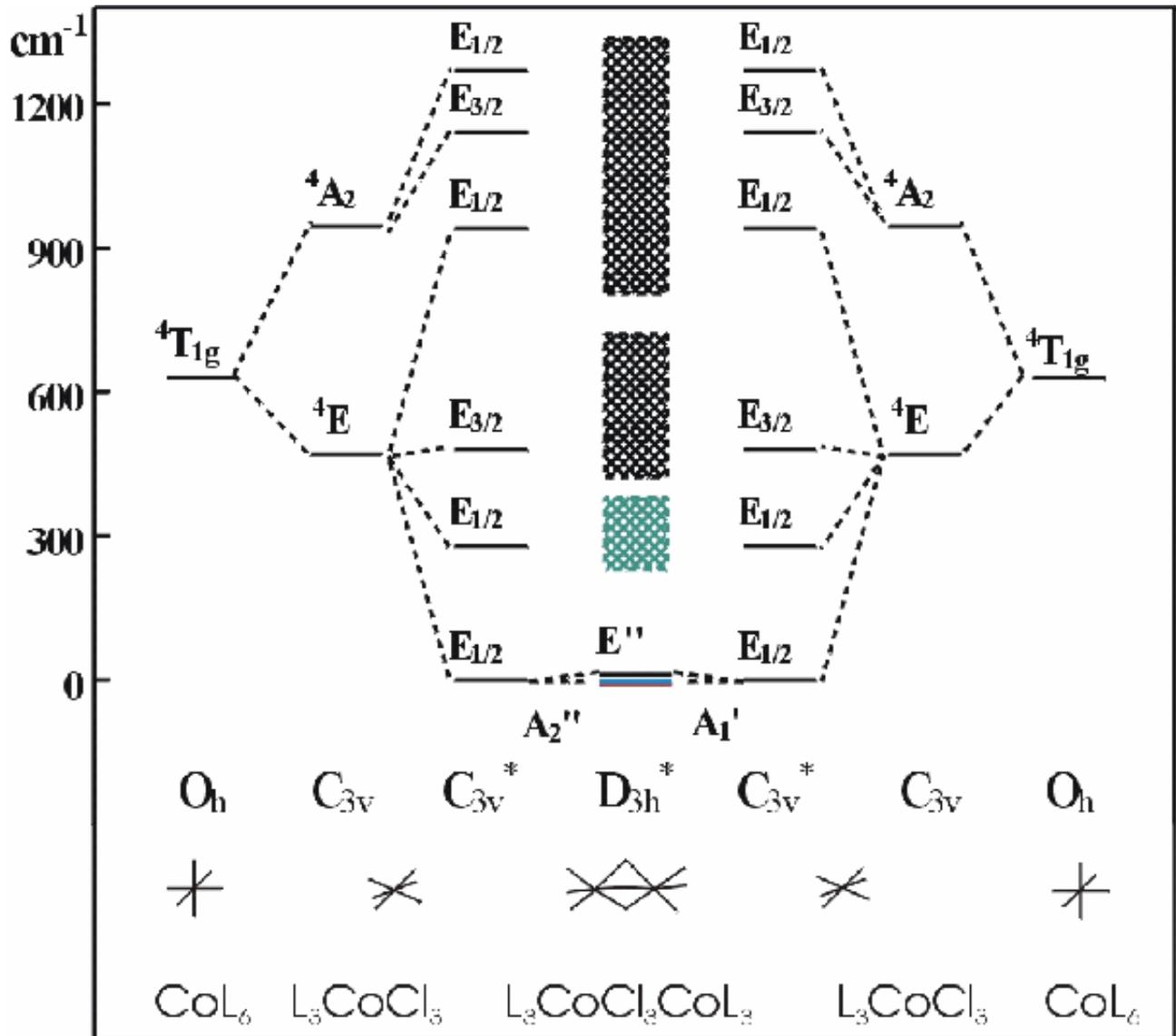


Info

Theoretische Chemie



Ausgabe Mai 2002

Inhaltsverzeichnis

1. Editorial
2. Bericht über das 262. Heraeus-Seminar
3. Lehrstühle stellen sich vor
4. Aus dem Vorstand
5. Klatsch & Tratsch
6. Mitgliederversammlung der AGTC Sempember 2001 in Bad Herrenalb
7. Stellenausschreibung

Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

dies ist das dritte und letzte INFO Theoretische Chemie aus Bochum; dann geben wir den Staffelstab an Herrn Botschwina in Göttingen ab. Leider hat es wieder etwas länger gedauert als geplant, bis das INFO fertig war, und es ist auch etwas dünn geworden. Das liegt hauptsächlich daran, daß Beiträge zum INFO nur sehr spärlich eingehen. Wir möchten Sie daher, auch im Namen der nächsten Herausgeber des INFOs, bitten, sich nicht zurückzuhalten und wissenswerte Informationen - zu allen Rubriken - in großer Fülle an das jeweilige Redaktionsteam einzusenden. Wir danken Herrn Andreas Schwaebe, der die meisten technischen Arbeiten für die letzten drei INFOs ausgeführt hat. Mit den besten Wünschen für ein erfolgreiches Sommersemester 2002

