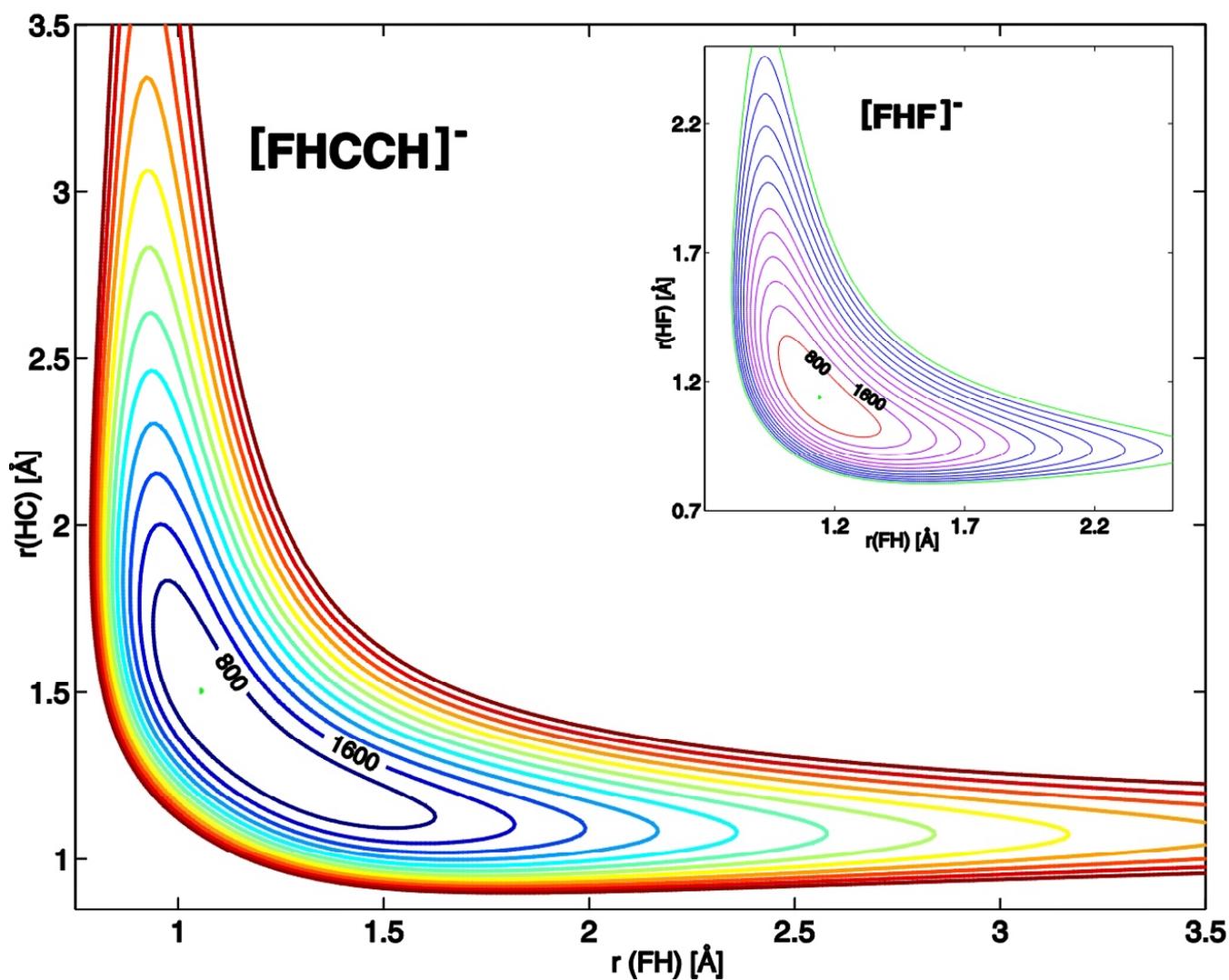


# Info

## Theoretische Chemie



Ausgabe November 2002

## Editorial

### Letzte Nachrichten

#### **Rückschau: Symposium für Theoretische Chemie (STC) 2002 in Bremen-Vegesack**

- [Bericht vom Symposium für Theoretische Chemie \(STC\) 2002 in Bremen \(Dr. C. Scheurer und Dr. M. Thoss, München\)](#)
- [Protokoll der Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie \(Prof. Dr. W. Thiel, Mülheim\)](#)

#### **Nachrichten**

- [Tagungsvorschau \(Prof. Dr. K. Helfrich, Berlin\)](#)
- [Klatsch und Tratsch](#)

#### **Arbeitsgruppen stellen sich vor**

- [Theoretische Organische Chemie in Münster \(Prof. Dr. S. Grimme und Dr. C. Mück-Lichtenfeld, Münster\)](#)

## **Editorial**

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

die nächsten drei Ausgaben des „Info Theoretische Chemie“ (2002-2003) werden von der Abteilung für Theoretische Chemie in Göttingen herausgegeben. Den bisherigen Bochumer Herausgebern sei an dieser Stelle für ihr Engagement herzlich gedankt.

Für die beiden Ausgaben des Jahres 2003, dem „Jahr der Chemie“, erbitten wir möglichst viele interessante Beiträge.

P. Botschwina, R. Oswald, S. Schmatz, Göttingen

## **Letzte Nachrichten**

### **39. Symposium für Theoretische Chemie**

Schwerpunktthema: Molekülspektroskopie und Dynamik

Organisiert von M. Quack, H.-P. Lüthi und J. Stohner

Gwatt-Zentrum am Thunersee

28.9-2.10. 2003

### **Neues Schwerpunktprogramm der DFG**

Der Senat der Deutschen Forschungsgemeinschaft hat die Einrichtung eines Schwerpunktprogrammes „Moderne und universelle first-principles Methoden für Mehrelektronensysteme in Chemie und Physik“ (SPP 1145) beschlossen (vorgesehene Laufzeit: 6 Jahre, Koordinator: Prof. Dr. M. Dolg, Univ. zu Köln).

## Bericht über das 38. Symposium für Theoretische Chemie in Bremen

Das 38. Symposium für Theoretische Chemie wurde von **Michael Schreiber** und **Ulrich Kleinekathöfer** an der *International University of Bremen* (IUB), einer im Februar 1999 neu gegründeten Privatuniversität in Bremen-Vegesack, ausgerichtet. Die Organisation und Zielsetzung der IUB, wie auch ihr Selbstverständnis und die Unterschiede zu staatlichen Universitäten, wurden den Teilnehmern am Ankunftsabend von Michael Schreiber erläutert.

