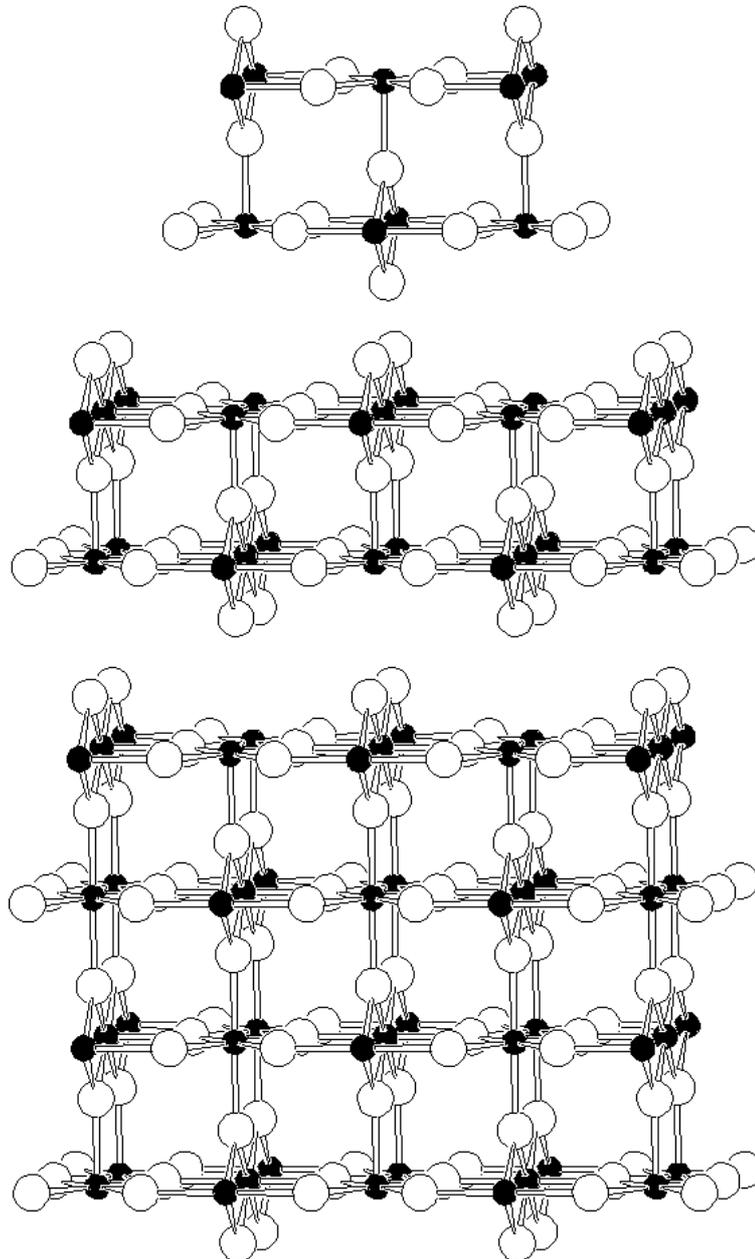


Info

Theoretische Chemie



TiO₂-Cluster mit Rutilstruktur

Dezember 1999

Inhaltsverzeichnis

• Editorial	2
• Arbeitsgruppen stellen sich vor	3
• Protokoll der Mitgliederversammlung der AG Theoretische Chemie	7
• Nachrichten vom Vorstand der AG Theoretische Chemie	10
• Hellmann-Preis 1999	11
• Tagungsvorschau 2000/2001	12
• Klatsch & Tratsch	15
• Stellenanzeigen	16

Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen,
dies ist die erste Ausgabe des INFO aus Hannover. Wir wollen die Tradition unserer Vorgängergruppen fortführen. Dabei werden wir auch eine Version im www zur Verfügung stellen, und zwar unter <http://www.theochem.uni-hannover.de/~info>. Beiträge sind jederzeit willkommen. Bitte senden Sie diese für die nächste Ausgabe per Email an Info@theochem.uni-hannover.de möglichst in Word 6.0 oder Word 97.

Wir wünschen Ihnen allen ein erholsames Weihnachtsfest und ein gutes Jahr 2000.

K. Jug, G. Geudtner, Hannover

Arbeitsgruppen stellen sich vor

Institut für Organische Chemie der TU Dresden

Unter dem Eindruck der Arbeiten von R.Zahradník (Prag) wurde Anfang der sechziger Jahre in Dresden von experimentell arbeitenden Chemikern des Instituts für organische Chemie eine Interessengruppe Quantenchemie gegründet. Zu den ersten Interessenten gehörten die späteren Hochschullehrer A. Mehlhorn (Dresden), H. Hartmann (Merseburg) und P.Rosmus (Paris). In dieser lockeren Bindung und in wechselnder Zusammensetzung hat die Gruppe bis Anfang der neunziger Jahre bestanden. Die Themen der theoretischen Arbeiten waren hauptsächlich bestimmt durch die damaligen Forschungsthemen des Instituts auf dem Gebiet der schwefelorganischen Chemie und später auch der Farbenchemie. In dieser Zeit wurden fast ausschließlich halbempirische Methoden der Quantenchemie benutzt.

