanntheitsgefühls mit traditionellen Unterweisungsritualen nicht erwehren. Erklärtes Ziel des KIT-Präsidiums ist – wie auch in Universitäten anderenorts – frühes wissenschaftlich selbstständiges Arbeiten der Studierenden. „Eine neue Qualität“ soll die Ausbildung in dieser neuartigen Organisation erhalten, indem die Wissenschaftler aus den Großforschungsprogrammen ebenfalls in die Lehre integriert sind². Horst Hippler steht für solche Qualität auch als Botschafter und Anwalt in Organisationen und Leitungsgremien im Wort, so als Vorsitzender der Landesrektorenkonferenz Baden-Württemberg und der Arbeitsgemeinschaft Technischer Universitäten ARGE TU/TH sowie als Präsident von EUCOR, der European Confederation of the Upper-Rhine Universities. In etlichen weiteren, nationalen wie internationalen, Gremien ist Horst Hippler engagiert. Festzustellen ist dabei eine besondere Affinität zu Frankreich, wo er auch (in Lille) als Gastpro-

¹ Friedrich Nietzsche, Über die Zukunft unserer Bildungs-Anstalten, Fünfter Vortrag, gehalten am 23. März 1872; aus Friedrich Nietzsche: Werke in drei Bänden. München 1954, Band 3, S. 247-263; s. auch <http://www.zeno.org/nid/20009257667>

² <http://www.kit.edu>

fessor tätig war. So war er Mitglied im Koordinationskomitee der Deutsch-Französischen Hochschule und ist in den Conseils Scientifiques mehrerer französischer Universitäten und Stiftungen aktiv. Für sein besonderes wissenschaftliches Engagement in Frankreich wurde er 2007 ausgezeichnet als Commandeur dans l'Ordre des Palmes Académiques und im Mai 2011 mit der Verleihung eines Ehrendoktorats der École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers (ENSAM) im Hochschulverbund ParisTech gewürdigt.

Die glanzvolle Karriere in der Leitung einer der prägnantesten deutschen Wissenschaftseinrichtungen fußt auf einer exzellenten Reputation als Wissenschaftler. Horst Hippler studierte 1966-70 Physik in Göttingen und promovierte 1974 an der Ecole Polytechnique Fédérale in Lausanne. Forschungsaufenthalte in den USA bei IBM in San Jose und am Risø-Nationallabor in Roskilde, Dänemark, schlossen sich an. Als wissenschaftlicher Assistent kehrte Horst Hippler 1977 nach Göttingen zurück, wo er sich 1988 am Institut für Physikalische Chemie habilitierte; 1993 wurde er dort zum außerplanmäßigen Professor ernannt. Im gleichen Jahr folgte er dem Ruf als Ordinarius für Physikalische Chemie an die TH Karlsruhe.

Horst Hippler ist Autor von etwa 160 wissenschaftlichen Publikationen, zumeist in den international angesehensten Journalen der Physikalischen Chemie. Auch in den Berichten der Bunsen-Gesellschaft ist er mit zahlreichen Beiträgen vertreten. Langjährige Zusammenarbeit verbindet ihn mit Jürgen Troe in Göttingen sowie mit den Karlsruher Kollegen, insbesondere Matthias Olzmann, im SFB 551 „Kohlenstoff aus der Gasphase“, dessen stellvertretender Sprecher er 1998 bis 2002 war. Anspruchsvolle reaktionskinetische Untersuchungen und bahnbrechende Beiträge zur Elementarkinetik von Verbrennungssystemen sind mit seinem Namen verbunden. Dabei wusste Horst Hippler stets physikalische Methoden auf höchstem Niveau mit technisch diffizilen Randbedingungen zu verknüpfen. Die Ergebnisse spiegeln demgemäß fundamentales Verständnis gepaart mit experimenteller Kunst und vorbildlicher Präzision wider. Begonnen hat seine eigene wissenschaftliche Laufbahn mit Rekombinationsexperimenten an Halogenatomen in überkritischen Gasen, heute Lehrbuchbeispiele, sowie an Ozon. Arbeiten bei Drücken von bis zu etwa 10 kbar, so wird berichtet, fanden zunächst räumlich noch etwas provisorisch in Schweizer Armeebarracken in Lausanne statt und wurden später in Göttingen fortgesetzt. Unerschrockenheit bei der Wahl der Systeme und experimentellen Bedingungen waren hier Voraussetzungen des Erfolgs.

