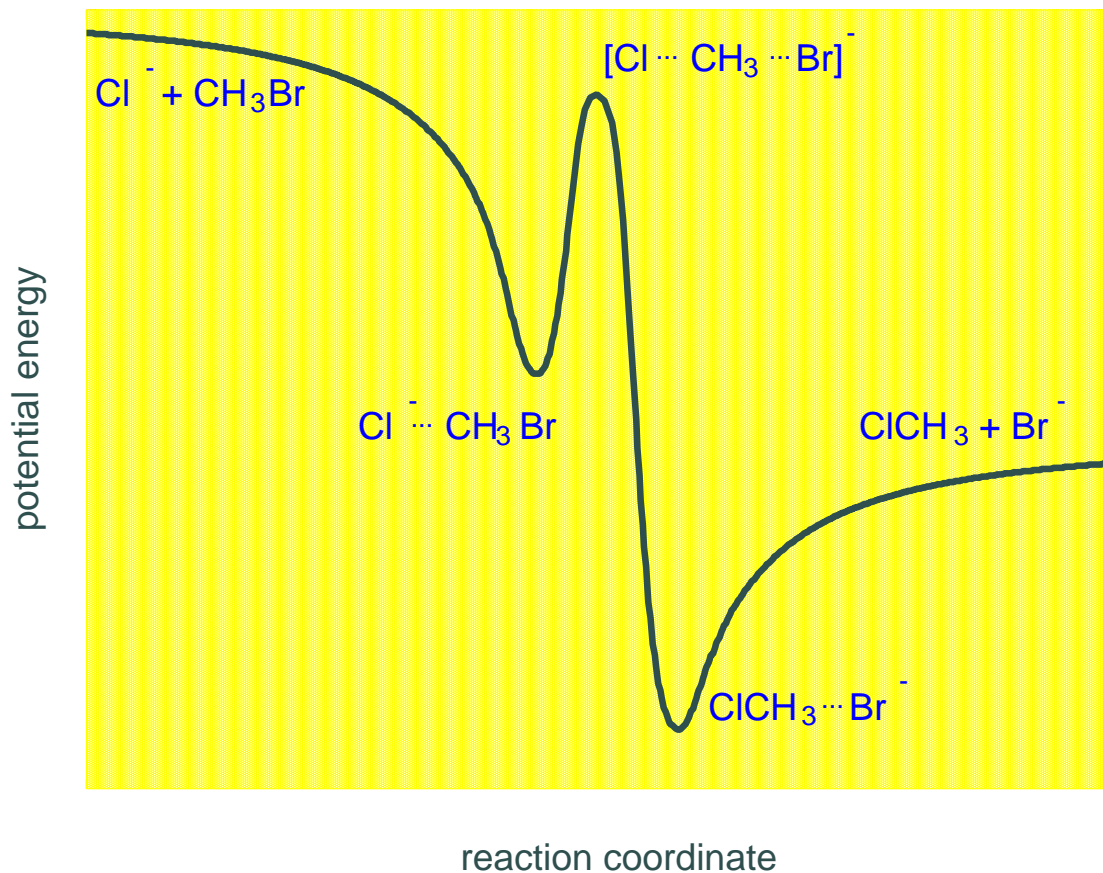


Info

Theoretische Chemie



Ausgabe April 2003

Inhalt

- Neuer AGTC-Vorstand
- Theoretische Chemie in Würzburg
- Tagungsvorschau (Prof. Dr. K. Helfrich, Berlin)
- Theoretische Chemie und Veranstaltungen der Deutschen Bunsen-Gesellschaft (Leserbrief)
- Klatsch und Tratsch
- Stellenausschreibung

Neuer AGTC–Vorstand

An der Briefwahl zum AGTC–Vorstand haben sich 131 Mitglieder beteiligt (Wahlbeteiligung 70 %). Der neue Vorstand besteht aus fünf gewählten Mitgliedern und den von Trägergesellschaften benannten Vertretern. In alphabetischer Reihenfolge:

Wolfgang Domcke

Gernot Frenking (GDCh)

Bernd Hess

Volker Staemmler

Walter Thiel

Hans–Joachim Werner (DBG)

Die Benennung des Vertreters der DPG steht noch aus.