V. Staemmler, K. Fink, Bochum

Bericht über das 262. Heraeus-Seminar

Modern Aspects of Many-Electron Theory

Bad Honnef 21-24.10. 2001

Ziel dieses Seminars war ein Meinungsaustausch zwischen Vertretern aktueller Methoden der Mehrelektronentheorie von Molekülen und Festkörpern, sowohl von etablierten Verfahren wie coupled-cluster (CC) oder Dichtefunktionaltheorie (DFT), als auch von neueren Ansätzen, bei denen die reduzierten Dichtematrizen die zentrale Rolle spielen.

Eine Reihe von Fortschritten auf dem CC-Gebiet wurden präsentiert, z.B. Ergebnisse von variationellen CC-Rechnungen, die lange für undurchführbar galten (J. Olsen). Im Rahmen von DFT ging es einerseits um ihre mathematischen Grundlagen, ausgehend von der Analysis konvexer Funktionale (H. Eschrig), andererseits um die Herleitung 'exakter' Austausch-Korrelationspotentiale aus ab-initio-Rechnungen (E.J. Baerends, R. Bartlett), aus störungstheoretischen Überlegungen (A. Görling), oder im Rahmen orbitalabhängiger Funktionale (E.K.U. Groß). Es fiel auf, daß die aus herkömmlichen Funktionalen erhaltenen Kohn-Sham Potentiale sich in wesentlichen Aspekten von ihren exakten Entsprechungen unterscheiden.

Der Rechenaufwand bei konventionellen Verfahren skaliert ungünstig mit der Zahl n der Atome im Molekül. Auf dem Wege in die Richtung 'Lineare Skalierung' mit n sind erhebliche Fortschritte erzielt worden (H.J. Werner, M. Head-Gordon). Die sog. dynamische oder kurzreichweitige Korrelation verlangt in traditionellen Ansätzen große Basissätze, und die Konvergenz ist langsam. Dagegen läßt sich eine hohe Genauigkeit bei vertretbarem Rechenaufwand mit Ansätzen erzielen, bei denen die Wellenfunktion explizit von den interelektro-nischen Koordinaten abhängt (W. Klopper, P. Taylor, S. Tenno).

Auf halbem Wege zwischen ab-initio- und DFT-Verfahren stehen erfolgversprechende Ansätze, bei denen die Einteilchen-Dichtematrix (S. Goedecker, K. Yasuda), die Zweiteilchen-Dichtematrix (A.J. Coleman, H. Nakatsuji), oder die Kumulanten der reduzierten Dichtematrizen (W. Kutzelnigg, D. Mukherjee) im Mittelpunkt stehen. Das bisher hinderliche sog. n -Repräsentierbarkeits-Problem für die Zweiteilchen-Dichtematrix ist offenbar gelöst (A.J. Coleman).

In zwei Podiumsdiskussionen ging es u.a. darum, was ab-initio-Quantenchemie und DFT voneinander lernen können, und in welche Richtung zukünftige Entwicklungen vermutlich gehen werden. Insgesamt gab einen regen Meinungsaustausch zwischen Vertretern verschiedener Bereiche der Theoretischen Physik, der Theoretischen Chemie und der Mathematik, die normalerweise nicht miteinander reden.

W. Kutzelnigg

(abgedruckt im Physik Journal 1(2002) Nr.1, Seite 62)

TheoChem @ RUB

Der Lehrstuhl für Theoretische Chemie an der Ruhr-Universität Bochum (RUB) wurde im Jahr 1973 von Professor Werner Kutzelnigg gegründet und zusammen mit seinem Mitarbeiter und späteren Kollegen Professor Volker Staemmler in mehr als 25-jähriger wissenschaftlicher Tätigkeit zu nationaler und internationaler Geltung gebracht. In dieser Zeit war eine beachtliche Zahl nunmehr bekannter Theoretischer Chemiker in Bochum als Doktoranden, Habilitanden oder Gäste tätig. Im Dezember des Jahres 1999 ging die Leitung des Lehrstuhl an Dominik Marx über.