Als zweites Arbeitsthema kamen in Göttingen zeitaufgelöste Untersuchungen des Energietransfers hochangeregter vielatomiger Moleküle hinzu. Hier wurde Laserblitzlichtanregung verwendet, gefolgt von interner Konversion, und die Abfrage erfolgte auf der längerwelligen Flanke des UV-Spektrums. Durch Verknüpfung mit Stoßwellenexperimenten wurden so direkte Aussagen zum Energietransfer möglich. Durchbrüche erfolgten bei der Bestimmung der Lebensdauern energiewahliger vielatomiger Moleküle, die unimolekular dissoziieren oder isomerisieren. So wurden zum Beispiel Toluol, Cycloheptatriene und Azulen eingehend untersucht und direkte Beob-

achtungen des Bindungsbruchs und der Stoßdesaktivierung kommuniziert. Multiphotonenanregung im infraroten Spektralbereich stellte eine methodisch wertvolle Ergänzung dar.

Dynamische Untersuchungen unter Einsatz von Kurzpuls-Spektroskopie und Bestimmung kinetischer Reaktionsabläufe in Stoßwellenrohren bildeten Anknüpfungspunkte für die Arbeiten in Karlsruhe, die sich durch vielseitige Interessen und Kooperationen auszeichnen. So wurden zum Beispiel Solvationsreaktionen von Elektronen ebenso untersucht wie Schlüsselreaktionen in Verbrennungssystemen. Insbesondere Beiträge zur Reaktionskinetik von Alkoxy-Radikalen sowie von Methyl, Benzyl oder Propargyl lieferten wichtige Bausteine für die Modellvalidierung und die detailgetreue Vorhersage der Schadstoffbildungswege in Flammen. Als ein methodisches Glanzstück sei die Arbeit zur Propargyl-Rekombination herausgegriffen, die einen signifikanten Bildungspfad zu Benzol in Flammen darstellt und als entscheidende Vorläuferreaktion bei der Entstehung von Ruß gilt. Der „richtige“ Wert des Geschwindigkeitskoeffizienten für diese so eminent wichtige Reaktion war jahrelang zwischen Experimentatoren und Theoretikern umkämpft, bis die Karlsruher Arbeiten einen neuen Standard setzten. Reaktionskinetik und -dynamik bei hohen Temperaturen oder Drücken unter Einsatz anspruchsvoller spektroskopischer Methoden bleibt ein beständiges Leitmotiv im Werk von Horst Hippler, bis hin zu in jüngster Zeit erfolgten Untersuchungen an Kohlenstoffclustern und Nanoröhren.

Für sein wissenschaftliches Werk erhielt Horst Hippler zahlreiche Ehrungen, wovon neben den bereits erwähnten hier die Polanyi Medal der Faraday Division of the Royal Society of Chemistry sowie seine Mitgliedschaft in der Deutschen Akademie der Technikwissenschaften, acatech, und die 2011 erfolgte Aufnahme in die Akademie der Wissenschaften zu Göttingen genannt sein sollen.

Man vermutet, dass ein so aktives Berufsleben nicht viel Zeit für Privates lässt – aber auch da ist Horst Hippler konsequent. Gern genießt er mit seiner Frau Hedda die kulinarische Vielfalt in der Region und in Frankreich. Er hat viele, langjährige Freunde im In- und Ausland, die er mit Frau und Tochter Nina regelmäßig besucht. Erwähnenswert ist auch seine Liebe zum nassen Element. Als aktiver Wettkampfschwimmer brachte Horst Hippler es bis zum Finale um die deutsche Meisterschaft, und etliche Jahre war er Mitglied einer Wasserballmannschaft. Es wird berichtet, dass man wichtige Dienstgeschäfte mit dem Rektor der TH Karlsruhe gut in aller Frühe im Schwimmbecken erledigen konnte. Biss und Ehrgeiz des Einzelkämpfers sowie Teamgeist des Mannschaftssportlers sind Eigenschaften, die Horst Hippler exzellent verbindet, und die ihn sicher noch manche schwierige Strecke überwinden lassen werden.

Wir wünschen Horst Hippler weiterhin Urteilskraft, Entschlossenheit und Stehvermögen bei der Verwirklichung seiner Ziele und Zeit für die wichtigen Dinge im Leben!

*Katharina Kohse-Höinghaus
Jürgen Troe, Klaus Luther*

**EHRUNGEN/PREISE/
AUSZEICHNUNGEN**

Hans-Joachim **Freund**, Prof. Dr., Direktor am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin, Mitglied der Bunsen-Gesellschaft, erhält den Karl-Ziegler-Preis der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) für seine herausragenden Arbeiten zum Verständnis der molekularen Grundlagen der heterogenen Katalyse, einem Gebiet, das eng mit dem Namen Zieglers verknüpft ist.