Theoretische Chemie in Würzburg

Die Theoretische Chemie in Würzburg ist im Rahmen von C3–Stellen durch Volker Engel (Inst. für Physikalische Chemie, Fiebiger–Professur), Bernd Engels (Inst. für Organische Chemie) und Martin Kaupp (Inst. für Anorganische Chemie) an drei chemischen Instituten vertreten. Diese Struktur ist wohl in Deutschland einmalig und führt einerseits zu einer außerordentlichen Breite der Forschungsgebiete in den Bereichen Quantenchemie (Engels, Kaupp) und Quantendynamik (Engel) sowie andererseits zu einer gemeinsamen, institutsübergreifenden Lehrstruktur im Fachgebiet Theoretische Chemie.

Man mag sich fragen, ob ein solcher "C3–Cluster" eine sinnvolle Implementierung der Theoretischen Chemie darstellt. Hier hängt wohl viel von den jeweils beteiligten Persönlichkeiten ab. Um es vorwegzunehmen: In der derzeitigen Konstellation funktioniert das "Experiment mit der Theorie" in Würzburg sehr gut. Die Frage, ob diese Struktur jedoch generell ein erstrebenswertes Modell darstellt, lässt sich im Moment nur schwer beantworten.

Bevor wir die einzelnen Forschungsgebiete und die Lehrstruktur vorstellen, sei zunächst über eine wichtige Konsequenz dieser "Konzentration" von Theoriearbeitskreisen berichtet: Seit dem 1.4.2001 besteht das Graduiertenkolleg 690 "Elektronendichte: Theorie und Experiment", an dem alle drei Theoriearbeitskreise beteiligt sind und an dem mit E. K. U. Gross aus der Physik (inzwischen C4–Professur an der FU Berlin) noch ein weiterer Theoretiker teilnimmt. Wie schon aus dem Namen des GK ersichtlich, spielt hier die Theoretische Chemie eine ganz zentrale Rolle. Sprecher des GK ist mit Bernd Engels ebenfalls ein Theoretiker. Thema des GK sind Veränderungen in chemischen und physikalischen Prozessen, die durch

Veränderungen in der Elektronendichte initiiert wurden. Hierbei konzentrieren wir uns auf intramolekulare Effekte. Modelle der chemischen Bindung spielen naturgemäß eine wichtige Rolle. Verschiedenste Methoden, von Populationsanalysen bis zu Realraumverfahren – wie topologischen Analysen der Elektronendichte oder der Elektronenlokalisierungsfunktion – werden kritisch unter die Lupe genommen bzw. weiterentwickelt. Dies wird auf experimenteller Seite nachhaltig unterstützt, u.a. durch Untersuchungen mit hochauflösender Röntgenbeugung (AK D. Stalke), was zu einem direkten experimentellen Zugang zu einigen der untersuchten Größen führt. Weitere wichtige Aspekte sind die Zusammenhänge spektroskopischer Größen (u.a. aus IR-, Raman-, CD- und NMR-Spektroskopie) mit Grundzustands- bzw. Übergangsdichten. Letztlich ist das GK ein ausgezeichnetes Medium, um Aspekte der Theoretischen Chemie in die gesamte Fakultät hinein zu tragen. So versuchen die drei "hauptamtlichen" Theoretiker dabei zu helfen, dass die auch in zahlreichen experimentell arbeitenden Arbeitskreisen durchgeführten Rechnungen vernünftig sind und auf "state-of-the-art" Methodologie beruhen. Da die Veranstaltungen des GK auch für nicht direkt am Kolleg beteiligte Besucher offen stehen, profitiert die gesamte Fakultät von diesem Angebot (s.u.).

Nun zu den Forschungsgebieten: Im **AK Engel** steht die Quantendynamik, also die Kernbewegung im Vordergrund. Die eingesetzten und im AK weiterentwickelten Methoden umfassen u.a. Abbildungen molekularer Wellenfunktionen, klassische und gemischt quantenmechanisch/klassische Dynamik, statistische Modelle zur Vielkörperfragmentation oder die quantenmechanische Beschreibung der Mehrfachionisation. Hieraus ergeben sich fruchtbare Zusammenarbeiten mit experimentellen Gruppen, u.a. in den Bereichen Femtosekunden-zeitaufgelöste Spektroskopie, Photoelektronenspektren dynamischer Systeme, Kontinuums-Resonanz-Raman-Spektroskopie, der zeitaufgelösten Vierwellen-Misch-Spektroskopie, sowie der Dissoziation und Ionisation in starken Laserfeldern.