Als Emeritus ist Werner Kutzelnigg weiterhin wissenschaftlich tätig, wie die von ihm im letzten Info Theoretische Chemie (Dezember 2001) neu eingeführte Rubrik "Emeriti stellen sich vor" oder sein Beitrag im vorliegenden Info bezeugen. Zudem ist die "Arbeitsgruppe Quantenchemie" von Professor Staemmler selbstverständlich äusserst aktiv (siehe Vorstellung im Info vom Juli 2001). Was nach seinem Ausscheiden, leider schon im Jahr 2005, mit dieser Professur wird, steht in den Sternen - und vielleicht noch nicht einmal dort. Momentan jedenfalls ist die Gruppe Staemmler, wie gewohnt, sehr produktiv. Erfreulicherweise ist die im vorletzten Info zähneknirschend erwähnte "dünne Personaldecke" auch wieder signifikant dicker geworden.

Aus dieser Konstellation mit drei forschungsaktiven Hochschullehrern heraus ergibt sich ein sehr vielfältiges und attraktives Forschungsspektrum im Bereich der Theoretischen Chemie an der RUB. Interessant ist in diesem Zusammenhang auch die enge lokale Einbindung der Theorie in den Sonderforschungsbereich "Metall-Substrat-Wechselwirkungen in der heterogenen Katalyse" (SFB 558) und in die Forschergruppe FOR 436 "Polymorphismus, Dynamik und Funktion von Wasser an molekularen Grenzflächen" (FOR 436).

Nun aber zur **FORSCHUNG** im "Arbeitskreis Marx". Der Generalbaß ist das Verstehen von Struktur, Dynamik und chemischen Reaktionen komplexer molekularer Vielteilchensysteme, wobei wir uns oft im Spagat zwischen Chemie und Physik wiederfinden. Die Grundidee besteht darin, "die Natur" so experimentnah wie möglich mit theoretischen Methoden zu beschreiben, wobei die zugrundeliegenden Entitäten Atomkerne und Elektronen sind

(dies war auch der Fokus der von uns mitorganisierten "NIC Winterschule 2002" <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume10/volume10.html>). Dementsprechend benutzen wir sogenannte atomistische *ab initio* Computersimulationen welche in der Lage sind, Dynamik und Quantenmechanik einzubeziehen - natürlich nur näherungsweise in Anbetracht der uns interessierenden Systemgrößen. In diesem Sinn bedeutet für uns der Begriff "*ab initio*", daß die konkreten Rechnungen nicht an experimentelle Daten angepasst werden oder von Parametern abhängen, die vorher aus speziellen Experimenten bestimmt wurden. Die zentrale Technik, um diesen Ansatz in praktische numerische Methoden umzusetzen, sind *ab initio* Simulationen, so wie sie zentral auf Ideen von Car und Parrinello aus dem Jahr 1985 zurückgehen.

Das Grundkonzept des Car-Parrinello Zugangs besteht darin, das Elektronenstrukturproblem sehr effizient "on the fly" zu lösen, d.h. während im Rahmen einer Molekulardynamiksimulation die Newtonschen Bewegungsgleichungen für die Kernfreiheitsgrade integriert werden. Damit können die auf alle Atomkerne wirkenden Kräfte gewonnen werden, ohne vor der Simulation eine Potentialfläche berechnen oder Kraftfelder parameterisieren zu müssen. Unter dem Strich ist es so möglich, dynamische Prozesse, die viele Freiheitsgrade involvieren, ohne Einschränkung der Dimensionalität studieren zu können. Die Methode, ihre Implementierung im Programmpaket CPMD, neuere Weiterentwicklungen und vielfältige Anwendungen sind sehr detailliert in der Übersichtsarbeit <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/go/cprev.html> beschrieben.

Die ursprüngliche Car-Parrinello Methode, und auch heute noch die meisten ihrer Anwendungen, beruht auf einigen wesentlichen Näherungen. Einerseits werden die Kerne als klassische Punktteilchen beschrieben, d.h. Prozesse, die wesentlich durch Nullpunktsenergie oder Tunneln geprägt sind, lassen sich damit nicht erfassen. Andererseits ist die Dynamik beschränkt auf den elektronischen Grundzustand, d.h. nichtadiabatische Prozesse und Photochemie sind nicht zugänglich. An beiden Punkten setzen wir methodisch an. Die *ab initio* Pfadintegralmethode zur Quantisierung der Kernfreiheitsgrade wird weiterentwickelt, um auch dynamische Phänomene behandeln zu können. Außerdem arbeitet Dr. Harald Forbert daran, die Austauschstatistik, zunächst für Bosonen, zu berücksichtigen um hoffentlich in Zukunft auch Bose-Einstein Kondensation zu ermöglichen und superflüssiges Helium im virtuellen Labor "herstellen" zu können. Dr. Nikos Doltsinis möchte sich auf dem Gebiet der Dynamik in angeregten Zuständen habilitieren. Er implementierte, damals noch in Cambridge, time-dependent DFT mit ebenen Wellen in CPMD und hat nach seinem Wechsel "ins Revier" (wie man hier sagt) bereits eine nicht-adiabatische Car-Parrinello Methode entwickelt, die eine sehr effiziente Durchführung von "surface hopping" erlaubt. Erste Anwendungen auf einfache Photoprozesse in Wasser laufen bereits, siehe <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/go/surfhop.html>. Er wird dabei von dem Diplomanden Holger Langer unterstützt, der sich zur Zeit mit der Spektroskopie von DNA Basen befasst. Bochum ist auch ein Entwicklungsknoten in einem Netzwerk von Gruppen um Jürg Hutter (Universität Zürich), Chris Mundy (Lawrence Livermore Natl Lab) und Michele Parrinello (CSCS/ETH Zürich), in dem ein neues *ab initio* Simulationspaket, CP2k, entwickelt wird.