Andreas **Köhn**, PD Dr., Institut für Physikalische Chemie der Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Mitglied der Bunsen-Gesellschaft und der AGTC, erhielt die Medaille der International Academy of Quantum Molecular Science für seine richtungsweisenden Beiträge auf dem Gebiet der explizit-korrelierten und Multireferenz-Coupled-Cluster-Theorie.

Ferdi **Schüth**, Prof. Dr., Direktor am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim, Mitglied der Bunsen-Gesellschaft, erhielt den Wöhler-Preis der GDCh für Ressourcenschonende Prozesse.

Helmut **Schwarz**, Prof. Dr., Institut für Chemie der TU Berlin, Mitglied der Bunsen-Gesellschaft, erhielt die Wissenschaftsmedaille der Tschechischen Akademie der Wissenschaften.

Daniel **Sebastiani**, Priv.-Doz. Dr., Freie Universität Berlin, Institut für Physik, Mitglied der Bunsen-Gesellschaft, erhielt den Hellmann Preis der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie (AGTC).

**RUFE, BERUFUNGEN,
ERNENNUNGEN, WAHLEN**

Manfred M. **Kappes**, Prof. Dr., Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Physikalische Chemie, Mitglied der Bunsen-Gesellschaft, wurde in die Leopoldina, Nationale Akademie der Wissenschaft, Sektion Chemie, aufgenommen.

**GEBURTSTAGE IM
SEPTEMBER 2011**

Herbert **Vogel**, Prof. Dr.-Ing., Darmstadt:
60. Geburtstag am 28.09.

Wolfgang **Schmickler**, Prof. Dr., Ulm:
65. Geburtstag am 11.09.

Horst **Hippler**, Prof. Dr., Karlsruhe:
65. Geburtstag am 23.09.

Rüdiger **Szargan**, Prof. Dr., Leipzig:
70. Geburtstag am 11.09.

Reynir **Vilhjalmsson**, Dr., Münster:
70. Geburtstag am 30.09.

Nils **Jaeger**, Prof. Dr., Bremen:
75. Geburtstag am 29.09.36

Horst **Stegemeyer**, Prof. Dr., Münstertal:
80. Geburtstag am 09.09.

Felix **Schreiner**, Dr., Mokena, IL 60448:
80. Geburtstag am 28.09.

**GEBURTSTAGE IM
OKTOBER 2011**

Michael R. **Schröter**, Dr., Frankfurt:
60. Geburtstag am 09.10.

Erminald **Bertel**, Dr., Innsbruck:
60. Geburtstag am 14.10.

Srulek **Cederbaum**, Prof., Dossenheim:
65. Geburtstag am 26.10.

Harald **Fischbach**, Dr., Osterode:
70. Geburtstag am 07.10.

Rüdiger N. **Lichtenthaler**, Prof. Dr., Heidelberg:
70. Geburtstag am 31.10.

Hans **Sillescu**, Prof. Dr., Mainz:
75. Geburtstag am 05.10.

Gerhard **Ertl**, Prof. Dr., Berlin:
75. Geburtstag am 10.10.

Wolfgang **Haase**, Prof. Dr., Darmstadt:
75. Geburtstag am 25.10.

**GEBURTSTAGE IM
NOVEMBER 2011**

Daniel **Homolka**, Dr., Frankfurt:
60. Geburtstag am 09.11.

Georg **Rößling**, Dr., Glienicke:
60. Geburtstag am 16.11.

Peter **Herbrechtsmeier** Dr., Großostheim:
65. Geburtstag am 10.11.

Emmerich **Wilhelm**, Prof. Dr., Wien:
70. Geburtstag am 25.11.

Dieter **Neuschütz**, Prof. Dr.-Ing., Herzogenrath:
75. Geburtstag am 18.11.

Karl-Heinz **Dücker**, Dr., Aachen:
80. Geburtstag am 08.11.

Hans-Georg **Kuball**, Prof. Dr., Stelzenberg:
80. Geburtstag am 25.11.

Harald **Cherdrón**, Prof. Dr., Wiesbaden:
80. Geburtstag am 30.11.

**NEUANMELDUNGEN ZUR
MITGLIEDSCHAFT**

Prof. Dr. rer. nat. Ravi Xavier Fernandes, RWTH Aachen University, Physico-Chemical, Fundamentals of Combustion, Templergraben 55, 52056 Aachen

Eva-Kristina Fleischmann, Universität Mainz, Institut für organische Chemie, Duesbergweg 10-14, 55128 Mainz (DFKG)

Prof. Dr. Peer Kirsch, Merck KGaA, PM-A Emerging Technologies Germany, Frankfurter Str. 250, 64293 Darmstadt (DFKG)

M. Sc. Hsin-Ling Liang,
Johannes Gutenberg Universität Mainz,
Duesbergweg 10-14, 55099 Mainz (DFKG)

Richard Rix,
Johannes Gutenberg-Universität Mainz,
Institut für Organische Chemie,
Duesbergweg 10-14, 55128 Mainz (DFKG)

