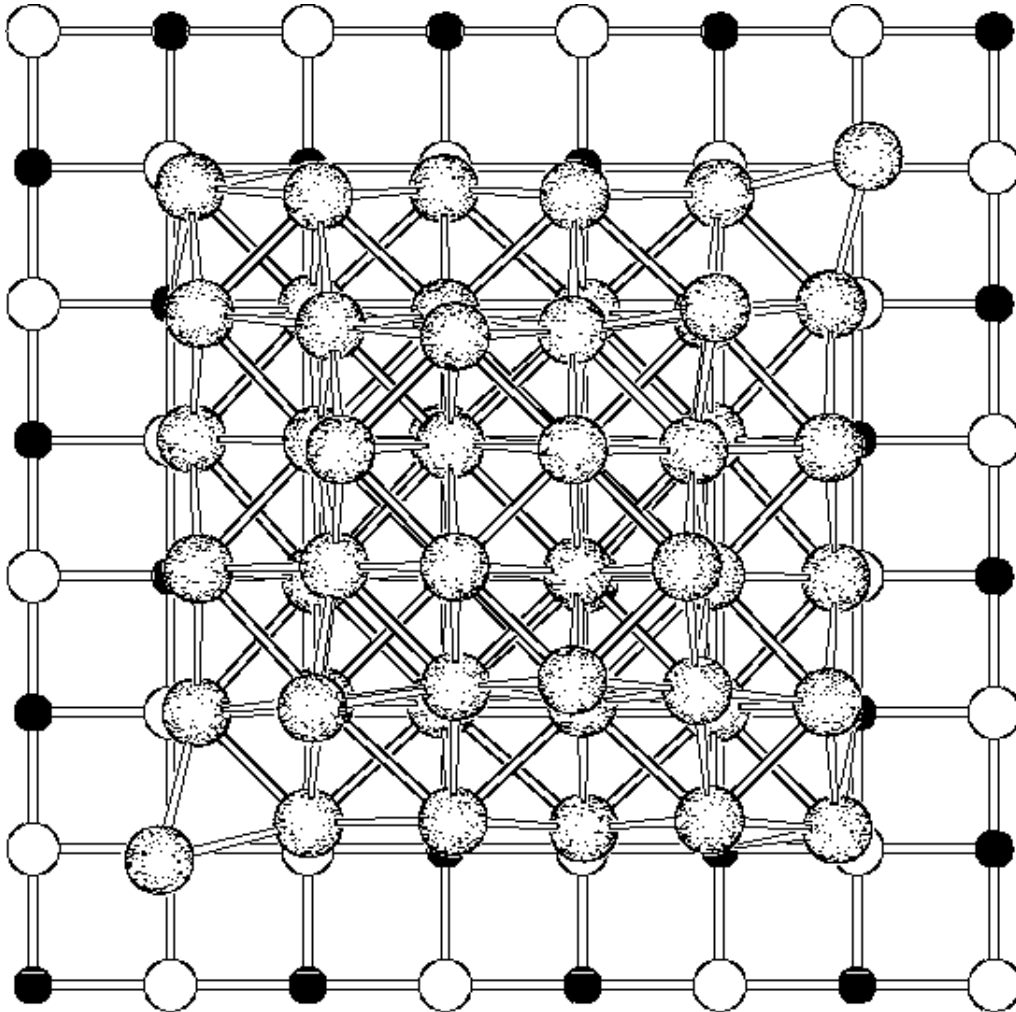


Info

Theoretische Chemie



Adsorption von Kupfer auf MgO

November 2000

Inhaltsverzeichnis

Editorial	2
Bericht über die Mitgliederversammlung der AG Theoretische Chemie	3
Bericht über die Studienreform	6
Bericht über das 36. Symposium für Theoretische Chemie in Litschau	7
Hans G.A. Hellmann-Preis	12
Tagungsvorschau 2000/2001	14
Klatsch & Tratsch	17
Stellenanzeigen	17

Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen, dies ist die dritte und letzte 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> Stellenanzeigen sind unter www.AGTC.uni-bonn.de einsehbar.

Wir wünschen allen ein erfreuliches Jahr 2001. Ab dann wird das INFO von der Arbeitsgruppe Staemmler, Bochum herausgegeben. Dazu wünschen wir viel Erfolg.

K. Jug, G. Geudtner, Hannover

Bericht über die Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie

beim 36. Symposium für Theoretische Chemie, Mittwoch, 13. September 2000, 18:15 Uhr

Tagesordnung

1. Bericht der Vorsitzenden
2. Kassenbericht
3. Symposium 2001 (Bericht Koeppel)
4. Symposium 2002
5. INFO TC (Redaktion, Verbreitung)
6. Kandidatenbenennung für den Vorstand 2001/2002
7. Verschiedenes
0. Die Tagesordnung wurde mit der Erweiterung zu TOP 1 (Bericht Hohlneicher zur Studienreformkommission) angenommen.
- 1.a) Die Etablierung der AG, deren Aufgabe es ist, die Zusammenarbeit der auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie tätigen Wissenschaftler zu fördern und deren Interessen gegenüber anderen Fächern und deren Verbänden zu vertreten, hat zweifellos dazu geführt, dass die Theoretische Chemie in verschiedener Weise "sichtbarer" geworden ist.
 - seit diesem Jahr hat die Theoretische Chemie 3 gewählte Fachgutachter bei der DFG
 - die Theoretische Chemie ist mit eigenem Vertreter in überregionalen Unterrichts Ausschüssen vertreten
 - der Hans G. A. Hellmann-Preis trägt zur weiteren Sichtbarkeit bei (Info darüber in den Veröffentlichungsorganen der Deutschen Bunsengesellschaft, der Gesellschaft Deutscher Chemiker, der Deutschen Physikalischen Gesellschaft und evtl. der schweizer und österreichischen Partnerorganisationen)
 - bei den Evaluationen der Fachbereiche Chemie in verschiedenen Ländern wird die Theoretische Chemie als eigenes Fach neben AC, OC, PC sowie BC und Technische Chemie geführt
 - die Themen und Autoren für die jährlichen Trendberichte in den Blauen Blättern werden von der AG vorgeschlagen

Die web page ist derzeit www.AGTC.uni-bonn.de

- 1.b) Die Umstellung der Beitragszahlung (jetzt über die Deutsche Bunsengesellschaft (DBG) hat an manchen Stellen zu Irritationen geführt, speziell da Mahnungen an solche Mitglieder gegangen sind, die bereits Jahre im voraus bezahlt hatten. Wir hoffen, dass das Verfahren ab dem nächsten Jahr besser klappt - ansonsten bitte kurzes e-mail zur Behebung der Schwierigkeiten an die Vorsitzende (unt000@uni.bonn.de). Die AG dankt der DBG für die bisherige - durchaus umfangreiche - unentgeltlich geleistete Arbeit und hofft auf weitere gute Zusammenarbeit.
Nach einem Beschluß des Vorstandes der DBG wird für Mitglieder der DBG der jährliche DBG-Beitrag um 25,- DM verringert, d. h. für Mitglieder der DBG ist ab 2001 der AG-Beitrag im DBG-Beitrag enthalten.
Die beiden Listen - Mitglieder und Info-Empfänger - wurden abgeglichen; ca. 40

Mitglieder, bei denen trotz Mahnung entweder keine Rückmeldung erfolgte oder nach "unbekannt verzogen" gemeldet wurde, sind aus der Liste gestrichen. Derzeit ist der Mitgliederstand 165.