Neben der Methodenentwicklung sind Anwendungen auf interessante Probleme die zweite Säule der Arbeit in Bochum. Dabei reichen die Fragestellungen von der Diffusion in assoziierten Flüssigkeiten über die Dynamik von interessanten Molekülen bis zu heterogener Katalyse und Protonentransfer. Die untersuchten Systeme umfassen Moleküle und Cluster aber auch Flüssigkeiten, Festkörper, Oberflächen und Biosysteme. Eine "Mediathek" ist noch im Aufbau begriffen, aber erste Animationen finden Sie bereits unter <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/go/media.html>.

Konkret beschäftigt sich momentan Dr. Bernd Meyer im Rahmen des SFBs 558 mit der heterogen katalysierten Methanolsynthese, Ilka Hegemann hat im Rahmen ihrer Diplomarbeit in 2001 das stark anharmonische IR Spektrum von CH₅⁺ über die Heisenberg-Gordon Formulierung der Spektroskopie im klassischen Grenzfall berechnet, Dr. Barbara Kirchner (jetzt an der Universität Zürich bei Jürg Hutter) hat als Postdoktorandin die erstaunlich schnelle anomale Diffusion von H Atomen in Wasser dynamisch aufgeklärt, Nikolaj Otte (nun Abteilung Thiel am MPI Mühlheim) hat erste Schritte in Richtung der Simulation von solvatisierten Elastinmodellen unternommen u.v.m. Die biophysikochemischen Interessen werden aktuell von Dr. Roger Rousseau in Zusammenarbeit mit Eduard Schreiner und Volker Kleinschmidt, der damit promovieren möchte, im Rahmen der Forschergruppe "Wasser" weiterverfolgt. Dr. Christian Boehme hat nach seiner Ankunft aus Strasbourg gerade angefangen, auf dem Gebiet der katalytischen Fe/S Biochemie zu arbeiten. John Stubbs (University of Minnesota) arbeitet für ein akademisches Jahr bei uns als DAAD Doktorand, um neue *ab initio* Simulationstechniken zu erlernen und in die USA mitzunehmen, wobei er konkret das Zustandekommen einer glykosidischen Bindung simuliert. Ab August soll sich Dr. Padma Kumar methodisch mit quasiklassischer und centroid path integral Quantendynamik beschäftigen. Professor Mark Tuckerman (New York University und Courant Institute of Mathematical Sciences) ist gerade als Gastprofessor an der RUB angekommen um neue Quantendynamiktechniken in Realzeit zu erarbeiten. Als Humboldtstipendiat arbeitet bereits seit Anfang Mai Professor

Amalendu Chandra (Indian Institute of Technology, Kanpur) in unserer Gruppe um Wasserstoffbrücken und Metalle in flüssigem Ammoniak zu studieren. Schließlich wird Dr. Martin Konopka (TU Bratislava) im Sommer für einige Monate als Postdoc kommen um das Verhalten von Thiolaten auf Kupferoberflächen zu untersuchen. Darüberhinaus laufen informelle aber fruchtbare Zusammenarbeiten u.a. mit Magali Benoit (Universite Montpellier), Daniel Boese (Weizmann Institute), Andreas Görling (TU München), Rafael Ramirez (CSIC Madrid) und Ivan Stich (TU Bratislava).

Im Bereich der **LEHRE** gab und gibt es bei uns einige Umstrukturierungen. Einerseits haben wir das Fortgeschrittenen-Praktikum von einer "Paper und Bleistift Veranstaltung" mehr in Richtung "Computerpraktikum" umorientiert. In diesem Zusammenhang hat es uns besonders gefreut, daß Dr. Karin Fink und Dr. Axel Kohlmeyer dafür mit dem "Hande-Preis für e-Learning 2001" ausgezeichnet wurden. Die Praktika finden im neu eingerichteten sogenannten "Theoretikum" statt. Dort werden aber keinesfalls nur Knöpfchen gedrückt, sondern die Studenten eignen sich selbständig vertiefenden Stoff an und programmieren einfache Algorithmen selbst. Zudem werden nicht nur käufliche Programme eingesetzt, sondern die Studenten werden auch mit selbstgestrickter Software "konfrontiert". In diesem Praktikum wird die gesamte Methodenpalette der Theoretischen Chemie gestreift, d.h. von der Elektronen- und Molekülstruktur über IR, NMR und optische Spektroskopie bis hin zur (*ab initio*) Molekulardynamik. Für Biochemiker haben wir ein maßgeschneidertes Programm in Theoretischer (Bio)Chemie ab dem Grundstudium bis hin zum Abschluß eingeführt, wobei die Ausdifferenzierung gegenüber der Chemie (momentan noch) in den Praktika erfolgt. Nikolaj Otte hat als erster Biochemiestudent bei uns diplomiert und Eduard Schreiner wird ihm demnächst folgen.

