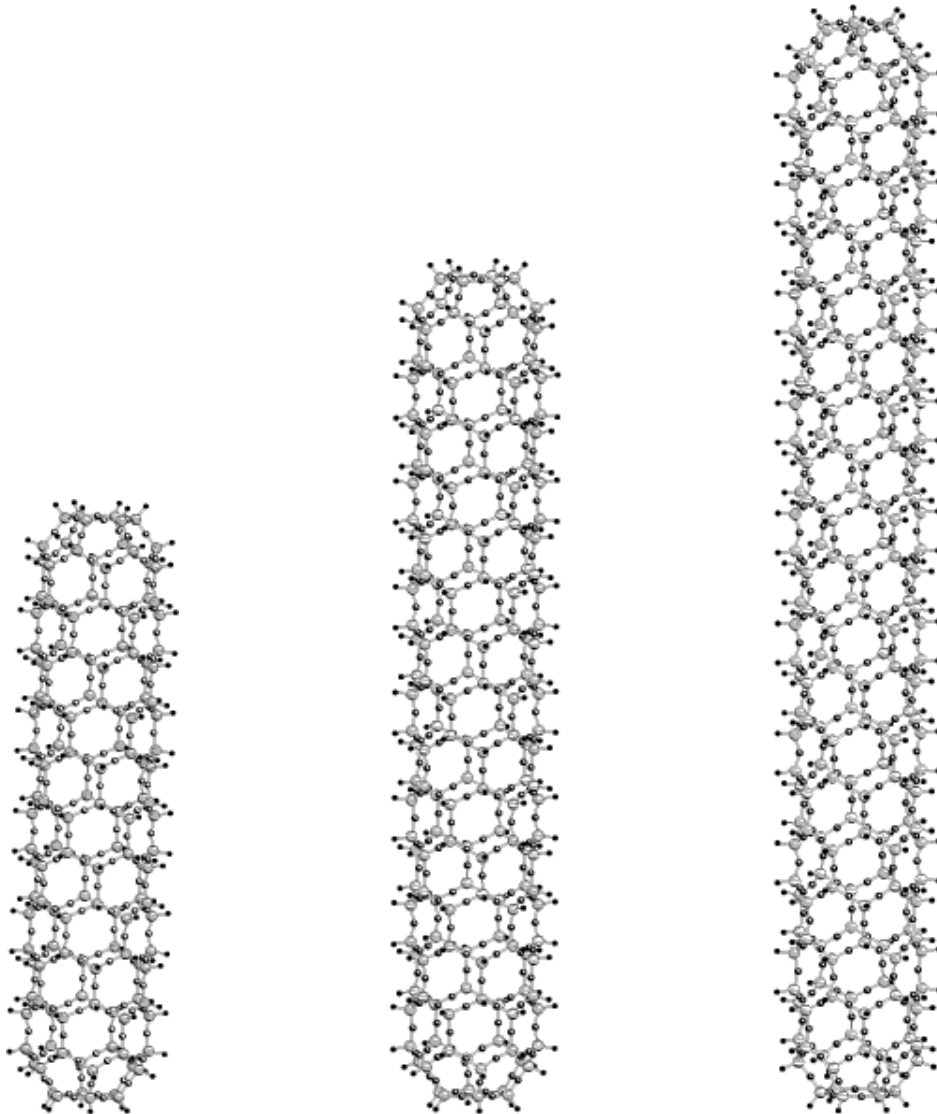


Info

Theoretische Chemie



Nanoröhren von Silsesquioxanen

Juni 2000

Inhaltsverzeichnis

* Editorial	2
* Arbeitsgruppen stellen sich vor	3
* Bericht über das 35. Symposium für Theoretische Chemie in Freiberg	5
* Hans-Hellmann-Gedächtnisveranstaltung in Moskau	8
* Tagungsvorschau 2000/2001	10
* Klatsch & Tratsch	13
* Stellenanzeigen	14

Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

dies ist die zwei Ausgabe des INFO aus Hannover. Wir werden wieder eine Version im www zur Verfügung stellen, und zwar unter <http://www.theochem.uni-hannover.de/info>. Beiträge sind jederzeit willkommen. Bitte senden Sie diese für die nächste Ausgabe per Email an Info@theochem.uni-hannover.de möglichst in Word 6.0 oder Word 97.

Wir wünschen Ihnen allen einen guten Semesterausklang.

K. Jug, G. Geudtner, Hannover

Arbeitsgruppen stellen sich vor

Theoretische Chemie interdisziplinär:

Das Computational-Chemistry-Team am Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz

Das MPI für Polymerforschung in Mainz betreibt interdisziplinäre Forschung nicht nur an Makromolekülen, sondern an vielen Systemen, die neudeutsch in dem Begriff "Soft Condensed Matter" zusammengefasst werden. Beispiele aus der experimentellen Arbeit sind: Struktur und Dynamik in Polymerschmelzen mittels Festkörper-NMR und Neutronenstreuung, Polyelektrolyte (geladene Polymere in Lösung, Strukturbildung durch supramolekulare Effekte, funktionale Materialien und vieles mehr.

