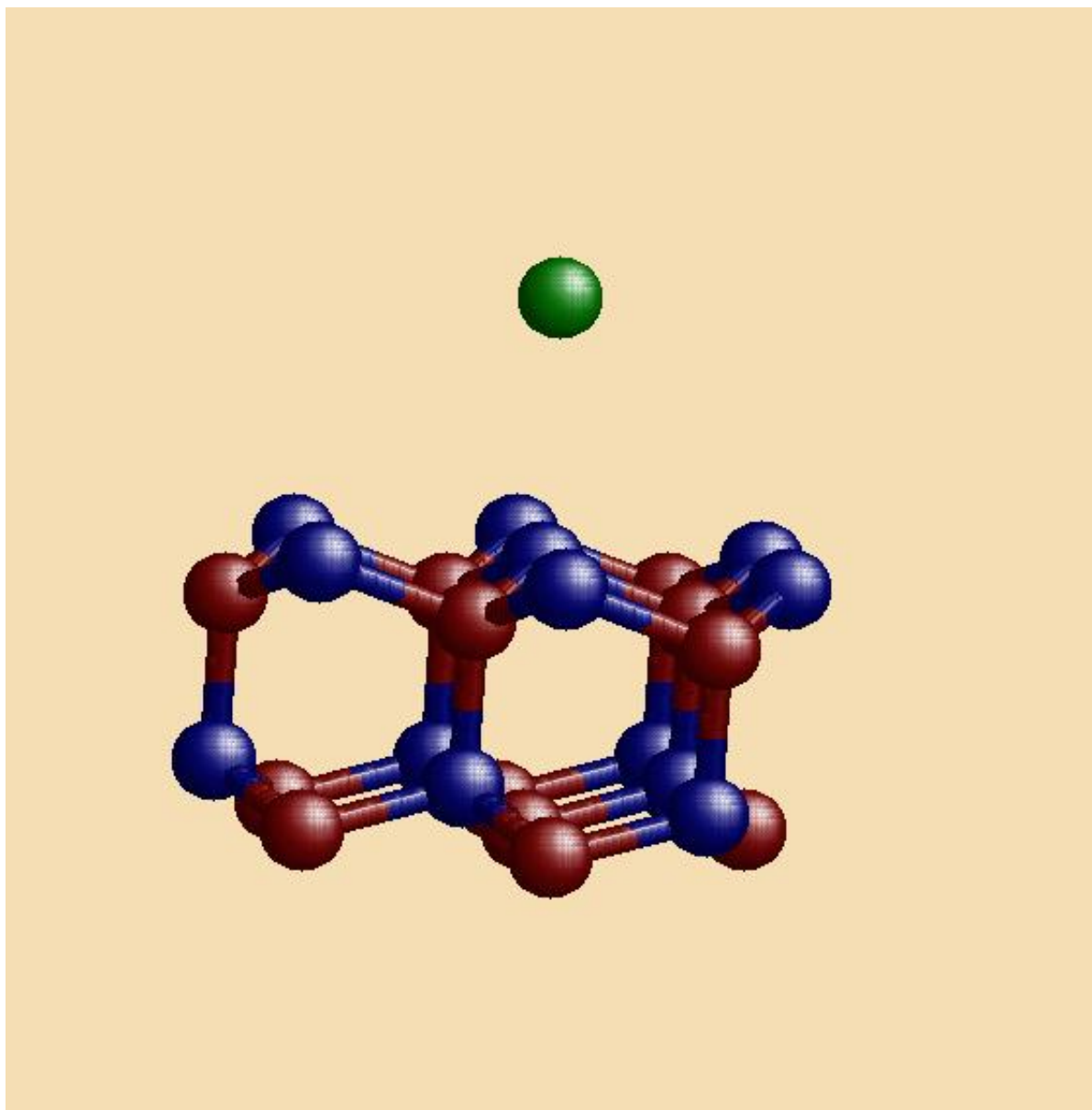


# Info

# Theoretische Chemie



**Ausgabe Dezember 2001**

## **Inhaltsverzeichnis**

1. Editorial
2. Bericht über das STC 2001
3. Emeriti stellen sich vor
4. Aus dem Vorstand
5. Klatsch & Tratsch
6. Tagungsvorschau 2002
7. Spezielle Tagungsankündigungen
8. Hellmann Preis
9. Physics Reports

## **Editorial**

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

an den Chemie-Fakultäten von vielen Universitäten und technischen Hochschulen in Deutschland ist zur Zeit eine intensive Diskussion über die Struktur des Chemie-Studiums im Gange; an manchen Fakultäten werden die Studiengänge für Chemie, Biochemie und das Lehramt Chemie bereits umgebaut. Anlaß für diese Diskussion ist natürlich die Notwendigkeit, das Chemie- Studium permanent den aktuellen Anforderungen anzupassen sowie ein gewisser Druck der Landes-Kulturministerien, international anerkannte Bachelor- und Master-Abschlüsse einzuführen (Stichwort "gestufte Studiengänge").