Andererseits wurden an unserer Fakultät mit dem Wintersemester 2001/02 die sogenannten gestuften Studiengänge Bachelor of Science (B.Sc.) und Master of Science (M.Sc.) in Chemie bzw. Biochemie eingeführt. Selbstverständlich kann die Theoretische Chemie als Schwerpunktfach in beiden Studiengängen sowohl auf Bachelor- als auch Master-Niveau gewählt werden. Gemäss den aktuellen Entwürfen wird dies auch in der gestuften Lehrerausbildung auf Master-Niveau möglich sein. Gleichzeitig wurde die Theoretische Chemie als Pflichtfach im Bachelor-Studium Chemie verankert - leider aber nur im Sinne einer Minimallösung mit drei Semesterwochenstunden (2V+1Ü) im dritten Semester. Zudem wird gerade ein vier- bis sechsemestriges Promotionsstudium konzipiert, aber schon jetzt ist es möglich, mit der Promotion sofort im Anschluß an einen überdurchschnittlichen Bachelor-Abschluß zu beginnen. Damit ist es möglich, die Master-Arbeit (also das Äquivalent zur Diplomarbeit) zu "überspringen". Es sei betont, daß gerade diese gestuften Studiengänge in Verbindung mit dem Punktesammelsystem ("credit points") zu jeder Zeit offen sind für Quereinsteiger - auch für solche aus Diplomstudiengängen und aus dem Ausland. Zudem wird der Master- Abschluß in Chemie/Biochemie per Äquivalenzbescheinigung dem entsprechenden klassischen Diplom gleichstellt. Viele Informationen zu diesem Thema finden Sie unter dem Punkt "Studium" auf der Homepage der Fakultät <http://www.ruhr-uni-bochum.de/chemie/>.

Last but not least ist zu bemerken, daß aufgrund der Neuberufung die **AUSSTATTUNG** mit Rechnern und Peripheriegeräten exzellent ist. Das Spektrum reicht von starken Multiprozessor-Workstations über diverse "Beowulfcluster" bis zur im Sommer anzuschaffenden ersten Ausbaustufe des lehrstuhleigenen Parallelrechners (mit ca. 450 GFlop/s peak performance und gut 100 GB RAM). Der gesamte Maschinenpark wird äußerst professionell von Dr. Axel Kohlmeyer "hauptamtlich" gefahren. Erfreulicherweise hat auch das Rechenzentrum Ende 2001 einen neuen Zentralrechner anschaffen "dürfen" (HP Superdome mit 28 Prozessoren, 56 GB RAM, 84 GFlop/s peak), auf dem wir oft gesehene Gäste sind. Trotz dieser guten lokalen Voraussetzungen müssen (aufgrund der Gruppengröße in Kombination mit dem Rechenzeitbedarf pro Anwendungsprojekt) diese Ressourcen unbedingt noch ergänzt werden durch Zugriff auf diverse Höchstleistungsrechenzentren. Im Zuge der Berufung wurde - erstaunlicherweise - zum ersten Mal auch eine professionelle und flächendeckende Punkt-zu-Punkt Vernetzung von den Zentralen Diensten realisiert. Auch wurden die Räumlichkeiten des Lehrstuhls inklusive Möblierung von Grund auf renoviert und bieten somit nicht nur sehr gute, sondern auch angenehme Arbeitsbedingungen.

Zum **SCHLUSS** lade ich Sie herzlich ein, uns doch virtuell unter <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/> zu besuchen, oder gerne auch persönlich <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/go/kontakt.html> vorbeizukommen.

Dominik Marx, Bochum im Mai 2002

Aus dem Vorstand

Auf den Webseiten der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie sollen Links zu den Homepages der entsprechenden Arbeitsgruppen in Deutschland, Österreich und der Schweiz eingerichtet werden. Der Vorstand war sich einig, daß möglichst alle unabhängigen Arbeitsgruppen aufgeführt werden sollten, die von einem Professor oder einem habilitierten Kollegen geleitet werden. Zum Erstellen der Links wird um eine Zusendung der betreffenden Webadresse gebeten (email: theory@mpi-muelheim.mpg.de).