Die Breite in der Forschung des Gesamtinstituts (ca. 450 Mitarbeiter) spiegelt sich auch in der Größe und der thematischen Vielfalt der Abteilung Theorie (Prof. Dr. Kurt Kremer, ca. 40 Mitarbeiter) wieder. Hier gibt es acht Untergruppen, die überwiegend von theoretischen Physikern geleitet werden und die Fragestellungen in allen Soft-Matter-Bereichen mit Computersimulation oder analytischer Theorie angehen. Die verwendete Methode hängt sehr davon ab, mit welchen Ausdehnungen und welchen Zeitdauern man sich dabei auseinandersetzt. Polymere zeigen auf allen Skalen interessante Effekte, von chemischen Reaktionen im Angströmbereich bis hin zur Morphologie von Polymermischungen, deren Strukturen mit dem bloßen Auge sichtbar sind. Die Dauer von Prozessen reicht von Femtosekunden (Molekülschwingungen) bis hin zu Sekunden (Fließverhalten von Polymerschmelzen). Wenn man Alterungsphänomene dazunimmt, sogar bis zu Jahren und Jahrzehnten. Jede Längenskala hat ihre Methoden und ihre Experten: das reicht vom Quantenchemiker über die Polymerphysikerin, die Simulationen mit vergrößerten Kugel-Feder- oder Gittermodellen betreibt, bis zum Kontinuumsmechaniker. Die Theorie in Mainz ist in der glücklichen Lage, dass sie nicht nur all diese Experten hat, sondern dass diese sich untereinander austauschen, so dass auch skalenübergreifende Ansätze möglich werden.

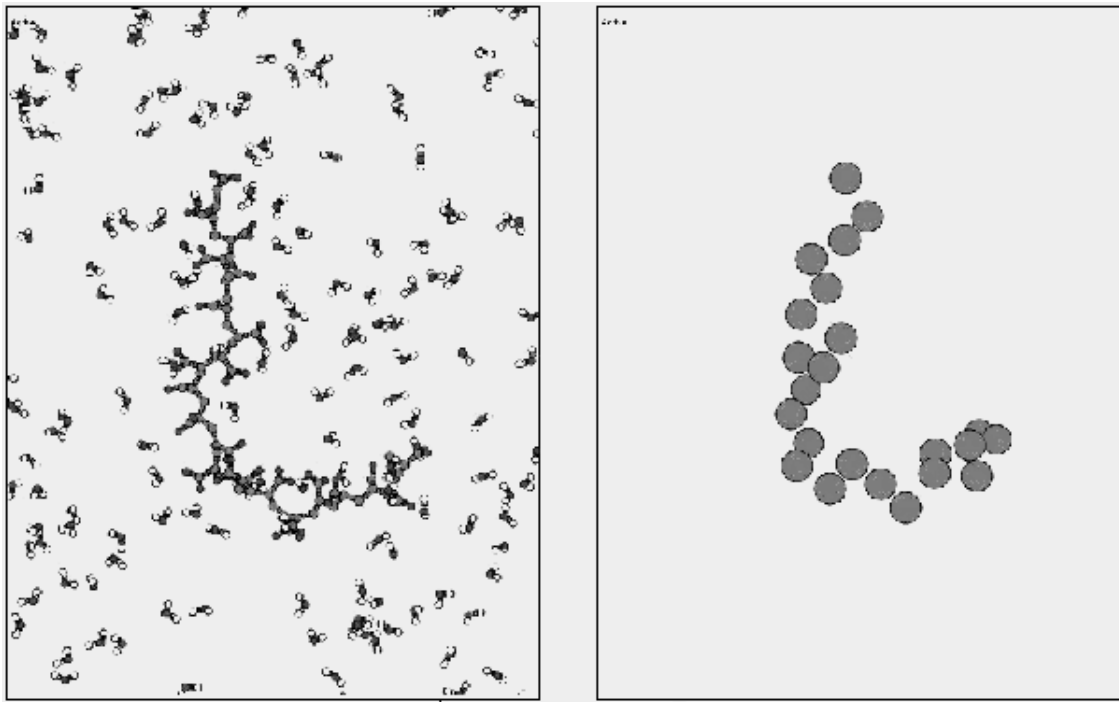
Wie passt nun die Theoretische Chemie in dieses Umfeld? Salopp gesagt, sind wir für alle chemisch-realistischen Beschreibungen zuständig. D.h. während die meisten unserer Theoriekollegen sich um generisches, d.h. von der chemischen Identität weitgehend unabhängiges, Verhalten von Polymeren (beispielsweise Skalierung von Eigenschaften mit der Kettenlänge) kümmern, müssen sich in unseren Simulationen Polystyrol und Polypropylen unterscheiden. Damit kommen vor allem Molekulardynamik-Rechnungen mit atomistischen Kraftfeldern zum Einsatz. Daneben ein wenig Quantenchemie (die "nächstkleinere" Längenskala) und ein wenig Simulation mit vereinfachten Modellen (die "nächstgrößere" Längenskala). Wir betrachten z.B.

- I. Struktur und Dynamik von Polyisopren (Kautschuk) im Vergleich mit NMR-Messungen
- II. Positronen-Lebensdauern in Polystyrol, Polycarbonat und Polyisopren
- III. Diffusion von Gasen und Lösungsmitteln in Polymermembranen
- IV. Adsorption von Polymeren aus wässriger Lösung an Celluloseoberflächen
- V. Dynamische Prozesse in Flüssigkeiten und Flüssigkristallen

Bei diesen Anwendungen profitieren wir stark von Kooperationen mit experimentellen Partnern (im Institut, national und international) oder technologischen Partnern (Industrie oder industriennahe Forschung). Neben Anwendungen beschäftigen wir uns intensiv mit der Weiterentwicklung von

Simulationsverfahren, Kraftfeldern und Software, z.B.

- I. Automatische Parametrisierung von Kraftfeldern aus experimentellen Daten
- II. Systematisches Vereinfachen von Polymermodellen



[Abbildung: Wie muss ein einfaches Modell von Polyacrylsäure (rechts) konstruiert werden, damit es sich trotz Vereinfachung noch so verhält wie "echte" atomistische Polyacrylsäure in wässriger Lösung (links)?]