1992 wurde in Dresden eine C3-Professur "Physikalische Organische Chemie und Quantenchemie" eingerichtet. Die nunmehr offiziell ausgewiesene Quantenchemiegruppe beschäftigt sich seitdem mit der Anwendung der Methoden der *ab initio* Quantenchemie und später auch der Dichtefunktionaltheorie auf organisch-chemische Probleme. In einem neuen Umfeld trat die chemische Reaktivität in den Vordergrund. Eingehender untersucht wurden 1,3-dipolare Cycloadditionsreaktionen. Im Falle der nichtkonzentriert ablaufenden Reaktionen entstehen reaktive biradikalische Intermediate. Überraschend zeigte sich, daß gute Ergebnisse nicht nur mit den aufwendigen *ab initio* quantenchemischen Methoden CASPT2 and post-HF erhalten werden können, sondern auch mit DFT, wenn die klassischen Strukturen durch die spin-eingeschränkte Kohn-Sham Methode (RKS) und die biradikalischen oder biradikaloiden Strukturen durch die uneingeschränkte UKS-Methode berechnet werden. Auch bei der Berechnung der biradikaloiden Übergangsstrukturen der [1,3]-sigmatropen Vinylcyclopropan-Cyclopenten-Umlagerung hat sich die UKS-Methode bewährt.

Gegenwärtig werden unter anderen UV/Vis-spektrale Anregungsenergien nach der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie (TD-DFT) berechnet, wobei insbesondere Verbindungen interessieren, deren Spektralverhalten mit halbempirischen Methoden nicht reproduziert und verstanden werden konnten. Vergleichende Berechnungen unter Variation der theoretischen Modelle zeigten, daß diese Methode ohne größere Abstriche an der Genauigkeit der berechneten Anregungsenergien leichter und allgemeiner anwendbar ist, als die *ab initio* Methoden CASPT2 und EOM-CCSD. Nur mit TD-DFT ist es gegenwärtig möglich, Zusammenhänge zwischen Struktur und Lichtabsorption in Serien von Verbindungen zu entwickeln.

In der Lehre wird die Quantenchemie in Dresden vertreten durch eine einsemestrige 2stündige Vorlesung "Quantenchemie" im Rahmen der physikalischen Chemie, durch eine wiederum einsemestrige Vorlesung über "Quantenchemische Rechenmethoden" (wahlweise) und durch ein organisch-chemisches Praktikum (Computerchemie) von 10 Wochenstunden über ein Semester als "Vertieftes Kernfach" (Anwendungen unter Verwendung der Methoden AM1, PM3, HF und DFT an Personalcomputern bzw. einem IBM-RISC-Workstationcluster).

Über den aktuellen Stand an Mitarbeitern und zur Publikationsliste ist über den WWW-Server Auskunft zu erhalten: <http://www.chm.tu-dresden.de/organik/qc/qc.html>

J. Fabian

Arbeitsgruppe: “Theorie komplexer Strukturen und Materialien“ am Fachbereich Physik der Universität Paderborn

Unsere Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit der Anwendung und Entwicklung von Methoden der Theoretischen Physik & Chemie für Computersimulationen zur Lösung materialwissenschaftlicher Fragestellungen. Mit derartigen Untersuchungen sollen Beiträge für das atomistische Verständnis der Eigenschaften von komplexen Systemen und realen Materialien, zur Aufdeckung von Struktur-Eigenschafts-Relationen und damit zur Vorhersage von Materialmodifikationen, neuen Materialien und Materialkombinationen mit herausragenden Eigenschaften (*computer assisted materials design*) geleistet werden. Das Spektrum der bearbeiteten Systeme reicht dabei von Molekülen, Clustern und Nanoteilchen über polymere, amorphe und kristalline Festkörper bis hin zu biologischen Systemen. Methodisch werden vorwiegend Dichte-Funktional-Verfahren eingesetzt. Einen breiten Raum nimmt dabei das von der Arbeitsgruppe entwickelte Dichte-Funktional basierte Tight-Binding Verfahren (DF-TB) ein. Dieses Verfahren gestattet die Berechnung der geometrischen und elektronischen Struktur, spektroskopischer Parameter und der Dynamik von komplizierten Molekülen, Clustern und Festkörpern mit bis zu ca. 1000 Atomen an Work Stations. Mit Hilfe von sogenannten *Order-N* Verfahren oder in Verbindung mit *Parallelcomputern* ist das Studium von Systemen mit bis zu 10000 Atomen möglich. Darüber hinaus steht ein breites Spektrum von weiteren DFT-Programmen – an deren Entwicklung Mitarbeiter der Arbeitsgruppe beteiligt sind oder waren – zur Verfügung. Rechentechisch verfügt die Arbeitsgruppe über einen Pool von 15 DEC-Compaq Workstations, dessen weiterer Ausbau vorgesehen ist, den Zugriff zum Paderborner Parallelcomputer (PC^2) und über Kooperationspartner die Möglichkeit zur Nutzung weiterer Supercomputer (T3E, Origin).

Die Gruppe hat ca. 17 Mitglieder – zur Zeit 2 Diplomanden, 6 Doktoranden, 6 promovierte Wissenschaftler und ständig 2-3 Gastwissenschaftler. Wir verfügen über ein weites Netz von Kooperationsbeziehungen im Inland (TU Chemnitz, IFW Dresden, DKFZ Heidelberg, Universität Konstanz etc.) und Ausland (Naval Research Lab. Washington, Harvard University, University of Exeter, Università Cagliari, Universität Helsinki etc.). Unsere Forschungsarbeiten sind in mehrere DFG-Schwerpunktprojekte, einem DFG-Innovationskolleg, einem EU-Projekt eingebunden und werden durch mehrere DFG-Einzelprojekte finanziert. Gegenwärtig wird am Aufbau eines Sonderforschungsbereiches zur Photonik gearbeitet. Interessenten für Doktoranden- und Post-Doc-Stellen sind also jederzeit willkommen!