Die meisten der etwa 160 Teilnehmer waren auf dem Campus - einem umgebauten, bzw. zum Teil noch im Umbau befindlichen, ehemaligen Kasernengelände, das vom Land Bremen und dem Bund zur Verfügung gestellt wurde - untergebracht. Die im Vergleich zu den vergangenen Jahren geringere Teilnehmerzahl war sicherlich wesentlich durch die Wahl des Termins Ende August verursacht, der dadurch vorgegeben war, dass die brandneuen Unterkünfte direkt nach der Konferenz von den Studenten des zweiten Studienjahrganges der IUB bezogen wurden. Die gemeinsame Unterbringung auf dem Campus und die Entfernung von den Attraktionen der Bremer Innenstadt (ca. 40 Minuten mit öffentlichen Verkehrsmitteln) war dem Gedankenaustausch zwischen den Konferenzteilnehmern sehr zuträglich. Michael Schreiber, Ulrich Kleinekathöfer und ihrem Team sei an dieser Stelle ganz herzlich für die Ausrichtung der Tagung und für eine trotz der Widrigkeiten einer im Aufbau befindlichen Universität hervorragend gelungene Organisation gedankt.

Wie auch in den vergangenen Jahren war die Konferenzsprache Englisch, mit Ausnahme des Vortrages des Hellmann Preisträgers. Einen umfassenden Überblick über den aktuellen Stand der Forschung zum diesjährigen Schwerpunktthema *Electron Transfer and Femtosecond Spectroscopy* boten die 15 eingeladenen Referenten, von denen ein Drittel aus dem fremdsprachigen Ausland kam.

**Timothy Clark** (Universität Erlangen-Nürnberg) präsentierte CI-Rechnungen auf der Basis der semiempirischen AM-1 Theorie zum Studium des Elektronentransfers in Proteinen. Die Identifizierung der "Brückenzustände" und deren Strukturoptimierung erfolgte mittels UHF, im Anschluss wurden die elektronischen Kopplungsmatrixelemente für die verschiedenen Elektronentransferwege bestimmt. Die Rechnungen wurden an Polyglycin in  $\alpha$ -Helix- und  $\beta$ -Faltblatt-Struktur durchgeführt, wobei Lösungsmittelleffekte mittels des NAOPC Verfahrens berücksichtigt wurden.

Als Gast von der Schwesteruniversität der IUB war **Gustavo Scuseria** (Rice University, Houston) eingeladen. Er gab einen Überblick über jüngste Entwicklungen im Bereich linear skalierender quantenchemischer Methoden für periodische Systeme. Die Methoden basieren auf der Verwendung der 'Fast Multipole' Methode für die Coulomb Terme, Gaußscher Basissätze und der Laplace Transformations Methode für MP2 Störungsrechnungen. Hartree Fock Verfahren sind dabei auf Isolatoren und Halbleiter anwendbar, während Metalle mittels DFT beschreibbar sind. MP2 Verfahren sind immer dann vorzuziehen, wenn langreichweitige

Wechselwirkungen und Dispersionsterme von Bedeutung sind. Als Beispiele wurden Rechnungen an (fluorierten) Kohlenstoff-Nanoröhren, Polymeren und Uranoxiden vorgestellt.

Ladungstransfer in DNA war das zentrale Thema von **Notker Rösch** (TU München), der zeigte, wie es durch eine Kombination verschiedener Methoden möglich ist, die für diesen Prozess entscheidenden Parameter zu berechnen. Zur Bestimmung der elektronischen Donor-Akzeptor-Kopplung wurde ein neues 'fragment charge difference' Schema vorgestellt. Damit ist es möglich, den Einfluss struktureller Fluktuationen auf die Größe der Kopplung zwischen Watson-Crick Basenpaaren, welche sich als stark temperaturabhängig herausstellt, zu studieren. Zusätzlich wurden die Reorganisationsenergie des Lösungsmittels und die freie Reaktionsenthalpie des Ladungstransfer-Prozesses bestimmt. Dabei wurde eine starke Abhängigkeit der Stabilität des Radikal-Kations von der nachfolgenden Base im DNA Basenstapel festgestellt.

**Thorsten Koslowski** (Universität Freiburg) stellte die Anwendung einer für die Beschreibung von Polaronprozessen in gemischt-valenten Salzschnmelzen entwickelten Variationsmethode auf Elektrontransfer-Prozesse in Molekülen und nichtstöchiometrischen Perovskiten vor. Die elektronische Struktur der untersuchten Systeme wird dabei mittels eines 'tight-binding' Hamiltonians beschrieben, der zur Berücksichtigung der dielektrischen Polarisierbarkeit der Umgebung in ein Reaktionsfeld eingebettet ist. Dieses Problem ist im Rahmen der 'mean-field'-Näherung selbstkonsistent lösbar und erlaubt die Berechnung von Potentialkurven für adiabatische Selbstaustausch-Reaktionen. Eine Erweiterung hin zu anspruchsvollen Reaktionsfeldern und Elektronenstrukturmethoden, sowie Elektrontransfer in Biopolymeren wurde diskutiert.

Der Einfluss äußerer Felder auf Elektrontransfer-Reaktionen wurde von **Volkhard May** (HU Berlin) für drei unterschiedliche, vom Standpunkt der formalen Theorie verwandte Prozesse, diskutiert: Im ersten Teil des Vortrags wurde der Einfluss inelastischer Prozesse auf die spannungsinduzierte Transmission von Elektronen durch Moleküle zwischen zwei Mikroelektroden untersucht. An einem Modell für Betain-30 wurde gezeigt, welche Effekte Dissipation auf die Ausbeute in laser-kontrolliertem Elektronentransfer hat. Außerdem wurden Rechnungen zur photo-induzierten Elektroneninjektion von an Halbleiteroberflächen gebundenen Molekülen vorgestellt.

**Shaul Mukamel** (University of Rochester) stellte mehrdimensionale spektroskopische Techniken in Frequenzbereichen von Infrarot bis zur Röntgenstrahlung vor und wies auf die Zusammenhänge in deren theoretischer Beschreibung hin. Mehrdimensionale IR Spektroskopie bietet eine höhere Auflösung als eindimensionale Verfahren und damit die Möglichkeit detaillierte strukturelle Informationen über Peptide und andere Biopolymere zu erhalten. Eine große Herausforderung stellt derzeit noch die Simulation realistischer mehrdimensionaler "ab-initio" Spektren mit experimenteller Präzision dar, die eine Invertierung der experimentellen Daten ermöglichen würden. Mehrdimensionale Röntgenverfahren versprechen einen direkten Zugang zu Information über die elektronische Struktur eines Moleküls auf ultrakurzen Zeitskalen.

Eine Übersicht über die Theorie feldinduzierter Prozesse an Oberflächen gab **Peter Saalfrank** (Universität Regensburg). Die Beschreibung laserinduzierter Desorption kleiner Moleküle von Metalloberflächen mittels Dichtematrix-Simulationen und stochastischer Wellenpaketpropagation waren das zentrale Thema des Vortrages. Die Anwendbarkeit und

Effizienz der verschiedenen Methoden wurde detailliert diskutiert und an verschiedenen Anwendungsbeispielen illustriert. Außerdem wurde eine Methode zur Beschreibung der Transmission von Elektronen durch molekulare Nanostrukturen vorgestellt, die auf der Verwendung von Green's Funktionen mit absorbierenden Randbedingungen beruht.