Klatsch & Tratsch

- **Frau Prof. Dr. D. Sigrid Peyerimhoff**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Bonn, ist mit Ablauf des WS 2001/2002 emeritiert worden.
Herr Prof. Dr. Horst Köppel, Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Heidelberg, übernimmt im SS 2002 (ab 01.04.2002) die Lehrstuhlvertretung.
- **Herr Prof. Dr. Michael Dolg**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Bonn, hat den Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Köln angenommen. Die Bonner C3-Stelle soll umgehend wieder ausgeschrieben werden.
- **Herr PD Dr. Bernd Hartke**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Stuttgart, ist zum 01.04.2002 zum C3-Professor für Theoretische Chemie am Institut für Physikalische Chemie der Universität Kiel ernannt worden.
- **Herr Prof. Dr. Bernd A. Hess**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Erlangen-Nürnberg, hat einen Ruf auf die C4-Professur für Theoretische Chemie an der Universität Bonn (Nachfolge Sigrid Peyerimhoff) erhalten.
- **Herr Prof. Dr. Jürgen Gauss**, Universität Mainz, hat den Ruf auf die C4-Stelle für Theoretische Chemie in Köln abgelehnt und den Ruf auf eine neue C4-Professur für Theoretische Chemie an der Universität Mainz angenommen.
- **Herr Dr. Christian Ochsenfeld**, Universität für Physikalische Chemie der Universität Mainz, hat den Ruf auf eine C3-Stelle für Theoretische Organische Chemie an der Universität Essen abgelehnt und zum 1. 3. 2002 den Ruf auf eine C3-Professur für Theoretische Chemie an der Universität Tübingen angenommen.

Wir gratulieren:

- **Prof. Dr Otto Steinborn**, Regensburg, zum 70. Geburtstag, am 8.5.2002
- **Prof. Dr. Sigrid D. Peyerimhoff**, Bonn, zum 65. Geburtstag, am 12.1.2002
- **Prof. Dr. Georg Hohlneicher**, Köln, zum 65. Geburtstag, am 13.3.2002
- **Prof. Dr. Wolf-Dieter Stohrer**, Bremen, zum 60. Geburtstag, am 2.1.2002
- **Dr. Horst Gonska**, Köln, zum 60. Geburtstag, am 22.3 2002
- **Prof. Dr. Robert Buenker**, Wuppertal, zum 60. Geburtstag, am 6.5.2002

Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie

beim 37. Symposium für Theoretische Chemie in Bad Herrenalb

Mittwoch, 26. September 2001.

Beginn: 17.40 Uhr.

Tagesordnung:

1. Genehmigung der Tagesordnung
2. Protokoll zur Mitgliederversammlung 2000
3. Bericht des Vorsitzenden
4. Kassenbericht und Wahl des Kassenprüfers
5. Neuwahl der Jury für den Hellmann-Preis
6. Symposium 2002
7. Symposium 2003
8. Verschiedenes

Protokoll:

1. Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Änderung akzeptiert.
2. Das Protokoll zur Mitgliederversammlung 2000 war im Info TC (November 2000) abgedruckt. Es wird ohne Änderung genehmigt.
3. Der Vorsitzende dankt zunächst seiner Vorgängerin (S. Peyerimhoff) für die erfolgreiche Arbeit in den beiden vergangenen Jahren. Der neue Vorstand für 2001-2003 hat folgende Mitglieder: W. Thiel (Vorsitzender), W. Domcke (Stellvertreter), B. Heß, G. Frenking, M. Schreiber, V. Staemmler und H.-J. Werner.

Der Bericht betont insbesondere die folgenden Punkte:

Der Zweck der Arbeitsgemeinschaft besteht darin, die Theoretische Chemie in allen Bereichen zu fördern (Forschung und Lehre, nationale und internationale Kooperationen, Interessenvertretung nach außen). Hier sind in den letzten Jahren Erfolge zu verzeichnen, beispielsweise bei Berufungen (Wiederbesetzung freier Professuren und Etablierung mehrerer neuer Professuren), bei großen Forschungsprojekten (z.B. starke Beteiligung an vielen Sonderforschungsbereichen der DFG) und bei der allgemeinen "Sichtbarkeit" unseres Faches (z.B. über den Hellmann-Preis). Trotzdem bleibt noch viel zu tun, damit die Theoretische Chemie angesichts ihrer großen wissenschaftlichen Fortschritte an allen Universitäten in Forschung und Lehre angemessen vertreten ist (z.B. durch die Schaffung weiterer neuer Professuren und durch eine bessere Verankerung im Studienplan).