Th. Frauenheim, G. Seifert, Paderborn, Dezember 1999

Theoretische Physik
Fachbereich Physik, Universität Paderborn
Warburger Str. 100, 33098 Paderborn

Tel.: 05251 60 2337

Fax 05251 60 3435

e-mail: frauenheim@phys.uni-paderborn.de, seifert@phys.uni-paderborn.de

WWW: <http://www.phys.uni-paderborn.de>

Hier findet man auch eine Übersicht der jüngsten Publikationen und eine Einführung in unsere Methoden.

Theoretische Chemie in Wuppertal

Arbeitsgruppen Buenker und Boustani

Im folgenden werden die derzeitigen Aktivitäten der Arbeitsgruppe von R. J. Buenker an der Bergischen Universität GH Wuppertal dargestellt. Das Hauptaugenmerk der Forschung liegt auf der ab-initio Konfigurations-Wechselwirkungs-Rechnung (CI) von Spektren und der Dynamik kleiner Moleküle.

Die Forschung gliedert sich in fünf Teilbereiche:

- a) Entwicklung von Computerprogrammen
- b) Anwendung auf Molekülspektren mit wenigstens einem schwere Atom wie Wismut und Blei
- c) Bereitstellung von Potentialflächen und nichtadiabatischen Kopplungselementen zur Bestimmung von Streuquerschnitten
- d) Anwendung der Complex-Scaling Methode zur Vorhersage der Linienbreiten und -lagen von Prädissoziationsniveaus in Molekülspektren
- e) Berechnungen von Energieniveaus dreiatomiger Moleküle, für die kanonische Durchschneidungen eine dominante Rolle spielen

Die Forschung unter Punkt a) wird seit 1994 durch das Schwerpunktprogramm "Theorie relativistischer Effekte in der Chemie und Physik schwerer Elemente" gefördert. Die Arbeit wurde in Zusammenarbeit mit Dr. Aleksey Alekseyev durchgeführt und konzentrierte sich auf Spektren von Hauptgruppenelementen, von denen viele von der experimentellen Gruppe von Prof. E. Fink gemessen wurde. Ein weiteres Hauptziel der gegenwärtigen Forschung ist die Entwicklung eines Computerprogramms, das unter Verwendung der Direct-CI Technik die Behandlung einer Säkulargleichung in der Größenordnung von $10^6 - 10^7$ erlaubt.

Die Berechnungen zu c) finden in Zusammenarbeit mit Prof. Kimura (Yamaguchi Universität) und Dr. Stancil (Oak Ridge National Laboratory) statt. Dabei sind Charge-Transfer Prozesse von größtem Interesse, die durch die Wechselwirkung von Protonen und Helium mit schweren Atomen und Molekülen auftreten. Im Wintersemester 98/99 besuchte R.J.Buenker das Institute for Theoretical Atomic and Molecular Physics of the Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics um an derartigen Projekten zu arbeiten. Anwendungen dieser Forschungen sind die Schwerionen-Strahlungstherapie, die Kernfusion und die Dünnfilmhalbleiteranalyse.

Zahlreiche Beispiele fuer Prädissoziationsphänomene weisen die Moleküle O_2 , HCl , $BeH(D)$, und CO auf. Die Ergebnisse der Arbeit wurden von R.J.Buenker anlässlich des American Chemical Society Meeting in New Orleans im August 99 dargestellt.

Des weiteren wurden dort Berechnungen zum Pseudo-Jahn-Teller Effekt des NO_2 Moleküls vorgetragen, die auf einer langjährigen Zusammenarbeit zwischen Dr. Gerhard Hirsch (+) und Prof. C. Petrongolo aus Sienna basieren und zur detaillierten Interpretation des von Delon und Jost aus Grenoble im Energiebereich von $10000 - 20000 \text{ cm}^{-1}$ untersuchten chaotischen NO_2 Spektrums führten.

Die Arbeitsgruppe von I. Boustani beschäftigt sich mit Clustern, Molekülen, Polyedern, Polymeren, Quasi-und Nanokristallen, Nanotubes und Sheets von Bor, Kohlenstoff und Bor-Stickstoff mit der Zielsetzung der Erarbeitung neuer Materialien und Halbleiter. Zur Untersuchung der obigen großen Systeme werden ab initio quantenchemische und Dichte-Funktional-Methoden eingesetzt.

(+) Im Mai 1999 ist Dr. Gerhard Hirsch nach schwerer Krankheit im Alter von 46 Jahren verstorben.

Arbeitsgruppe Jensen

Die Arbeitsgruppe Jensen in der Theoretischen Chemie an der Bergischen Universität - Gesamthochschule Wuppertal hat es effektiv seit dem 15. Oktober 1992 gegeben. Zu diesem Zeitpunkt wurde ich als Gastprofessor angestellt; die Gastprofessur endete am 31. Juli 1993. Am 1. August 1994 wurde ich als Universitätsprofessor (C3) fest angestellt. Die Forschung der Arbeitsgruppe zielt auf die Entwicklung und Anwendung theoretischer Methoden zur Vorhersage und Analyse von Experimenten der hochauflösenden Molekülspektroskopie.