- III. Quantenpfadintegral-Monte-Carlo zur Beschreibung von Positronen in Polymeren
- IV. Neue Nichtgleichgewichts-Molekulardynamik-Verfahren zur Berechnung von Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und Soret-Koeffizient
- V. Kopplung von Quantenchemie und Molekulardynamik
- VI. Kraftfelder für Flüssigkeiten, Polymere u.ä.
- VII. Beschreibung elektronisch angeregter Zustände innerhalb der Molekulardynamik
- VIII. Weiterentwicklung unseres Programmpakets YASP

Häufig werden auch diese methodischen Entwicklungen zunächst durch einen Kooperationswunsch angeregt, verselbständigen sich dann aber oft. Hier hilft auch die Nähe zu den anderen Gruppen innerhalb der Theorie-Abteilung. Austausch von Know-How, Methoden und Software (in beiden Richtungen!) ermöglicht es, manches Forschungsprojekt durchzuführen, das sonst unterbliebe.

März 2000

PD Dr. Florian Müller-Plathe
 Max-Planck-Institut für Polymerforschung
 Ackermannweg 10
 D-55128 Mainz

Bericht

über das

35. Symposium für Theoretische Chemie der deutschsprachigen Länder

(35th Symposium for Theoretical Chemistry, in German, but preferentially in English)

vom 12. bis 16. September 1999 in Freiberg (Sachsen/Deutschland)

Die Tagung war professionell - und für die Teilnehmer reibungslos - organisiert worden von

Michael Dolg (gerade im Übergangszustand, vom Dozenten am Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme im nahen Dresden, zum Professor für Theoretische Chemie an der Universität Bonn) zusammen mit

Jürgen Fabian (Professor für Physikalische Organische Chemie und Quantenchemie an der Technischen Universität Dresden) und

Horst Hartmann (Professor für Organische Chemie an der Hochschule Merseburg und im Graduiertenkolleg an der Bergakademie Freiberg).

Die beiden Letzteren hatten die Theoretische Chemie in schweren Jahrzehnten in Dresden etabliert und hochgehalten (siehe Info Theoretische Chemie Dezember 1999).

Ihnen Dreien sei an dieser Stelle nochmals ganz herzlich für die Ausrichtung der Tagung gedankt, ebenso ihren Mitarbeitern wie den finanziellen Förderern, allen voran der DFG, der MPG und dem Freistaat Sachsen.

Die Tagung fand etwas außerhalb des Freiburger Stadtzentrums im Clemens-Winkler-Bau der Technischen Universität, der ältesten Bergakademie der Erde (gegründet 1765), statt. Neben dem Chemiker Winkler sind viele bekannte, mehr oder weniger wissenschaftliche Persönlichkeiten als Studenten, Administratoren und/oder Professoren mit Freiberg verknüpft, so Novalis-von Hardenberg oder Alexander von Humboldt. Freiberg war über viele Jahrhunderte **das** Zentrum Sachsens gewesen. Trotz dreißigjährigem Krieg und vierzig Jahren DDR - deren Auswirkungen auch noch beeindruckten - konnte Sehenswertes im Stadtzentrum schön renoviert werden.

Als Hauptthema der Tagung war

Relativistic and Electron Correlation Effects in Heavy Element Chemistry

gewählt gewesen. Unter den fast 30 eingeladenen beziehungsweise ausgewählten Vorträgen behandelten über die Hälfte vorzugsweise oder streifend Theorie und/oder Praxis relativistischer Elektronendynamik, wozu auch die Spin-Bahn-Kopplungen gehören. Unter den fast 90 frei eingereichten Postern, die das gesamte Spektrum der theoretischen Chemie überdeckten, waren immerhin noch weit über ein Viertel nicht frei von relativistischen Korrekturen, und sei es auch nur in Form der Verwendung von relativistischen Pseudopotentialen bei der Behandlung schweratomiger chemischer Systeme.

Die Serie der Hauptvorträge wurde mit einer schönen Relativistik-Übersicht von **Bernd Artur Heß** (Erlangen) eingeleitet, die hier im Vorgriff auf weitere Präsentationen zum Thema etwas eingehender dargestellt werden soll. Heß wählte anschauliche Deutungen mittels Bohrschem Atommodell und Orbitalschemata neben klaren formalen Erklärungen anspruchsvoller theoretischer Konzepte und besprach konkrete rechentechnische Methodiken auf 4-, 2- und 1-komponentigem Niveau. Der Vortrag war mit einem ausgewogenen Zitatenschatz und mit akkuraten numerischen Resultaten angereichert. So etwa zum HgO, das für Experimentatoren immer noch eine harte Nuß zu sein scheint. Während nämlich HgO als Feststoff gegenüber den atomaren Komponenten recht stabil ist, gilt dies nach den zuverlässigen Rechnungen wider alle Erwartung so keineswegs für das zweiatomige Molekül.