Mats Simmermacher,
Justus-Liebig-Universität Gießen,
Heinrich-Buff-Ring 58, 35392 Gießen

Daniel Wenzlik,
Johannes Gutenberg-Universität Mainz,
Duesbergweg 10-14, 55128 Mainz (DFKG)

VERANSTALTUNGEN/EVENTS

Tagungen der Deutschen Bunsen-Gesellschaft

Bunsentagung 2012

17.-19.05.2012, Leipzig

Thema: **Ionische Flüssigkeiten**

Wissenschaftliche Organisation: F. Endres (Clausthal-Zellerfeld), P. Wasserscheid (Erlangen), M. Antonietti (Golm)
Lokale Organisation: B. Abel, R. Denecke, B. Kirchner (Leipzig)

Bunsentagung 2013

09.-11.05.2013, Karlsruhe

Thema: **(Arbeitstitel) Theoretical Spectroscopy**

Wissenschaftliche Organisation: W. Domcke (TU München), J. Gauß (Uni Mainz), M. Kappes und W. Klopfer (KIT)

Allgemeine Informationen zu den Bunsentagungen: www.bunsen.de oder Geschäftsstelle der Deutschen Bunsen-Gesellschaft

Internationale Diskussionstagungen

SimMolMod 2011

Advances in Molecular Modeling of Thermophysical Properties – Science meets Engineering

Gemeinsam veranstaltet von:
Deutsche Bunsen-Gesellschaft e.V. und DECHEMA e.V.

15./16.09.2011, TU Dortmund

Organisation: H. Haase (TU Kaiserslautern); C. Holm (Universität Stuttgart); B. Kirchner (Universität Leipzig); F. Müller-Plathe (TU-Darmstadt); G. Sadowski (TU Dortmund); J. Vrabec (Universität Paderborn)

Information: <http://events.dechema.de/simmolmod2011.html>

Photokatalyse

13./14.10.2011 Universität Heidelberg,

Hörsaalgebäude Chemie

Organisation: M. Grunze, M. Motzkus (Heidelberg)

Information: http://www.uni-heidelberg.de/dbg_2011/events.html

Bunsen Kolloquien

Robert Bunsen's 200th birthday:

Frontiers in Physical Chemistry

12.10.2011, Heidelberg

Organisation: M. Grunze, M. Motzkus (Heidelberg)

Information: http://www.uni-heidelberg.de/dbg_2011/events.html

Im Anschluss an das Bunsen-Kolloquium wird in einem Festakt im Rahmen des GDCh-Programms „Historische Stätten der Chemie“ eine Gedenktafel am alten chemischen Laboratorium von Robert Bunsen enthüllt. Nähere Informationen hierzu erhalten Sie durch Frau Renate Kießling (r.kiessling@gdch.de).

Diffusion in Solids – Methods, Models, and Materials

On the occasion of the 65th birthday of Paul Heitjans

27./28.10.2011, Hannover

Organization: M. Wilkening (Hannover), M. Martin (Aachen)

Information: www.bunsen.pci.uni-hannover.de

WEITERE VERANSTALTUNGEN

Thermosets 2011

21.09.2011 - 23.09.2011, Berlin,

Novotel Berlin Am Tiergarten

Organization: Fraunhofer Research Institution for Polymeric Materials and Composites PYCO, Teltow (Germany)

Information: <http://thermosets.de/>

23. Internationale Flüssigkristallkonferenz ILCC 2012

19.-24.08.2012, Mainz

Organisation: Prof. Dr. Rudolf Zentel, Prof. Dr. Klaus Müllen, Prof. Dr. Harald Pleiner (Mainz)

Information: <http://www-e.uni-magdeburg.de/liquidcr/conferences.shtml>

ANKÜNDIGUNGEN

Die Wilhelm-Jost-Gedächtnisvorlesung 2011 der Akademie der Wissenschaften und der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e. V. wurde verliehen an:

Prof. Dr. Götz Eckold
Georg-August-Universität Göttingen
Institut für Physikalische Chemie
Tammannstr. 6
37077 Göttingen

Prof. Dr. Götz Eckold wird seine Vorlesungen an folgenden Tagen/Orten halten:

Mittwoch,	den 26.10.2011 in Darmstadt
Donnerstag,	den 27.10.2011 in Marburg
Mittwoch,	den 02.11.2011 in Halle
Donnerstag,	den 03.11.2011 in Leipzig
Mittwoch,	den 09.11.2011 in Berlin
Donnerstag,	den 10.11.2011 in Hannover
Donnerstag,	den 17.11.2011 in Münster
Donnerstag,	den 01.12.2011 in Göttingen

Sein Vortragstitel lautet:

„Kinetik und Mechanismen von Selbstorganisationsprozessen in Festkörpern“.