Wichtig für die Arbeitsgemeinschaft ist die Kommunikation nach innen und außen. Das Info TC wird 2001 von V. Staemmler und 2002 durch P. Botschwina herausgegeben, es ist über das Internet allgemein zugänglich (Beiträge sind willkommen). Seit 1999 ist die Arbeitsgemeinschaft dank der Bonner Gruppe (S. Peyerimhoff) auf eigenen Webseiten präsent (www.agtc.uni-bonn.de, demnächst auch www.theochem.de), hier finden sich viele interessante Informationen und Links.

Seit kurzem besteht die Möglichkeit, auch seitens der Theoretischen Chemie durch Notizen in den "Blauen Blättern" über aktuelle Forschungsergebnisse zu informieren. Die Koordination liegt bei W. Domcke (Dynamik) und B. Heß (Elektronenstruktur), die beide für Vorschläge dankbar sind (am besten direkt einen kurzen zusammenfassenden Text der gewünschten Länge einreichen). Darüber hinaus werden auch dieses Jahr in den "Blauen Blättern" drei Jahresrückblicke aus dem Gebiet der Theoretischen Chemie erscheinen. Als Autoren haben sich J. Gauss, A. Görling und B. Hartke zur Verfügung gestellt.

Der Bericht schließt mit dem Aufruf an alle, die Arbeitsgemeinschaft durch aktive Mitwirkung zu unterstützen und um neue Mitglieder zu werben. Derzeit gibt es 174 Mitglieder, aber insbesondere bei den jüngeren Kollegen sollten sich weitere Interessenten finden lassen.

4. Der Kassenprüfer (F. Mark) hat am 22. August 2001 die Verwaltung der Deutschen Bunsengesellschaft (DBG) in Frankfurt besucht und unsere dort geführten Konten geprüft. Da er nicht am Symposium teilnehmen kann, hat er einen ausführlichen schriftlichen Bericht vorgelegt. Der Vorsitzende fasst die wichtigsten Punkte zusammen: Es gibt "keinen Grund zur Beanstandung", außerdem ist der DBG für das Jahr 2000 die ordnungsgemäße Führung aller Konten auch durch offizielle Wirtschaftsprüfer (KPMG) bestätigt worden. Besonders hervorgehoben wird die kostengünstige Verwaltung unserer Konten durch die DBG. Die Mitgliederversammlung billigt den Kassenbericht und wählt F. Mark erneut zum Kassenprüfer.

Neben dem laufenden Konto der Arbeitsgemeinschaft besteht der Hellmann-Fonds für den Hellmann-Preis. An Spenden sind während des letzten Jahres 8445 DM eingegangen, so daß der Hellmann-Fonds derzeit einen Stand von ca. 18000 DM aufweist. Dieser Betrag ist deutlich niedriger als bei vergleichbaren Fonds in der DBG. Der Vorsitzende erneuert daher den letztjährigen Spendenaufruf. Spenden sind in jeder Höhe willkommen, eine steuerliche Spendenbescheinigung wird durch die DBG ausgestellt.

Ab 2002 beträgt der jährliche Mitgliedsbeitrag für die Arbeitsgemeinschaft 13 Euro (statt bisher 25 DM).

5. Für die Neuwahl zur Jury für den Hellmann-Preis legt der Vorstand eine Liste von 10 Kandidaten vor, die zur Mitwirkung bereit sind. Es werden keine weiteren Kandidaten vorgeschlagen. Zu wählen sind 5 Mitglieder und 2 Ersatzmitglieder, wobei die Jury laut Satzung Vertreter aus Deutschland, Österreich und der Schweiz umfassen soll. In geheimer schriftlicher Abstimmung werden gewählt: R. Ahlrichs (Karlsruhe), H.-P. Huber (Basel), H. Lischka (Wien), C. Marian (Bonn) und W.H.E. Schwarz (Siegen) als Mitglieder sowie J. Manz (Berlin) und J. Sauer (Berlin) als Ersatzmitglieder.
6. U. Kleinekathöfer berichtet in Vertretung von M. Schreiber über den Stand der Vorbereitung zum Symposium 2002. Hier hat sich wegen der Berufung von M. Schreiber an die International University Bremen eine wesentliche Änderung ergeben: Das Symposium wird nicht in der Region Chemnitz stattfinden, sondern auf dem Campus der International University in Bremen, und zwar vom 25.-29. August 2002 in der Woche vor dem dortigen Semesterbeginn. Als Schwerpunktthema ist "Elektronentransfer und Femtosekundenspektroskopie" vorgesehen.

In der Diskussion wurde angeregt, bei den Vorträgen auf zukünftigen Symposien eine zu enge Festlegung auf ein Schwerpunktthema zu vermeiden und eine gewisse thematische Vielfalt zuzulassen, auch im Hinblick auf Überlappungen bei den Schwerpunktthemen 2000-2002.