Ich erbe nach meinem Vorgänger, Herrn Thiel, die Mitgliedschaft in der DFG-Forschergruppe "*Erzeugung, Nachweis und Eigenschaften Reaktiver Moleküle.*" Im Rahmen dieser Forschergruppe fand in den Jahren 1993-1995 mit den Wuppertaler Kollegen Buenker, Bürger und Fink eine intensive Zusammenarbeit statt, die in weniger formalisierter Weise immer noch weiterläuft. Eine weitere, wichtige Forschungs Kooperation war die Teilnahme am EU-Projekt HEROS ("*Highly Excited Rovibrational States*" im Rahmenprogramm "*Human Capital and Mobility*") zur Beschreibung hochangeregter Rotations-Schwingungszustände verschiedener Moleküle. Unser Beitrag zu diesem Projekt war die theoretische und experimentelle Untersuchung der Bildung von sogenannten vierfachen Clustern, d.h. Gruppen von vier, fast entarteten Rotations-Schwingungsenergien bei hoher Rotationsanregung in den asymmetrischen Kreiselmolekülen H_2S , H_2Se , H_2Te und H_2Po . Besonders nennenswert ist auch meine langjährige Zusammenarbeit mit Herrn Dr. Philip R. Bunker, *Steacie Institute for Molecular Sciences*, Ottawa, Kanada. Herr Bunker ist als Humboldt-Preisträger seit 1996 jedes Jahr für 2-3 Monate in Wuppertal tätig gewesen. Zusätzlich zu zahlreichen Veröffentlichungen hat diese Zusammenarbeit die zweite Ausgabe des Buches '*Molecular Symmetry and Spectroscopy*' hervorgebracht. Siehe die September-1999-Ausgabe von *Physics Today* für eine Rezension. Näheres zum Buch (und ein Bestellformular - nur US\$ 64.95!) findet sich im *World Wide Web* unter <http://www.cisti.nrc.ca/cisti/journals/41653/>.

Die wesentliche Forschungsaktivität in den vergangenen Jahren beschäftigt sich mit dem Renner-Effekt. Im Rahmen der Doktorarbeiten von Herrn Dr. Martin Brumm und Herrn Dr. Gerald Osmann ist ein Computer-Programm, RENNER, zur Berechnung der rovibronischen Energien eines dreiatomigen Moleküls im Falle einer Renner-Entartung geschrieben worden. In diesem Falle müssen die Wechselwirkungen zwischen den Rotations-Vibrationszuständen zweier Elektronenzustände berücksichtigt werden. Neuerdings ist dieses Programm auch zur theoretischen Interpretation von Coulomb-Explosion-Imaging-Experimenten für CH_2^+ eingesetzt worden.

Schließlich möchte ich mein liebstes Kind, die Prag-Tagung, erwähnen. Ich bin Mitveranstalter der "*Conferences on High Resolution Molecular Spectroscopy*", die in geraden Jahren in Ost- oder Zentraleuropa stattfinden. Die nächste Tagung findet in Prag, Tschechien, 3.-7. September 2000 statt. Siehe <http://www.chem.uni-wuppertal.de/conference/>. Ab initio-Beiträge sind herzlich willkommen, wenn sie bei der Vorhersage oder Interpretation hochaufgelöster Molekülspektren hilfreich sind!

Prof. Per Jensen, Ph.D.

FB 9 - Theoretische Chemie

Bergische Universität – Gesamthochschule Wuppertal

D-42097 Wuppertal

E-mail: jensen@uni-wuppertal.de

WWW: <http://www.chem.uni-wuppertal.de/adressen/jensen.htm>

Protokoll der Mitgliederversammlung der AG Theoretische Chemie am 15.09.1999 in Freiberg, 17.00 Uhr

Tagesordnung:

1. Bericht des Vorstandes
2. Nominierung und Wahl des Komitees für den Hellmann-Preis
3. zukünftige Finanzierung des Hellmann-Preises
4. Beitrag AG Theoretische Chemie
5. Symposium 2000
6. Symposium 2001
7. Verschiedenes

Die Tagesordnung wird angenommen.

TOP 1

Die Vorsitzende berichtet, daß die AGTC als Institution in den letzten Jahren sichtbar wurde und sich bewährt hat. Beispiele:

- Die AGTC ist diejenige Organisation, welche Personen zur Fachgutachterwahl der DFG für den Bereich Theoretische Chemie (im Verbund Physikalische und Theoretische Chemie) vorschlägt. Hinweis: Die Mitglieder der AG sollten bei dieser Fachgutachterwahl dafür Sorge tragen, daß die TC-Repräsentanten gewählt werden.
- Die AGTC wird nach möglichen Autoren und Themen gefragt zur Darstellung des Jahresrückblicks Theoretische Chemie in den "Blauen Blättern".
- Die AGTC ist offizielles Mitglied in der Studienreformkommission der GDCh zur Neuordnung des Chemiestudiums (Vorsitzender Märkl), vertreten durch Herrn Kutzelnigg bzw. Herrn Domcke.
- Bei Evaluierung in machen Ländern wurde nicht nur AC, OC, PC, sondern auch TC (und BC) eigens benannt.

Die AGTC ist seit kurzem im Internet.