Arbeitsgemeinschaft Bunsen-Karriereforum

Liebe Kolleginnen und Kollegen,
auf der diesjährigen 110. Bunsentagung in Berlin hat sich die Arbeitsgemeinschaft Bunsen-Karriereforum konstituiert. Die Arbeitsgemeinschaft ist die Nachwuchsförderorganisation der Bunsen-Gesellschaft. Sie soll die Kommunikation fördern sowie die Interessen von jungen Physikochemiker/innen innerhalb der Bunsen-Gesellschaft und nach außen hin vertreten. Ziel ist es auch, junge Mitglieder bei Planung und Aufbau ihrer Karrieren im akademischen und industriellen Umfeld zu unterstützen. An der konstituierenden Sitzung in Berlin waren 20 Nachwuchswissenschaftler/innen beteiligt.

In den vergangenen Jahren, seit 2007, hat sich ein Kern engagierter Nachwuchswissenschaftler/innen innerhalb der Bunsen-Gesellschaft zusammengefunden und das jeweils im Rahmen der Bunsentagung stattfindende Symposium „Karriereforum“ organisiert. Diese Aufgabe wurde durch die Gründung der AG Bunsen-Karriereforum nun verstetigt. Weiter im Fokus der AG sind die Ausarbeitung von Positionspapieren zu Karrierefragen, die gegenseitige Information über Veranstaltungen und Veröffentlichungen, das Engagement in den Gremien der Bunsen-Gesellschaft und andere für junge Wissenschaftler/innen relevante Aspekte. Diskutiert wird auch ein Mentoring-Programm. Ein Email-Verteiler informiert alle Mitglieder der AG gezielt über die Aktivitäten.

Mit dieser Nachricht möchten wir alle Nachwuchswissenschaftler/innen in der Bunsen-Gesellschaft herzlich einladen, Mitglied der AG Bunsen-Karriereforum zu werden und so zu einem aktiven, lebendigen, jungen Netzwerk beizutragen. Die Mitgliedschaft in der AG ist in der Regel auf eine Gesamtdauer von 10 Jahren beschränkt, und es wird kein zusätzlicher Mitgliedsbeitrag erhoben. Für die Anmeldung schicken Sie bitte eine Email an die Bunsen-Geschäftsstelle (woehler@bunsen.de). Für Rückfragen stehen wir natürlich gerne zur Verfügung (karriereforum@bunsen.de),

die AG-Sprecher
Melanie Schnell und Wolfgang Bessler

AUSSCHREIBUNGEN



Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie
awards the

VAN'T HOFF PRIZE



The van't Hoff Prize was established in 2008 by Gerhard Ertl in remembrance of the first Nobel Prize winner in chemistry, Jacobus Henricus van't Hoff. The award consists of a Silver Medal, a Certificate and an amount of € 20.000. It will be presented at the 111th Annual General Meeting of the German Bunsen-Society from 17-19 May 2012 in Leipzig.

The prize will be awarded for outstanding and sustained contributions to the field of Physical Chemistry to an active scientist. Suitable candidates of high international visibility in their research field will be evaluated with respect to scientific quality of their research. There are no restrictions on age, nationality or country of residence, but candidates should preferentially come from a German-speaking region in Europe. Candidates do not need to be members of the DBG.

The merits of a particular candidate should be brought to the attention of the selection panel by means of a nomination sent to the DBG. The nomination should be accompanied by a supporting statement describing fully the outstanding contributions made by the candidate, including biographical details and a list of publications. Self-nominations are not possible.

Nominations should be submitted by **1 October 2011** to

Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e. V.
Erika Wöhler
Theodor-Heuss-Allee 25,
60486 Frankfurt am Main,
Germany

Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e. V.
awards the

NERNST-HABER-BODENSTEIN PRIZE 2012

in memory of Max Bodenstein, Fritz Haber and Walther Nernst. The prize will be presented at the 111th Annual General Meeting of the German Bunsen-Society from 17-19 May 2012 in Leipzig.

The prize will be awarded to a distinguished younger scientist (of up to 40 years of age) for outstanding scientific achievements in the field of physical chemistry. Suitable candidates of international visibility in their research field will be evaluated by a high level expert selection panel with respect to the scientific quality, originality and independence of their research. Candidates should come from a German-speaking region of Europe or work there at the time of their nomination.

Nominations from established scientists in the area of physical chemistry should include a short CV of the candidate, an overview of the candidate's scientific achievements and publications, and a supporting statement.