**Abraham Nitzan** (Tel Aviv University) stellte numerische Simulationen zur Transmission von Elektronen durch Wasser vor. Dabei wurde insbesondere die Frage diskutiert, welchen Einfluss inelastische Effekte auf die berechneten Transmissionsraten haben. Auf der Basis einer Beschreibung durch instantane Normalmoden konnte gezeigt werden, dass der Hauptbeitrag zur inelastischen Transmission von Rotations-Librations-Moden verursacht wird.

Die kohärente Kontrolle molekularer System war das Thema des Vortrages von **Regina de Vivie-Riedle** (MPI für Quantenoptik, Garching). Es wurde eine Erweiterung eines Algorithmus auf der Basis der 'Optimal Control Theory' vorgestellt, die es erlaubt komplexere Systeme zu behandeln und gleichzeitig experimentell realisierbare Laser-Pulse zu erhalten. Die Anwendungsbeispiele umfassten: Steuerung ultraschneller Reaktionen an konischen Durchschneidungen, Realisierung von vollständigem Schwingungs-Populationstransfer als konzeptionelle Basis für einen molekularen Quantencomputer, sowie die Umwandlung eines atomaren in ein molekulares Bose-Einstein Kondensat.

Im experimentellen Vortrag erläuterte **Nikolaus Ernsting** (HU Berlin), wie man moderne Femtosekunden-Laserspektroskopie einsetzen kann, um die verschiedenen dynamischen Prozesse in Ladungstransfer-Systemen in Lösung zu verstehen. Dabei wurden exemplarisch die Systeme Para-Nitroanilin, Biantryl und Cyano-Biantryl in unterschiedlichen Lösungsmitteln studiert. Die aus transienten Absorptionsspektren abgeleiteten Elektrontransfer-Zeiten zeigen eine ausgeprägte Abhängigkeit vom Lösungsmittel. In Biantryl ergab die Analyse der transienten Spektren außerdem Hinweise auf eine polare Natur des lokal-angeregten Zustands.

**Ursula Röthlisberger** (EPF Lausanne) stellte Ergebnisse von gemischt quanten-klassischen (QM/ MM) Car-Parinello Simulationen vor. Es wurde gezeigt, dass die Qualität der Simulationen durch neue Verfahren zur Kopplung der beiden Teilsysteme verbessert werden kann. Die Methode wurde auf den Photorezeptor Rhodopsin angewendet. In Kombination mit klassischen Molekuldynamik-Simulationen konnten Zwischenprodukte des Signal-Transduktionsprozesses charakterisiert werden.

Verschiedene Möglichkeiten zur Formung eines molekularen Bose-Einstein-Kondensates (BEC) aus einem atomaren BEC wurden von **Peter Drummond** (University of Queensland, Brisbane) diskutiert. Mit Hilfe von 'mean-field' Methoden und einer effektiven Quantenfeldtheorie konnte der Grundzustand des BEC charakterisiert werden. Eine interessante Frage ist dabei, ob die Bildung von Molekülen oder chemische Reaktionen in einem BEC beschleunigt werden. Ob dieser Prozess, in Analogie zu 'superconductivity', als 'superchemistry' bezeichnet werden soll, war Anlass kontroverser Diskussionen.

**Frank Großmann** (TU Dresden) berichtete über elektronischen Transport durch molekulare Systeme. Auf der Basis von 'tight-binding'-DFT Rechnungen und der Landauer-Formel wurde die Leitfähigkeit für HBC  $C_{42}H_{18}$  auf einer Goldoberfläche, sowie von Fullerenen zwischen

zwei Kohlenstoff-Nanoröhren-Elektroden bestimmt. Im letzteren Fall zeigt sich, dass die Rotation der Fullerene die Leitfähigkeit um mehrere Größenordnungen ändern kann.

**Eli Pollak** (Weizmann Institute, Rehovot) diskutierte photoinduzierte Prozesse in polyatomaren Systemen bei Raumtemperatur. Die Eigenschaften der internen Energieverteilung im angeregten Zustand können durch die Parameter des Laserpulses gesteuert werden und bestimmen die Dynamik der anschließenden Reaktionen, wie unimolekulare Isomerisierung, interne Konversion oder Elektrontransfer. Umgekehrt können die entsprechenden Reaktionsraten als "molekulares Thermometer" für die Energieverteilung im angeregten Zustand dienen, was unter anderem am Beispiel von Stilben verdeutlicht wurde.

Die *15 ausgewählten Kurzvorträge* - von denen nur zwei in direktem Bezug zum Schwerpunktthema standen - boten eine ausgewogene Mischung aus Methodenentwicklung und Anwendung sowohl im Bereich der Quantenchemie als auch der Dynamik.

Aus Anlass des bevorstehenden 100. Geburtstages von Eugene P. Wigner (\* 17. November 1902) referierte **Klaus Helfrich** (Technische Universität Berlin) über Wigners Berliner Zeit und seine Beiträge zur Theoretischen Chemie.

**Andrea Peluso** (Universita di Salerno, Baronissi) zeigte, dass der Elektrontransfer zwischen primärem und sekundärem Chinon im photosynthetischen Reaktionszentrum von Bakterien über einige Protonen- und Wasserstofftransfers entlang der Wasserstoffbrückenkette zwischen den Chinonen verlaufen kann. Ein Tunnelmechanismus kann aufgrund des zu kleinen elektronischen Kopplungselements ausgeschlossen werden.

**Filipp Furche** (Universität Karlsruhe) stellte die Untersuchung der anomalen Fluoreszenzbande des 4-Dimethylaminobenzonitrils in polaren Medien als Beispiel für die Berechnung angeregter Potentialenergieflächen mittels analytischer Gradienten in TDDFT vor.

**Arne Lüchow** (Universität Düsseldorf) präsentierte eine Methode, die es erlaubt, die dominanten Beiträge zur lokalen elektronischen Energie in Quanten-Monte-Carlo Rechnungen mit formal  $n^2$  anstatt dem üblichen  $n^3$  Aufwand zu berechnen. Für Systeme angemessener Größe kann sogar eine lineare effektive Skalierung des Aufwandes erzielt werden.

Die Erweiterung der semiempirischen 'self-consistent density-functional tight binding' (SCC-DFTB) Methode um einen empirischen Dispersionsbeitrag wurde von **Markus Elstner** (Universität Paderborn) vorgestellt. Dies erlaubt die Behandlung großer DNA-Systeme und Proteine mittels QM/MM Verfahren und kann im Rahmen von TDDFT auf angeregte Zustände erweitert werden.