Der **AK Engels** bearbeitet quantenchemische Fragestellungen. Auf methodischer Seite ist die Entwicklung effizienter Multireferenzverfahren ein Schwerpunkt. Momentane Themen sind die Eignung von Kohn–Sham–Orbitalen aus "exact–exchange"–LHF–Berechnungen als Basis für Multi–Referenzansätze, die Implementierung einer effizienten MR–MP2–Methode und die Verbesserung semiempirischer MR–CI–Methoden zur Berechnung elektronisch angeregter Zustände. Ein Schwerpunkt quantenchemischer Anwendungen sind folglich Systeme, deren verlässliche Beschreibung Multi–Referenz–Effekte berücksichtigen muss (z.B. radikalische oder biradikalische Reaktionen, gespannte Allenverbindungen). Seit kürzerem beschäftigt sich der AK auch mit biologischen bzw. bioorganischen Fragestellungen, wie z. B. den Selbstpaarungskomplexen von Peptidnucleinsäuren, bei denen neben der strukturellen Charakterisierung auch die notwendige Optimierung geeigneter Kraftfelder durchgeführt wird. Fragen zum Wirkmechanismus antiinfektiver Wirkstoffe sollen in dem neu beantragten SFB 1961 untersucht werden.

Im **AK Kaupp** stehen relativistische Effekte, die Parameter der magnetischen Resonanz, Übergangsmetallkomplexe und biologische Fragestellungen im Mittelpunkt. Methodische Entwicklungen konzentrieren sich auf DFT–Ansätze zur Berechnung von NMR– und EPR–Parametern, u.a. chemische Verschiebungen, Spin–Spin–Kopplungskonstanten (jeweils unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen), elektronischer g–Tensoren oder Hyperfeinkopplungskonstanten. Dies führt wiederum zu zahlreichen Anwendungen, u.a. auf Verbindungen schwerer Elemente, auf katalytisch relevante Fragestellungen oder auf biologische Systeme, wie z.B. kürzlich im Zusammenhang mit der Funktion photosynthetischer Reaktionszentren. Zahlreiche weitere Untersuchungen befassen sich u.a. mit ungewöhnlichen Strukturen früher Übergangsmetallverbindungen, mit Fragen der chemischen Bindung, oder mit der Vorhersage neuer Verbindungen, ungewöhnlicher Strukturen oder neuer Oxidationsstufen.

Die Lehrveranstaltungen zur Theoretischen Chemie sind in Würzburg traditionell in der Physikalischen Chemie angesiedelt. Im dritten Semester werden die Grundlagen der Quantenmechanik ('Atom und Molekülbau') sowie die Anwendungen in der Spektroskopie ('Molekülspektroskopie') behandelt. Im Studium nach dem Vordiplom, sind als Pflichtvorlesungen die 'Quantenchemie' und 'Symmetrie' zu hören. Mit der Etablierung des Theorieclusters ergab sich die Möglichkeit, weitere gemeinsame Veranstaltungen in Theoretischer Chemie anzubieten. So findet die Vorlesung 'Quantenchemie 2' jetzt regelmäßig im Wintersemester statt. Inhaltlich werden hier verschiedene Module angeboten, die einen Bogen von modernen Ab-initio-Verfahren über Analysemethoden der Elektronendichte bis hin zur Molekular- und Quantendynamik spannen. Hinzu kommen Spezialvorlesungen, die sich z. B. mit der Anwendbarkeit von Methoden auf diverse Probleme ("Wie rechne ich richtig?", B. Engels) oder mit Drehimpulsalgebra ("Angular momentum theory and its application to molecular processes", V. Engel) befassen.

Alle drei Theoretiker halten neben den schon diskutierten zusätzlichen Vorlesungen in Theoretischer Chemie auch Vorlesungen in den jeweiligen Fachgebieten (Anorganische, Organische und Physikalische Chemie). Hierdurch werden naturgemäß auch in diesen Vorlesungen theoretische Aspekte verstärkt diskutiert, was insgesamt eine verbesserte Ausbildung der Chemiker in den theoretischen Grundlagen der verschiedenen in der Chemie verwendeten Modellvorstellungen zur Folge hat. Im Rahmen der anorganisch- und organisch-chemischen Praktika im Hauptstudium werden jeweils quantenchemische Übungen ("Theoriepräparate") angeboten, in denen die Studenten mit Hilfe quantenchemischer Methoden konkrete Fragen aus den jeweiligen Fachgebieten bearbeiten. Im Rahmen des Graduiertenkollegs Elektronendichte (siehe oben) wird ebenfalls ein "Theoretisches Praktikum" angeboten. Neben den Theoriepräparaten eröffnet auch diese Blockveranstaltung allen Studierenden der Chemie und Pharmazie die Möglichkeit, quantenchemische und quantendynamische Methoden direkt am Computer auszuprobieren. Außerdem war die Ringvorlesung "Theoretische Chemie" im Graduiertenkolleg erfreulich gut