Nominations should be submitted by **1 October 2011** to

Deutsche Bunsen-Gesellschaft
für Physikalische Chemie e. V.
Erika Wöhler
Theodor-Heuss-Allee 25,
60486 Frankfurt am Main,
Germany

The German Bunsen Society for Physical Chemistry (Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e. V.) and the Ewald Wicke-Foundation (Ewald Wicke-Stiftung) are seeking nominations to award the

EWALD WICKE-PRIZE 2012

in remembrance of Ewald Wicke.

The prize will be presented at the 111th Annual General Meeting of the German Bunsen-Society from 17-19 May 2012 in Leipzig, Germany.

The award will be made to a distinguished younger scientist (of up to 35 years) for outstanding scientific achievements in the area of applied physical chemistry. Suitable candidates will be evaluated with respect to the scientific quality and originality of their research. Candidates should originate from a German speaking region in Europe or work there at the time of their nomination.

Nominations from established scientists in the area of physical chemistry should include a short CV of the candidate, an overview of the candidate's scientific achievements and publications, and a supporting statement.

Nominations should be submitted by **1 October 2011** to

Deutsche Bunsen-Gesellschaft
für Physikalische Chemie e. V.
Erika Wöhler
Theodor-Heuss-Allee 25
60486 Frankfurt am Main
Germany

THEODOR-FÖRSTER-GEDÄCHTNISVORLESUNG

Die Gesellschaft Deutscher Chemiker, vertreten durch den Vorstand der Fachgruppe Photochemie, und die Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie schreiben gemeinsam die Verleihung der Theodor-Förster-Gedächtnisvorlesung aus. Dieser Preis ist für hervorragende Arbeiten auf dem Gebiet der Photochemie vorgesehen. Vorschläge für zu Ehrende können aus dem Gesamtgebiet der Photochemie erfolgen. Die bisherigen Preisträger waren **George Porter**, London, **Albert Weller**, Göttingen, **Zbigniew R. Grabowski**, Warschau, **Fritz P. Schäfer**, Göttingen, **Jan W. Verhoeven**, Amsterdam, **Waldemar Adam**, Würzburg, **Dietmar Möbius**, Göttingen, **Frans Carl DeSchryver**, Leuven, **Kurt Schaffner**, Mülheim, **Jakob Wirz**, Basel, **Nicholas J. Turro**, New York, **Gion Calzaferri**, Bern, **Masahiro Irie**, Tokyo, und **Miguel A. Miranda**, Valencia. Über die Zuerkennung der Auszeichnung entscheidet ein Gremium, das aus Vertretern der GDCh-Fachgruppe Photochemie und der Deutschen Bunsen-Gesellschaft besteht. Der Geehrte sollte in der Regel vier Vorträge halten, wobei der erste dieser Vorträge im Rahmen der Jahrestagung der Fachgruppe Photochemie im Oktober 2012 in Potsdam gehalten wird.

Neue Kandidatenvorschläge mit einer schriftlichen Begründung werden bis **spätestens 31. Dezember 2011** erbeten an:

GDCh-Geschäftsstelle
Ulrike Bechler
Varrentrappstr. 40-42
60486 Frankfurt am Main
u.bechler@gdch.de

ALBERT-WELLER-PREIS

Zum ehrenden Gedenken an Albert Weller (1922 - 1996) verleihen die Fachgruppe Photochemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker und die Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie einen Preis für eine herausragende wissenschaftliche Dissertation auf dem Gebiet der Photochemie/Spektroskopie.

Der Preis, mit dem in der Regel alle zwei Jahre ein junger Wissenschaftler (zwei bis maximal drei Jahre nach der Promotion) ausgezeichnet werden soll, wird anlässlich der Jahrestagung der Fachgruppe Photochemie im Oktober 2012 in Potsdam verliehen. Der Preisträger wird dabei Gelegenheit erhalten, seine Arbeit in einem wissenschaftlichen Vortrag vorzustellen. Der Preis besteht aus einer Verleihungsurkunde und einem Preisgeld von € 1.000,-. Über die Auswahl entscheidet ein Gutachtergremium, das zu je 2 Mitgliedern von den beiden Gesellschaften berufen wird.

Anträge können bis zum **30. April 2012** bei der

GDCh-Geschäftsstelle,
Ulrike Bechler,
Varrentrappstr. 40-42,
60486 Frankfurt am Main,
u.bechler@gdch.de,

eingereicht werden.

Dem formlosen Antrag, der eine kurze Begründung für den Vorschlag enthalten soll, sind ein Lebenslauf, eine Publikationsliste sowie die Veröffentlichung selbst in elektronischer Form (PDF-Dokument) beizufügen.