- 1.c) Herr Hohlneicher berichtet über die Studienreformkommission (s. extra Bericht).
- 2.a) Der Hellmann-Fonds beträgt z. Zt. 13.000,-- DM. Der Vorstand hat beschlossen, einen Spendenaufruf an Mitglieder in Professorenstellen zu schicken, um diesen Fonds beträchtlich aufzustocken. Das Ziel dabei ist es, den Hellmann-Preis langfristig aus diesen Zinserträgen zu sichern.
- 2.b) Herr Franz Mark, MPI Mülheim, wird zum Kassenprüfer gewählt.
3. Herr Köppel berichtet über die Planungen zum Symposium 2001. Das 37. Symposium für Theoretische Chemie (STC 2001) wird vom 23. - 27. September 2001 im Haus der Kirche, Doblerstraße 51, 76332 Bad Herrenalb, stattfinden.
Organisation: H. Köppel, J. Schirmer, P. Schmelcher, L. S. Cederbaum.
Thema: Elektronisch angeregte Moleküle: Struktur und Dynamik.
Er legt eine Liste der eingeladenen Redner mit vorläufigen Vortragstiteln vor. Poster und Kurzvorträge sind zu allen Bereichen der Theoretischen Chemie erwünscht. Weitere Einzelheiten ab ca. Februar 2001 unter <http://www.pci.uni-heidelberg.de/tc>.
4. Es ist nicht gelungen, einen Veranstalter für das Symposium 2002 in der Schweiz zu finden. Hinzu kommt, dass 2002 auch der WATOC-Kongress in der Schweiz (04. - 09. August 2002, in Lugano) stattfindet und außerdem von Thomas Balley (Fribourg) im gleichen Jahr eine Tagung über "Reactive Intermediates" in Ascona veranstaltet wird. Daher wurde beschlossen, dass das Symposium 2002 von deutschen Kollegen organisiert wird. Dafür hat sich Michael Schreiber, Chemnitz bereit erklärt.

Das Symposium 2003 wird dann evtl. von Th. Balley (Fribourg, Schweiz) organisiert. Dieses Arrangement hätte auch den Vorteil, dass nicht im gleichen Jahr unser Symposium und der große International Congress of Quantum Chemistry, der vom 20. - 25. 07. 2003 in Bonn stattfindet, in Deutschland sind.

5. Für die Redaktion des Info Theoretische Chemie haben sich bereit erklärt
für 2001: Herr Staemmler, Bochum
für 2002: Herr Botschwina, Göttingen

Es wird beschlossen, die normale Verbreitung über das Internet zu organisieren (Herunterladen der Datei), wobei per e-mail die Ankündigung an die Mitglieder erfolgen soll, sobald eine Ausgabe fertig ist. Postversand soll nur auf Wunsch erfolgen. Die Aufmachung des Info soll ansprechend sein, so dass man dies auch zum Schmökern an Nicht-Theoretiker (oder in die Auslage der Bibliotheken) weiterreichen kann.

6. Es wurde beschlossen, die Wahl des Vorstandes durch Briefwahl durchzuführen. Es gab keine Bedenken, bei der Amtszeit des Vorstandes vom Kalenderjahr abzuweichen. Dieses Verfahren hat den Vorteil, dass die konstituierende Sitzung des neuen Vorstandes evtl. im Frühjahr während der Bunsentagung erfolgen kann. Der neue Vorsitzende soll das Amt spätestens zum 01. Juli antreten. Die jetzige Vorsitzende hatte ihr Amt am 01. Juni 1999 angetreten.
Es wurden 15 Vorschläge für den Vorstand gemacht. Das folgende Procedere soll erfolgen:
 - (a) Die Vorsitzende fragt bei den Vorgeschlagenen an, ob sie für die Wahl zur Verfügung stehen.
Von den anwesenden Teilnehmern haben sich bereits
Bernd Engels (Würzburg),

Stefan Grimme (Münster),
Volker Staemmler (Bochum),
Hans-Joachim Werner (Stuttgart) und
Christoph van Wüllen (Berlin)

sowie Michael Schreiber (Chemnitz) als Vertreter der DPG zur Verfügung gestellt.
Nach einer Voranfrage ist auch Walter Thiel (MPI Mülheim) wieder zur Kandidatur bereit. Die Versammlung war der Meinung, die in den Vorstand berufenen Personen sollten sich mit der AGTC identifizieren und sich für die Außenwirkung einsetzen, wobei eine rege Teilnahme an den Symposien erwartet wird.

- (b) Die Briefwahl soll gegen Jahresende (Nov./Dez.) erfolgen.
 - (c) Mit den Wahlunterlagen wird ein Formular zur Adressenaktualisierung versandt (Fax, e-mail, Telefon, da diese Info bei vielen Mitgliedern fehlt). Ebenso wird dabei abgefragt, ob das Info Theoretische Chemie auf dem Postweg (Ausnahme) erhalten werden will.
7. Die Vorsitzende dankt den Herren Bernd Hartke und W. H. Eugen Schwarz dafür, daß diese den Bericht über das 36. Symposium im Info TC (und evtl. in den Bunsenberichten) übernehmen werden.

Nach Fragen zur Studienreform und dem Hinweis auf die Tagung in Maria Pfarr (20. - 23. 02. 2001, über Moleküle mit magnetischen Eigenschaften, Organisator Kutzelnigg) schließt die Versammlung um 19:05 Uhr.

Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff

Bericht über die Studienreform

Im Rahmen der Studienreformdiskussion müssen derzeit drei Arten des Chemiestudiums auseinandergehalten werden.