Die nationalen und internationalen Anstrengungen auf dem Gebiet der relativistischen Quantenchemie (besonders erwähnt seien hier das einschlägige DFG-SPP und das europäische REHE-Projekt) haben Theorie, Methodik und Verständnis im letzten Jahrzehnt ein gehöriges Stück voran gebracht. Als anzustrebende Hauptpfade zukünftiger Forschungsstrategie wurden dann auch die Fortentwicklung von Methoden für große Systeme (vergleiche das Info Theoretische Chemie Dezember 1999) und für Elektronenkorrelation und ihre Verbindung mit den weit entwickelten Methoden der Relativistik gewiesen. Relativistische Pseudopotentiale sind die wohl praktikabelste Methode für den Computerchemiker, wobei allerdings die nichttriviale Spin-Bahn-Kopplung berücksichtigt werden muß. Die Quantenchemie mittelschwerer und schwerer Elemente wird sich daher gegenüber der Black-Box-Mentalität noch einige Zeit widerspenstig erweisen, wie bei den Diskussionen herauskam. Anspruchsvollere *abinitio*-Verfahren werden vorzugsweise auf rechentechnisch einfachere, zweikomponentige Näherungen der Vierkomponenten-Dirac-Gleichung zurückgreifen. Dabei bieten sich dann weitere erträgliche Näherungen wie z.B. verschiedene Einzentrenapproximationen für die kernnahen relativistischen Effekte an. Hinweise auf die auch numerisch teils sehr wichtigen konzeptionellen Unterschiede von 2- und 4-komponentigen Darstellungen (dem sogenannten "picture change") fanden sich an verschiedenen Stellen.

Die vielen Beiträge zum relativistischen Themenkreis seien hier nur noch namensweise und alphabetisch aufgelistet. Die Abstracts dieser, wie auch aller anderen Beiträge sind weiterhin über <http://www.mpipks-dresden.mpg.de/~stc99> zugänglich. Über Theorie und Resultate vierkomponentiger Rechnungen wurde von **Uzi Kaldor** (Tel Aviv), von **Markus Reiher** (Bielefeld/Erlangen) und von **Trond Saue** (Tromsø/Toulouse) berichtet. Mit Herleitung, Anwendung und Interpretation zweikomponentiger Verfahren bis hin zu Bedeutung und speziellen Details von Spin-Bahn-Kopplungen sowie mit chemisch interessanten relativistischen Rechenresultaten befaßten sich **Evert Jan Baerends** (Amsterdam), **Martin Kaupp** (Stuttgart/Würzburg), **Vladimir Kellö** (Preßburg), **Werner Kutzelnigg** (Bochum), **Christel Marian** (Bonn), **Notker Rösch** (München), **W.H.Eugen Schwarz** (Siegen), **Karla Schmidt** (NewOrleans/Konstanz), **Peter Schwerdtfeger** (Auckland), **Christian Teichteil** (Toulouse) und **Lucas Visscher** (Amsterdam).

Der Tradition folgend war ein Experimentator zu einem zentralen Hauptvortrag eingeladen, um die Theoretiker zu neuen Untersuchungen zu animieren. **Helmut Schwarz** (Berlin) trug über die Bindungsaktivierung bei Übergangsmetall-Organyl-Kationen vor, wozu Theoretiker aufgefordert sind, Potentialflächen auch für elektronisch angeregte Zustände zu erzeugen und mit Hilfe von Dynamikuntersuchungen die mechanistischen Abläufe zu klären.

Ein weiterer zentraler Programmpunkt des 35. Symposiums war die erstmalige Verleihung des **Hans G. A. Hellmann Preises** an einen jungen, herausragenden, Deutsch sprechenden Wissenschaftler. Der Festvortrag des Preisträgers sollte - als einziger - in Deutsch gehalten werden.

Hellmann war einer der Pioniere der Quantenchemie auf breitem Gebiet gewesen, dessen zu kurzes Leben und Wirken durch die revolutionären Entwicklungen der 1930er Jahre in Deutschland und Rußland begrenzt worden war (siehe <http://www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann>).

Als Insider kann der Bericht hier den seinerzeitigen Skeptikern versichern, dass sich bei der Auswahl der Kandidatin beziehungsweise des Kandidaten alle Kommissionsmitglieder in beeindruckender Weise um größte Objektivität bemüht haben. Der ausgewählte Preisträger **Wim Klopper** (Utrecht) hielt einen sprachlich, didaktisch und insbesondere auch inhaltlich exzellenten Vortrag über das zweite Hauptthema des Symposiums, die Elektronenkorrelation, und seine Coupled-Cluster- r_{12} -Methode. Dabei gelangen ihm Anknüpfungspunkte an viele Initial-Leistungen Hellmanns, nämlich molekularen Virialsatz, molekulares Kraft-Theorem (das sog. Hellmann-Feynman-Theorem), Mechanismus der kovalenten Bindung, Pseudopotentiale und Dispersionskräfte. Wim Klopper stellte begriffliche Konzepte, theoretische Deduktionen, rechentechnische Entwicklungen und numerische Resultate höchster Akkuratessse vor. Wim Klopper und die Auswahlkommission haben damit hohe Standards für zukünftige Preisträger und ihre Präsentationen gesetzt.

Die weiteren Vorträge kann man grob in vier verschiedene Themenkreise einordnen: gemäß dem zweiten Hauptthema (i) *abinitio* Methoden, speziell Elektronenkorrelation, und dann (ii) Dichtefunktionaltheorie (DFT), (iii) Monte-Carlo-Verfahren und (iv) Sonstiges.

Zur Thematik (i) der *abinitio* Methoden präsentierten **M. Hanrath** (Bonn) und **W. Wenzel** (Dortmund) ihre Neuentwicklungen und Anwendungen zur Multireferenz-CI-Methode. Hochgenaue Resultate erlauben die explizit korrelierten r_{12} -Methoden, wie überzeugend von **W. Klopper** (Utrecht, siehe oben) mit seinen Coupled-Cluster-Ansätzen und von **R. Gdanitz** (Braunschweig) mit seinem MR-ACPF Verfahren demonstriert. **V. Kellö** (Preßburg, siehe auch oben) analysierte die Beiträge von Elektronenkorrelation und Relativistik zu atomaren und molekularen elektrischen Eigenschaften.