7. Zur Organisation des Symposiums 2003 in der Schweiz haben sich M. Quack und H.P. Lüthi (ETH Zürich) bereit erklärt. Die Mitgliederversammlung begrüßt dies einhellig und überträgt den beiden Kollegen die Ausrichtung des Symposiums (voraussichtlich im September 2003).
8. Es werden weitere Tagungen auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie vorgestellt.
 - a) S. Peyerimhoff: 11th International Congress of Quantum Chemistry, Bonn, 20.-25. Juli 2003, mit drei vorangehenden Satellitentagungen jeweils am 17.-18. Juli 2003 (Dynamik, Berlin, J. Manz; Katalyse, Mülheim, W. Thiel; Korrelation, Bad Herrenalb, H.-J. Werner), einem direkt anschließenden Hellmann-Tag am 26. Juli 2003 (Bonn, W.H.E. Schwarz) und einer zeitlich nachgeschalteten Relativistik-Tagung vom 27.-31. Juli (Bad Herrenalb, C. van Wüllen).
 - b) R. Jaquet: Arbeitstagung für Theoretische Chemie zum Thema "Dichtefunktional-Theorie" (organisiert von A. Sax), Mariapfarr, 19.-22. Februar 2002.
<http://www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr/index.html>
 - c) N. Doltsinis: Winterschule "Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms" (organisiert vom Forschungszentrum Jülich), Kerkrade (NL), 25. Februar - 1. März 2002.
<http://www.fz-juelich.de/wsqs>

Abschließend bedankt sich der Vorsitzende bei U. Fleischer, A. Koslowski und S. Thiel für die Bereitschaft, den Tagungsbericht über das diesjährige Symposium zu erstellen, der im Info TC und in den "Blauen Blättern" erscheinen soll.

Ende der Mitgliederversammlung: 18.15 Uhr
gez. W. Thiel

Im Rahmen des Projektes zur Einführung von "Juniorprofessuren"

sind an der Universität Siegen Stellen für Juniorprofessuren in folgenden Bereichen zu besetzen:

Fachbereich 8 Chemie-Biologie

Theoretische Chemie

Die zukünftige Stelleninhaberin/der zukünftige Stelleninhaber soll sich in angemessener Weise an der Lehre des Faches theoretische Chemie beteiligen sowie eine aktuelle Forschungsrichtung der Theoretischen Chemie bearbeiten (z.B. Molekulardynamik, Simulationen, *confined liquids*, molekulare Wechselwirkungen, Oberflächen). Eine Mitarbeit im Forschungsschwerpunkt "Nano- und Mikrochemie" und mit den Arbeitsgruppen der Physikalischen Chemie wird erwartet.

Auskunft erteilt der Dekan, Herr Prof. Dr. Wenclawiak, Fachbereich 8 Chemie-Biologie, Tel.: 0271-740-2329.

Die zukünftigen Stelleninhaberinnen/Stelleninhaber sollen Aufgaben in Wissenschaft, Forschung und Lehre in ihren Fächern selbständig wahrnehmen.

Das Einstellungsverfahren ist an die Bestimmungen über die Berufung von Professorinnen und Professoren des Hochschulgesetzes Nordrhein-Westfalen angelehnt. Einstellungsvoraussetzungen für Juniorprofessorinnen und Juniorprofessoren sind neben den allgemeinen dienstrechtlichen Voraussetzungen

1. ein abgeschlossenes Hochschulstudium,
2. pädagogische Eignung,
3. besondere Befähigung zu wissenschaftlicher Arbeit, die in der Regel durch die herausragende Qualität einer Promotion nachgewiesen wird.

Sofern vor oder nach der Promotion eine Beschäftigung als wissenschaftliche Mitarbeiterin oder als wissenschaftlicher Mitarbeiter erfolgt ist, sollen Promotions- und Beschäftigungsphase zusammen nicht mehr als sechs Jahre betragen haben. Die Promotion darf nicht länger als 5 Jahre zurückliegen.

Die Einstellung erfolgt zunächst für die Dauer von drei Jahren im Beamtenverhältnis auf Zeit bzw. im Angestelltenverhältnis. Bei Bewährung als Hochschullehrerin oder Hochschullehrer soll das Beamtenverhältnis bzw. Angestelltenverhältnis im dritten Jahr um weitere drei Jahre verlängert werden. Die Besoldung / Vergütung erfolgt nach der Besoldungsgruppe C 1 BBesO.

Die Universität Siegen strebt eine Erhöhung des Anteils an Frauen in Forschung und Lehre an. Es wird darauf hingewiesen, dass die Bewerbungen von Frauen ausdrücklich erwünscht sind und Frauen bei gleicher Eignung, Befähigung und fachlicher Leistung bevorzugt berücksichtigt werden, sofern nicht in der Person des Mitbewerbers liegende Gründe überwiegen.

Ebenso ist die Bewerbung geeigneter Schwerbehinderter erwünscht.