Die Studienreform-Kommission der GdCh hat in den letzten Jahren ein neues Studienmodell erarbeitet, das ein sechs-semesteriges Basis-Studium und ein vier-semesteriges Aufbau-Studium vorsieht. Seitens der AGTC haben Herr Kutzelnigg und Herr Domcke in der Studienreformkommission mitgearbeitet und dafür gesorgt, daß die Theoretische Chemie im Basis-Studium angemessen vertreten ist. Dieses Modell könnte als Grundlage für die neu zu formulierenden Studiengänge an vielen Universitäten werden. Wir haben den Entwurf daher diesem InfoTC angehängt bzw. verweisen auf die entsprechende Seite der GdCh: Empfehlungen der Studienreformkommission

An der Fakultät für Chemie der Ruhr-Universität Bochum sind mit Beginn des laufenden Semesters Bachelor- und Master- Studiengänge für Chemie eingeführt worden; der Diplom-Studiengang läuft unwiderruflich aus. Bachelor- und Master-Studiengänge für Biochemie werden im nächsten Jahr eingeführt werden. Diese Studiengänge sind nicht identisch mit dem Entwurf der Studienreformkommission, ähneln ihm jedoch in vielen Punkten. Details können der Homepage der Fakultät für Chemie der Ruhr-Universität entnommen werden.

Wir wünschen allen Kolleginnen und Kollegen ein schönes Weihnachtsfest und ein erfolgreiches Jahr 2002.  
V.Staemmler, K.Fink, Bochum

## **Bericht über das 37. Symposium für Theoretische Chemie in Bad Herrenalb (Deutschland)**

Das Symposium fand im schön gelegenen Urlaubs- und Kurort Bad Herrenalb im Schwarzwald statt. Die Tagungsstätte der Evangelischen Akademie Baden (Haus der Kirche) liegt oberhalb des gut zu Fuss erreichbaren historischen Stadtkerns von Bad Herrenalb. Für die etwa 250 Teilnehmer aus dem deutschsprachigen Raum sowie aus angrenzenden Ländern stand ein technisch hochwertiger Seminarraum mit moderner Tagungstechnik und kompletter Mediene Ausstattung zur Verfügung. Etwa die Hälfte der Teilnehmer konnte direkt am Veranstaltungsort in komplett eingerichteten Einzelzimmern untergebracht werden. Die umliegenden Hotels und Pensionen lagen leicht erreichbar in unmittelbarer Nähe. Ein besonderes Lob geht an das Haus-Team, das die Durchführung der Veranstaltung in unkomplizierter Weise tatkräftig unterstützte.

Wie in den letzten Jahren üblich, war auch in diesem Jahr ein Schwerpunktsthema für das Symposium gewählt worden. Im Rahmen eines von der Heidelberger Theoretischen Chemie um **Horst Köppel, Jochen Schirmer, Peter Schmelcher** und **Lorenz Cederbaum** hervorragend zusammengestellten Programms berichteten 12 eingeladene Hauptvortragende, von denen die Hälfte aus dem fremdsprachigen Ausland kam, über unterschiedliche Aspekte des Themas **Electronically Excited Molecules: Structure and Dynamics**. Eindrucksvoll wurde so ein guter Überblick über den aktuellen Stand der Forschung und die Fortschritte auf diesem Gebiet vermittelt.

Den Auftakt bildete **Ove Christiansen** (Lund), der zeigte, dass auch angeregte Zustände und damit zusammenhängende Moleküleigenschaften mit hoher Genauigkeit auf Coupled-Cluster -Niveau behandelt werden können, wie es für Grundzustände in vielen Fällen zur Routine geworden ist. Allerdings hat die Genauigkeit auch ihren Preis oder wie es der Vortragende formulierte: 'there is no free lunch'. Im Laufe der Tagung zeigte sich jedoch, dass eine ausreichende Genauigkeit auch mit weniger aufwändigen Methoden zu erreichen ist. Um im Bild zu bleiben: kostenlos ist das Mittagmahl nicht, aber es gelingt immerhin - mit den zur Verfügung stehenden Mitteln - sehr schmackhafte und sättigende Mahlzeiten zuzubereiten.

So demonstrierte **Stefan Grimme** (Münster) im anschliessenden Vortrag, dass es durchaus möglich ist, Anregungsenergien von Systemen mit etwa 200 Elektronen mit einer Genauigkeit von wenigen Zehntel eV zu berechnen. Mit Hilfe der gewählten Algorithmen und durch Parallelisierung (Stichwort: Linux-Cluster) kommen die vorgestellten MR-MP2- Rechnungen in den Bereich von Routineanwendungen.

**Hans Lischka** (Wien) berichtete über Entwicklung und Implementierung eines analytischen Energiegradienten für MR-CISD und MR-ACPF/AQCC, bei dem die Behandlung von MO- und CI-Koeffizienten völlig unabhängig ist. Dadurch ist das Verfahren insbesondere auch bei zustandsgemittelten Rechnungen anwendbar. Stationäre Punkte auf angeregten Flächen können routinemässig lokalisiert und charakterisiert werden. Als Beispiele wurden Rechnungen am C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>CO vorgestellt, geplant sind Rechnungen an Systemen mit bis zu sechs Nichtwasserstoffatomen. Will man systematische Untersuchungen an einer Vielzahl größerer Moleküle durchführen, so muss man Kompromisse bei der zu erzielenden Genauigkeit eingehen.

**Dage Sundholm** (Helsinki) stellte Ergebnisse seiner 'time-dependent'-DFT- Rechnungen an einer Reihe von Chlorophyllen vor. Übereinstimmung zwischen den unterschiedlichen Dichtefunktionalen und - soweit verfügbar - mit experimentellen Werten ergibt sich für die Bande niedrigster Anregungsenergie. Für die höheren Banden beobachtet man für die unterschiedlichen Dichtefunktionale teilweise recht stark variierende Werte. Auch treten je nach Dichtefunktional Banden in einem Energiebereich auf, in dem keine zu erwarten sind. Es handelt sich hierbei vermutlich um Artefakte des benutzten Dichtefunktionalen.