NACHHALTIGES AUF DEM WISSENSCHAFTSFORUM 2011



Zum Internationalen Jahr der Chemie 2011 wurde im Bremer Universum® am 6. September die Ausstellung „T-Shirts, Tüten und Tenside“ im Rahmen des Wissenschaftsforums Chemie eröffnet. Die Wanderausstellung zur Nachhaltigen Chemie ist ein Gemeinschaftsprojekt der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU), der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), der Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie (DECHEMA) und des Verbandes der Chemischen Industrie (VCI). Die Ausstellung bleibt über das GDCh-Wissenschaftsforum Chemie hinaus bis zum 2. November in Bremen und wandert dann an den DBU-Standort nach Osnabrück, wo sie konzipiert wurde und etwa eineinhalb Jahre verbleibt, bis sie erneut deutschlandweit auf Wanderschaft geht.

Die Ausstellung möchte vor allem jungen Menschen die Potenziale der Naturwissenschaft Chemie nahe bringen, sie für den Umweltschutz sensibilisieren und gleichzeitig neugierig machen auf chemische Experimente und Verfahren. An neun Stationen mit interaktiven Elementen und Experimenten lädt die Ausstellung Besucher ein, auf Entdeckungstour zu Themen wie Energie, Wasser oder Ausbildung zu gehen und die Zusammenhänge zwischen alltäglichen Produkten und chemischen Verfahren zu erforschen. Der Eintritt ist frei. Für Schulklassen wird ein begleitendes pädagogisches Programm angeboten; die Ausstellung eignet sich für Schüler ab der 7. Klasse.

GDCh-Präsident Professor Dr. Michael Dröscher, der Bremer Senator für Umwelt, Bau und Verkehr, Dr. Joachim Lohse, und der stellvertretende DBU-Generalsekretär, Professor Dr. Werner Wahmhof, eröffneten die Ausstellung am Abend des 6. September offiziell. Dröscher dankte der DBU für die Initiative, eine solche Ausstellung zu konzipieren. Bereits 2009 habe sich die DBU in ein GDCh-Publikationsprojekt zur Nachhaltigen Chemie eingebracht. „Die GDCh hat 2006 eine Arbeitsgemeinschaft Nachhaltige Chemie ins Leben gerufen, die seit 2009 eine mitgliederstarke Fachgruppe ist. Sie hat wichtige Themen in die Fach- wie auch die öf-

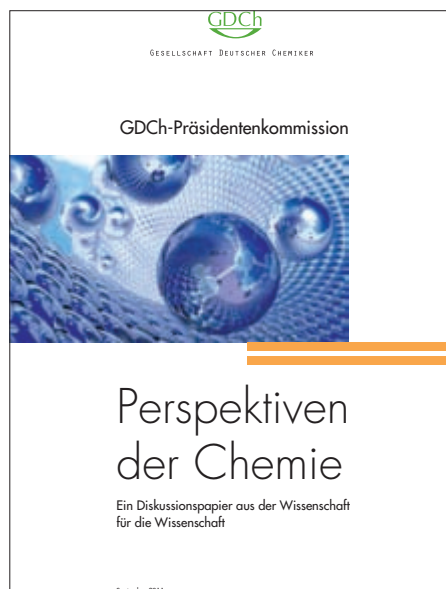
fentliche Diskussion eingebracht, unter anderem 2008 in der *Aktuellen Wochenschau* der GDCh und 2009 in der Publikation *HighChem hautnah – Aktuelles zur Nachhaltigen Chemie*“ (www.gdch.de).

Wie werden sich die chemischen Wissenschaften in den kommenden Jahren entwickeln, worüber also werden Chemikerinnen und Chemiker künftig forschen? Auf diese Fragen wollte der Präsident der Gesellschaft Deutscher Chemiker in den Jahren 2008/2009, Professor Dr. Klaus Müllen, eine Antwort wissen und brachte Chemikerinnen und Chemiker aus Hochschule und Industrie zusammen, die diesen Fragen nachgehen sollten. Das erste Ergebnis intensiver Diskussionen ist das Papier „Perspektiven der Chemie“, das anlässlich des Wissenschaftsforums Chemie am 5. September der Öffentlichkeit vorgestellt wurde.