1. Der klassische Diplomstudiengang mit Vordiplom, Hauptdiplom und Diplomarbeit Für diesen Studiengang gibt es eine genehmigte Rahmenprüfungsordnung, die allerdings eine Regelstudienzeit von 9 Semestern vorsieht.
2. Der reformierte Studiengang Chemie, der ein 6-semesteriges Basisstudium und ein darauf aufbauendes 4-semesteriges Vertiefungs- oder Schwerpunktstudium beinhaltet. In dem Schwerpunkt- bzw. Vertiefungsstudium ist die Diplomarbeit enthalten. Für diesen Studiengang wurde eine Rahmenprüfungsordnung erarbeitet, die den Universitäten Anfang dieses Jahres mit der Bitte um Stellungnahme bis 05.05.2000 zugeleitet wurde. Wie oft in solchen Fällen, kann es durchaus sein, daß die Bitte um Stellungnahme, die eigentlich Betroffenen, d.h., die Chemiefachbereiche, gar nicht erreicht hat. Die von den Hochschulen und Ländern vorgetragenen Einwände werden derzeit bearbeitet. Wann mit einer endgültigen Verabschiedung dieser Rahmenordnung zu rechnen ist, ist schwer vor-herzusagen. Ebenso wenig ist sicher, daß das Ergebnis so aussieht, daß dieser reformierte Studiengang eine echte Chance bekommt.
3. Bachelor- und Masterstudiengänge Auch hier wurde eine Art Rahmenstudienordnung erarbeitet, die merkliche Parallelitäten zu der Rahmenstudienordnung für den reformierten Studiengang Chemie aufweist. Allerdings wird es für Bachelor- und Masterstudiengänge keine Rahmenordnung geben, so daß das, was erarbeitet wurde, nur als eine Art Orientierungshilfe zu betrachten ist. Bachelor- und Masterstudiengänge müssen von einer Akkreditierungsagentur akkreditiert werden. Die Akkreditierungsagentur muß prüfen, ob die Studieninhalte einen ausreichenden Qualitätsstandard garantieren und ob die personellen und materiellen Voraussetzungen für die Einrichtung eines solchen Studiengangs gegeben sind. Die Chemie bemüht sich zur Zeit, eine solche Akkreditierungsagentur aufzubauen. Diese Agentur muß aber selbst wieder vom Deutschen Akkreditierungsrat akkreditiert werden. Die Akkreditierung ist bisher nicht erfolgt, es besteht jedoch berechtigte Hoffnung dazu, daß die Akkreditierung noch in diesem Jahr erteilt wird.

Ergänzende Informationen zur Studienreform und zu der im Aufbau befindlichen Akkreditierungsagentur können Sie den Webseiten der GDCh (www.gdch.de) entnehmen.

Prof. Dr. G. Hohlneicher

Bericht über das 36. Symposium für Theoretische Chemie

*'Quantenmechanik und Quanteneffekte
in Systemen zunehmender Komplexität'*

vom 10. bis 14. September 2000 in Litschau (Niederösterreich)

Das 36. Symposium für Theoretische Chemie, STC 2000, war von **Werner Jakubetz** (Institut für Theoretische Chemie und Molekulare Strukturbiologie der Universität Wien) perfekt organisiert worden. Hier sei ihm und allen seinen Mitstreiterinnen, Mitstreitern und Förderern vorab nochmals ganz herzlich gedankt.

Zum Thema des Symposiums (siehe oben) waren in gelungener Auswahl 12 Hauptvortragende zu je einstündigen Präsentationen eingeladen worden. Darin eingebettet war die Hellmann-Preisvergabe mit Vortrag des Preisträgers (siehe nächsten Artikel und weiter unten in diesem Info) sowie 19 ausgewählten Kurzvorträge à 20 Minuten. Zwei Postersitzungen mit insgesamt 90 Postern in zwei Sälen rundeten das wissenschaftliche Programm ab.

Im traditionell-obligatorischen **Experimentatoren-Vortrag** zur geistigen Anregung der versammelten Theoretiker zeigte der auch in TV-Wissenschaftssendungen erfahrene **Anton Zeilinger** (U Wien), dass selbst 'große' Objekte wie die Fullerene C_{60} und C_{70} in Doppelspalt-Experimenten quantenmechanisches Interferenzverhalten, und zwar von besonders interessanter Art, aufweisen. Er fügte dann einige einfache, überzeugende und unwidersprochene Argumente an, die Quanten-Verhalten auch für noch größere Objekte erwarten lassen.

Im Gegensatz zum vorigen Symposium deckten die **theoretischen Hauptvorträge** diesmal einen durchaus breiten Themen-Bereich ab; sie seien hier in der Reihenfolge des Programms referiert, da sich schon so zwanglos eine passende thematische Einteilung ergibt. **Wolfgang Schleich** (Ulm) lieferte in seinem exzellenten Eröffnungsvortrag eine grundlegende Übersicht zum Problem der *Messung quantenmechanischer Zustandsfunktionen*. Er zeigte, wie man in Theorie und Praxis mit der 'Holographie des Quantenzustands' aus Messungen entlang verschieden rotierter Orts- und Impulskoordinaten Wellenfunktion, Wignerfunktion und Husimifunktion rekonstruieren kann. In einem ebenso den physikalischen Grundlagen gewidmeten Vortrag gab **Moshe Shapiro** (Weizmann Institut, Rehovot) eine Zusammenfassung der Grundidee der von ihm und Paul Brumer favorisierten *kohärenten Kontrolle chemischer Reaktionen* mit Lasern. Sie beruht darauf, dass man das Reaktionsziel auf zwei unterschiedlichen Wegen erreicht, die quantenmechanisch miteinander interferieren, wodurch eine Kontrolle über verschiedene Produkte oder Produktzustände möglich wird. Als eine neue Anwendung dieser Strategie führte er eine Möglichkeit zur gezielten Anreicherung eines Enantiomers aus einer racemischen Mischung vor. Naturgemäß ergibt die Analyse der dazu notwendigen experimentellen Anordnung, dass eine gewisse Chiralitätsinformation mittels Polarisierung oder räumliche Anordnung der Laser immer eingespeist werden muss.

In einer mit *Reaktionsdynamik* zureichend charakterisierten Sitzung mit drei wiederum sehr kompetenten Referenten fasste zunächst **Gerhard Stock** (Frankfurt) verschiedene Zugänge zur Inkorporation von Quanteneffekten in klassische Trajektorienrechnungen übersichtlich zusammen. Er demonstrierte, dass sein 'Abbildungszugang' fundierter und erfolgreicher ist als das populäre 'surface hopping'. Im zweiten Teil berichtete er, dass das Problem der Nullpunktsenergie kaum auf dem Niveau einzelner Trajektorien gelöst werden kann. Erfolgversprechender ist die Forderung an das gesamte Ensemble, die klassische Zustandsdichte solle im Langzeitlimit mit der quantenmechanischen übereinstimmen. Anschließend stellte **Uwe Manthe** (TU München) die

theoretischen Grundlagen der klassischen Theorie des Übergangszustands und der quantenmechanisch-exakten Berechnung von Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten in stimulierender Weise gegenüber. Er referierte die Theorie der 'Raten'-Berechnung mittels der Eigenzustände des thermischen Fluss-Operators. Er zeigte in Anwendungen bis hin zur 12-dimensionalen Behandlung der Reaktion $\text{H} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3$, dass Abweichungen von experimentellen Daten - nicht unerwartet - von der Genauigkeit der Potentialflächen diktiert werden. Abschließend gab **Reinhard Schinke** (MPI Göttingen) einen Einblick in die beeindruckende Vielfalt von Resonanzen in scheinbar einfachen dynamischen Systemen der unimolekularen Dissoziation. Zu den Beispielen gehörten: das vergleichsweise 'harmlose' HCO , bei dem gute Übereinstimmung zwischen den sehr detaillierten experimentellen und theoretischen Resultaten zu erreichen war; das HOCl mit sich 'unsystematisch' über sechs Größenordnungen ändernden Resonanz-Lebensdauern; oder das teils chaotische, aber trotzdem mit statistischen Theorien nicht besser beschreibbare NO_2 .