**Hans-Joachim Werner** (Stuttgart) diskutierte neue MRCI-Rechnungen höchster Genauigkeit zur Reaktion H<sub>2</sub> + Cl. Es handelt sich hierbei um einen bimolekularen Prozess, zu dessen korrekter Beschreibung mehrere gekoppelte Energiehyperflächen notwendig sind. Die neuen Rechnungen erklären im Gegensatz zu bisherigen Studien die experimentell beobachteten H/D Isotopeneffekte. Zum Teil verbleiben aber selbst nach sehr aufwändigen Streurechnungen auf den gekoppelten Potentialflächen noch Abweichungen zu experimentellen Grössen.

**Wolfgang Domcke** (München) erläuterte, wie sich aus den Untersuchungen der Modellsysteme Malonaldehyd und Salicylaldehyd sowie Indol und Phenol ein allgemeiner Mechanismus ableiten lässt, der die kurze Lebensdauer der angeregten Zustände und damit die Photostabilität dieser Art von Molekülen verständlich macht. Ein angeregter Zustand mit  $ps^*$  Charakter schneidet bei größerer Entfernung vom Gleichgewichtsabstand den  $pp^*$ -Zustand und den Grundzustand. Die resultierenden konischen Durchdringungen ergeben einen Weg zur ultraschnellen strahlungslosen Desaktivierung. Die Photostabilität aromatischer Biomoleküle, insbesondere der DNS-Basen, ist natürlich von elementarer Bedeutung für alle biologischen Prozesse.

**Maurizio Persico** (Pisa) zeigte, dass die Benutzung einer semiempirischen Methode (MNDO), die durch Reparametrisierung speziell an das untersuchte System angepasst wurde, einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Geschwindigkeit darstellen kann. Im vorgestellten Verfahren wird die Dynamik durch klassische Trajektorien und 'surface hopping' behandelt. Die Energie inklusive Gradient sowie die Kopplungselemente werden während der Simulation direkt ('on the fly') berechnet. Nach Anregung von Elektronen innerer Schalen sind sowohl direkte als auch indirekte Prozesse zu beobachten.

**Hans Ågren** (Stockholm) beschrieb die Behandlung der Dynamik der resonanten Photoemission (RPE) unter Berücksichtigung aller möglichen Photoionisationskanäle. Wie die Rechnungen zeigen, ist die Interpretation neuerer experimenteller Daten im Sinne von Mehratom-RPE fraglich, da die Beobachtung dieses Prozesses den Rechnungen zu Folge nur in sehr speziellen Situationen möglich sein sollte.

Auf ungewöhnliche angeregte Zustände konzentrierte sich **Christian Jungen** (Orsay, Frankreich). Er beschrieb Untersuchungen an hoch liegenden Rydbergzuständen. Diese können eine solche Ausdehnung haben, dass die mittlere Geschwindigkeit des Rydberg-Elektrons trotz des grossen Massenunterschieds mit denen der Kerne vergleichbar werden. Zur Beschreibung dieser Zustände kann man dem jeweiligen Fall angepasste effektive Hamiltonoperatoren, die den unterschiedlichen Hund'schen Kopplungsfällen entsprechen, benutzen. Mit dem vorgestellten Verfahren gelingt nun die allgemeine Behandlung der unterschiedlichen Fälle.

**Eberhard K. U. Gross** (Würzburg) diskutierte DFT-Ansätze jenseits der Born-Oppenheimer Näherung. Das voll gekoppelte System aus Kernen und Elektronen wird mittels einer 'multi-component'-DFT beschrieben. Neben der Suche nach dem günstigsten Funktional ist dabei auch die Wahl geeigneter Dichten von Bedeutung. Erste Anwendungen für Moleküle in starken Laserfeldern, in denen das externe Feld und die Kern-Elektron-Wechselwirkung von gleicher Größenordnung sind, wurden vorgestellt.

**Francoise Massnou-Seeuws** (Orsay, Frankreich) diskutierte Wege zu ultrakalten Molekülen. Durch Photoassoziation ultrakalter Atome sind kältere Moleküle als durch mechanische Kühlung zugänglich. Mit einem Gitter-Abbildungsverfahren gelingt die genaue Berechnung der Schwingungswellenfunktionen hoher Energie und damit die Ermittlung der Franck-Condon-Faktoren zwischen Schwingungsniveaus des angeregten und des Grundzustands. Diese Rechnungen stellen eine wesentliche Hilfe zur Interpretation vorliegender experimenteller Daten sowie zur Konzeption neuer Experimente dar.

Im experimentellen Vortrag schilderte **Tobias Brixner** (Würzburg), wie man Laserpulse iterativ gezielt modifizieren kann, um die Ausbeute genau eines (Photo)Prozesses zu maximieren. Dabei zeigte sich, dass mehrere Parameter gleichzeitig zu berücksichtigen sind. Die Mehr-Parameter-Optimierung führt auch in solchen Fällen zum Ziel, in denen die Optimierung nur eines Parameters, wie z. B. der Wellenlänge oder der Intensität, nicht ausreichend ist. Auch für Moleküle in Lösung gelingt dadurch die gezielte, selektive Anregung.

Von den neunzehn ausgewählten Kurzvorträgen stand mehr als die Hälfte in direktem Bezug zum Thema der Konferenz.

**Christof Hättig** (Forschungszentrum Karlsruhe) beschrieb zwei Alternativen zur störungstheoretischen Korrektur der CIS-Anregungsenergien bei nicht-iterativen Näherungen zu CC2.