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

Dort soll auch eine eigene Rubrik "job openings" aktualisiert werden, so daß diese Info jederzeit abrufbereit ist. Bitte Sekretariat der Vorsitzenden über offene Stellen, Postdoc-Anfragen etc. Informieren: Kronz@thch.uni-bonn.de

Die AG beabsichtigt, das Angebot der Deutschen Bunsengesellschaft anzunehmen, alle Finanzangelegenheiten über ein Konto der DBG laufen zu lassen (s. auch TOP 4), d.h. in Zukunft werden Aufforderungen zur Beitragszahlung Ende jeden Jahres verschickt.

Der Bericht des Kassenprüfers F. Mark wird erfolgen, bevor die Kasse an die DBG übergeht. Über die Kassenprüfung wird Herr Mark im Info TC berichten.

Herr Kutzelnigg berichtet über die Arbeit in der Studienreformkommission. Die Theoretische Chemie ist in der GDCh-Vorlage jetzt im Basisstudium als Theoretische Chemie I und II mit je 3 SWS Pflichtveranstaltung (und je 3.5 credit points) verankert.

TOP 2

Für das Preiskomitee für den Hellmann-Preis wurden gewählt die Professoren:

Domcke
Heß
Schwarz
Huber (Schweiz)
Sax (Österreich)

als Ersatzmitglieder (mit gleicher Stimmenzahl)

Ahlich
Kaupp
Meyer

Insgesamt wurden 44 Stimmzettel abgegeben.

TOP 3

Ein umfangreicher Spendenaufruf an in- und ausländische Kollegen wird beschlossen. Das Konto (bei der Deutschen Bunsengesellschaft) wird baldmöglichst bekanntgegeben.

TOP 4

Es wird eine Erhöhung des eher symbolischen Beitrags von DM 15,00 auf DM 25,00 beschlossen. In Härtefällen kann der Beitrag ganz erlassen werden.

TOP 5

Herr Jakubetz berichtet über das Symposium 2000. Es wird vom 10. bis 14. September 2000 in Litschau (Österreich) stattfinden im Rogner-Dorint Resort Feriendorf Königsleitn, homepage:

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

Seine Finanzplanung geht von 200 Teilnehmern aus. Das Feriendorf (mit Apartments) ist auch für Begleitpersonen sehr geeignet.

Die Konferenzsprache steht noch einmal zur Diskussion. Die überwiegende Meinung ist: Hauptvorträge sollten in englischer Sprache sein; Kurzbeiträge in deutscher oder englischer Sprache - je nachdem, in welcher Sprache sich die Vortragenden besser fühlen. Die Ankündigung für STC 2000 erfolgt in beiden Sprachen.

TOP 6

Das Symposium 2001 wird aller Voraussicht nach von der Gruppe Cederbaum/Köppel ausgerichtet im Heidelberger Raum. Einzelheiten im Info zu Jahresbeginn 2000.

TOP 7

Herr Köppel berichtet über die Arbeitstagung 2000 in Maria Pfarr, 15. - 18.02.2000.

Kontaktadressen: horst.koeppel@urz.uni-heidelberg.de
uwe@phya4.physik.uni-freiburg.de
alexander.sax@kfunigraz.ac.at

Es werden weitere Tagungen angekündigt. Einzelheiten hierüber sollen im nächsten Info erscheinen. Speziell:

- “Winterschool in Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry”, 21.-25.02.2000 in Jülich (Programm-Komitee u.a. Lewerenz, Thiel und Werner)
- “Numerical Techniques for Schrödinger Equations”, 03.-05.02.2000 in Leipzig (Organisation: Hackbusch, Flad).

Die Sitzung schließt um 17.58 Uhr.

gez. Peyerimhoff

Nachtrag

Die Heidelberger Arbeitsgruppe (H. Köppel, J. Schirmer, P. Schmelcher und L.S. Cederbaum) hat inzwischen zugesagt, die Organisation des Symposiums für Theoretische Chemie 2001 zu übernehmen. Es soll von Sonntag, 23.9. - Donnerstag, 27.9.2001 in Bad Herrenalb stattfinden.

Nachrichten vom Vorstand

Liebe Mitglieder der AG Theoretische Chemie,

auf dem 35. Symposium für Theoretische Chemie in Freiberg hat die Vollversammlung u. a. beschlossen:

- (1) den jährlichen Beitrag für die AG Theoretische Chemie von DM 15,-- auf DM 25,-- zu erhöhen
- (2) die Konten (für Spenden und Mitgliedsbeiträge) bei der Deutschen Bunsengesellschaft zu führen

Die Deutsche Bunsengesellschaft (DBG) hat die Rechnungen für 2000 bereits verschickt; für die Mitglieder der DBG ist der Beitrag für die AGTC in "Summe Fachgruppenbeiträge" ausgewiesen. Für Nichtmitglieder der DBG wohl als Beitrag AGTC.

Unstimmigkeiten kann es geben, da die aktualisierte Liste mit dem letzten Stand der AGTC-Beiträge erst NACH der Übergabe an die DBG erstellt wurde. Mit anderen Worten, es können Forderungen von der DBG entstehen für Mitglieder, welche Jahresbeiträge bereits im voraus über das Jahr 2000 hinaus bezahlt haben.

Vorschlag: Sie teilen der DBG mit, dass Sie bereits bis zum Jahre x den Mitgliedsbeitrag bezahlt haben (dafür ist ein Formular von der DBG vorgesehen!), falls Sie nicht einfach das bisher "Überzahlte" als Spende für den Hellmann-Preis betrachten wollen.

