

Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Bonn

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

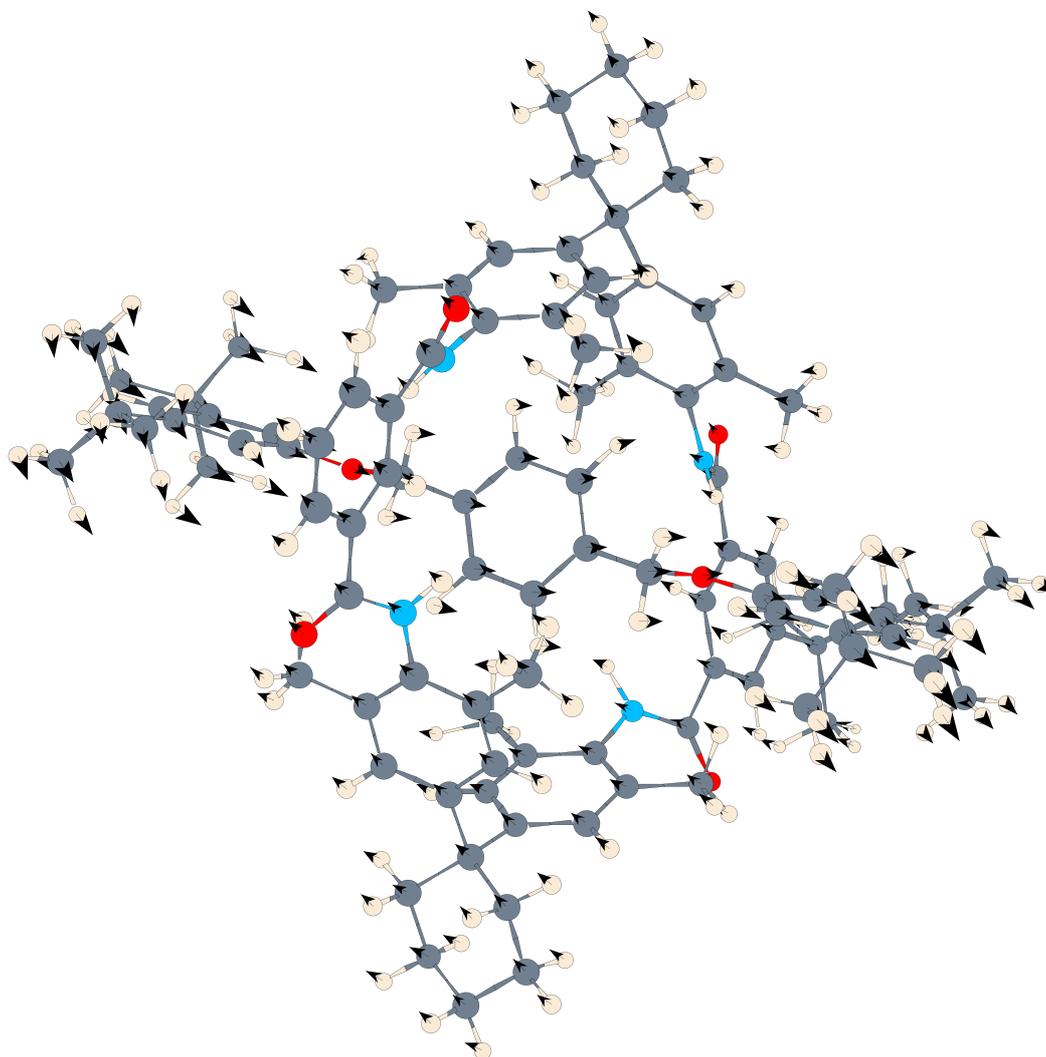
und

Institut für Physikalische Chemie, Universität Jena

<http://www.ipc.uni-jena.de/reiher>

Info

Theoretische Chemie



Ausgabe April 2005

Titelbild:

Das Titelbild zeigt eine Normalmode eines Rotaxan-Moleküls. Diese Moleküle werden in Bonn in den Arbeitsgruppen von C. A. Schalley und von F. Vögtle synthetisiert. Die Synthese der Moleküle erfolgt durch Ausnutzung eines Templateffektes, der die Einfädung der Achse in den Reif sicherstellt. Die Templateffekte, die in dieser Systemklasse auftreten, werden im Rahmen des Bonner SFB 624 "Template" von den Arbeitsgruppen Peyerimhoff (Berechnung von Wasserstoffbrückenenergien beim Templat-Effekt), Kirchner (Car-Parrinello-Simulationen) und Reiher (Schwingungsanalysen) intensiv untersucht.