Eine Car-Parinello MD Studie der ersten Pikosekunden in der Reaktion zwischen Monomethylhydrazin und Nitrogenstetroxid stellte **Irmgard Frank** (LMU München) vor. Diese Komponenten bilden den Treibstoff der letzten Ariane 5-Stufe und das Verständnis des Reaktionsablaufes könnte zur Aufklärung der fehlgeschlagenen Mission im Jahr 2001 beitragen.

**Mirjana Mladenovic** (Universität Göttingen) gab einen Überblick über jüngste Anwendungen von DVR und FBR Methoden zur Berechnung gebundener Rotations-Schwingungszustände in vieratomigen Molekülen wie HCCN, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> und HOCO.

Die Anwendung einer Inkrementmethode zur Behandlung der Elektronenkorrelation in metallischen Systemen wurde von **Beate Paulus** (MPI-PKS Dresden) vorgestellt. Für Li<sub>n</sub>-Ringe konnten damit unter Verwendung lokalisierter (2s)-Orbitalgruppen und Multireferenzmethoden zur Beschreibung der niedrigen angeregten Zustände gute Ergebnisse erzielt werden.

**Christiane Koch** (Fritz-Haber-Institut, Berlin) stellte eine 'surrogate-Hamiltonian'-Methode zur Beschreibung von dissipativen Umgebungseffekten in Elektrontransfer-Reaktionen und Photodesorptions-Prozessen vor.

Auf der Basis von MP2 und DFT Rechnungen diskutierte **Martin Kaupp** (Universität Würzburg) ein Modell, dass die Wechselwirkungen zwischen den Tryptophanen und Chinonen im Photosystem I erklärt.

**Oliver Kühn** (FU Berlin) zeigte, wie mit Hilfe von DFT-Rechnungen, klassischen Molekulardynamik-Simulationen und Redfield-Theorie die dissipative, laser-getriebene Dynamik von intramolekularen Wasserstoffbrückenbindungen beschrieben werden kann.

**Andreas Dreuw** (Lawrence Berkeley National Laboratory) stellte Ergebnisse von TDDFT-Rechnungen vor, die den biologisch relevanten Prozess der Photodissoziation des Komplexes CO-Myoglobin charakterisieren.

**Thomas Sommerfeld** (Universität Heidelberg) diskutierte anhand von CAP/CI-Rechnungen für Nitromethan die Kopplung zwischen dipol-gebundenen Zuständen und Valenz-Zuständen.

**Gerd Fischer** (TU Dresden) präsentierte Rechnungen zur Reaktion von kleinen Kohlenstoff-Clustern mit H<sub>3</sub><sup>+</sup> auf der Basis von 'tight-binding'-DFT und Molekulardynamik-Simulationen.

**Günter Käb** (MPI für Biophysikalische Chemie) stellte eine neue semiklassische Methode zur Beschreibung molekularer Dynamik vor und zeigte Anwendungen auf Schwingungsenergie-Umverteilungsprozesse in größeren Molekülen.

Die Verleihung des *Hans G. Hellmann-Preises für Theoretische Chemie* an **Klaus Liedl** (Universität Innsbruck) bildete einen weiteren zentralen Programmpunkt des Symposiums. Der diesjährige Preisträger berichtete in seinem deutschsprachigen Vortrag über Methoden zur Beschreibung von Reaktionsraten für Protontransfer-Prozesse. Durch die Kombination der Theorie des Übergangszustandes, einer semiklassischen Beschreibung von Tunnelprozessen und ausreichend genauen Potentialenergie-Flächen ist es damit möglich Grundzustands-Tunnelaufspaltungen in Prototyp-Systemen wie Malonaldehyd und Tropolon zu beschreiben. Das Potential der Methoden wurde durch eine breite Auswahl von Anwendungen auf Protontransfer-Reaktionen, die durch Wasser vermittelt werden, demonstriert. Die Beispiele reichten vom Zerfallsmechanismus der Kohlensäure bis zu Reaktionen der Atmosphärenchemie.

Zum Symposium gehörten weiterhin zwei abendfüllende *Postersitzungen*. Auf 90 Postern wurden Arbeiten zu den verschiedensten Bereichen der Theoretischen Chemie präsentiert. Die Postersitzungen waren sehr gut besucht und es wurde auch nach ihrem Ende noch intensiv weiter diskutiert. Wie schon im letzten Jahr wurden für die Poster Preise in unterschiedlichen Kategorien vergeben. Die Preise für die anspruchsvollsten Poster gingen an **Stephan Grimm** (LMU München, 2. Preis) sowie an **Andrei Pisiakov** (TU München, 1. Preis).

Das wissenschaftliche Programm wurde ergänzt durch eine Exkursion, die den Teilnehmern die Sehenswürdigkeiten von Bremen und Umgebung nahe brachte. Wahlweise konnte bei einer Stadtführung die Innenstadt von Bremen mit seinen historischen Bauten, nach einem Spaziergang an der Weser das Segelschulschiff 'Deutschland' in Bremen-Vegesack, oder mit dem Fahrrad die nähere Umgebung von Bremen besichtigt werden.

Christoph Scheurer und Michael Thoss (TU München)

**Protokoll**  
**der Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft**  
**Theoretische Chemie (AGTC)**  
**auf dem 38. Symposium für Theoretische Chemie in Bremen**

**Mittwoch, 28. August 2002**

**Beginn: 17.10 Uhr**

**Tagesordnung:**

- Genehmigung der Tagesordnung
- Protokoll zur Mitgliederversammlung 2001
- Bericht des Vorsitzenden
- Kassenbericht und Wahl des Kassenprüfers
- DFG-Fachkollegien
- Symposien 2003 und 2004
- Kandidatenbenennung für den Vorstand 2003-2005
- Verschiedenes

**Protokoll:**

Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Änderung akzeptiert.

Das Protokoll zur Mitgliederversammlung 2001 war im Info TC (Mai 2002) abgedruckt. Es wird ohne Änderung genehmigt.

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 auch im letzten Jahr Erfolge zu verzeichnen, beispielsweise bei Berufungen (Wiederbesetzung freier Professuren und Etablierung neuer Professuren) und bei großen Forschungsprojekten (z.B. Einrichtung eines neuen DFG-Schwerpunkts im Bereich der Quantenchemie). Jedes Mitglied bleibt aufgerufen, jeweils im eigenen Bereich zur weiteren Stärkung der Theoretischen Chemie beizutragen (z.B. durch eine bessere Verankerung im lokalen Studienplan).

Die Arbeit des Vorstands während des vergangenen Jahres verlief reibungslos. Besondere Aktivitäten waren die Verabschiedung einer Satzung für den Hellmann-Fonds, die Vorbereitungen für das Jahr der Chemie 2003 und die Planung für verschiedene wissenschaftliche Konferenzen (Details siehe unten).