Am dritten Symposiumstag folgte eine Sitzung mit Themen der 'statischen' *ab-initio-Quantenchemie*: Mit einfachen, aber effektiven Folien und trockenem, sympathischem Humor brachte **James Anderson** (Pennsylvania State University) die Quanten-Monte-Carlo-Methodik als Alternative und Ergänzung zu den etablierten Hauptmethoden der Quanten-chemie nachhaltig und beeindruckend in Erinnerung. Von einigen Lehrbüchern und Übersichtsartikeln als uninteressant abgetan, kann sie zumindest kleine Systeme wie CH_4 oder $\text{F} + \text{H}_2$ so genau beschreiben, dass sie sich den kuriosen Vorwurf als 'zu genau für die Chemie' einhandelte. Und für größere Systeme wie C_{10} oder C_{20} liefert sie immerhin so gute Resultate wie CI- oder coupled-cluster-Verfahren. Mit Computeranimation und Beamer-technik bemühte sich **David Yarkony** (Johns Hopkins University, Baltimore) um das Zuhörer-Interesse. In einem inhaltlich interessanten Beitrag berichtete er über korrekte und effektive Charakterisierung von konischen Durchschneidungen durch vier sich aus Gradienten und Gradientendifferenzen ergebende Parameter. Er warnte vor falschen Analogieschlüssen zwischen den Systemen $\text{F} + \text{H}_2$ und $\text{OH} + \text{H}_2$, deren konische Durchschneidungen sich aufgrund der unterschiedlichen Zahl von Freiheitsgraden topologisch-geometrisch unterscheiden. Ein neues Kriterium für sich treffende Durchschneidungs-Säume in Systemen aus drei Atomen wurde vorgestellt.

Es folgten zwei sehr *anwendungsnahe Themen*. **Bernd Engels** (Würzburg) berichtete über Rechnungen an verschiedenen Biradikalsystemen in enger Kooperation mit 'normalen' Organikern. Ein wichtiger Punkt waren die theoretisch-methodischen Anforderungen in diesem Bereich. Zum Beispiel scheint das Ziegler'sche Rezept zur Abschätzung von Multiplett-Aufspaltungen im Kohn-Sham-Schema leider nur bei kleinen Aufspaltungen zuverlässig zu arbeiten. **Pavel Hobza** (Heyrovsky Institut, Prag) stellte die traditionelle, in Spektren durch eine Rotverschiebung charakterisierte Wasserstoffbrückenbindung dem neuen Typ der 'anomalen, blauverschobenen' H-Bindung gegenüber, die einige Experimentatoren aufregt. Allerdings handelt es sich hier gar nicht um die typischen H-Donor-Akzeptor-Systeme. Hobza berichtete über DFT-basierte Rechnungen mit empirischem Dispersionsterm, über Energie- und Freie-Energie-Flächen, über Kraftfeldrechnungen in verschiedenen Ensembles sowie über Anwendungen dieser Techniken auf DNA-Basenpaare in der Gasphase.

Die letzte Sitzung brachte eine Kulmination im Sinne 'wirklich' *komplexer Systeme*: Im *biochemischen Bereich* stellte **Klaus Schulten** (University of Illinois, Urbana) in einem eloquenten Vortrag ein umfassendes Modell der Photosynthese vor, vom Lichteinfang bis zur ATP-Synthese, mit einer beeindruckenden Vielfalt von Informationsbeiträgen: intelligente Röntgenstrukturanalyse; parallele Molekülmechanik mit Millionen von Atomen; semi-empirische Hamiltonoperatoren;

Zufallsmatrixtheorie und stochastische Pfadintegrale; Kombination experimenteller und theoretischer Daten bei der Bestimmung von Transfergeschwindigkeiten; etc.. Auch wenn sich einige Zuhörer fragten, wieviel des Gezeigten gesicherte Erkenntnis ist, kristallisierten sich doch einige qualitative Erklärungen der gefundenen Strukturen als glaubhaft heraus. Die innerhalb eines Faktors von zwei richtig vorhergesagten Geschwindigkeiten verschiedener Transferschritte in dem weiten Bereich von 50 fs bis 40 ps überzeugten als klare Pluspunkte des vorgestellten Modells. Zur Visualisierung der Konformationsfluktuationen von Chlorophyll- und Carotenoid-Aggregaten und des Drehmechanismus der ATPase waren hier Computeranimationen tatsächlich hilfreich. Der letzte eingeladene Vortrag war der *anorganischen Materialwissenschaft* gewidmet. **Jürgen Hafner** (U Wien) gab hierzu einen Überblick über die Einsatzmöglichkeiten direkter DFT-Moleküldynamik, mit Anwendungen auf Silikatstrukturen, auf das Phasendiagramm des Bornitrids, auf Zintl-Phasen und auf Entschwefelungs-Mechanismen an Molybdänoberflächen.

Die **Festsitzung zur Hellmann-Preis-Verleihung** (siehe diesbezüglichen Artikel in dieser Info) war auf den ersten Tagungs-Nachmittag anberaumt worden. **Andreas Görling** (TU München) berichtete in seinem **Preisträger-Vortrag** (in deutscher Sprache) über eine saubere störungstheoretische Begründung von Dichtefunktional-Austauschpotentialen und präsentierte eine Reihe überzeugender Anwendungsbeispiele.