**Johannes Röder** (Universität Erlangen-Nürnberg) untersuchte die Genauigkeit der Beschreibung von Grund- und angeregten Zuständen kleiner Moleküle mit der 'Density-Matrix Renormalization Group' durch Vergleich mit Full-CI-Rechnungen.

**Axel Koslowski** (MPI Mülheim) zeigte, dass Multireferenz-CI-Methoden in Verbindung mit semiempirischen Rechenverfahren ohne Anpassung der semiempirischen Parameter eine qualitativ richtige Beschreibung der Potentialflächen von protonierten Schiffbasen im Grund- und ersten angeregten Zustand liefern.

**Karin Fink** (Bochum) präsentierte ein Programm zur Beschreibung von offenschaligen Zuständen in periodischen Systemen. Als Anwendungsbeispiele diskutierte sie magnetische Kopplungen und d-d-Anregungen in Übergangsmetalloxiden.

**Tillmann Klamroth** (Regensburg) stellte quantendynamische Rechnungen zur Simulation von Zweiphoton-Photoemissionsspektren einer Cu(100)-Oberfläche und zu laser-induzierten Strömen durch Metall-Nichtleiter-Grenzflächen vor.

**Thorsten Klüner** (Fritz-Haber-Institut Berlin) hob anhand des Beispielsystems CO/Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> die Wichtigkeit einer hochdimensionalen Behandlung der Photodesorption von Oberflächen hervor. Anschliessend präsentierte er ein Schema, das die Beschreibung elektronisch angeregter Zustände in metallischen Adsorbat-Substrat-Systemen durch Einbettung konventioneller ab initio-Methoden in Dichtefunktionalmethoden erlaubt.

**Chantal Daniel** (Strasbourg, Frankreich) zeigte mit Wellenpaketrechnungen, dass in Trimethylzinnhalogeniden bei Bestrahlung mit sichtbarem Licht eine homolytische und mit ultraviolettem Licht eine heterolytische Spaltung der Zinn-Halogen-Bindung erfolgt, und zwar unabhängig von der Polarität des Lösungsmittels.

Anhand der Ableitung von Auswahlregeln zeigte **Ofir Alon** (Haifa, Israel), dass Kohlenstoff-Nanoröhren in Wechselwirkung mit zirkular polarisiertem Licht hervorragend zur selektiven Erzeugung sehr hoher 'harmonics' geeignet sein können.

**Jörn Manz** (FU Berlin) zeigte am Beispiel von H<sub>2</sub>POSH, dass sich aus einem Racemat ein reines Enantiomer gewinnen lässt, wenn man einen elektronisch angeregten Zustand beteiligt. Die Wirkung der dazu notwendigen Laserpulse wurde in schönen Animationen visualisiert.

**Daniil Kosov** (Frankfurt) präsentierte eine Kombination aus Car-Parinello-Moleküldynamik und zeitabhängiger Dichtefunktionaltheorie, die die Simulation der Dynamik von Systemen in angeregten Zuständen erlaubt.

**Nikos Doltsinis** (Bochum) erläuterte die Implementierung eines Surface-Hopping- Algorithmus im Rahmen der Car-Parinello-Moleküldynamik unter Benutzung der 'restricted open-shell Kohn-Sham'-Methode zur Beschreibung des angeregten Zustands. Als Anwendungen wurden die intramolekulare Protonenübertragung in ortho-Hydroxybenzaldehyd und die Photoisomerisierung der Doppelbindung in Methanimin vorgestellt.

**Max Mühlhäuser** (Bonn) zog aus Untersuchungen von Methylhypochlorit und Chlormethanol mit einer individuell selektierenden Multireferenz-CI-Methode den Schluss, dass die Photofragmentierung dieser Verbindungen in der Atmosphäre sehr wahrscheinlich ist.

**Michael Thoss** (TU München) präsentierte eine Methode zur Simulation zeitabhängiger Quantendynamik komplexer Systeme unter Berücksichtigung dissipativer Effekte. Das System selbst wird dabei mit genauen quantenmechanischen Methoden behandelt, das umgebende Bad mit Näherungsmethoden.

**Christian Ochsenfeld** (Mainz) sprach über die Entwicklung und Anwendung linear skalierender ab initio-Hartree-Fock- und Dichtefunktionalmethoden zur Beschreibung grosser Systeme mit mehr als tausend Atomen.

**Carmen Tesch** (MPI für Quantenoptik, Garching) schlug vor, einen Quantencomputer mit zwei Qubits durch die zwei IR-aktiven Schwingungen im Acetylenmolekül zu realisieren und entwickelte Laserpulse zur Durchführung logischer Operationen. Auf diese Weise liessen sich alle Kriterien eines Quantencomputers nach David Deutsch erfüllen.

**Robert Berger** (TU Berlin) kam aufgrund seiner Rechnungen mit der elektroschwachen Theorie zu dem Ergebnis, dass die Paritätsverletzung bei molekularen Systemen am ehesten in elektronisch angeregten Zuständen experimentell nachweisbar sein müsste.

**Irene Burghardt** (Paris) diskutierte die Erweiterung der 'Multi-configuration time-dependent Hartree'-Methode auf grosse Systeme durch Aufteilung in Bereiche, die mit unterschiedlicher Genauigkeit behandelt werden.

**Stefan Schmatz** (Göttingen) diskutierte die Dynamik der SN<sub>2</sub>-Reaktion (Cl<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>Cl/CH<sub>3</sub>Br) auf der mit CCSD(T) berechneten Potentialhyperfläche mit besonderem Augenmerk auf die auftretenden Resonanzen.