Wichtig für die Arbeitsgemeinschaft ist die Kommunikation nach innen und außen. In Nachfolge von Herrn Staemmler wird Herr Botschwina die nächsten drei Ausgaben des Info

TC herausgeben (2002-2003), das zukünftig in einem halbjährigen Rhythmus erscheinen soll (Beiträge sind willkommen). Die Webseiten der Arbeitsgemeinschaft ([www.theochem.de](http://www.theochem.de)) werden vom jeweiligen Vorsitzenden betreut, hier finden sich viele interessante Informationen (z.B. Links zu den in unserem Fach aktiven Forschungsgruppen in Deutschland, Österreich und der Schweiz).

Seit dem vergangenen Jahr wird auch seitens der Theoretischen Chemie durch Notizen in den "Blauen Blättern" über aktuelle Forschungsergebnisse informiert. Die Koordination liegt im Bereich Elektronenstruktur bei Herrn Hess und im Bereich Dynamik bislang bei Herrn Domcke und demnächst bei Herrn Marx (Vorschläge sind willkommen, am besten den Koordinatoren einen kurzen zusammenfassenden Text der gewünschten Länge zusenden). Darüber hinaus werden auch für dieses Jahr in den "Blauen Blättern" drei Jahresrückblicke aus dem Gebiet der Theoretischen Chemie erscheinen (D. Bakowies, M. Reiher, M. Schütz).

Der Vorsitzende berichtet über die vorgesehenen Aktivitäten zum Jahr der Chemie 2003 und ruft die Mitglieder zur Teilnahme an den entsprechenden lokalen Veranstaltungen auf (z.B. die geplanten Tage der offenen Tür). Er verweist auf die Möglichkeit, allgemeinverständliche Artikel zur Theoretischen Chemie zu verfassen, die dann über AGTC und GDCh den Weg in überregionale Zeitungen finden können. Die GDCh-Ortsverbände planen populärwissenschaftliche GDCh-Vorträge im Jahr der Chemie, der Vorstand hat hierzu eine Vorschlagsliste mit Referenten und Themen aus dem Bereich der Theoretischen Chemie erstellt. Als zentrale öffentlichkeitswirksame Veranstaltung dient der ICQC-Kongress in Bonn Ende Juli 2003, und hier insbesondere eine öffentliche AGTC-Abendveranstaltung mit Vorträgen zu den Themenkreisen "Reaktionsdynamik" und "Biomoleküle".

Der Bericht schließt mit dem Aufruf an alle, die Arbeitsgemeinschaft durch aktive Mitwirkung zu unterstützen und um neue Mitglieder zu werben (Beitrittsformulare siehe [www.theochem.de](http://www.theochem.de) unter "Mitglieder"). Die Zahl der Mitglieder ist im vergangenen Jahr von 174 auf 185 gestiegen (20 Zugänge, 9 Abgänge).

Herr Mark (Mülheim) berichtet über die im August 2002 durchgeführte Prüfung der bei der Deutschen Bunsengesellschaft (DBG) geführten Konten. Bei dem Hellmann-Fonds sind 2001 an Spenden insgesamt 10158 DM eingegangen, und der Kontostand ist zum 31.12.2001 auf 28256 DM angestiegen. Bei dem allgemeinen AGTC-Konto ergibt sich aus den dokumentierten Einnahmen und Ausgaben für 2001 ein positiver Saldo von 1897 DM, es fehlen jedoch die Mitgliedsbeiträge 2001 der AGTC/DBG-Doppelmitglieder und ein Beleg über das am 31.12.2000 vorhandene Guthaben; die DBG hat zugesagt, diese beiden offenen Punkte zu klären. Ansonsten gibt es bei der Kontoführung durch die DBG keinen Grund zur Beanstandung.

Die Mitgliederversammlung billigt den Kassenbericht und die Kassenführung durch die DBG, allerdings bei dem allgemeinen AGTC-Konto nur unter dem ausdrücklichen Vorbehalt, dass

die beiden obigen offenen Punkte geklärt werden müssen. Die Mitgliederversammlung wählt Herrn Mark erneut zum Kassenprüfer.

Der Hellmann-Fonds ist trotz des erfreulichen Anstiegs im letzten Jahr noch immer deutlich niedriger dotiert als vergleichbare 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.

Herr Hess berichtet über die kommenden Änderungen im DFG-Gutachterwesen. Es wird künftig im Bereich der Chemie sieben Fachkollegien geben, die fachübergreifend sind. Die gewählten Gutachter werden für alle DFG- Förderverfahren zuständig sein (Normalverfahren, Sonderforschungsbereiche, Schwerpunkte, Graduiertenkollegs, etc), um einheitliche Qualitätsstandards zu gewährleisten. Das schon bisher gelegentlich eingesetzte Verfahren, Sondergutachter zu befragen, wird von der DFG in der Satzung verankert werden. Die Sondergutachter sollen herangezogen werden, um die Anträge im Normalverfahren zunächst zu begutachten, so dass die gewählten Gutachter dann auf dieser Basis ihre endgültige Entscheidung treffen können.

Insgesamt wird die Zahl der gewählten Gutachter durch die Einführung der Fachkollegien deutlich erhöht. Die Theoretische Chemie wird in folgenden Fachkollegien vertreten sein: Molekülchemie, Chemische Festkörperforschung, Physikalische und Theoretische Chemie, Chemie biologischer Systeme. Insgesamt werden daher statt bisher drei etwa sieben Gutachter aus dem Bereich der Theoretischen Chemie gebraucht. Abweichend von der bisherigen Regelung wird jeder Wahlberechtigte bei der nächsten Gutachterwahl sechs Stimmen haben, die auch auf verschiedene Fachkollegien verteilt werden können.

Es besteht Einigkeit darüber, dass der Vorstand wie bei früheren Wahlen die Nominierung der Kandidaten aus dem Bereich der Theoretischen Chemie koordinieren soll. Zur Mitarbeit bereite Kollegen werden gebeten, sich bei dem Vorsitzenden melden.

Im Auftrag der Organisatoren des Symposiums 2003 (M. Quack und H.-P. Lüthi, ETH Zürich) berichtet der Vorsitzende, dass Termin und Ort leider noch nicht genau festgelegt sind (Planung: September 2003 in der Schweiz). Die genauen Daten werden sobald wie möglich im Info TC und im Internet ([www.theochem.de](http://www.theochem.de)) mitgeteilt. Als Schwerpunktthema ist "Molekülspektroskopie und Dynamik" vorgesehen.

Zur Organisation des Symposiums 2004 in Deutschland hat sich G. Frenking (Universität Marburg) bereit erklärt. Die Mitgliederversammlung begrüßt dies einhellig und überträgt ihm die Ausrichtung des Symposiums.

Die Mitgliederversammlung beschließt, die Wahl des nächsten Vorstands als Briefwahl durchzuführen.