Die **ausgewählten Kurzvorträge** boten eine ausgewogene Mischung unterschiedlicher Qualität aus Methodenentwicklungen und Anwendungen in den Bereichen der statischen Quantenchemie (ab-initio, DFT und semiempirisch) und der Schwingungs- und Reaktions-Dynamik. Bei der *Methodenentwicklung* in der statischen Quantenchemie präsentierte **M. Schütz** (Stuttgart) verschiedene linear skalierende Varianten zur Behandlung der triples-Beiträge zum lokalen coupled-cluster-Verfahren, die um bis zu sechs Größenordnungen schneller, aber praktisch ebenso genau sind wie konventionelle Zugänge. **A.D. Boese** (Cambridge) sprach zur nahezu rein empirischen Entwicklung neuer Dichtefunktionale. Bei den *Anwendungen* der statischen Quantenchemie demonstrierte **M. Dallos** (U Wien / Argonne Natl. Lab.) anhand von MR-CISD- und MR-AQCC-Geometrieoptimierungen angeregter Zustände von CH_2O , dass der π - π^* -Zustand aufgrund einer konischen Durchschneidung mit dem σ - π^* -Zustand nicht planar ist. **M. Bühl** (MPI Mühlheim) präsentierte Korrelationen zwischen DFT-berechneten NMR-Verschiebungen und katalytischer Aktivität von Übergangsmetallkomplexen. **C. Mueck-Lichtenfeld** (Münster) wandte sorgfältige DFT-Rechnungen auf die Umlagerung zwitterionischer Zirkonocene an. **M. Hutter** (MPI Frankfurt) modellierte den Phosphoryl-Transfer von verschiedenen Kinasen auf AM1-Niveau. **T. Krüger** (U Graz) bemühte sich um ein besseres Verständnis des Staebler-Wronski-Effekts in Solarzellen aus amorphem Silicium mit ONIOM-Methoden. **G. Seifert** (Paderborn) machte Strukturvorschläge auf dem aktuellen Gebiet schon synthetisierter wie neuartiger anorganischer Nanoröhren mittels eines ladungskonsistenten, DFT-basierten tight-binding-Verfahrens. In die Zeitabhängigkeit leitete **T. Sommerfeld** (Heidelberg) mit sorgfältigen Berechnungen von Energien und Lebensdauern kleiner Dianionen über.

Im Bereich der *Vibrations-Kerndynamik* sprachen sowohl **R. Jaquet** (Siegen) als auch **A. Alijah** (Bielefeld) über Schwingungen gebundener Zustände des H_3^+ . Ersterer benutzte in einem anschaulichen Überblick die sehr genau berechnete Grundzustandsfläche, letzterer konzentrierte sich auf die niedrigsten Triplettflächen. **D. Luckhaus** (ETH Zürich) diskutierte überzeugend und klar Schwingungs-Adiabatizität, vereinfachte Schwingungs-Hamiltonoperatoren und verbesserte Reaktionsweg-Hamiltonoperatoren. **O. Kühn** (FU Berlin) behandelte die intramolekulare Schwingungsenergie-Umverteilung in Phthalsäuremonomethylester nach Laseranregung mit einem Reaktionsflächen-Hamiltonoperator und TDSCF in 55 Dimensionen.

Mehrere Kurzvorträge waren der *reaktiven Dynamik* gewidmet: **S.C. Althorpe** (Durham) zeigte Schnappschüsse von 'state-to-state'-Wellenpaketen. **H. Köppel** (Heidelberg) konnte mit 5D-Dynamik auf einer CCSD(T)-Fläche der Vinyliden-Acetylen-Umlagerung das experimentelle Spektrum sehr gut reproduzieren und zeigte, dass die sehr modenspezifischen Lebensdauern des Vinyliden damit zwar um Größenordnungen länger erhalten werden als bisher angenommen, aber immer noch deutlich kürzer als die aus Coulomb-Explosion abgeleiteten 3 μ s. **A. Hofmann** (MPI Garching) zeigte schöne Kontrollmöglichkeiten in einer auf 3 Dimensionen beschränkten Dynamik der photoinduzierten Ringöffnung von Cyclohexadien auf gekoppelten CAS-SCF-Flächen über zwei verschiedene konische Durchschneidungen. **I. Frank** (U München) führte CPMD-Simulationen von AFM-Experimenten zur Bindungsdehnung und zum heterolytischen Bindungsbruch von Polymeren in wässriger Lösung vor. Das Konzert der Kurzvorträge wurde abgerundet von **U. Kleinekathöfer** (Chemnitz) mit laserpulsinduzierter Ladungstransferdynamik eines 2D-Betain-Modellsystems und von **A. Lami** (Pisa) mit numerischen Experimenten zur Dynamik in einem einfachen 2D-Modellsystem mit konischen Durchschneidungen.

Nicht vergessen werden soll schließlich der Bericht von **H. Lischka** über COST, eine Vereinigung zur *Förderung der wissenschaftlichen und technischen Zusammenarbeit in Europa*. In der Aktion 'COST Chemie' (siehe <http://www.unil.ch/cost/chem/>) sind die für die Chemie wichtigen Schwerpunkte zusammengefaßt. Für die Theoretische Chemie sind die beiden Aktionen D9 (Advanced Computational Chemistry of Increasingly Complex Systems) und D23 (Metachem: Metalaboratories for Complex Computational Applications in Chemistry) von besonderem Interesse. Es werden gemeinschaftliche Projekte von Arbeitsgruppen, die aus mehreren europäischen Ländern kommen müssen, gefördert. Projektanträge müssen an das entsprechende Management-Komitee geschickt werden. Die Finanzierung der Projekte erfolgt national. Von COST gibt es finanzielle Unterstützung für Arbeitsgruppentreffen und "short term scientific missions".

Auf die **Fülle der Poster** kann natürlich nicht mehr im Detail eingegangen werden. Die thematische Verteilung bewegte sich im üblichen Rahmen: Etwa ein Drittel der Poster befasste sich mit ab-initio- oder DFT-Methodenentwicklung, etwa ebenso viele mit reinen Anwendungen solcher Methoden auf verschiedenste chemische Fragestellungen. Im Gegensatz zum Vortragsprogramm waren Poster zur Reaktionsdynamik mit etwa nur einem Sechstel in der Minderheit. Erfrischerweise widersetzte sich das verbleibende Sechstel einer solch einfachen Charakterisierung und spiegelte die ganze Bandbreite der theoretischen Chemie wieder. Entsprechend wurden die Postersitzungen intensiv und lange besucht.

Zum Schluss einige **allgemeine Anmerkungen**: *Zum Tagungsort* war die autofreie Feriensiedlung Koenigsleitn in Litschau ausgesucht worden. Litschau ist ein kleiner Ort im Waldviertel in Niederösterreich, in einem Zipfel unweit der Grenze zur Tschechischen Republik, in ausgesprochen ruhiger, naturnaher Randlage. Die separaten Ferienhäuser bestachen durch ihre ländlich-idyllische Atmosphäre bei praktischer Unterbringung in komplett ausgestatteten Ein- und Mehrzimmer-Appartements. Dem unmittelbaren Nebeneinander von bequemer Unterbringung, flexibler Bewirtung aller Teilnehmer, Vortrags-Hörsaal und Poster-Räumen war es zu verdanken, dass die Tagung zu intensivem Miteinander und anregenden wissenschaftlichen Diskussionen führte - und das trotz der Kombination von perfektem Sommerwetter und umfangreichem Freizeitangebot vor Ort mit Badesee (für Tieftemperatur-Experimentatoren), mit Wanderwegen, Fahrradverleih sowie Tennis- und Golf-Plätzen.