**Victor Bezchastnov** (Heidelberg) stellte eine Methode zur Beschreibung von Anionen in magnetischen Feldern unter Berücksichtigung der Kernbewegung vor, mit der man ein reichhaltiges Spektrum aus echten gebundenen und Resonanzzuständen erhält.

Einen Höhepunkt des Symposiums stellte die Verleihung des **Hellmann-Preises für Theoretische Chemie** an **Uwe Manthe** (München) dar. Verbunden mit dem 1998 geschaffenen Preis, der in diesem Jahr zum dritten Male verliehen wurde (weitere Einzelheiten zum Preis finden sich unter:

<http://www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/> und <http://www.thch.uni-bonn.de/AGTC/agtc.hellmann.html>), ist ein Vortrag auf dem Symposium - im Gegensatz zum restlichen Programm übrigens in deutscher Sprache. Der diesjährige Preisträger berichtete über seine Arbeiten zur quantenmechanischen Beschreibung der Moleküldynamik in mehreren Dimensionen. Nach einer auch für den Nicht-fachmann gut verständlichen Einführung und der Erläuterung des 'multi-configurational time-dependent Hartree' Ansatzes wurde an einigen Beispielen gezeigt, wie Quanteneffekte die Dynamik unterschiedlicher Prozesse beeinflussen. Als Beispiele für photoinduzierte Prozesse wurden die Photodissoziation von Methylodid sowie die Schwingungsprädissoziation von I<sub>2</sub> im Dreikörpersystem I<sub>2</sub>-Ne-Ne diskutiert. Als Beispiel für einen thermischen Prozess wurde die Reaktion H + CH<sub>4</sub> angeführt. Diese kann als Prototyp einer radikalisch verlaufenden Reaktion eines organischen Moleküls angesehen werden. Für diese sechsatomige Reaktion wurden genaue Berechnungen der Geschwindigkeitskonstanten unter Berücksichtigung aller Freiheitsgrade vorgestellt.

Zum wissenschaftlichen Programm gehörten auch dieses Jahr zwei abendfüllende Veranstaltungen, die der Präsentation und Diskussion von Postern aus den verschiedensten Bereichen der Theoretischen Chemie dienen. Verglichen mit den letzten beiden Jahren hat sich die Anzahl der Posterbeiträge erfreulicherweise auf 170 vergrößert. Die Postersitzungen waren gut besucht und auch lange nach ihrem offiziellen Ende wurde noch intensiv weiter diskutiert. Dies war sicherlich auch auf das angenehme Nebeneinander von Unterbringung, Bewirtung und Wissenschaft zurückzuführen. Die Organisatoren des Symposiums haben erstmalig Preise für die besten drei Poster bereitgestellt. Grundlage war ein Wahlverfahren, bei dem jeder Teilnehmer pro Posterabend eine Stimme hatte. Die Preise bestanden aus jeweils einer freien Registration für die 'Watoc02' in Lugano und zusätzlich einem Geldpreis von 300 DM für den ersten Platz. Die Wahlbeteiligung lag bei etwa 50%. Die Preise gingen an drei Poster, die sich mit strukturellen und elektronischen Eigenschaften von InP-Clustern (Sudip Roy, 3. Preis), mit der Kontrolle ultraschneller Quantendynamik (Dorothee Geppert, 2. Preis) und mit stereodynamischen Effekten bei der Photo-desorption (Stephan Thiel, 1. Preis) auseinandersetzten.

Das wissenschaftliche Programm wurde durch eine Nachmittagstour wahlweise nach Baden-Baden oder zum Kloster Maulbronn abgerundet. Letzteres gilt als die am besten erhaltene mittelalterliche Klosteranlage nördlich der Alpen und steht seit 1993 als Weltkulturdenkmal auf der Liste der UNESCO. In einem ausführlichen Rundgang unter kompetenter Führung erhielten die Teilnehmer eindrucksvolle Einblicke in die Zisterzienserkultur.

Kurzberichte über die Tagung erscheinen in den Nachrichten aus der Chemie und im Bunsenmagazin.

Ulrich Fleischer, Axel Koslowski, Stephan Thiel

E-mail fleischer/koslowski/thiels@mpi-muelheim.mpg.de

## **Emeriti stellen sich vor**

### **Werner Kutzelnigg, Ruhr-Universität Bochum**

Der Status des 'professor emeritus' ist offensichtlich ein Auslaufmodell. Die weitaus meisten der heute tätigen Professoren werden nicht mehr emeritiert, sondern pensioniert werden. Dennoch sind Fakultäten gut beraten, wenn sie den ihnen verbleibenden Spielraum so nützen, daß pensionierte Professoren auch künftig so behandelt werden wie bisher Emeriti.

Formal besitzen Emeriti alle Rechte und keine Pflichten eines Professors im Amt. Insbesondere entfällt die Pflicht zur Lehre, was sicher eine erhebliche Entlastung ist, aber auch das Recht, das dem einen oder anderen doch viel bedeutet hat, sich an der Lehre gestaltend zu beteiligen. Man kann zwar Spezialvorlesungen anbieten,

aber wenn diese nicht gerade - wie seinerzeit bei F.Hund in Göttingen - die Geschichte der Quantenmechanik aus der Sicht eines Zeitzeugen behandeln, ist kaum mit Zuhörern zu rechnen. Sicher, man kann auch durch das Verfassen von Lehrbüchern oder Monographien dem Verlangen nach didaktischer Tätigkeit Rechnung tragen. Zu den Pflichten, von denen man gern erlöst ist, gehört die Beteiligung an der akademischen Selbstverwaltung. Der Preis, den man dafür zu zahlen hat, besteht darin, daß man auch von allen wichtigen (oder dafür gehaltenen) Informationen abgeschnitten ist, und so dem Zentrum des Geschehens entrückt wird.