besucht. Insgesamt ist festzustellen, dass in Würzburg in der Lehre und in der Forschung die Bedeutung der Theorie erheblich zugenommen hat. Dies zeigt sich z. B. auch in der deutlich gestiegenen Anzahl der Diplom- und Promotionsarbeiten mit einem theoretischen Thema. Nach einiger Diskussion über Kompetenzträgerschaft existiert neuerlich auch die Möglichkeit (Diskussion über Nutzen der Habilitation hin oder her), in Theoretischer Chemie zu habilitieren.

Tagungsvorschau (Mai – Dezember 2003)

(Prof. Dr. Klaus Helfrich, Berlin)

19.–24.05 in Frankfurt a. M.

ACHEMA 2003

<http://www.achema.de>

29.–31.05. in Kiel

Hauptversammlung der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie,
„Sensorik“

<http://www.bunsentagung.uni-kiel.de>

20.–26.07. in Bonn

XIth International Congress of Quantum Chemistry 2003

<http://icqc.uni-bonn.de>

Satelliten-Tagungen:

16.–18.07. in Bad Herrenalb

Electron Correlation

<http://www.theochem.uni-stuttgart.de/satellite>

16.–18.07. in Mülheim

Catalysis

<http://www.mpi-muelheim.mpg.de/CMC/symposium>

16.–18.07. in Nancy, Frankreich

Modelling chemical reactivity: from gas-phase to solution and enzymes

<http://www.lctn.uhp-nancy.fr/JLR>

16.–18.07. in Berlin

Multidimensional Quantum Reaction Dynamics

<http://userpage.chemie.fu-berlin.de/~jmanz/index.html>

26. 07. in Bonn

100 Years Hellmann

<http://www.tc.chemie.uni-siegen.de/hellmann/index.html>

28.–30.07. in Berlin
Relativistic Effects in Heavy–Element Chemistry
<http://www.chemie.tu-berlin.de/REHE2003>

28.09–02.10. im Gwatt–Zentrum am Thunersee, Schweiz
39.Symposium für Theoretische Chemie 2003
Martin Quack (ETH Zürich), E–Mail: quack@phys.chem.ethz.ch

06.–11.10. in München
GDCh–Jahrestagung Chemie
<http://www.gdch.de/tagung/index.html>

17.10. in Hannover
Hans Hellmann–Kolloquium
<http://www.theochem.uni-hannover.de/hhkol.html>

**Theoretische Chemie und Veranstaltungen
der Deutschen Bunsen–Gesellschaft
(Leserbrief)**

Liebe Leser,

ich möchte Sie kurz als Mitglied der Themenkommission der Deutschen Bunsen–Gesellschaft für Physikalische Chemie (www.bunsen.de) ansprechen.

Die Themenkommission ist für die wissenschaftlich–inhaltliche Ausrichtung von Bunsenveranstaltungen zuständig. Im Sinne einer Stärkung der Theoretischen Chemie wurde im Leitfaden für Bunsenveranstaltungen Punkt 6 "Kurze Stellungnahme zum angemessenen Verhältnis von Beiträgen aus Experiment und Theorie" vor einem Jahr neu hinzugenommen. Diese Bitte soll in erster Linie unsere Experimentalkollegen zumindest zu einem kurzen "Innehalten" stimulieren. Allerdings sind wir uns innerhalb der Kommission auch einig, dass die "Angemessenheit" bei unserer Entscheidungsfindung eine Rolle spielen wird. Ich darf anmerken, dass erste Früchte dieser Stimulation bereits zu erkennen sind!