Das so schon mehr als ausreichende *Rahmenprogramm* wurde von einer Exkursions-Alternative gekrönt, die den Teilnehmern die landschaftlichen und kulturellen Reize der Region nahebrachte. Die eine Fahrt führte zum Zisterzienser-Stift und Städtchen Zwettl, mit frühmittelalterlichen,

gotischen, Renaissance- und Barock-Bauten, mit integriertem Hundertwasser-Brunnen und launig-dörflicher Führung. Die Alternativ-Fahrt hatte Weitra zum Ziel, mit seinem imposanten Renaissanceschloss über einem harmonischen Marktplatz, umgeben von Bürgerhäusern aus diversen Jahrhunderten (je mit eigenem Braurecht). Eine kompetente Führerin spannte den Bogen von alten Stadtdokumenten mit handtellergroßen Siegeln, über Portraits und Artefakte des Fürstenberger Geschlechts, bis zur umfassenden Brauereiausstellung im Schloßgewölbe.

Die ansonsten optimale, oben gelobte *Tagungsort* erzwang eine gewisse Enge bei den Postern. So war es gut, dass wenigstens alle Poster die ganze Tagungszeit aufgehängt bleiben konnten. Leider fehlte auf der ersten Postersitzung vielen Teilnehmern die ausreichende Information über Getränkequellen, insbesondere da die vielen, intensiven Diskussionen die Hälse rasch trocken werden ließen. - Vielleicht erstmalig war genügend Zeit zu Diskussionen bei den einstündigen Hauptvorträgen, die auch genutzt wurde. Allerdings wurde von manchen, jedoch eben keineswegs von allen Tagungsteilnehmern eine ganze Stunde als zu lang empfunden.

Schon dem *Vorankündigungs-Programm* hatte man ein interessantes und breites Themenangebot entnehmen können. Daher hatten Organisator wie Teilnehmer einen größeren Zuspruch seitens der Arbeitsgruppenleiter aus Deutschland, Österreich und der Schweiz erwartet. Die geographische Lage des Tagungsortes hätte auch mehr Gäste aus anderen, nahegelegenen Ländern ermöglichen können. Es wird ja inzwischen die deutsche Sprache nur noch auf den ersten Seiten der Programm-Broschüre (neben Englisch), beim Hellmann-Preisvortrag (nur einige wenige nicht Deutsch sprechende Europäer blieben der Preisverleihung deswegen fern) und vereinzelt auch bei Posterdiskussionen verwendet. Offenbar hatte aber die Summe aus Tagungsbeitrag und Aufenthaltskosten nicht nur jüngere Mitarbeiter und nicht-deutsch-sprechende Gäste, sondern auch einige mehr oder weniger arrivierte Theoretiker der AGTC abgeschreckt. Das Dilemma zwischen der Nutzung preiswerter Tagungsressourcen in Universitätsstädten mit ihren attraktiven Lokalen einerseits - und andererseits einem isolierten Klausur-Hotel mit gebührenpflichtigen Konferenz-Arrangements und vorprogrammierter Unausweichlichkeit nachmittäglicher und abendlicher wissenschaftlicher Diskussionen ist wohl prinzipiell nicht zur Zufriedenheit aller auflösbar. Aus Sicht der erschienenen Teilnehmer jedenfalls war das diesjährige STC in Litschau eine in wissenschaftlichem Teil, Organisation und Rahmenprogramm gelungene Veranstaltung.

Das nächste Symposium mit dem Hauptthema 'Elektronisch angeregte Moleküle: Struktur und Dynamik' wird freundlicherweise von Herrn Köppel aus Heidelberg und seinen Kollegen vom 23. bis 27.09.2001 in Bad Herrenalb in der Nähe von Karlsruhe arrangiert werden. Details sind in Kürze unter <http://www.pci.uni-heidelberg.de/tc/stc2001> zu finden. Selbst für das übernächste Symposium konnte schon ein Ausrichter gefunden werden: Herrn Schreiber aus Chemnitz sei dafür im Voraus gedankt.

B. Hartke (Stuttgart), W.H.E. Schwarz (Siegen)

Hans G.A. Hellmann-Preis

Es wird über die Verleihung des Hellmann-Preises 2000, über die Ausschreibung des Hellmann-Preises 2001 sowie über den Hellmann-Fonds berichtet.

Hans G. A. Hellmann, der Pionier der Quantenchemie in Deutschland, wurde am 14.10.1903 in Wilhelmshaven geboren und 1933/34 von den Nazis - aufgrund der jüdisch-ukrainischen Herkunft seiner Frau - aus seinem Amt in Hannover entfernt. Er nahm daraufhin eine führende Position im Karpov-Institut für Physikalische Chemie in Moskau an und wurde während Stalins "Großem Terror" 1937/38 im Alter von 34 Jahren liquidiert. Neuere Nachforschungen ergaben als Todestag den 29. Mai 1938. Zu Hellmanns Leistungen gehören zum Beispiel das erste Lehrbuch der "Quantenchemie", die Herleitung und Anwendung der molekularen Virial- und Kraft- (sog. Hellmann-Feynman-) Theoreme, die Deutung der Natur der kovalenten Bindung, die Einführung der Pseudopotentialmethode und die diabatische und adiabatische Darstellung der Theorie elementarer Reaktionen.

Unter www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/ finden Sie weitere Einzelheiten zu Hellmanns wissenschaftlichem und persönlichen Lebenslauf.

1. Einrichtung des Hellmann-Fonds für den Hellmann-Preis

Auf dem Symposium für Theoretische Chemie 1998 hatte die Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie (AGTC) beschlossen, im Andenken an diesen Pionier der Quantenchemie regelmäßig einen "Hans G. A. Hellmann-Preis" an eine in einem Bereich der Theoretischen Chemie arbeitende Nachwuchs-Wissenschaftlerin bzw. an einen Wissenschaftler zu verleihen. Die erste Verleihung erfolgte im Rahmen des 35. Symposiums für Theoretische Chemie 1999 an Willem M. Klopper (Utrecht), die zweite während des 36. Symposiums 2000 an Andreas Görling (München), siehe unten.