Ich werde außerdem im Januar/Februar mit der DBG die aktualisierte Liste, die mir jetzt vorliegt, durchgehen und dafür sorgen, dass Mitglieder, die bereits nach dieser Liste im voraus bezahlt haben, keine Mahnung erhalten.

Es tut mir leid, dass es möglicherweise zu Unstimmigkeiten gekommen ist. Ich werde auf jeden Fall versuchen, alles ins richtige Lot zu bringen. Ich begrüße, dass die DBG die Kontenführung übernommen hat; auf diesem Wege müssen Spendenbescheinigungen und Mitgliedsbeiträge von Finanzämtern akzeptiert werden.

Mit allen guten Wünschen für 2000

Sigrid D. Peyerimhoff
(Vorsitzende der AGTC)

Übrigens ist die AGTC im www zu finden unter

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

Hellmann-Preis 1999 an Doz. Dr. Wim Klopper

Auf dem 34. Symposium für Theoretische Chemie in Gwatt/Schweiz im Herbst 1998 war von der (der DPG, der GDCh und der Bunsen-Gesellschaft assoziierten) "Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie" der 'Hans G.A. Hellmann-Preis' für jüngere Wissenschaftler(innen) aus dem Gesamtbereich der Theoretischen Chemie eingerichtet worden. Der Preis wurde in diesem Jahre auf dem 35. Symposium für Theoretische Chemie in Freiburg/Sachsen erstmalig verliehen an:

Privatdozent Dr. Willem Maarten Klopper

Herr Klopper aus Opperdoes/Niederlande, derzeit am Debye-Institut der Universität Utrecht, wurde für seine Beiträge zur Entwicklung der "r12-Methode" geehrt. Mit zielstrebigem theoretischen und programmtechnischen Arbeiten hat er eine Idee aus der Frühzeit der Quantenchemie zu einem anwendungsreifen Verfahren geführt, welches Elektronenkorrelationseffekte bei Atomen und Molekülen mit hoher Genauigkeit erfasst.

Wim Klopper, Jahrgang 1961, studierte in Leiden, später in Bochum, wo er bei Prof. Kutzelnigg in Theoretischer Chemie mit einem Thema promovierte, das die Basis für die jetzt preisgekrönten Arbeiten legte. Ein breites Kenntnis- und Technik-Repertoire hat er sich unter anderem bei Kooperationen mit Noga (Pressburg) und Császár (Budapest) sowie bei längeren Arbeitsaufenthalten in Minneapolis (Almlöf), Oslo (Faegri) und Zürich (Lüthi) erworben, wo er auch habilitiert wurde. Das Schwergewicht seiner Arbeiten liegt auf quantenchemischer Methodenentwicklung, auf Computerimplementierung und auf der Anwendung dieser Verfahren bei kleinen und mittelgroßen Molekülen und Clustern mit spektroskopischer Genauigkeit. Wim Klopper wurde auch mit der 1999 Annual Medal der International Academy of Quantum Molecular Science ausgezeichnet.

Ausschreibung des 'Hans G.A. Hellmann - Preises' für 2000

Im Rahmen des 36. Symposiums für Theoretische Chemie, das vom 10. – 14. September in Litschau/Österreich stattfinden wird, soll 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-Professur innehaben.

Vorschläge (mit Curriculum, Laudatio, Publikationsliste und einigen Sonderdrucken des Kandidaten, Details siehe WWW) werden bis zum 15. April 2000 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.

Tagungsvorschau 2000

Stand: 16. 11. 99

Zusammengestellt von:

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

I. Straße des 17. Juni 112, 10623 Berlin, Sekr. ER 16

II. Hermannstr. 1, 14163 Berlin

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

Fax: (030) 814 98767

E-Mail : Helfrich_TUB@compuserve.com

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

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

2000:

I. 30. 1. – 5. 2. in Riezlern, Kl. Walsertal:

Arbeitstagung Energiereiche atomare Stöße

Jan M. Rost, PhD, MPI Physik komplexer Systeme, Dresden

E-Mail: rost@mpipks-dresden.mpg.de

I. 15. – 18. 2. in Mariapfarr, Öst.:

5. Arbeitstagung für Theoretische Chemie “Quantendynamik großer Systeme”

WWW: <http://www.kfunigraz.ac.at./tchwww/sax/mariapfarr/>

II. 21. – 25. 2. in Jülich, Forschungszentrum

Winterschule: “Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry”

Dr. Johannes Grotendorst

John von Neumann Institute for Computing (NIC), Central Institute for Applied Mathematics (ZAM), Research Centre Juelich, D-52425 Juelich

E-Mail: j.grotendorst@fz-juelich.de

WWW: <http://www.fz-juelich.de/wsqc/>

I. 26. 2. – 3. 3. in Florida, USA:

40th Sanibel Symposium

Sanibel Symposium, University of Florida, PO Box 118435, Gainesville, FL 32611-8435 USA