Im Umkehrschluss sollten wir als Theoretiker bei Bunsenveranstaltung auch mehr Flagge zeigen. Insbesondere gehe ich davon aus, dass auch Theorietagungen (mit dem einen oder anderen Experimentator als Gastsprecher, ähnlich wie bei unserem Symposium) die Zustimmung der Kommission finden würden. In diesem Sinne rufe ich Sie herzlich auf, derartige Tagungen etwa als "International Bunsen Discussion Meetings" oder "Bunsen Kolloquien" zu veranstalten. Für weitere Informationen stehe ich gerne jederzeit zur Verfügung.

Schließlich wäre es wünschenswert, wenn wir bei der traditionellen Bunsentagung um Christi Himmelfahrt (Mai) insgesamt mehr Präsenz zeigen würden.

Ich verbleibe mit besten Grüßen

Ihr Dominik Marx, im Januar 2003

www.theochem.ruhr–uni–bochum.de

Klatsch und Tratsch

Dr. Martin Albrecht, MPI für Physik komplexer Systeme, Dresden, hat den Ruf als Juniorprofessor für Theoretische Chemie an der Univ. Siegen (Nachf. W. H. Eugen Schwarz) angenommen.

Prof. Dr. Georg Jansen ist seit dem Wintersemester 2002/03 Professor für Theoretische Organische Chemie (C3) an der Universität Duisburg–Essen, Standort Essen.

Dr. Ulrich Kleinekathöfer, International University Bremen, hat sich mit einer Arbeit über 'Structure and Dynamics in Molecular Systems: Electron and Exciton Transfer' an der Technischen Universität Chemnitz am 15.11.2002 habilitiert.

Prof. Dr. Wolfgang Liptay, Univ. Mainz, feierte seinen 75. Geburtstag am 8.2.2003.

Priv.–Doz. Dr. Florian Müller–Plathe, MPI für Polymerforschung, Mainz, hat einen Ruf an die International Univ. Bremen als Full Professor of Physical Chemistry angenommen. Die Stelle wurde neu geschaffen.

Prof. Dr. Walter Thiel, MPI für Kohlenforschung, Mühlheim/Ruhr, erhielt für seine Arbeiten zur Theoretischen Chemie und Computerchemie die Schrödinger–Medaille 2002 der World Association of Theoretical Chemistry.

UNIVERSITÄT REGENSBURG

In der Naturwissenschaftlichen Fakultät IV – Chemie und Pharmazie

ist eine

Professur

der Besoldungsgruppe C 3

für Theoretische Chemie

im Beamtenverhältnis auf Lebenszeit

zum 01.10.2003 zu besetzen.

In der Lehre soll das Fach "Theoretische Chemie" vertreten werden. Darüber hinaus wird eine Beteiligung an Lehrveranstaltungen der physikalischen Chemie erwartet. Auf die Bereitschaft und Fähigkeit zur Zusammenarbeit in der Lehre mit anderen Teilfächern der Chemie wird großer Wert gelegt.

Die Forschungsaktivitäten sollen auf einem modernen Gebiet der Theoretischen Chemie liegen, das vorhandene Themenbereiche wie Quantendynamik oder Photochemie sinnvoll ergänzt. Eine Beteiligung an den Schwerpunkten "Medizinische Chemie", "Sensorische Photorezeptoren" oder "Neue Materialien auf der Basis schwacher Bindungskräfte" ist erwünscht.

Einstellungsvoraussetzungen sind ein abgeschlossenes Hochschulstudium, die pädagogische Eignung, Promotion, Habilitation oder der Habilitation gleichwertige wissenschaftliche Leistungen.

Bei gleicher Qualifikation werden Schwerbehinderte bevorzugt.

Bewerberinnen und Bewerber dürfen das 52. Lebensjahr zum Zeitpunkt der Ernennung noch nicht vollendet haben (vgl. Art. 12 Abs. 3 Satz 2 BayHSchLG).

Die Universität strebt eine Erhöhung des Frauenanteils an und fordert daher qualifizierte Wissenschaftlerinnen ausdrücklich zur Bewerbung auf.

Bewerbungen mit den üblichen Unterlagen (Lebenslauf, Zeugnisse, Urkunden, Schriftenverzeichnis mit den fünf wichtigsten Sonderdrucken, Angaben zur bisherigen Lehrtätigkeit, Darstellung der wissenschaftlichen Arbeitsgebiete, Drittmittelinwerbung) sind

bis zum 30. April 2003

an den Dekan der Naturwissenschaftlichen Fakultät IV – Chemie und Pharmazie der Universität Regensburg, D-93040 Regensburg, zu richten.