Zu den Rechten gehört die Inanspruchnahme akademischer Einrichtungen, wie Bibliothek, Rechenzentrum, etc. ... . Auch darf man post-docs im Rahmen von durch Drittmittel finanzierten Forschungsprojekten betreuen. Keinen Anspruch hat man dagegen auf eine Sekretärin oder andere Hilfskräfte. Daß man alle interne Verwaltung und alle Korrespondenz selbst erledigen muß, macht einen großen Teil der Entlastung von Aufgaben wieder wett.

Was sich mit der Emeritierung kaum ändert, ist der Eingang von Post und email, und die Anforderungen zum Abfassen von Gutachten über Forschungsvorhaben oder für Zeitschriften landen auf dem Schreibtisch wie gewohnt. Würde man alle dies Aufgaben unverzüglich erledigen, wäre man völlig ausgelastet und käme zu nichts anderem. Natürlich könnte man, unter Hinweis auf die Emeritierung all derlei von sich weisen, aber damit gibt man eine weitere aktive Teilnahme am Geschehen auf. Man wird nach wie vor davon Gebrauch machen, daß zumindest die Arbeiten, die man begutachten muß, auch wirklich liest.

Die Vorstellung, man könne jetzt ganz das tun, was man eigentlich immer wollte, wozu nur die Zeit fehlte, stellt sich offenbar bald als Illusion heraus. Die wissenschaftliche Tätigkeit steht nach wie vor in Konkurrenz zu anderen Verpflichtungen, und man muß weiterhin Prioritäten setzen.

Nach diesen allgemeinen Bemerkungen nun ein paar Worte zu dem, was ich mir für nächste Zeit vorgenommen habe. Mein Schwerpunktthemen sind:

1. Elektronenkorrelation
2. Relativistische Quantenchemie
3. Konvergenz von Basisentwicklungen
4. Nichtadiabatische Korrekturen

Ad 1. Im Rahmen der Elektronenkorrelation fasziniert mich z. Zt., in Zusammenarbeit mit Debashis Mukherjee, die Beschreibung der Mehrelektronensysteme mit Hilfe der Kumulanten der reduzierten Dichtematrizen. Die Kumulanten sind extensive Größen und sie skalieren linear mit der Teilchenzahl. Eine Hierarchie von Gleichungen zur direkten Berechnung der Kumulanten wurde hergeleitet, sie ist aber noch nicht voll befriedigend. Hier gäbe es Arbeit für einen Post-doc.

Diese Arbeiten stehen im Zusammenhang damit, daß ich die Erfolge der Kohn-Sham-artigen Dichtefunktionaltheorie als eine Herausforderung an die ab-initio Theorie empfinde, nach besser begründeten Ansätzen zu suchen, die bei vergleichbar geringem Rechenaufwand die richtige Antwort aus dem richtigen Grund geben können, wodurch es möglich sein sollte, das verlorene Terrain 'wiederzuerobern'. Natürlich habe ich auch das Interesse an explizit korrelierten Wellenfunktionen nicht aufgegeben.

Ad 2. Bei der Formulierung einer relativistischen Mehrelektronenquantenmechanik gibt es noch eine Reihe ungeklärter Probleme. Ich habe dazu einiges Material zusammengetragen, das ich in Ruhe aufarbeiten und publizieren muß. Auf der mehr praktischen Seite arbeitet mein Post-doc Wenjian Liu an der Implementierung einer relativistischen MC-SCF-Theorie im Rahmen der quasientarteten direkten Störungstheorie. Auch hier ist noch einiges zu tun. Ebenso sind die Arbeiten zu relativistischen Korrekturen zu magnetischen Eigenschaften noch nicht abgeschlossen.

Ad3. Bei der Entwicklung von Wellenfunktionen nach Gaussbasen habe ich das Problem der Konvergenz-Rate von 'even-tempered' Funktionen vor längerer Zeit analytisch gelöst und die Lösung publiziert. Noch unveröffentlicht sind u.a. die Untersuchungen zu 'optimalen' Basissätzen, sowie zur Abhängigkeit der zu wählenden Basissätze in Abhängigkeit vom zu lösenden Problem.

Ad4. Zur niedrigsten Näherung für nichtadiabatische Korrekturen, fern von vermiedenen Überkreuzungen liegt einiges Material unveröffentlicht in meiner Schublade.

Noch weiteres wäre aufzuarbeiten. Aus dem Manuskript des Vortrags zu Hückel's 100. Geburtstag 'Was mir an der Hückel-Theorie gefällt' ließe sich z. B. mit geringen Änderungen ein druckfertiger Aufsatz machen, vielleicht zum 105ten.

## Aus dem Vorstand

Nachdem die Gesellschaft deutscher Chemiker und die Deutsche Bunsengesellschaft ihre Vertreter für den Vorstand der AGTC beannt haben, ist dieser jetzt vollständig.