Im Bereich von (ii) der Dichtefunktionaltheorie lieferte **A. Görling** (München) Einblicke in die neue Entwicklung zur Generation von Kohn-Sham-Potentialen, die systematisch verbesserbar sind, und die sich sogar für die Behandlung von Anionen eignen. **M. Kaupp** (Stuttgart, s.o.) stellte neue Rechnungen mit der DFT-Methode zur Bestimmung magnetischer Resonanzparameter vor. **T. Strassner** (München) benutzte die DFT zur Untersuchung von Oxidationsmechanismen von Alkanen mit Chromylchlorid.

Beim dritten Themenkreis, (iii) den Monte-Carlo-Verfahren, präsentierten **H.-J. Flad** (Dresden) und **M. Lewerenz** (Jülich) ihre Ergebnisse unter Anwendung von 'Diffusions-Quanten-Monte Carlo', z.B. für Hg- bzw. He-Cluster.

Und schließlich, (iv), brachte **Pekka Pyykkö** (Helsinki) viel Interessantes zum immer noch kontroversen Thema der "closed shell interactions". zwischen schwereren, speziell 'relativistischen' Atomen. **A. Heidenreich** (Tel Aviv) führte seine Ergebnisse zu "pump-probe"-Simulationen von $XeAr_n$ -Clustern vor. **B. Hartke** (Stuttgart) berichtete über neue Untersuchungen zur globalen Geometrie-Optimierung bei großen atomaren und molekularen Clustern. **L. von Szentpaly** (Jamaika) zeigte neue Möglichkeiten zur universellen Skalierung von RKR Potentialkurven unter Verwendung einer Valenzzustandsformulierung für Atome in Molekülen auf.

Schließlich müssen die hervorragenden Posterpräsentationen zu den verschiedensten Bereichen der Theoretischen Chemie erwähnt werden. Da im Vergleich zu den letzten beiden Tagungen die Zahl

der Teilnehmer merklich geringer war, gab es erfreulich viel Platz für die Posteraufstellungen und die Diskussionen. Offensichtlich hatte die Wahl von echt theoretischen Hauptthematika viele potentielle Tagungsteilnehmer aus dem mehr 'normalchemisch' interessierten Kollegenkreis abgeschreckt, obwohl die Mehrzahl der tatsächlichen Vortrags- und Posterpräsentationen die Vernetzung von Relativistik wie auch von Korrelation mit vielen Bereichen der Chemie belegte.

Die Posterdiskussionen nach dem Abendessen waren aber trotzdem oder nicht nur deswegen weniger intensiv als sonst üblich und hielten nicht bis in die späten Abendstunden an, da es die meisten Teilnehmer irgendwann zu ihren Gasthöfen und Unterkünften drängte. Offenbar müßte man zukünftig mehr Gewicht auf engeres Beieinander von Tagungsräumen und Unterkünften, und auch auf mehr Abstand zu anderen Attraktionen legen, was dann zwangsläufig einen intensiveren Gedankenaustausch zur Folge haben müßte. Der Nachteil ist allerdings naturgemäß, dass man nicht die günstigen Ressourcen einer Universität nutzen kann. Jedenfalls ist es den Organisatoren hoch anzurechnen, dass sie auch beim nichtwissenschaftlichen Teil der Tagungsorganisation finanziell gut gewirtschaftet haben und den 'nichtwissenschaftlichen Ertrag' in den Hellmann-Preis-Fonds einbringen konnten.

Nicht vergessen werden darf schließlich, wie das wissenschaftliche Programm durch eine Nachmittags- und Abend-Tour nach Meißen abgerundet wurde. Nach einer Besichtigung des Museums der berühmtesten und ältesten Porzellan-Manufaktur der westlichen Kulturkreise (gegründet 1710) und einer Einführung in ihre Technologie bestand Gelegenheit zu einem Streifzug durch die Sehenswürdigkeiten der Altstadt, der in einem stilvollen Abendessen ausklang.

Auf das 36. Symposium für Theoretische Chemie vom 10. - 14. September 2000 in Litschau (Niederösterreich) zum Thema "Quantum Mechanics and Quantum Effects in Systems of Increasing Complexity", organisiert von Werner Jakubetz (Wien) [werner@univie.ac.at oder <http://www.itc.univie.ac.at/~werner/STC2000>] wird in diesem Info gesondert hingewiesen.

W.H.E.Schwarz, R.Jaquet, Siegen

Hans-Hellmann-Gedächtnisveranstaltung in Moskau

Hans G.A. Hellmann, einer der Pioniere der Quantenchemie (siehe <http://www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/index.html> sowie Bunsen-Magazin (1999) 1/1: 10 - 21; 1/2: 60 - 70 (ISSN 005-9021)) hätte im Jahre 1998 seinen 95. Geburtstag feiern können. Zu diesem Termin war eine Initiative gestartet worden, das Andenken in den beiden Ländern von Hellmanns Schaffen, in Deutschland und in Russland, wachzuhalten. In Moskau lebt die Kunstmalerin Tatjana Livshits, eine entfernte Verwandte Hellmanns, die als noch junges Mädchen in den 1930er Jahren mit ihm persönlich bekannt geworden war. Sie hat sein Portrait im Auftrage der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie nach aufgefundenen Photos geschaffen. Es ist jetzt im Moskauer Staatlichen Karpov-Institut für Physikalische Chemie im Rahmen einer Festveranstaltung enthüllt und in die Galerie der berühmten Physikochemiker des Instituts eingereicht worden.