E-Mail: sanibel@qtp.ufl.edu

WWW: <http://www.qtp.ufl.edu/Sanibel>

I. 13. - 16. 3. in Potsdam:

DPG-Frühjahrstagung

Fachverbände Polymerphysik, Chemische Physik

WWW: http://www.dpg-tagungen.dpg-physik.de/info/potsdam_2000.htm

II. 19. - 22. 3. in Regensburg:

Chemiedozententagung

WWW: <http://www.gdch.de/tagung/index.htm>

- III. **20. - 24. 3. in Dresden:**
64. Physikertagung der DPG
WWW: http://www.dpg-tagungen.dpg-physik.de/info/dresden_2000.htm
- IV. **3. - 7. 4. in Bonn:**
DPG-Frühjahrstagung
Fachverbände Atomphysik, Plasmaphysik, Kurzzeitphysik, Molekülphysik,
Massenspektrometrie, Quantenoptik
WWW: http://www.dpg-tagungen.dpg-physik.de/info/bonn_2000.htm
- V. **3. – 7. 4. in Göttingen:**
GAMM-Jahrestagung (Gesellschaft f. angew. Mathematik u. Mechanik)
Prof. G.E.A. Meier
E-Mail: GAMM2000@dlr.de
- VI. **22. - 27. 5. in Frankfurt a. M.:**
Achema 2000
WWW: <http://www.chema.de>
- VII. **1. - 3. 6. in Würzburg:**
Hauptversammlung der Bunsengesellschaft
"Chemische und Elektrochemische Energie-Speicherung und -Wandlung"
E-Mail: H.Behret@bunsen.de
WWW: <http://www.Bunsen.de>
- VIII. **5. – 10. 6. in Menton, Frankreich:**
X th International Congress on Quantum Chemistry
WWW: <http://www.lctn.u-nancy.fr/ICQC>
- IX. **4. – 8. 9. in Budapest:**
Third European Conference on Computational Chemistry
E-Mail: eurocc3@para.chem.elte.hu
WWW: <http://www.phy.bme.hu/conf/euco>
- X. **10. – 14. 9. in Litschau, Waldviertel, Niederösterreich:**
36. Symposium für Theoretische Chemie
WWW: <http://www.itc.univie.ac.at/~werner/STC2000/>
- XI. **17. – 22. 9. in Jerusalem, Israel:**
MOLEC 2000 (13th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions)
WWW: <http://www.fh.huji.ac.il/~roib/MOLEC/>
- XII. **19. – 22. 9. in Karlsruhe:**
SCAN 2000 (GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing,
Computer Arithmetic and Validated Numerics)
WWW: <http://www.scan2000.de/contact.html>
- XIII. **8. – 13. 10. in Berlin, TU:**
International Conference on Computers in Chemical Research and Education,
ICCCRE
E-Mail: tg@gdch.de

2001:**XIV. 23. –27. 9. in Bad Herrenalb:****37. Symposium für Theoretische Chemie**

H. Köppel, J. Schirmer, P. Schmelcher, L. S. Cederbaum (Heidelberg)

Hinweise auf weitere Tagungskalender:**I. Physikalische Blätter, Tagungskalender**WWW: http://www.wiley-vch.de/vch/journals/2050/2050_con.html**II. Deutsche Physikalische Gesellschaft, Tagungen**WWW: <http://www.dpg-tagungen.dpg-physik.de>**III. CONFMENU von Prof. Young S. Kim**WWW: <http://www.physics.umd.edu/robot/>**IV. Gesellschaft Deutscher Chemiker, Tagungen**WWW: <http://www.gdch.de/tagung/index.htm>**V. Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen**WWW: <http://www.bunsen.de>**VI. Tagungskalender der Uni Regensburg**WWW: <http://www.chemie.uni-regensburg.de/~hoh05008/KONFERENZEN>

Klatsch & Tratsch

Herr PD Dr. M. Dolg, MPI für Physik komplexer Systeme, Dresden, hat den Ruf auf eine C3-Professur für Theoretische Chemie (Nachfolge Prof. Dr. B. Hess) an der Universität Bonn angenommen.

Herr Prof. Dr. W. Domcke, Universität Düsseldorf, hat den Ruf auf die C4-Professur für Theoretische Chemie (Nachfolge Prof. Dr. L. Hofacker) an der TU München angenommen.

Herr PD Dr. R. Gdanitz hat im Rahmen einer Umhabilitation von der Universität-Gesamthochschule Kassel die Lehrbefugnis für das Fach "Theoretische Physik" an der TU Braunschweig erhalten.

Herr PD Dr. S. Grimme, Universität Bonn, hat den Ruf auf die C4-Professur Theoretische Organische Chemie (Nachfolge Prof. Dr. M. Klessinger) an der Universität Münster angenommen.

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

Herr Dr. A. Köster hat sich am 20.7.1999 für das Fach Theoretische Chemie an der Universität Hannover habilitiert. Er hat inzwischen einen Ruf auf eine Professur am CINVESTAV in Mexico-City angenommen.

Frau PD Dr. C. Marian ist mit der Vertretung der C4-Professur für Theoretische Chemie an der Universität Düsseldorf beauftragt worden.

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

Prof. Dr. F. Temps, Universität Kiel, hat gemeinsam mit Prof. H.-J. Werner, Universität Stuttgart, den Gottfried Wilhelm Leibniz-Preis 2000 erhalten.

Wir gratulieren!

Stellenanzeigen

Institut für Organische Chemie der Universität Dresden

In einem im Rahmen des Graduiertenkollegs "Struktur-Eigenschafts-Beziehungen bei Heterocyclen" geförderten Projekt ist ab 1. Dezember 99 ein zunächst bis September 00 befristetes Postdoktorandenstipendium für theoretische Untersuchungen auf dem folgenden Gebiet zu vergeben:

Ab initio und DFT Berechnungen zur Struktur und zu physikalischen und chemischen Eigenschaften von organischen Verbindungen mit Heteroatomen.