Die AGTC hat nun einen Fonds eingerichtet, aus dessen Zinserträgen der möglichst jährlich zu vergebende Preis zukünftig finanziell ausgestattet werden sollte. Der *steuerbegünstigte* Fonds (mit einem Kapitalgrundstock von über 10.000 DM) wird von der Deutschen Bunsengesellschaft für die AGTC verwaltet. Er muss noch kräftig wachsen. Erste Spenden von einigen Lehrstuhlinhabern und Emeriti der Theoretischen Chemie in Höhe von 1.000 DM sowie etwas geringere Beiträge von anderen Dauerstelleninhabern und Freunden der Theoretischen Chemie sind schon eingegangen. Die AGTC bittet ganz herzlich, bei der Aufstockung des Fonds mitzuwirken. Selbstverständlich werden *Spendenquittungen* für Ihre steuerlichen Zwecke ausgestellt.

Der Hellmann-Preis hilft übrigens in vielfältiger Weise, die Aufmerksamkeit auf das eigenständige, interdisziplinäre Fach der Theoretischen Chemie zu lenken. Daher hoffen alle Freunde der theoretischen Chemie auf tatkräftige Unterstützung des Fonds:

Bankverbindung: Deutsche Bunsengesellschaft

Konto-Nr. 491 061 800, Dresdner Bank Frankfurt,
BLZ 500 800 00, Kostenstelle 8110 (Hellmann-Fonds)

Spender können einen Sonderdruck zu Leben und Werk von Hans Hellmann (Bunsenmagazin 1999, 1(1): 10-21 und 1(2): 60-70: Hans G. A. Hellmann (1903-1938) - Ein Pionier der Quantenchemie) postalisch bei der *Theoretischen Chemie, Universität Siegen, D-57068 Siegen, Deutschland*, oder per Email bei schwarz@chemie.uni-siegen.de anfordern. Die Namen der Spender können in die Spenderliste der Hellmann-homepage

(www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/) aufgenommen werden.

2. Verleihung des Hellmann-Preises 2000 an Herrn Priv. Doz. Dr. A. Görling

durch die Vorsitzende der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie in GDCh, DPG und Bunsengesellschaft (AGTC), Frau Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff, Bonn, am 11.9.2000 während des 36. Symposiums für Theoretische Chemie in Litschau/Niederösterreich (siehe den Bericht in dieser Info).

Andreas Görling, Jahrgang 1960, studierte Chemie an der Technischen Universität München. Ende der 80er Jahre rankten sich seine Dissertationsarbeiten bei Prof. Rösch um verschiedene anwendungsorientierte Themenstellungen der Theoretischen Chemie. Dabei machte er erste Bekanntschaft mit der damals auch bei Chemikern in Mode gekommenen Dichtefunktionalmethode (deren Förderung durch Kohn und Pople 1998 mit dem Nobelpreis für Chemie ausgezeichnet wurde). Während eines längeren Gastaufenthaltes in New Orleans ließ sich Andreas Görling von Prof. Levy in die theoretische Analyse der Grundlagen der Dichtefunktionale einführen. A. Görling hat dann sowohl den grundlegenden Formalismus wie die anwendungstechnischen Rechenverfahren weiterentwickelt und wurde mit diesen Ergebnissen, zurück in München, im Jahre 1995 habilitiert. Seither hat er weitere Beiträge zur verbesserten dichtefunktionaltheoretischen Behandlung von Grund- und insbesondere von angeregten Zuständen in kleineren Molekülen wie in ausgedehnten Festkörpern, mittels selbstwechselwirkungsfreier Austauschpotentiale und unter Lösung des Symmetriedilemmas, neuerdings auch zur Untersuchung nichtlinearer optischer Phänomene, erarbeitet.

Im Anschluss an die Laudatio durch Frau Peyerimhoff hielt Herr Görling den Hans-Hellmann-Preisträger-Vortrag in deutscher Sprache.

Görling stellte den traditionellen Zugang zu Dichtefunktionalen der "Constrained-Search"-Formulierung gegenüber. Eine Konstruktionsmethode für zustands- und orbitalabhängige Kohn-Sham-Potentiale wurde vorgestellt. Das exakte Austauschpotential ist selbstwechselwirkungsfrei und liefert im Vergleich zu üblichen Dichtefunktionalen bemerkenswert korrekte Halbleiter-Bandlücken. Auch das Symmetrie-Problem der Kohn-Sham-SCF-Methode wurde angegangen. Das neue, auf Grund- wie angeregte Zustände anwendbare Verfahren geht nicht vom üblichen Kohn-Sham-Ansatz, sondern vom Constrained-Search-Konzept aus, unter adiabatischer Verbindung quasifreier und korrekt wechselwirkender Elektronensysteme. So konnten überraschend zuverlässige Anregungsenergien, Multiplettaufspaltungen, Rydberg-serien und Innerschalenlöcher von Atomen und kleinen Molekülen reproduziert werden (siehe z.B. Phys. Rev. A **47** (1993) 2783, **59** (1999) 3359; Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 2089, **83** (1999) 5459).

3. Ausschreibung des Hans G. A. Hellmann-Preises 2001

Im Rahmen des 37. Symposiums für Theoretische Chemie, das vom 23. - 27. September in Bad Herrenalb (bei Karlsruhe)/Deutschland stattfinden wird, soll wieder der Hans G.A. Hellmann-Preis für Theoretische Chemie verliehen werden. Der Preis wird satzungsgemäß (siehe <http://www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/>) für hervorragende wissenschaftliche Leistungen aus dem *Gesamtbereich* der Theoretischen Chemie an jüngere Nachwuchswissenschaftler(innen) verliehen, die noch keine Lebenszeit-Stellung innehaben.

Vorschläge (mit Curriculum, Laudatio, Publikationsliste und einigen Sonderdrucken des Kandidaten, Details siehe WWW) werden bis zum 15. April 2001 erbeten an die Vorsitzende der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie, Frau Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff, Theoretische Chemie, Universität Bonn, Wegeler Str. 12, D-53115 Bonn, Deutschland.

W.H.Eugen Schwarz.