Das Karpov-Institut war im Jahre 1918 als *das* Zentrum der Physikalischen Chemie in der Sowjetunion gegründet worden, mit zur Zeit ca. 300 Wissenschaftlern. Es war Hellmanns

Moskauer Wirkungsstätte zwischen seiner Emigration aus Deutschland nach der Machtübernahme der Nazis und seiner Ermordung während des "großen Terrors" in der stalinistischen Sowjetunion.

Das Festkolloquium wurde am Montag, dem 29. November 1999, vom Direktor des Karpov-Instituts, Prof. Dr. A.P. Simonov eröffnet. Die vorwiegend Moskauer Zuhörerschaft rekrutierte sich vornehmlich aus vier Instituten, dem schon genannten Staatlichen Institut für Physikalische Chemie (Karpov-Institut), dem Staatlichen Institut für Allgemeine und Anorganische Chemie (Kornakov-Institut), dem Institut für Geschichte der Naturwissenschaften und der Technik der Russischen Akademie der Wissenschaften (Vavilov-Institut) und dem Chemie-Department der Moskauer Staatlichen Lomonossov-Universität. In das Vortragsprogramm führte W.H.E. Schwarz mit den Stationen des wissenschaftlichen Lebensweges Hellmanns ein, zu denen später darauf bezogene Vorträge gehalten wurden. Zunächst wurden historische und wissenschaftshistorische Themen beleuchtet. Außer den beiden letzten noch lebenden Schülern Hellmanns, Prof. Dr. N. Sokolov und insbesondere dem mit 89 Jahren immer noch forschungsaktiven Prof. Dr. M.A. Kovner (beide Moskau), trugen die Fernsehjournalistin und Historikerin Dr. Sabine Arnold (München), die Kunstmalerin Tatjana Livshits (Moskau) sowie Hellmanns Sohn Dipl.-Ing. Hans Hellmann jr. (jetzt Siegen) bei.

Die wissenschaftlichen Leistungen Hellmanns und aktuelle Aspekte der nach einem Zweidrittel-Jahrhundert daraus entstandenen Problemfelder wurden von den Theoretiker-Kollegen M.V. Basilevskij, V.I. Pupyshev und W.H.E. Schwarz thematisiert. Neben Hellmanns *zwei Büchern* zur Quantenchemie musste natürlich das *Hellmann-Feynman-Theorem* diskutiert werden. Hellmann hatte es neben anderen grundsätzlichen Punkten (z.B. *molekularer Virialsatz*) schon 1933 in Hannover in einer zwar wichtigen, aber kaum zitierten Arbeit in der gut zugänglichen Zeitschrift für Physik (85:180-190) formuliert. Eine ganze Reihe von inhaltlich mehr oder weniger entfernten Vorläufern und Nachfolgern des Kraft-Theorems wurden ausgegraben, ebenso Variationsaspekte für genäherte Eigenfunktionen von Hellmann (!) bis Hurley (1954) und Klopper (1999). Letzterer ist übrigens der erste Träger des kürzlich gestifteten Hellmann-Preises (siehe die Dezember-1999-Ausgabe der "Info Theoretische Chemie", <http://www.theochem.uni-hannover.de/~infound> BUNSEN MAGAZIN 1(6): 189, 1999).

Weiterentwicklungen der auf Hellmann zurückgehenden *Pseudopotentialmethode* von 1934 (auch selten zitiert, Kurzmitteilung in Englisch in 1935, J.Chem.Phys. 3:61) gehören heute zum Standard-Methodenrepertoire des Computerchemikers. Zwar waren Hellmann schon damals die Drehimpulsabhängigkeit der effektiven Rumpfpotentiale wie die Wichtigkeit der Elektronenkorrelation in den Valenzschalen bewußt gewesen. Doch hatte auch er, genau wie Dirac, die relativistischen Effekte noch wegdiskutiert, die heutzutage einen aktuellen Forschungsschwerpunkt bilden. Relativistische Beiträge sind inzwischen auch in die Hellmann-Ruedenbergsche Erklärung des *Chemischen Bindungsmechanismus* eingeflossen. Schließlich wurden Hellmanns bahnbrechende und umfassende Beiträge zur Theorie der *diabatischen und adiabatischen Reaktionen* (schon 1935 !), der Übergang von der einen zur anderen Darstellung und die Deutung von Aktivierungsbarrieren den Entwicklungen der letzten Jahrzehnte gegenübergestellt.

Das Kolloquium klang mit einem von der Russischen Akademie der Wissenschaften offerierten Imbiß aus, bei dem durchaus nicht nur Wodka gereicht wurde. Die Festveranstaltung war auf russischer Seite von den oben genannten Institutionen sowie von der Moskauer Gesellschaft für Theoretische Chemische Physik, der Akademie der Wissenschaften und dem Ministerium für Wissenschaft und Technologie, auf deutscher Seite von der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie und insbesondere der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie (einer der Träger unserer AGThCh) unterstützt worden. Dafür sei im Namen aller Theoretiker gedankt.

