

## Nachruf für Herrn Professor Tom Ziegler

Am 24. März 2015 verstarb im Alter von 69 Jahren völlig unerwartet Professor Tom Ziegler, der sich als Alexander-von-Humboldt-Forschungspreisträger gerade am Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Inst. f. Physikal. u. Theor. Chemie, zu einem Forschungsaufenthalt aufhielt.

Prof. Tom Ziegler von der University of Calgary (Canada) wurde in Kopenhagen geboren und promovierte dort im Jahre 1972 in Theoretischer Chemie. Er kam seit 2012 stets einmal pro Jahr für ca. zwei Monate in das Mulliken Center, um theoretische Forschungsarbeiten durchzuführen und seine fundierten Kenntnisse an Studenten und Doktoranden weiter zu geben.

Prof. Ziegler war ein international herausragender, vielfach zitierter theoretischer Chemiker. Sein Tätigkeitsgebiet war das hochaktuelle und sich immer noch in schneller Entwicklung befindende Feld der Dichtefunktionaltheorie (DFT), zu dem er seit den Anfängen in den 70er Jahren bedeutende Beiträge geleistet hat.

Die Dichtefunktionaltheorie erlaubt zusammen mit modernen Software- und Computerentwicklungen die "virtuelle", computer-gestützte Behandlung von chemischen Problemen basierend auf fundamentalen (aber numerisch komplizierten) Grundgleichungen der Quantenmechanik.

In besonderem Maße hat Prof. Ziegler zur Entwicklung und Anwendung der Theorie in der Chemie, und hier besonders für elektronisch angeregte Zustände beigetragen. Die DFT ist heutzutage das "Arbeitspferd" für genaue Computer-basierte Elektronenstruktur-Rechnungen in Physik, Chemie und zunehmend auch molekularer Biologie. Seine Anwendungen dieser Theorie im Bereich der katalytischen chemischen Reaktionen, speziell der homogenen Olefinpolymerisation, schufen einen tiefen, unverzichtbaren mechanistischen Einblick in diese für die Industrie so bedeutende Reaktionsklasse der Organometallchemie. Einer seiner weiteren Arbeitsgebiete war die theoretische Spektroskopie, die mittlerweile routinemäßig zur Identifizierung von Substanzen im Labor eingesetzt wird. Seine Methodenentwicklungen werden weltweit und routinemässig in dem bekannten Quantenchemieprogramm ADF verwendet.

Mit Prof. Tom Ziegler verliert die Theoretische Chemie einen herausragenden Wissenschaftler und Kollegen. Alle Mitarbeiter werden die tiefgehenden Diskussionen mit ihm und seine humorvolle, liebenswerte Art vermissen und ihm ein ehrendes Andenken bewahren.

Im Namen aller Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter

Stefan Grimme