Müllens Nachfolger im Amt des GDCh-Präsidenten, Professor Dr. Michael Dröscher, sagte zum Diskussionspapier: „Ich habe die Fackel gern weitergetragen, die Kollege Müllen mir Anfang 2010 übergeben hat, und ich freue mich sehr, dass die GDCh nun dieses Perspektivenpapier in die wissenschaftliche Diskussion einbringt. Gerade als Industriechemiker bin ich begeistert, welche Potenziale die 26 namhaften Chemikerinnen und Chemiker in ihren Beiträgen aufgezeigt haben. Das Papier macht mehr als deutlich, dass die Chemie keine abgeschlossene Wissenschaft ist, sondern ihre Rolle weiter ausbauen wird. Davon werden wichtige Arbeitsgebiete wie die Gesundheits- oder Energieforschung sehr stark profitieren.“

Mit „Perspektiven der Chemie“ ist bewusst kein abschließendes Papier entstanden. Es ist ein Diskussionspapier, das den Chemikerinnen und Chemikern sowie allen an der chemischen Forschung Interessierten zur weiteren Diskussion über künftige

Forschungsfelder vorgelegt wird. Diese Diskussion wurde in einer öffentlichen Abendveranstaltung am 5. September im Bremer Congress Centrum begonnen. „Mit den Ergebnissen der Diskussion und weiteren Beiträge werden wir das Papier fortschreiben. Es wendet sich in erster Linie an die Wissenschaft, an in der chemischen Forschung tätige Naturwissenschaftler. Mit ihnen wollen wir noch nicht gut kartierte Pfade und Fragestellungen in der Chemie beschreiben, auch um junge Studierende und junge Wissenschaftler für die bedeutenden Forschungsfelder jetzt und in Zukunft zu begeistern“, so Dröscher. Auch die breite Öffentlichkeit und die Politik sind eingeladen, an der Diskussion teilzunehmen; das Papier steht für alle zur Verfügung (www.gdch.de).





Antrag auf Mitgliedschaft

in der **Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie (DBG)**

Jahresbeitrag

- | | |
|---|---------|
| <input type="checkbox"/> persönliches, studentisches Mitglied (bitte Studienbescheinigung beifügen) | 30,- € |
| <input type="checkbox"/> persönliches Jungmitglied (bis zu 3 Jahren nach erfolgter Promotion/Eintritt in das Berufsleben) | 65,- € |
| <input type="checkbox"/> persönliches Doppelmitglied mit Mitglied in der DECHEMA, DPG, GDCh (Mitglieds-Nr.: _____) | 75,- € |
| <input type="checkbox"/> persönliches, ordentliches Mitglied | 100,- € |
| <input type="checkbox"/> nichtpersönliches Mitglied (Institute, Bibliotheken, Firmen usw.) | 485,- € |

in der **Deutschen Flüssigkristall-Gesellschaft (DFKG)**

- | | |
|---|---------|
| <input type="checkbox"/> persönliches, studentisches Mitglied (bitte Studienbescheinigung beifügen) | 0,- € |
| <input type="checkbox"/> persönliches, ordentliches Mitglied | 25,- € |
| <input type="checkbox"/> institutionelle Mitglieder | 150,- € |

in der **AG Theoretische Chemie (AGTC)**

- | | |
|--|--------|
| <input type="checkbox"/> persönliches, ordentliches Mitglied | 13,- € |
|--|--------|

geworben von: _____

Mitglieds-Nr.: _____

Daten zur Person

Frau Herr

Name _____ Vorname _____ Titel _____

Geburtsdatum _____ Geburtsort _____ Land (LKZ) _____

Privatanschrift

Universitäts- bzw. Dienstanschrift

Strasse _____ Strasse _____

Postfach _____ Postfach _____

PLZ _____ Ort _____ Land _____ PLZ _____ Ort _____ Land _____

Kommunikationsdaten privat

Kommunikationsdaten dienstlich

Tel.: (_____) _____

Tel.: (_____) _____

Fax (_____) _____

Fax: (_____) _____

E-Mail _____

E-Mail _____

Bitte senden Sie die Mitteilungen und Zeitschrift(en) an meine Privatanschrift Dienstanschrift

Datenschutz

- Ich bin damit einverstanden, dass meine Daten zu Zwecken der Mitgliederverwaltung und Mitgliederbetreuung elektronisch gespeichert und verarbeitet werden.

Aufnahme in das Mitgliederverzeichnis

Ich bin mit der Aufnahme meines Geburtsdatums und meiner Adress- und Kommunikationsdaten in **gedruckte Mitgliederverzeichnisse** der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie einverstanden.

- ja nein

Ich bin mit der Aufnahme meines Geburtsdatums und meiner Adress- und Kommunikationsdaten in **Onlinemitgliederverzeichnisse** der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie einverstanden.

- ja nein

Studium /Ausbildung

Studienfach/Ausbildung _____ Studien-/Ausbildungsbeginn (tt.mm.jj) _____ Abschluss (tt.mm.jj) _____

Promotion (tt.mm.jj) _____ Berufseintritt (tt.mm.jj) _____

Bestehende Doppelmitgliedschaften

Ort/Datum _____

Unterschrift _____

Bitte in Druckbuchstaben ausfüllen