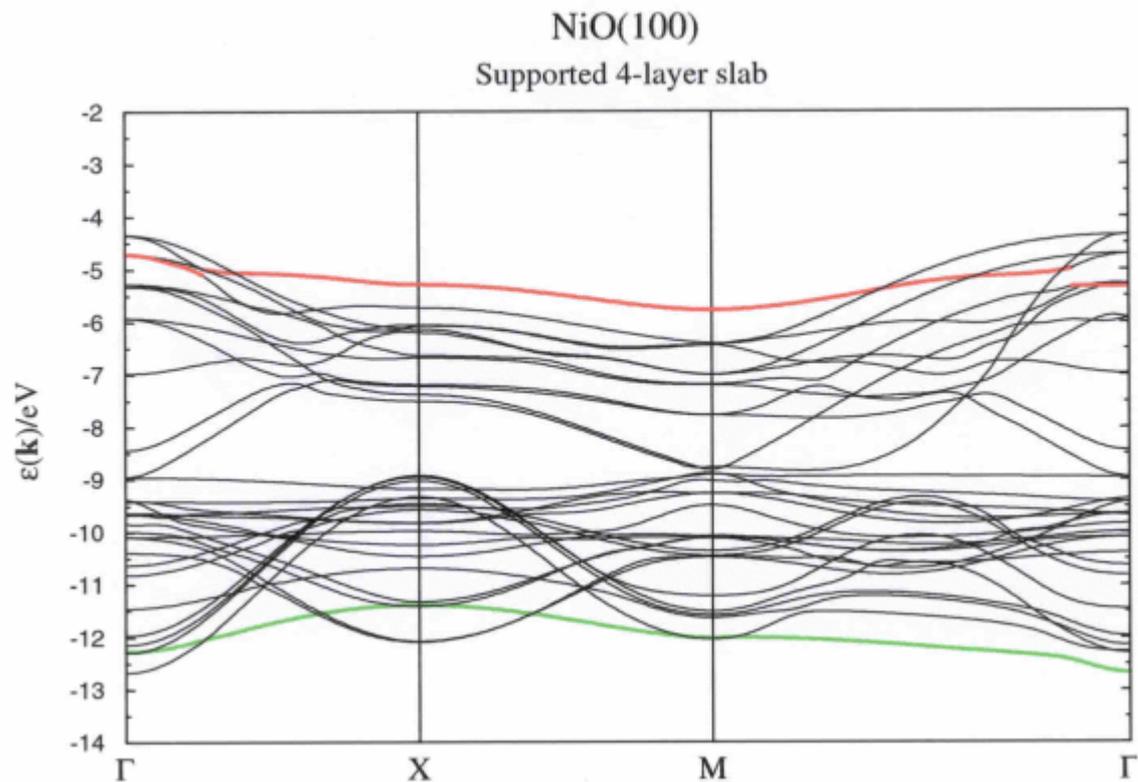


Info

Theoretische Chemie



Ausgabe Juli 2001

Inhaltsverzeichnis

1. [Editorial](#)
2. [Arbeitsgruppen stellen sich vor](#)
3. [Vorstandswahlen der AGTC](#)
4. [Bericht von der Sitzung des Vorstandes der AGTC](#)
5. [Klatsch & Tratsch](#)
6. [Tagungsvorschau 2001/2002](#)
7. [Winter School: "Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems"](#)
8. [Stellenausschreibungen](#)

Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

dies ist die erste Ausgabe des "Info Theoretische Chemie" aus Bochum.

Eigentlich war beabsichtigt, alle drei Monate eine neue Ausgabe zu veröffentlichen, und die erste Ausgabe war für den März 2001 geplant.

Leider hat sich die Herausgabe aufgrund unserer dünnen Personaldecke verzögert!

Wir versprechen den 3-Monats-Rhythmus ab dieser Ausgabe einzuhalten und das nächste "Info Theoretische Chemie" nach dem [37. Symposium für Theoretische Chemie](#) in Bad Herrnalb Anfang Oktober zu verschicken.

Wir möchten uns bei unseren Vorgängern, Prof. Dr. K. Jug und seinem Team, für die Herausgabe des "Info Theoretische Chemie" vom Herbst 1999 bis zum Ende letzten Jahres bedanken.

Wir wünschen allen Kolleginnen und Kollegen einen schönen Sommer 2001.