Die Mitglieder sind ((wie vorher))

**Prof. Dr. H.-J. Werner**, Stuttgart

(gleichzeitig Vertreter der Deutschen Bunsengesellschaft)

**Prof. Dr. M. Schreiber**, Bremen

(Vertreter der Deutschen Physikalischen Gesellschaft)

**Prof. Dr. Gernot Frenking**, Marburg

(Vertreter der Gesellschaft deutscher Chemiker)

## Klatsch & Tratsch

- **Prof. Dr. Gotthart Seifert**, Gesamthochschule Paderborn, hat einen Ruf auf eine C4-Professur für Physikalische Chemie an der TU Dresden erhalten und angenommen.
- **Prof. Dr. Michael Schreiber**, TU Chemnitz, hat einen Ruf auf eine Professur für Theoretische Physik an der neu gegründeten "International University in Germany" in Bremen angenommen.
- **Prof. Dr. Peter Saalfrank**, Universität Regensburg, hat einen Ruf auf die C4-Professur für Theoretische Physik an der Universität Potsdam erhalten.
- **Herr Priv.-Doz. Dr. Bernd Hartke**, Institut für Theoretische Chemie der Universität Stuttgart, hat den Ruf auf die C3-Professur für Theoretische Chemie an der Christian-Albrechts-Universität Kiel erhalten.
- **Herr Priv.-Doz. Dr. Christian Ochsenfeld**, Institut für Theoretische Chemie der Universität Mainz, hat Rufe auf C3-Professuren an die Universitäten Essen und Tübingen erhalten.
- **Frau Prof. Dr. Christel Marian**, GMD St. Augustin, hat den Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Heinrich-Heine-Universität angenommen.

## Tagungsvorschau 2001/2002

Stand: 8. 10. 2001

### Zusammengestellt von:

Prof. Dr.phil.nat. **Klaus Helfrich**, Fachgebiet Theoretische Chemie-Quantenchemie,  
Fakultät II Mathematik u. Naturwiss., 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 [www.thch.uni-bonn.de/AGTC](http://www.thch.uni-bonn.de/AGTC)

---



2002:

- **25. 2. – 1. 3. in Kerkrade, NL:**  
**Winter School: Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems:  
From Theory to Algorithms**  
WWW: <http://www.fz-juelich.de/wsqs>
- **4. – 8. 3. in Osnabrück:**  
**Frühjahrstagung der DPG**  
Arbeitskreis Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen der DPG  
WWW: <http://www.dpg-tagungen.de/info/osnabrueck2002.html>
- **10. – 13. 3. in Köln:**  
**Chemiedozententagung**  
WWW: <http://www.gdch.de/tagung/index.htm>
- **18. – 22. 3. in Leipzig:**  
**66. Physikertagung**
- **25. – 28. 3. in Augsburg:**  
**Jahrestagung 2002 der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM)**  
WWW: <http://gamm2002.uni-augsburg.de>
- **7. – 8. 5. in Darmstadt:**  
**16. Molecular Modelling Workshop**
- **9. – 11. 5. in Potsdam:**  
**Hauptversammlung der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie**  
WWW: <http://www.bunsen.de>
- **4. – 9. 8. in Lugano, Schweiz:**  
**6<sup>th</sup> World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC)**  
WWW: <http://www.watoc02.ch/>
- **25. – 29. 8. in Bremen, Internat. Universität:**  
**38th Symposium for Theoretical Chemistry**  
WWW: <http://www.tu-chemnitz.de/schreiber/STC2002>

2003:

- **20. – 26. 7. in Bonn:**  
**XI<sup>th</sup> International Congress on Quantum Chemistry**  
WWW: <http://www.thch.uni-bonn.de/IAQMS/IAQMS.congress.html>

**Hinweise auf weitere Tagungskalender:**

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

## Spezielle Tagungsankündigungen

### ***Arbeitstagung für Theoretische Chemie in Mariapfarr***

vom 19.02. bis 22.02. 2002

Density Functional-Theory, time independent and time dependent

Dichtefunktional-Theorie, zeitunabhängig und zeitabhängig

#### **Preliminary Program**

E.J. Baerends (Amsterdam)	Basics of time-independent DFT and new developments.
E.K.U. Groß (Würzburg)	Basics of time-dependent DFT and applications.
A. Görling (München)	Properties of DFT and "beyond" DFT.
G. Seifert (Paderborn)	DFT for large systems: from inorganic nano-tubes to biomolecules.
W. Kutzelnigg (Bochum)	Density Matrix Theory - New Ideas

#### MINISYMPOSIUM

Wissenschaftliche Leitung: Ralph Jaquet (Siegen)  
Labor für Physikalische und Theoretische Chemie,  
Universität Siegen  
D-57068 Siegen, Deutschland  
theo@theo.chemie.uni-siegen.de  
Website der Arbeitstagung für Theoretisch Chemie 2002

### ***Euro Winter School in Kerkrade***

vom 25.02. bis 01.03. 2002

Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems:

From Theory to Algorithms

Veranstaltungsort	Rolduc Conference Centre, Kerkrade, NL
Organisation	John von Neumann Institute for Computing, Jülich  Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr Universität Bochum  Institut für Theoretische Physik II, Universität Stuttgart
Poster	Euro Winter School
Informationen	Webpage der Euro Winter School

## **38th Symposium for Theoretical Chemistry in Bremen**

vom 25.08. bis 29.08. 2002

Electron Transfer and Femtosecond Spectroscopy

Veranstaltungsort	International University Bremen
Organisation	M. Schreiber U. Kleinekathöfer
Informationen	Webpage des STC2002
Emailadresse	stc2002@iu-bremen.de

### **Hellmann-Preis**

Wie schon im Bericht über das 37. Symposium für Theoretische Chemie in Bad Herrenalb erwähnt (siehe dieses INFO S. "vorletzte Seite") wurde in diesem Jahr der Hellmann-Preis zum dritten Male an einen erfolgreichen Nachwuchswissenschaftler verliehen, und zwar an Uwe Manthe "für seine Beiträge zur effizienten Berechnung von chemischen Reaktionsraten". Der nächste

### ***Hellmann-Preis 2002***

soll auf dem 38. Symposium für Theoretische Chemie vom 25- bis 29. August 2002 in Bremen verliehen werden. Der Preis wird satzungsgemäß (siehe <http://www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/>) für hervorragende wissenschaftliche Leistungen, etwa vom Range einer Habilitationsarbeit, aus dem Gesamtbereich der Theoretischen Chemie an jüngere Nachwuchswissenschaftler(innen) vergeben, die noch keine Lebenszeit-Stellung innehaben, nicht älter als 40 Jahre alt sind und die deutsche Sprache beherrschen.