Folgende Kandidaten werden benannt: W. Domcke (München), G. Frenking (Marburg), J. Gauss (Mainz), S. Grimme (Münster), B. Hess (Erlangen), V. Staemmler (Bochum), W. Thiel (Mülheim), C. van Wüllen (Berlin), H.-J. Werner (Stuttgart). Alle Kandidaten haben zugestimmt, sich zur Wahl zu stellen.

Die Briefwahl soll gegen Ende dieses Jahres erfolgen, damit der neue Vorstand seine Arbeit im ersten Halbjahr 2003 aufnehmen kann.

Es werden weitere Tagungen auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie vorgestellt.

- [W. Thiel in Vertretung von S. Peyerimhoff: 11th International Congress of Quantum Chemistry \(ICQC\), Bonn, 20.-25. Juli 2003, mit drei vorangehenden Satellitentagungen jeweils am 16.-18. Juli 2003 \(siehe unten\), einem direkt anschließenden Hellmann-Tag am 26. Juli 2003 \(Bonn, W.H.E. Schwarz\) und einer weiteren Satellitentagung am 27.-30. Juli \(siehe unten\)](#)
- [H.-J. Werner: ICQC-Satellitentagung am 16.-18. Juli 2003 in Bad Herrenalb zum Thema "Electron Correlation: Ab Initio Methods and Density Functional Theory"](#)
- [W. Thiel: ICQC-Satellitentagung am 16.-18. Juli 2003 in Mülheim zum Thema "Computational Modelling of Catalysis"](#)
- J. Manz: ICQC-Satellitentagung am 16.-18. Juli 2003 in Berlin zum Thema "Multidimensional Quantum Reaction Dynamics"
- [C. van Wüllen: ICQC-Satellitentagung am 27.-30. Juli 2003 in Berlin zum Thema "Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry"](#)
- [W. Thiel: Arbeitstagung für Theoretische Chemie am 18.-21. Februar 2003 in Mariapfarr \(organisiert von A. Sax\) zum Thema "Hybrid QM/MM and Linear Scaling QM Approaches"](#)
- G. Frenking: Halbtägiges Symposium für Theoretische Chemie im Rahmen der GDCh-Jahrestagung, 6.-11. Oktober 2003, München.

Abschließend bedankt sich der Vorsitzende bei C. Scheurer und M. Thoss für die Bereitschaft, den Tagungsbericht über das diesjährige Symposium zu erstellen, der im Info TC, in den "Blauen Blättern" und im Bunsenmagazin erscheinen soll.

Ende der Mitgliederversammlung: 18.10 Uhr

gez. W. Thiel

# Tagungsvorschau 2003

(Prof. Dr. K. Helfrich, Berlin)

---

- 18. - 21. 02. in Mariapfarr, Salzburg, Österreich

Arbeitstagung für Theoretische Chemie

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

- 16. - 19. 03. in Chemnitz

Chemiedozententagung 2003

WWW: [www.tu-chemnitz.de/chemie/aduc2003/](http://www.tu-chemnitz.de/chemie/aduc2003/)

- 24. - 28. 03. in Hannover

67. Physikertagung und Frühjahrstagung des Arbeitskreises Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (AMOP) der DPG [www.dpg-tagungen.de/info/hannover2003.html](http://www.dpg-tagungen.de/info/hannover2003.html)

- 24. - 28. 03. in Dresden

Frühjahrstagung des Arbeitskreises Festkörperphysik (AKF) der DPG u. a. mit den Fachverbänden Dynamik und Statistische Physik und Chemische Physik und Polymerphysik

WWW: [www.dpg-tagungen.de/info/dresden2003.html](http://www.dpg-tagungen.de/info/dresden2003.html)

- 24. - 28.03. in Abano Terme - Padua /Italien

Jahrestagung der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM)

WWW: <http://www.gamm2003.it/>

- 19. - 24.05. in Frankfurt a. M.

**ACHEMA 2003**

WWW: <http://www.achema.de>

- **29. - 31.05. in Kiel**

**Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für  
Physikalische Chemie , "Sensorik"**

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

- **20. - 26.07. in Bonn**

**XI<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry 2003**

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

**Satelliten-Tagungen:**

**16. - 18.07.**

in Bad Herrenalb:

**Electron Correlation**

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

in Mülheim:

**Catalysis**

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

in Nancy, Frankreich:

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

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

in Berlin:

**Multidimensional Quantum Reaction Dynamics**

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

**26. 07.**

in Bonn:

**100 Years Hellmann**

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

**28. - 30. 07.**

in Berlin:

**Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry**

WWW: <http://www.chemie.tu-berlin.de/REHE2003>

**6. - 11. 10. in München**

**GDCh-Jahrestagung Chemie**

WWW: [www.gdch.de/tagung/index.htm](http://www.gdch.de/tagung/index.htm)

- **17. 10. in Hannover**

**Hans Hellmann-Kolloquium**

WWW: [www.theochem.uni-hannover.de/hhkol.html](http://www.theochem.uni-hannover.de/hhkol.html)

---

**Hinweise auf weitere Tagungskalender:**

- **Deutsche Physikalische Gesellschaft, Tagungen**

WWW: <http://www.dpg-tagungen.de/>

- **Wiley / DPG**

WWW: [www.pro-physik.de/Phy/External/PhyH/1,1003,2-6-0-0-1-phy\\_events\\_search\\_page-0-0,00.html](http://www.pro-physik.de/Phy/External/PhyH/1,1003,2-6-0-0-1-phy_events_search_page-0-0,00.html)

- **CONFMENU von Prof. Young S. Kim**

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

**Gesellschaft Deutscher Chemiker, Tagungen**

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

- **Bunsen-Gesellschaft, Versammlungen und Veranstaltungen**

WWW: <http://www.bunsen.de/>

**Siehe auch :**

[www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html](http://www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html) sowie unter

[www.agtc.uni-bonn.de/agtc.tagvors.html](http://www.agtc.uni-bonn.de/agtc.tagvors.html)

## **Klatsch und Tratsch**

Herr Dr. Wim Klopper hat den Ruf auf die C4-Professur für Theoretische Chemie (vorgezogene Nachfolge Ahlrichs) an der Universität Karlsruhe (TH) erhalten und angenommen. Er arbeitet seit dem 1.10.2002 in Karlsruhe.

Herr Dr. Thomas Krüger hat sich mit einer Arbeit „Chemie, Quantenmechanik und der Molekülbegriff“ an der Karl-Franzens-Universität Graz am 29.1.2002 habilitiert und wurde zum Universitätsdozenten ernannt.

Herr Dr. Thomas Bredow hat sich mit einer Arbeit „Quantenchemische Untersuchungen an kristallinen Festkörpern und Festkörperoberflächen“ an der Universität Hannover am 6.2.2002 habilitiert und wurde zum Privatdozenten ernannt.