V.Staemmler, K.Fink, Bochum

Arbeitsgruppen stellen sich vor

"Quantenchemie" in Bochum

Bis 1999 bestand die Theoretische Chemie in Bochum im wesentlichen aus "Quantenchemie". Beide Arbeitsgruppen am Lehrstuhl für Theoretische Chemie, die von Werner Kutzelnigg und die von Volker Staemmler, waren thematisch nahe benachbart und beschäftigten sich vor allem mit der elektronischen Struktur von Atomen und Molekülen.

Dabei stand die Entwicklung quantenchemischer Näherungsverfahren und deren Anwendung auf chemisch interessante Fragestellungen im Vordergrund des Interesses.

Seit Dominik Marx im Dezember 1999 den Ruf auf die Nachfolge von Werner Kutzelnigg angenommen hat, ist neben die Quantenchemie die "Dynamik" getreten.

Dominik Marx wird sein Arbeitsgebiet, das von der klassischen Molekulardynamik über ab initio Simulationen bis zur Quantendynamik von Vielteilchensystemen reicht, in einem der nächsten INFOS vorstellen.

In unserer Arbeitsgruppe "Quantenchemie" gibt es zur Zeit vier Schwerpunkte:

- Spektroskopische Eigenschaften kleiner Moleküle
- Magnetische Austauschkopplung in Übergangsmetall-Komplexen
- Elektronische und geometrische Struktur von Oxidoberflächen
- Adsorption kleiner Moleküle an Oxidoberflächen

In allen diesen Bereichen versuchen wir, Methodenentwicklung und aktuelle Anwendungen zu kombinieren.

Die Liebe zur Methodenentwicklung geht so weit, daß wir fast ausschließlich die eigenen quantenchemischen Programme (ROHF, CASSCF, Valenz-CI, MC-CEPA) verwenden.

Das bietet den großen Vorteil, daß man immer in die Programme eingreifen und sie jederzeit bei Bedarf modifizieren und ausbauen kann.

"Das geht nicht!" gibt es dann nicht.

Unseren ersten Schwerpunkt bilden schon seit langem die Behandlung **spektroskopischer Eigenschaften kleiner Moleküle** und die Berechnung von Potentialflächen angeregter Zustände. Dabei sind neben dem ROHF-Programm für offenschalige Zustände das von Ulrich Meier geschriebene linear konvergente CASSCF-Programm, ein von Jan Wasilewski entwickeltes konventionelles Valenz-CI-Programm – in dem inzwischen auch die Berechnung von Übergangsmomenten und der Spin-Bahn-Kopplung sowie die Berücksichtigung von äußeren Magnetfeldern enthalten ist – und schließlich das von Reihold Fink entwickelte MC-CEPA Programm die wichtigsten Arbeitspferde. Das MC-CEPA Programm ist ein genähertes zustandsspezifisches Multi-Referenz coupled-cluster Programm, das wegen der Verwendung lokalisierter Orbitale und PNOs sowie einer Mischung von konventionellen und direkten Techniken auch auf kleinen PCs und Workstations sehr effizient läuft.

In der Vergangenheit haben uns vor allem spektroskopische Eigenschaften kleiner atmo- sphärischer Radikale wie NH oder NH₂ interessiert. Zur Zeit dümpeln diese Rechnungen etwas auf Sparflamme vor sich hin. Einige Arbeiten zu den Absorptions- und Emissionsspektren von LiHe sind gerade abgeschlossen; solche für angeregte Zustände von kleinen Edelgas-Clustern sind in Vorbereitung. In diesen Bereich gehört auch die Berechnung von NEXAFS-Spektren.

Den zweiten Schwerpunkt bilden Untersuchungen der magnetischen **Superaustausch-Kopplung** in Übergangsmetallverbindungen. Sie wurden angeregt durch experimentelle Arbeiten in der Anorganischen Chemie in Bochum, wo die magnetischen Eigenschaften von zweikernigen überbrückten

Übergangsmetallkomplexen gemessen, aber nicht immer verstanden werden konnten. Obwohl die Energieunterschiede zwischen den verschiedenen Spinzuständen sehr klein sind – $10 - 200 \text{ cm}^{-1}$ –, gelingt es nicht nur, die Experimente zu deuten, sondern in vielen Fällen auch eine quantitative Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten zu erzielen. Unser Lieblingsbeispiel ist die Superaustauschkopplung in zweikernigen Co-Komplexen, da dort räumliche Verzerrung der oktaedrischen Umgebung jedes Co^{2+} Ions, Spin-Bahn-Wechselwirkung und Superaustausch von der gleichen Größenordnung sind und in derselben CI-Rechnung behandelt werden müssen. In der letzten Zeit haben wir solche Untersuchungen auf oxidische Festkörper ausgedehnt.