Die quantenchemischen Berechnungen sollen zum Verständnis der Struktur-Eigenschafts-Beziehungen beitragen und mit dem Rechenprogramm GAUSSIAN, gegebenenfalls auch mit den Programmen TURBOMOL, MOLCAS und MOLPRO, durchgeführt werden.

Voraussetzungen für die Bewerbung sind gute theoretische Kenntnisse auf dem Gebiet der Quantenchemie und die Bereitschaft zur Wahrnehmung von Aufgaben in der Organisation, zur Weiterbildung und zur wissenschaftlichen Zusammenarbeit im Graduiertenkolleg.

Bewerbungen und Anfragen sind bitte zu richten an:

Prof. Dr. J. Fabian
Institut für Organische Chemie
TU Dresden
Mommsenstr. 13
D-01062 Dresden

Tel: 0351-463-5385
Fax: 0351-463-7030

E-Mail: fabian@coch01.chm.tu-dresden.de

Department of Chemistry, Utrecht University

The Department of Chemistry is an internationally oriented organisation for education and research. Education is broad and collaboration with other institutes is common (twin studies). Research is carried out within three Research Institutes and is known as (inter)nationally leading and successful. The Department finds itself in a continuing process of adapting to changing conditions and of creating and exploiting chances.

In the Theoretical Chemistry Group of the Department of Chemistry of Utrecht University, there is available a

Ph. D. research position (assistant in opleiding v/m) in the field of research of *ab initio* quantum chemical methods development

You will work within the Theoretical Chemistry Group. Using quantum chemical *ab initio* methods, the group investigates, among other things, intermolecular potentials, reaction mechanisms of radical cations and organic molecules, molecular properties such as NMR shieldings and indirect spin-spin couplings, and develops methods therefore.

Your task will consist of developing further the program package that is presently being developed by the group's members for the efficient and accurate computation of electron correlation effects in (metal)organic and catalytic systems, in particular by employing local correlation approaches, embedding, effective core potentials, relativistic operators, and multireference perturbation theory. Program development takes place within an international collaborative effort involving various European countries. The research project should be concluded with a Ph. D. thesis.

We are looking for candidates who have received a diploma in a natural science, preferably chemistry or physics, or who will receive such a diploma in the near future, and with interest in methodological research in quantum chemistry and with affinity to computer implementations of complex program packages.

We offer a temporary Ph. D. research position for the duration of four years. The extent of the position is 100%. Your salary is NLG 2,261.– gross per month in the first year and changes to NLG 4,037.– in the last year, in conformity with CAO Nederlandse Universiteiten. In addition, you will receive a special allowance during the first three years (NLG 700.– gross per month in the first, NLG 500.– in the second, and NLG 300.– in the third year).

Interested? For further information, please contact Dr. W. M. Klopper, telephone +31 30 253 4144, e-mail w.m.klopper@chem.uu.nl, or Dr. J. H. van Lenthe, telephone +31 30 2 53 273 3, e-mail joop@chem.uu.nl. You can send your written application to Ms. M. van Bart, Human Resources and Organisation, Department of Chemistry, Sorbonnelaan 16, NL-3584 CA Utrecht, The Netherlands. Vacancy number 64.917.

COSMOlogic

*Your Competent Partner for
Computational Chemistry and Solvation*

COSMOlogic GmbH&CO.KG
Burscheider Str. 515
D - 51381 Leverkusen
Tel.: 49-2171-73168-1 FAX:-9
Geschäftsführer: Dr. Andreas Klamt
andreas.klamt@cosmologic.de
<http://www.cosmologic.de>

Stellenausschreibung

Wir sind ein kleines Startup-Unternehmen (gegr. 5/99), das auf dem Gebiet Physiko-Chemie und Computational Chemistry operiert. Unser zentrales Produkt besteht in der COSMOtherm (COSMO-RS)-Software zur Berechnung physiko-chemischer Reinstoff- und Gemischdaten auf der Basis quantenchemischer Rechnungen. Nähere Angaben finden sich auf unserer Homepage. Zur Zeit sind wir zu zweit: Neben mir als theor. Physiker mit 12jähriger Industrieerfahrung bei der Bayer AG arbeitet ein theor. Chemiker in der Firma. Zur Verstärkung und Abrundung unseres Team suchen wir einen jungen, dynamischen Mitarbeiter, der möglichst viele der folgenden Kenntnisse mitbringen sollte:

- sichere Kenntnisse der org. und theor. Chemie
- souveräner Umgang mit chemischen Strukturen
- Grundkenntnisse im Molecular Modeling
- Kenntnisse der chemischen und verfahrenstechnischen Thermodynamik
- Kenntnisse im Umfeld von Berechnungsverfahren für Stoffdaten
- Erfahrung im Umgang mit bzw. Operating von PCs unter WinNT und/oder LINUX
- Programmierkenntnisse FORTRAN, Visual-Basic

Promotion wird nicht vorausgesetzt, ist aber kein Hinderungsgrund. Wir bieten einen höchst interessanten Arbeitsplatz mit guter Bezahlung und allen Chancen (und Risiken!), die mit einem Startup-Unternehmen verbunden sind.

Über möglichst baldige Kontaktaufnahme würde ich mich freuen.

Andreas Klamt