### **Wir gratulieren:**

Prof. Dr. W. H. E. Schwarz, Siegen, zum 65. Geburtstag, am 30.12.2002

# Theoretische Organische Chemie in Münster

Der Lehrstuhl für Theoretische Organische Chemie an der Universität Münster wurde 1971 neu gegründet und war bis zum Ende des SS 1999 mit Prof. Martin Klessinger besetzt, der überwiegend auf dem Gebiet der theoretischen Photochemie gearbeitet hat und insbesondere durch sein Photochemie-Lehrbuch (zusammen mit J. Michl) bekannt geworden ist. Im Januar 2000 ging die Leitung des Lehrstuhls an Stefan Grimme über.

Die Theorie ist in Münster (wie schon aus dem Namen des Lehrstuhls zu erkennen) im Institut für Organische Chemie integriert, wo drei weitere C4- und vier C3-Kollegen experimentell (d.h. überwiegend synthetisch) arbeiten. Das wissenschaftliche Umfeld und die Infrastruktur im Institut sind hervorragend und mit Prof. E.-U. Würthwein, der zur Hälfte auch Fragestellungen der "Computational Chemistry" bearbeitet, gibt es auch fruchtbare theoretische Anknüpfungspunkte. Neben einer C3-Stelle in der Physikalischen Chemie (Prof. Andreas Heuer), die sich mit der theoretischen (klassischen) Modellierung von ungeordneten Festkörpern beschäftigt, gibt es in Münster keine weiteren ausgewiesenen Theoretiker. Als einzige Quantenchemie-Gruppe fällt uns daher die Aufgabe zu, dieses Gebiet in diversen SFBs und Graduiertenkollegen zu vertreten. Naturgemäß ergeben sich hier eine Reihe von Routine-Fragestellungen (auch mit der Anorganischen Chemie), die wir bisher im "Service-Betrieb" angehen. In wie weit diese Thematiken bei konstantem Personal (momentan 1 Akad. Rat, 1 Postdoc, 5 Doktoranden, 2 Diplomanden) und steigender Nachfrage in Zukunft weiter angegangen werden können, ist derzeit nicht klar.

Unsere Forschungsschwerpunkte liegen seit vielen Jahren im **Bereich der Entwicklung und Anwendung von korrelierten quantenchemischen Verfahren für große Moleküle**. Dabei werden sowohl Dichtefunktional- als auch traditionelle Wellenfunktionsmethoden verwendet. Im Bereich der DFT haben wir mit Eigenentwicklungen (DFT/SCI und **DFT/MRCI**) wesentlich zur Erweiterung des Anwendungsbereiches für angeregte Zustände und Biradikale beigetragen. Im besonderen gilt dies für die DFT/MRCI-Methode (*J. Chem. Phys.*, *111*, (1999), 5645), deren Grundidee die Erfassung der statischen Korrelation durch eine (kurze) CI-Entwicklung und des dynamischen Teils durch die Einbeziehung des DF-Potentials ist. Mittlerweile werden erfolgreiche Anwendungen mit dieser Methode überwiegend extern von anderen Arbeitsgruppen (C. Marian, N. Ernsting, P. Saalfrank) durchgeführt, wobei das Anwendungsgebiet im wesentlichen die **theoretische elektronische Spektroskopie** ist.

Nicht nur bei der DFT/MRCI-Methode, sondern auch bei unseren methodischen Arbeiten zur **Multi-Referenz-Störungstheorie** ist die Tradition der "Bonner Schule" deutlich wiederzuerkennen. Wir haben ein **vereinfachtes MR-MP2 Verfahren** für große Moleküle entwickelt und in ein effizientes paralleles Programm umgesetzt, das zwar überwiegend für "excited-state problems" eingesetzt wird (z.B. Kalibrierung von TDDFT bei Silicium-Clustern, *Phys. Rev. Lett.*, *87* (2001), 276402), aber auch für schwierige Grundzustandsprobleme wie C<sub>20</sub>-Isomere (*ChemPhysChem*, *2* (2001), 207) gute Dienste leistet. Eine ebenfalls durchgeführte Erweiterung auf MR-MP4(SD) (*Chem. Phys. Lett.*, *334* (2001), 99) scheint zwar deutlich verbesserte Genauigkeit zu erbringen, ist aber für größere Systeme einfach zu aufwendig.

In letzter Zeit beschäftigen wir uns intensiv mit **vereinfachten Coupled-Cluster Verfahren**. Wir befinden uns hier gerade in der Testphase, die über den Erfolg dieser Arbeiten entscheiden wird. Immerhin haben wir bereits ein **paralleles QCISD(T) Programm** erstellt, das relativ effizient auf Linux-PC-Clustern (s.u.) läuft. Um dies zu erreichen, verwenden wir nicht nur hier, sondern auch für alle anderen korrelierten ab initio Verfahren die "**Resolution-of-the-identity**" (**RI**) **Näherung** zur direkten Berechnung der nötigen Zweielektronenintegrale. Diese schon relativ alte Technik (J. Almlöf, M. Häser) erlaubt einfache und effiziente integral-direkte Implementierungen bei gleichzeitig hervorragender Genauigkeit.

In diesem Zusammenhang muss natürlich auch erwähnt werden, dass wir bei allen unseren Arbeiten das in Karlsruhe unter der Leitung von Prof. R. Ahlrichs entwickelte **Programmpaket TURBOMOLE** verwenden, das weltweit zu den schnellsten und effizientesten ab initio Programmpaketen gehört. Unsere Programme setzen an den Schnittstellen dieses Paketes an und erweitern es somit methodisch. Wir hoffen natürlich, dass dieses System auch in Zukunft gepflegt und weiterentwickelt wird und uns damit ein partieller technologischer Vorsprung vor der "Gaussian-Community" erhalten bleibt.

Ein Schwerpunkt bei den Anwendungen bilden immer noch die Berechnungen zur theoretischen elektronischen Spektroskopie größerer Moleküle, wobei uns die **optischen Eigenschaften chiraler Systeme** ganz besonders am Herzen liegen. Neben den Untersuchungen zum **elektronischen Circular dichroismus**, die wir schon seit Jahren mit einer Vielzahl von Methoden (MR-MP2, DFT/MRCI, CC2, TDDFT) durchführen, haben wir uns mit der Berechnung der **optischen Rotationsdispersion (OR)** ein neues Standbein geschaffen. Die Berechnung der OR ist insbesondere experimentell von großem Interesse, da durch Vergleich mit theoretischen Daten die wichtigen absoluten Konfigurationen (d.h. ob R oder S) von biologisch oder pharmakologisch relevanten Molekülen bestimmt werden können. Zusammen mit F. Furche (Karlsruhe) haben wir die Berechnung der OR mit der TDDFT-Methode kürzlich entscheidend vorangebracht (RI und Ursprungsinvarianz, *Chem. Phys. Lett.* 361 (2002), 321).