Tagungsvorschau 2000/2001

Stand: 4. 11. 2000

Zusammengestellt von:

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

- Straße des 17. Juni 112, 10623 Berlin, Sekr. ER 1, Tel. : (030) 314 23774 ;
- Hermannstr. 1, 14163 Berlin, Tel. priv.: (030) 8131669 oder 8134045

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 <http://www.thch.uni-bonn.de/AGTC>

2000:

- **11. - 16. 12. in Berlin: Jubiläumswoche 100 Jahre Quantentheorie**
14. 12., 16.00 Uhr: Festsitzung im Schauspielhaus am Gendarmenmarkt
11. - 16. 12.: Symposien I - IV in der TU Berlin
WWW: <http://www.dpg-physik.de/kalender/qt100/qt100.htm>

2001:

- **14. - 17. 1. in Wien:**
Tagung über Angewandte Dichtefunktional-Theorie
WWW: <http://www.physics.at/dft2001>
- **12. - 15. 2. in Zürich:**
Jahrestagung der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik - GAMM 2001
WWW: <http://www.GAMM2001.ethz.ch>
- **18. - 21. 3. in Leipzig:**
Chemiedozententagung
- **26. - 30.3. in Hamburg:**
65. Physikertagung und Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik (AKF) der DPG
WWW: <http://www.dpg-tagungen.de/info/hamburg2001.html>
- **im April in Sofia, Bulgarien:**
Sixth European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics
E-Mail: quantum@rl.ac.uk

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

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

- **24. - 29. 8. in Baltimore, Maryland, USA:**
7 th International Wigner Symposium
 WWW: <http://www.physics.umd.edu/robot/wigsym.html>

- **vorauss. 23. -27. 9. in Bad Herrenalb:**
37. Symposium für Theoretische Chemie
 L. S. Cederbaum (Heidelberg) , H. Köppel

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

Hinweise auf weitere Tagungskalender:

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

- **Physikalische Blätter, Tagungskalender**
 WWW: <http://www.wiley-vch.de/vch/journals/2050/konfer/index.html>

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

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

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

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

THE 2001 GORDON CONFERENCE ON MOLECULAR ENERGY TRANSFER

Co-chairs: Joel M. Bowman (Emory University)
Hanna Reisler (University of Southern California)

Sheraton Harbortown Resort
January 14-19, 2001
Ventura, California

As is customary, the meeting (which alternates every two years between Europe and the US) will cover all aspects of energy transfer, such as decomposition and reaction dynamics, intramolecular energy transfer, and energy transfer in media ranging from gas and clusters to condensed phases and interfaces. Several sessions will be devoted to new topics such as He nanodroplets, single molecule detection, etc. Oral sessions will take place in the morning and in the evening. At the beginning of each session, the session Chair will give a 20 minute perspective of the field. Each oral presentation will be 35 minutes, leaving ample time for discussion.

The conference will begin on Sunday afternoon at 4:30 PM with a reception and oral presentations at 7:30 PM. Poster sessions will take place after the evening talks on Monday - Thursday. Afternoons are free for discussions, volleyball at the beach, jogging, swimming, etc. Trips to nearby points of interest will be organized. The conference will culminate with the Thursday evening banquet, and the after dinner session in which the breadth of the field of molecular energy transfer, its modern practice and novel directions will be discussed. Departure is on Friday morning. Application forms for the Gordon Conference must be submitted to the GRC office, University of Rhode Island, P.O. Box 984, West Kingston, RI 02892-0984. Tel. 401 783-4011 (-7644 fax). Early application is encouraged because the conference has usually close to the maximum allowed number of attendees. The deadline for registration at a reduced rate is 4 weeks prior to the conference. Please plan to apply by December 7, 2000. The deadline for submission of posters December 22, 2000.

We hope to raise support for student and postdoc travel.

UPDATED INFORMATION ABOUT THE PROGRAM

CAN BE FOUND AT <http://www.grc.uri.edu/programs/2001/met.htm>

Hanna Reisler	phone: (213) 740 7071
Department of Chemistry	fax: (213) 740 3972
University of Southern California	E-mail: reisler@chem1.usc.edu
Los Angeles, CA 90089-0482	web: http://www-rcf.usc.edu/~reisler/

Klatsch & Tratsch

Herrn Prof. Dr. R. Ahlrichs wurde auf der 99. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft in Würzburg die Bunsen-Denkmünze 2000 verliehen. Außerdem erhielt er den mit 200.000 DM dotierten Landesforschungspreis Baden-Württemberg für den Bereich Grundlagenforschung

Herr PD Dr. M. Schoen, Universität Gesamthochschule Wuppertal hat den Ruf auf eine C3-Professur für Theoretische Chemie am Ivan N. Stranski-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der TU Berlin angenommen.

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

Herr PD Dr. C. van Wüllen, Ruhr-Universität Bochum hat den Ruf auf eine C3-Professur für Angewandte Quantenchemie und Computerchemie am Institut für Organische Chemie der TU Berlin angenommen.

Wir gratulieren

Stellenanzeigen

POSTDOKTORAND IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY/THEORETISCHER CHEMIE

Zum 1.1.2001 ist in meinem Arbeitskreis eine auf 2 Jahre befristete Postdoktorandenstelle (BAT IIa) zu besetzen. Im Rahmen dieser Stelle sollen quantenchemische Berechnungen der Strukturen, Bindungsverhältnisse und Reaktionsmechanismen von Modellverbindungen von *Metall-Enzymen* durchgeführt werden. Die Arbeiten stehen im Zusammenhang mit einem geplanten neuen *Sonderforschungsbereich* am Fachbereich Chemie der Philipps-Universität Marburg. Es besteht die Möglichkeit, die theoretischen Untersuchungen als Startphase einer *Habilitation* zu nutzen. Erfahrungen mit quantenchemischen ab-initio, DFT und MD Methoden werden erwartet. Anfragen und Bewerbungen sind an folgende Adresse zu richten:

Prof. Gernot Frenking
Fachbereich Chemie Philipps-Universität
D-35032 Marburg

Tel: 06421-282-5563
Fax: 06421-282-5566
Email: frenking@chemie.uni-marburg.de

POSTDOC FELLOWSHIPS IN COMPUTATIONAL QUANTUM CHEMISTRY
Immediately Available

2-3 New Post-Doc Positions in Metallo-Enzymes and Organometallic Reactivity

Address for contact:

Professor Sason Shaik

**Department of Organic Chemistry and The LISE MEITNER-MINERVA CENTER for
Computational Quantum Chemistry**

Hebrew University 91904, Jerusalem

ISRAEL

FAX +972(2)6585345, +972(2)6584680

E-mail: sason@yfaat.ch.huji.ac.il

WWW home page <http://yfaat.ch.huji.ac.il/sason.html>

=====
Projects: Two State Reactivity of Metallo-Enzymes and Model Organometallics, Using Tools of Computational Quantum Chemistry

- Reactivity of model organometallic species which perform oxidations of organic compounds.
- Reactivity of Cytochrome P-450 and related enzymes which perform oxidations of C-H bonds (HRP, SAMO, NOS).
- Reactivity of oxometallates.

See for example recent papers: Chem Eur. J., 4, 193, (1988), Angew Chem Int. Ed., 38, 3510-3512 (1999), J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 399-411 (1999), Account Chem Res. 35, 139 (2000).

MO and DFT-based methods. QM/MM methods.

Specifications:

- * Send CV, list of publications, and names/addresses/e-mail addresses for two references. Also, arrange letters from these references
- * For all Candidates: Fluency in English is essential including scientific writing skills. Application not meeting these specifications will not be handled.
- * **PRIORITY** will be given to candidates with experience in organometallic chemistry and in quantum chemical computations.