Tagungsvorschau 2000/2001

Stand: 30. 5. 2000

Zusammengestellt von:

Prof. Dr.phil.nat. **Klaus Helfrich**, Fachgebiet Theoretische Chemie, FB 5, TU Berlin

I. Straße des 17. Juni 112, 10623 Berlin, Sekr. ER 1

II. Hermannstr. 1, 14163 Berlin

Tel. : (030) 314 23774 ; Tel. priv.: (030) 8131669 oder 8134045

Fax: (030) 814 98767

E-Mail :Helfrich_TUB@compuserve.com

Im **WWW** finden Sie die aktuelle Fassung unter
<http://www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html>

sowie unter www.thch.uni-bonn.de/AGTC

2000:

I. 4. - 8. 9. in Budapest:

Third European Conference on Computational Chemistry

E-Mail: eurocc3@para.chem.elte.hu

WWW: <http://www.phy.bme.hu/conf/euco>

II. 10. - 14. 9. in Litschau, Waldviertel, Niederösterreich:

36. Symposium für Theoretische Chemie

WWW: <http://www.itc.univie.ac.at/~werner/STC2000/>

III. 17. - 22. 9. in Jerusalem, Israel:

MOLEC 2000 (13th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions)

WWW: <http://www.fh.huji.ac.il/~roib/MOLEC/index.htm>

IV. 17. - 30. 9. in Riolo Terme, Italien:

European Summerschool in Quantum Chemistry

WWW: <http://www.teokem.lu.se/esqc/00>

V. 19. - 22. 9. in Karlsruhe:

SCAN 2000 (GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing,

Computer Arithmetic and Validated Numerics)
WWW: <http://www.scan2000.de/contact.html>

- I. **25. - 27. 9. in Mülheim a. d. Ruhr, MPI f. Kohlenforschung:
WorkShop Modelling Catalysis - Quantum Simulations in Industry**
WWW: <http://www.mpi-muelheim.mpg.de/quasi/workshop>

- I. **8. - 13. 10. in Berlin, TU:
International Conference on Computers in Chemical Research and Education, ICCCRE**

E-Mail: tg@gdch.de

2001:

- II. **14. - 17. 1. in Wien:
Tagung über Angewandte Dichtefunktional-Theorie**
WWW: <http://www.physics.at/dft2001>
- III. **18. - 21. 3. in Leipzig:**

Chemiedozententagung

**26. - 30.3. in Hamburg:
65. Physikertagung und Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik
(AKF) der DPG**
<http://www.dpg-tagungen.de/info/hamburg2001.html>

**2. - 6. 4. in Berlin:
Frühjahrstagung des Arbeitskreises Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen
(AMOP) der DPG
und Tagung der ECAMP**
WW: <http://www.dpg-tagungen.de/info/berlin2001.html>

- I. **24. - 26. 5. in Stuttgart:
Bunsen-Tagung
"Computersimulationsmethoden in der Physikalischen Chemie: Große Moleküle,
Flüssigkeiten, Festkörper"**
WWW: <http://www.bunsen.de>

- II. **24. - 29. 8. in Baltimore, Maryland, USA:
7 th International Wigner Symposium**

WWW: <http://www.physics.umd.edu/robot/wigsym.html>

- III. **vorauss. 23. -27. 9. in Bad Herrenalb:
37. Symposium für Theoretische Chemie**

L. S. Cederbaum (Heidelberg) , H. Köppel

- IV. **23. - 29. 9. in Würzburg:
28. GDCh-Hauptversammlung**

Hinweise auf weitere Tagungskalender:

- V. **Deutsche Physikalische Gesellschaft, Tagungen**
WWW: <http://www.dpg-tagungen.dpg-physik.de>

- VI. **CONFMENU von Prof. Young S. Kim**
WWW: <http://www.physics.umd.edu/robot/>

- VII. **Gesellschaft Deutscher Chemiker, Tagungen**
WWW: <http://www.gdch.de/tagung/index.htm>

- VIII. **Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen**
WWW: <http://www.bunsen.de>

- IX. **Tagungskalender der Uni Regensburg**
WWW: <http://www.chemie.uni-regensburg.de/~hoh05008/KONFERENZEN>

Klatsch & Tratsch

Herr Dr. I. Boustani hat sich mit einer Arbeit "Die Dichtefunktionaltheorie in der Chemie: Konzepte und Anwendungen am Beispiel der Bor-Cluster" an der Bergischen Universität-Gesamthochschule Wuppertal am 12.5.1998 habilitiert.

Herr PD Dr. B. Hartke, Universität Stuttgart hat ein mit 15.000 DM pro Jahr dotiertes Karl-Winnacker-Stipendium der Hoechst-Gruppe (Celanese/Aventis) erhalten.

Herr PD Dr. M. Kaupp, MPI für Festkörperforschung, Stuttgart, hat den Ruf auf die C3-Professur für Anorganische Chemie an der Universität Würzburg angenommen.

Herr PD Dr. D. Marx, MPI für Festkörperforschung, Stuttgart, hat den Ruf auf die C4-Professur für Theoretische Chemie (Nachfolge Prof. Dr. W. Kutzelnigg) an der Ruhr-Universität Bochum angenommen.

Herr PD Dr. P. Saalfrank, FU Berlin hat den Ruf auf die C3-Professur für Theoretische Chemie an der Universität Regensburg erhalten und zum WS 2000/01 angenommen.

Herr PD Dr. G. Stock, Universität Freiburg hat den Ruf auf eine C4-Stelle für Theoretische Chemie an der Universität Frankfurt erhalten.

Herr PD Dr. C. van Wüllen, Ruhr-Universität Bochum hat den Ruf auf eine C3-Professur für Angewandte Quantenchemie und Computerchemie an der TU Berlin erhalten.

Wir gratulieren!

Stellenanzeigen

EC THEONET - Postdoctoral and predoctoral opportunities

A number of postdoctoral and predoctoral positions are available within the research training network

THEONET II (2000 -2004)

"Theoretical studies of electronic and dynamical processes in molecules and clusters"

funded by the European Commission in the framework of the research and technological development programme "Improving the Human Research Potential and the Socio-economic Knowledge Base" (Fifth Framework Programme of the European Community).