Die beiden anderen Schwerpunkte ergaben sich aus unserer langjährigen Beteiligung an drei großen Forschungsprojekten: der von der DFG finanzierten Forschergruppe "Modellkat", dem Graduiertenkolleg "Dynamische Prozesse an Festkörperoberflächen" sowie jetzt dem Sonderforschungsbereich 558 "Metall-Substrat-Wechselwirkung in der heterogenen Katalyse". Dabei geht es zum einen um die Charakterisierung der geometrischen und elektronischen Eigenschaften reiner Oxidoberflächen, zum anderen um das Verständnis der verschiedenen Teilschritte in der heterogenen Katalyse.

Zur Berechnung der **Eigenschaften reiner Oxidoberflächen** benutzen wir hauptsächlich ein selbst entwickeltes zweidimensionales periodisches Hartree-Fock-Programm – natürlich auf ROHF-Niveau – (M. Gumbiowski, A. Leitheuser, K. Fink). Damit lassen sich die Struktureigenschaften der Grundzustände von 2D-Oberflächen, z.B. Rekonstruktionen, Relaxationen, Ladungsverteilungen, Oberflächenzustände usw., gut beschreiben. Karin Fink ist zur Zeit dabei, ein periodisches Valenz-CI-Programm neu zu entwickeln, mit dem man auch angeregte Zustände von 1D und 2D Systemen, beispielsweise Magnonen- und Exzitonenspektren, behandeln kann.

Die **Adsorption kleiner Moleküle an Oxidoberflächen** ist eher ein lokaler Prozess, der sich besser mit Cluster-Methoden beschreiben läßt. Das gilt auch für manche spektroskopischen Eigenschaften, z.B. lokale d-d Anregungen, NEXAFS- und IR- Spektren von Adsorbaten, sowie auch für katalytische Prozesse und Desorptionsvorgänge. Wir behandeln solche Teilschritte der heterogenen Katalyse dadurch, daß wir das oder die Adsorbatmoleküle auf einen relativ kleinen Metalloxid-Cluster setzen, der seinerseits in ein ausgedehntes Punktladungsfeld eingebettet wird. Dann können wir das Adsorbat-Substrat-System als großes Molekül betrachten und das ganze Arsenal der quantenchemischen Methoden benutzen.

Einige aktuelle Themen aus den beiden letzten Schwerpunkten sind:

- Geometrische und elektronische Struktur der NiO(100) Oberfläche
- Rekonstruktionen und Relaxationen der $\text{Cr}_2\text{O}_3(111)$ Oberfläche
- Magnetische Eigenschaften und Superaustausch an der CoO(001) Oberfläche
- Adsorption von CO auf $\text{Cr}_2\text{O}_3(111)$
- Adsorption von Cu-Atomen auf unterschiedlichen ZnO Oberflächen
- Röntgenabsorptionsspektren für Pyridin auf ZnO
- Röntgenabsorptionsspektren für Benzol und N_2 auf $\text{TiO}_2(110)$
- XPS und optische Spektren für CuZnO Cluster
- Laserinduzierte Desorption im System NO/NiO(100)
- Laserinduzierte Desorption im System CO/ $\text{Cr}_2\text{O}_3(111)$

Volker Staemmler

Karin Fink

Vorstandswahlen der AGTC

Im Januar 2001 fanden die Wahlen für den Vorstand der AGTC statt. Von den 172 Mitgliedern gaben 115 ihre Stimme ab, das entspricht einer erfreulich hohen Wahlbeteiligung von 67 %.

In den Vorstand gewählt wurden

Prof. Dr. W. Domcke, München
Prof. Dr. B. Heß, Erlangen
Prof. Dr. V. Staemmler, Bochum
Prof. Dr. W. Thiel, Mülheim
Prof. Dr. H.-J. Werner, Stuttgart

Die Deutsche Physikalische Gesellschaft entsendet wie bisher

Prof. Dr. M. Schreiber, Chemnitz

in den Vorstand, die beiden anderen Trägergesellschaften, die Deutsche Bunsengesellschaft sowie die Gesellschaft Deutscher Chemiker, haben noch keine neuen Mitglieder für den Vorstand der AGTC benannt.