Als letzten, eher anwendungsorientierten Bereich unserer Forschung möchten wir unsere seit kurzem laufenden Arbeiten zu **systematischen Fehlern der Dichtefunktionaltheorie** vorstellen. Unserer Meinung nach sollte sich die (eindeutig stagnierende) Entwicklung neuer DF stärker auf die Problemfälle konzentrieren statt zum xten Male den "G2-Satz" durchzurechnen. Hier wollen wir durch systematische Untersuchungen zusammen mit korrelierten ab initio Methoden eine zuverlässige Datenbasis erarbeiten. Zur Zeit untersuchen wir die **Energetik von DNA-Basen-Tautomeren**, bei denen die DFT (mit Ausnahme eines Funktionals !) selbst für qualitative Vorhersagen absolut unbrauchbar ist. Ein anderer Aspekt betrifft das falsche **asymptotische Verhalten der meisten DF** bei größeren Abständen, das insbesondere bei angeregten Zuständen vom Rydberg-Typ (und damit auch für viele "Second-Order-Properties") problematisch ist. Wir konnten kürzlich zeigen, dass DF-Artefakte auch bei bisher als unproblematisch geltenden Valenzzuständen zu völlig falschen Abhängigkeiten der Eigenschaften mit der Systemgröße führen (*J.Am.Chem.Soc.*, eingereicht).

Im Bereich der **Hardware-Ausstattung** verfolgen wir das Ziel, möglichst "autark" die nötige Rechenleistung zur Verfügung zu stellen, was heutzutage relativ einfach durch Einsatz der vergleichsweise billigen Intel-x86 bzw. AMD Athlon-Prozessoren und Zusammenfassung zu

einem Parallelrechner möglich ist. Aus den Berufungsmitteln und zusätzlichen Geldern des Forschungssetats konnten wir im Dezember 2000 die erste Ausbaustufe unseres **Linux-Clusters "Lyra"** aufbauen. Alle 19 Rechner (ein Server und 18 Knotenrechner) sind mit jeweils 2 CPU (P3/800) und 2 GB RAM ausgestattet. Der Server enthielt seinerzeit ein RAID-Array mit ca. 65 GB Plattenplatz. Aus Kostengründen und aufgrund der Struktur der damals überwiegend eingesetzten Programme entschieden wir uns gegen eine schnelle Vernetzung (z.B. Myrinet) und bauten alles mit einem einfachen Fast-Ethernet-Switch (100 MBit/s) auf. Die nötige Infrastruktur (Kühlung, Regale, usw.) wurde von der Werkstatt des Institutes bereitgestellt. Die Installation des Betriebssystems erfolgte dann mit einem automatischen Clone-Prozess von Hand, die System- und Jobverwaltung wird mit Open Source Software bewältigt. Im Laufe des Jahres 2001 sind dann noch sechs weitere Dual-P3/800-, acht Dual-Athlon/1500+-Knoten und weitere 52 GB Plattenplatz gekauft worden, die dem Cluster seine derzeitige Größe von **64 CPUs, 64 GB Speicher und fast 120 GB Plattenplatz** geben. Der Cluster läuft jetzt seit ca. 2 1/2 Jahren sehr stabil und es sind auch keinerlei signifikante Hardware-Probleme aufgetreten. Ein vom Rechenzentrum demnächst bereitgestellter Cluster mit schnellem Netz wird uns als Entscheidungshilfe für die Konfiguration unseres neu aufzubauenden zweiten Clusters dienen. Dieser wird dann wahrscheinlich auf single-Prozessor Pentium4-Basis laufen, da bei zwei gleichzeitig auf einer Doppel-Prozessormaschine laufenden Prozessen teilweise erhebliche Leistungseinbussen (bis zu 50 %) zu beobachten sind.

In der **Lehre ist die Theoretische Chemie** in Münster leider nicht im Grundstudium vertreten, was in zukünftigen Studienreformen (Bachelor/Master) dringend geändert werden müsste. Lehrveranstaltungen zur Quantenchemie werden von uns insbesondere im Rahmen des vierten (Diplom-Prüfungs-) Faches "Theoretische Chemie" angeboten. Eine zweisemestrige Vorlesung, die gemeinsam mit Prof. A. Heuer (PC) gelesen wird, bereitet auf das mehrwöchige Praktikum vor. Im ersten Teil dieses Praktikums wird ein einfaches SCF-Programm in FORTRAN erstellt. Im zweiten Teil werden dann Anwendungsaufgaben mit Standard-Programmen (TURBOMOLE, Gaussian) bearbeitet, um ein möglichst breites Methodenspektrum (Semiempirik, HF, DFT, Störungstheorie, Coupled Cluster) kennen zu lernen. Die relativ anspruchsvollen Aufgaben behandeln typische Themen aus der Computational Chemistry: Übergangsstrukturen, Thermodynamik, BSSE, Dissoziationen, angeregte Zustände, Schwingungs- und NMR-Spektren werden von den Praktikanten berechnet. Die Teilnehmerzahl lag in den beiden letzten Jahren durchschnittlich bei sechs, was eine intensive persönliche Betreuung einfach machte. Wir hoffen, diese aufwendige Form der Ausbildung auch bei den mittlerweile extrem hohen Studentenzahlen in Münster (ca. 200 Dipl.-Chemie Anfänger) weiter aufrecht zu erhalten. Jeder der Studierenden im Fach "Theoretische Chemie" führt danach noch ein sechswöchiges Forschungspraktikum im Arbeitskreis durch.

Neben der Quantenchemie wollen wir auch die Computertechnik als solche stärker in die Lehre einbeziehen. Eine seit dem SS 2001 angebotene Wahlveranstaltung "EDV für Chemiker" soll in zwei Semestern grundlegende Kenntnisse vermitteln: Im ersten Teil stellen wir die Funktionsweise der PC-Hardware vor und behandeln Themen wie Netzkommunikation, Betriebssysteme und Programmiergrundlagen. Ein Großteil des Praktikums wird danach für praktische Programmierübungen mit FORTRAN am Linux-PC genutzt. Im zweiten Teil führen wir dann in Software ein, die für den Chemiker von allgemeinem Interesse ist: Modelling-, NMR-Programme, Mathematik-Pakete wie Maple, wissenschaftlicher Formelsatz (TeX), bis hin zu Datenbank-Anwendungen und Chemie im

Internet. Einen ähnlichen Kurs (in Englisch) bieten wir auch als Pflichtveranstaltung im Rahmen der 2001 neu gegründeten "Graduate School of Chemistry" (internationaler Promotionsstudiengang nach amerikanischem Vorbild) an, die vom Land NRW finanziell getragen wird.

Stefan Grimme und Christian Mück-Lichtenfeld, Münster im September 2002

<http://www.uni-muenster.de/Chemie/OC/research/grimme/>

Email: [grimmes@uni-muenster.de](mailto:grimmes@uni-muenster.de), [cml@uni-muenster.de](mailto:cml@uni-muenster.de)