The network is aimed at extending the successes of first-principle computational chemistry, and thereby increasing its impact on and contribution to fundamental and applied chemistry. Some of the research projects are concerned with further theoretical and methodological advances, whilst others address specific chemical problems using new or existing methods.

THEONET II will cover following fields of research

- 1) Quantum Chemistry (molecular electronic structure)
- 2) Potential energy functions, Bound States and Spectroscopy
- 3) Time-dependent Phenomena, Molecular Dynamics and Reactions

Under the terms of the programme, the young researchers who are successful applicants for the supported positions must be aged 35 years or less, and must be nationals of a Community Member State or a State associated with the EC programme (Bulgaria, the Czech Republic, the Republic of Cyprus, Estonia, Hungary, Iceland, Israel, Latvia, Liechtenstein, Lithuania, Norway, Poland, Romania, Slovakia and Slovenia). Subject to its final conclusion, an Association Agreement signed with the Swiss Confederation is expected to enter into force on 01.01.2001. The young researchers must not be nationals of the state in which the participant appointing them is established, and must not have carried out their normal activities in that state for more than 12 of the 24 months prior to their appointment.

Enquiries should be addressed directly to one of the group leaders of the network:

Prof. P. Rosmus, Theoretical Chemistry, University of Marne la Vallee, Champs sur Marne, F-77454 Marne la Vallee, France; e-mail: p@univ-mlv.fr; phone: +33-160957304; fax: +33-160957320

Prof. P. J. Knowles, School of Chemistry, University of Birmingham, Edgbaston, Birmingham B15 2TT, United Kingdom;

e-mail: p.j.knowles@bham.ac.uk; phone: +44-1214147472; fax: +44-1214147471

Prof. P. Palmieri, Dipartimento Fisica ed Inorganica, University of Bologna, Viale Risorgimento 4, I-40136 Bologna, Italy;
e-mail: paolo.palmieri@bo.nettuno.it; phone: +39-0516443698;
fax: +39-0516443690

Prof. N. C. Handy, Department of Chemistry, University of Cambridge, Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, United Kingdom;
e-mail: nch1@cam.ac.uk; phone: +44-1223336373; fax: +44-1223336362

Prof. G. D. Billing, Chemistry Laboratory III, Department of Chemistry, University of Copenhagen, Univesitetsparken 5, DK-2100 Copenhagen, Denmark;
e-mail: gdb@moldyn.ki.ku.dk; phone: +45-35320252; fax: +45-353202591

Prof. L. Halonen, Laboratory of Physical Chemistry, University of Helsinki, P.O. Box 55, FIN-00014 Helsinki, Finland; e-mail: lauri.halonen@helsinki.fi;
phone: +358-919140280; fax: +358-919140279

Prof. B. O. Roos, Department of Theoretical Chemistry, Chemical Center, Lund University, P.O.B. 124, S-22100 Lund, Sweden; e-mail: bjorn.roos@teokem.lu.se; phone: +46-46228251; fax: +46-462224543

Prof. G. Delgado-Barrio, Departamento de Fisica Atomica y Molecular Teorica, Instituto de Matematicas y Fisica Fundamental, Consejo Superior de Investigaciones Cientificas, Serrano 123, E-28006 Madrid, Spain; e-mail: gerardo@cc.csic.es; phone: +34-915901607; fax: +34-915854894

Prof. A. van der Avoird, Insitute of Theoretical Chemistry, Chemistry Department, University of Nijmegen, Toernooiveld 1, NL-6525 ED Nijmegen, The Netherlands; e-mail: avda@theochem.kun.nl; phone: +31-243653037; fax: +31-243653041

Prof. V. Aquilanti, Group of Dynamics of Elementary Chemical Processes, General Chemistry Department, University of Perugia, Via Elce di sotto, I-06123 Perugia, Italy; e-mail: aquila@dyb.unipg.it; phone: +39-0755855512; fax: +39-0755855606

Prof. H.-J. Werner, Institut for Theoretical Chemistry, University of Stuttgart, Pfaffenwaldring 55, D-70569 Stuttgart, Germany;
e-mail: werner@theochem.uni-stuttgart.de; phone: +49 711 685 4400;
fax: +49 711 685 4442

Coordinator P. Rosmus

Stellenausschreibung theoretische Festkörperphysik/-chemie

Am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart ist in der Abteilung Prof. Jansen eine Doktorandenstelle (BAT IIa/2) im Bereich theoretische Festkörperphysik/-chemie zu besetzen.

Schwerpunkt der theoretischen Arbeiten in der Abteilung ist die Entwicklung neuer Methoden zur Vorhersage kinetisch und/oder thermodynamisch stabiler Modifikationen kristalliner Systeme. Zu diesem Projekt sind weitere Informationen auf der folgenden Web-Seite zu finden.

<http://www.mpi-stuttgart.mpg.de/JANSEN/Gr42home/index.htm>

Darüber hinaus werden quantenchemische Methoden eingesetzt, um die chemische Bindung in Festkörpern zu beschreiben.

Bewerber/innen sollten mit UNIX-Rechnern vertraut sein. Die Kenntnis der Programmiersprachen C und/oder Fortran ist hilfreich. Die Bereitschaft zu interdisziplinärem Arbeiten und zur Kooperation mit experimentell arbeitenden Kollegen ist eine wichtige Voraussetzung.

Für Bewerbungen und weitere Auskünfte wenden Sie sich bitte an:

Priv.-Doz. Dr. Christian Schön

MPI für Festkörperforschung

Heisenbergstr. 1

70569 Stuttgart

Tel. 0711-689 1464 bzw. 0711-689 1501

email:schoen@c3serv1.mpi-stuttgart.mpg.de