In der ersten Sitzung des neuen Vorstandes am 26.5.2001, anlässlich der Bunsentagung 2001 in Stuttgart, wurden Herr Thiel als Nachfolger von Frau Peyerimhoff zum neuen Vorsitzenden und Herr Domcke zum neuen stellvertretenden Vorsitzenden gewählt.

Die AGTC hat zur Zeit 172 Mitglieder.

Bericht von der Sitzung des Vorstandes der AGTC

Bunsentagung, Stuttgart, 26.5.2001

Die wesentlichen Punkte der ersten Sitzung des im Januar neugewählten Vorstandes der AGTC waren:

1. Der Mitgliederbestand der AGTC ist derzeit 172.
2. Der neue Vorstand setzt sich zusammen aus: W. Thiel (1. Vorsitzender), W. Domcke (2. Vorsitzender), B. Heß, V. Staemmler, H.-J. Werner, M. Schreiber (von der DPG benanntes Vorstandsmitglied). Die DBG und die GDCh haben noch keine Vertreter benannt.
3. Die "homepage" der AGTC bleibt trotz des Wechsels im Vorsitz aus Kostengründen bei der Uni Bonn angesiedelt: <http://www.agtc.uni-bonn.de>
4. An vielen Universitäten und Fachhochschulen werden zur Zeit Bachelor- und Master-Studiengänge für die Fächer Chemie, Biochemie und Chemieingenieurwesen eingerichtet. Zehn Chemieorganisationen (darunter die GDCh, DBG, DECHEMA, VCI und andere) haben eine Agentur zur Akkreditierung dieser Studiengänge (A-CBC) gegründet. Jürgen Hinze (Bielefeld) nimmt seit Anfang 2001 die Vertretung der Theoretischen Chemie in dieser Kommission wahr. Es sieht allerdings so aus, als ob die Ministerien der einzelnen Länder keine fachnahe Akkreditierungsagentur unterstützen, sondern entsprechende Agenturen direkt bei den Landesministerien einsetzen wollen.
5. Auch in diesem Jahr wird wieder ein Hellmann-Preis vergeben. Der Name des Preisträgers wird wie immer erst bei der Preisverleihung in Bad Herrenalb bekannt gegeben. Auf der nächsten Vollversammlung der AGTC müssen die Mitglieder des Preiskomitees neu gewählt werden.
6. Der Vorstand bittet weiter um Spenden für den Hellmann-Fonds, damit die Vergabe des Hellmann-Preises über eine längere Zeit gesichert werden kann. Selbstverständlich wird eine Spendenbescheinigung für das Finanzamt ausgestellt.

Bankverbindung:

Konto der Deutschen Bunsengesellschaft:

Kontonummer: 491 061 800

BLZ: 500 800 00

Deutsch Bank Frankfurt

Kostenstelle 8110 (Hellmann-Fonds)

Klatsch & Tratsch

- Frau Prof. Dr. Christel Marian, GMD St. Augustin, hat den Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Heinrich–Heine–Universität Düsseldorf, als Nachfolgerin von Wolfgang Domcke, erhalten.
- Neu ausgeschrieben wurde kürzlich eine C4–Professur für Theoretische Chemie an der Johannes–Gutenberg–Universität Mainz. Der Bewerbungsschluß war der 15.6.2001.
- Die anderen derzeit laufenden Berufungsverfahren sind noch nicht abgeschlossen: Köln, Essen, Bonn usw.
- Frau Dr. Karin Fink und Herr Dr. Axel Kohlmeyer, beide Bochum, erhielten im Juni 2001 in Halle den Professor–Wolfgang–Hande–Preis für E–learning. Sie wurden für die Ausarbeitung eines Multimedia Konzeptes für das Fortgeschrittenen–Praktikum in Theoretischer Chemie ausgezeichnet.
- Wir gratulieren:
 - Prof. Dr. Joachim Reinhold, Leipzig, zum 60. Geburtstag, am 2.12.2000
 - Prof. Dr. Volker Staemmler, Bochum, zum 60. Geburtstag, am 16.12.2000
 - Prof. Dr. Wolfgang von Niessen, Braunschweig, zum 60. Geburtstag, am 32.1.2001
 - Prof. Dr. Wolf Weyrich, Konstanz, zum 60. Geburtstag, am 23.7.2001

Tagungsvorschau 2001/2002

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

2001:

25. – 30. 6. in Dubrownik, Kroatien:

MATH/CHEM/COMP 2001

WWW: <http://mcc.irb.hr>

24. – 29. 8. in Baltimore, Maryland, USA:

7 th International Wigner Symposium

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

23. – 27. 9. in Bad Herrenalb:

37thSymposium for Theoretical Chemistry

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

E-Mail: stc2001@urz.uni-hd.de

WWW: <http://www.pci.uni-heidelberg.de/tc/stc2001>

23. – 29. 9. in Würzburg:

28. GDCh–Hauptversammlung

2002:

19. 2. – 22. 2. in Mariapfarr, Salzburg, Österreich:

Arbeitstagung für Theoretische Chemie

Methoden der Quantenchemie: Dichtefunktionaltheorie

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

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:

6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC)

WWW: <http://www.watoc02.ch/>

vorauss. im September in Chemnitz:

38th Symposium for Theoretical Chemistry

WWW: <http://www.tu-chemnitz.de/schreiber>

2003:

20. – 26. 7. in Bonn:

XIth 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>

John von Neumann Institute for Computing

Winter School: "Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: "From Theory to Algorithms", 25 February – 1 March 2002, Rolduc / Kerkrade (NL)

This Winter School continues a recently launched series of schools and conferences in Computational Science organized by the John von Neumann Institute for Computing (NIC).

It will cover modern quantum simulation techniques and their implementation on high-performance computers, in particular on parallel systems. The focus clearly is on numerical methods which are tailored to treat large quantum systems with many coupled degrees of freedom ranging from superfluid Helium to chemical reactions. Among others, the following topics will be covered:

- * Diffusion and Green's function Monte Carlo
- * Path integral Monte Carlo and molecular dynamics
- * Car-Parrinello / ab initio molecular dynamics
- * Real-time quantum dynamics for large systems
- * Lattice and continuum algorithms
- * Exchange statistics for Bosons and Fermions / sign problem
- * Parallel numerical techniques and tools
- * Numerical integration and random numbers

This strongly interdisciplinary School aims at bridging three "gaps" in the vast field of large-scale quantum simulations: The first one between chemistry and physics, the second one between typical graduate courses in these fields and state-of-the-art research, and finally the one between the Monte Carlo and molecular dynamics communities. The participants – being mostly graduate students, postdocs as well as young researchers in the area of theoretical/computational physics and chemistry – are expected to have basic knowledge of quantum, classical, and statistical mechanics. They will benefit from this School by learning about recent methodological advances within and outside their field of specialization. In addition, they will get insights into recent software development and implementation issues involved, in particular in the context of high-performance computing.

Scientific Programme Committee

Johannes Grotendorst, Forschungszentrum Juelich
Dominik Marx, Ruhr-Universitaet Bochum
Alejandro Muramatsu, Universitaet Stuttgart

Posters are invited.

More information: <http://www.fz-juelich.de/wsqs>

Stellenausschreibungen



Ruhr-Universität-Bochum
Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Im Rahmen des [SFB 558 "Metall-Substrat-Wechselwirkung in der heterogenen Katalyse"](#) ist ab sofort eine **Doktorandenstelle BAT(IIa/2)** am Lehrstuhl für Theoretische Chemie zu besetzen.

Im Rahmen des SFB sollen ab initio Rechnungen zur Methanolsynthese an Cu/ZnO Katalysatoren durchgeführt werden.

Für weitere Informationen oder Bewerbungen wenden Sie sich bitte an Prof. Dr. V. Staemmler oder Dr. K. Fink, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum.

Email: Karin.Fink@ruhr-uni-bochum.de

Freie Universität Berlin
Arbeitsgruppe für Theoretische Chemie



In der Arbeitsgruppe Theoretische Chemie des Instituts für Chemie der Freien Universität Berlin ist voraussichtlich zum 01.10.2001 eine **Promotionsstelle BAT (IIa/2)** zu besetzen.

Das Arbeitsgebiet ist die Theorie zur Laserkontrolle chemischer Reaktionen sowie übliche Lehr aufgaben.

Voraussetzung ist das Diplom bzw. Master in Chemie, Physik oder Informatik sowie grundlegende Programmiererfahrungen.

Erwünscht sind Erfahrungen aus den Bereichen Quantenchemie oder der Theorie zur molekularen Dynamik.

Interessierte bewerben sich bitte mit den üblichen Unterlagen bei Prof. Dr. Jörn Manz, Freie Universität Berlin, Institut für Chemie – Physikalische und Theoretische Chemie, Takustr. 3,m 14195 Berlin

Email: manz@chemie.fu-berlin.de