### ***Vorschläge***

mit Curriculum (tab.Lebenslauf mit persönlichen und wissenschaftlichen Angaben wie z.B. Gastaufenthalten), Publikationsliste, Laudatio und 5 Sonderdrucken des Kandidaten, (Details siehe <http://www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/hellrichtd.html>) werden schon jetzt erbeten. Senden Sie bitte Ihren Vorschlag Anfang des neuen Jahres (zur Arbeitserleichterung der Jury in 5-facher Ausfertigung) an den Vorsitzenden der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie, Herrn Prof. Dr. Walter Thiel, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-45470 Mühlheim an der Ruhr, Deutschland. Wenn Sie Ihren Vorschlag vom letzten Jahr wiederholen möchten, brauchen Sie nur eventuelle Erweiterungen von Publikationsliste, Curriculum oder einen neuen wesentlichen Sonderdruck des Kandidaten einzureichen. Die Kandidatenliste wird am 15. April 2002 geschlossen.

### ***Hellmann-Fonds***

Die AGTC hat bei der Bunsengesellschaft einen steuerbegünstigten Fonds eingerichtet. Bei einem Endkapital von ca. 25.000 Euro wäre die Zahlung eines Preisgeldes aus den Zinserträgen gesichert. Die bisher höchsten Spenden von 2000 Euro und 1000 Euro sind kürzlich von privaten Mitgliedern der AGTC eingegangen, so dass jetzt schon fast die Hälfte des erhofften Kapitals vorhanden ist. Im vergangenen Jahr hatten nämlich auch etliche Lehrstuhlinhaber und Emeriti der Theoretischen und Physikalischen Chemie aus Deutschland, Österreich und der Schweiz je 500 Euro, etliche C3-Professoren 250 Euro gespendet. Dafür sei allen Spendern herzlich gedankt. Weitere

## **Spenden**

sind aber offensichtlich durchaus noch erforderlich. Außer zu privaten Spenden sind Sie auch dazu aufgerufen, Firmen und Organisationen zu Spenden zu animieren. Die Spenden sind an die Deutsche Bunsengesellschaft, Konto-Nr. 491 061 800, BLZ 500 800 00, Dresdner Bank Frankfurt, für Kostenstelle 8110 (Hellmann-Fonds) zu überweisen. Die Bunsengesellschaft schickt Ihnen bei Angabe Ihrer Adresse auf dem Überweisungsformular automatisch eine Bescheinigung über die steuerbegünstigte Spende zu. Die Spender werden in der Regel in der Liste "Contributors to the Hellmann-Award Fund" ( <http://www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/contributors.html> ) aufgeführt.

## **Physics Reports**

Physics Reports ist eine Zeitschrift, welche Review-Artikel in allen Bereichen der Physik abdeckt.

"Physics Reports keeps the active physicist up-to-date on developments in a wide range of topics by publishing timely reviews which are more extensive than just literature surveys but normally less than a full monograph. Each Report deals with one specific subject. These reviews are specialist in nature but contain enough introductory material to make the main points intelligible to a non-specialist. The reader will not only be able to distinguish important developments and trends but will also find a sufficient number of references to the original literature."

Für den Bereich Molekülphysik bin ich der zuständige Editor.

Es wäre schön, wenn wir in diesem Gebiet weitere Beiträge zur Verbreitung unserer Arbeiten erhalten würden!

Beispiele der letzten Zeit sind:

- **D. Andrae**  
"Finite Nuclear Charge Density Distributions in Electronic Structure Calculations for Atoms and Molecules" (2000)
- **M. H. Beck, A. Jäckle, G. A. Worth, H.-D. Meyer**  
"The Multiconfiguration Time-Dependent Hartree (MCTDH) Method: A Highly Efficient Algorithm for Propagating Wavepackets" (2000)
- **A. I. Pegarkov**  
"Resonant Interactions of Diatomic Molecules with Intense Laser Fields: Time-Independent Multi-Channel Green Function Theory and Application to Experiment" (2000)
- **J. Köhler**  
"Magnetic Resonance of a Single Molecular Spin" (1999)
- **J. J. Ladik**  
"Polymers as Solids: A Quantum Mechanical Treatment" (1999)
- **R. Singh, B. M. Deb** "Developments in Excited-State Density Functional Theory" (1999)
- **N. Moiseyev**  
"Quantum Theory of Resonances: Calculating Energies, Widths and Cross-Sections by Complex Scaling" (1998)
- **A. Nagy**  
"Density Functional. Theory and Application to Atoms and Molecules" (1998)
- **M. Peric, B. Ostojic, J. Radic-Peric**  
"Ab initio Investigation of the Renner-Teller Effect in Tetra-Atomic Molecules" (1997)

Es gibt kostenlose Sonderdrucke und Verbreitung durch CONTENTS-Alert (a free electronic alerting service).  
Sigrid Peyersimhoff

---

Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, [www.theochem.ruhr-uni-bochum.de](http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de)

---