Inhaltsverzeichnis

1 Editorial	5
2 Nachrichten	5
2.1 Tagungsvorschau	5
2.1.1 April–Dezember 2005	5
2.1.2 Januar–Dezember 2006	6
2.1.3 Januar–Dezember 2007	7
2.2 Klatsch und Tratsch	7
3 Verschiedenes	8
3.1 Hans G. A. Hellmann-Preis 2005 für Theoretische Chemie	8
3.2 Ergebnis der Vorstandswahl	8
3.3 Rechnerbeschaffung am LRZ München/HLRB	9
3.4 Online Studie zum Thema: Theoretische Chemie an der Schnittstelle zwischen Hochschule und Industrie — Einladung zur Mitwirkung	9
4 Umstellung auf Bachelor/Master	10
4.1 Übersicht BAMA-Studiengänge	12
4.1.1 Universität Bielefeld (Uwe Manthe)	12
4.1.2 Universität Bochum (Dominik Marx)	13
4.1.3 Technische Universität München (Wolfgang Domcke)	13
4.1.4 Universität Siegen (Eugen Schwarz)	14
4.1.5 Universität Tübingen (Christian Ochsenfeld)	14
4.1.6 Technische Universität Dresden (Gotthard Seifert)	15
4.2 Keine Theoretische Chemie mehr im Studium? — Anmerkungen des GDCh-Geschäftsführers Prof. Wolfram Koch	16
5 Arbeitsgruppen stellen sich vor	17

5.1	Theoretische Chemie an der Universität Mainz	17
5.2	Theoretische Chemie an der Universität Zürich	20
6	Nachruf — Prof. Dr. Bernd Artur Heß	22

1 Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

zum vorerst letzten Mal halten Sie das von den Bonner (und ehemals Bonner) Theoretikern zusammengestellte Info TC in den Händen. Der Tradition entsprechend wird das Info TC nach drei Ausgaben aus einer Arbeitsgruppe an eine andere abgegeben. Wir haben versucht, in den vergangenen 18 Monaten relevante und interessante Informationen zur Theoretischen Chemie im Info zusammenzutragen und hoffen, daß uns dies gelungen ist.

im April 2005

M. Reiher (Jena)
B. Kirchner (Bonn)

2 Nachrichten

2.1 Tagungsvorschau

[siehe auch die Zusammenstellung <http://www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html> von Prof. Dr. K. Helfrich]

2.1.1 April–Dezember 2005

- 06.–10.04.2005, Düsseldorf:
REHE Conference 2005: Relativistic Effects in Heavy Elements
Thema: Computational Approaches to Spin-Magnetic Properties of Molecules
www.theochem.uni-duesseldorf.de/REHE2005
- 05.–07.05.2005, Frankfurt a. M.:
Hauptversammlung der Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie
Hauptthema: *Detektion und Dynamik einzelner Moleküle*
<http://www.bunsen.de/>
- 10.–15.05.2005, Novgorod, Russland
9th V. A. Fock Meeting on Quantum and Computational Chemistry and 2nd Hellmann-Symposium on Theoretical Chemistry “DFT Complex Systems and Complex Problems”
<http://www.qcc.ru/~fock>

- 15.–17.6.2005, Meschede
89th International Bunsen Discussion Meeting “Chemical processes at oxide surfaces: from experiment to theory”
<http://www.pc.rub.de/sfb/Bunsen/Inhalt.htm>
- 20.–24.06.2005, Columbus, Ohio, USA:
60th International Symposium on Molecular Spectroscopy
<http://molspect.chemistry.ohio-state.edu/symposium/>
- 16.–21.07.2005, Los Angeles, USA:
American Conference on Theoretical Chemistry
<http://www.conferences.ucla.edu/ACTC>
- 04.–08.09.2005, Innsbruck, Österreich:
41. Symposium für Theoretische Chemie
<http://www-c724.uibk.ac.at/theochem/staff/bmr/StC2005.html>
- 03.–08.09.2005, Ascona, Switzerland:
“Ab-initio Molecular Dynamics Simulations — from Solid State Physics to Chemistry and Biology”; Symposium in Honor of Professor Michele Parrinello on the Occasion of his 60th Birthday
<http://www.cpmid.org>
- 11.-14.09.2005, Düsseldorf:
GDCh-Jahrestagung
<http://www.gdch.de/vas/tagungen/tagungen2005/5560.htm>
- 11.-15.09.2005, Genf, Schweiz
11th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics (DFT05)
<http://DFT2005.unige.ch>

2.1.2 Januar–Dezember 2006

- 13.–17.03.2006, Frankfurt a. M.:
Frühjahrstagung des Arbeitskreises Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (AMOP) der DPG
<http://www.dpg-tagungen.de/info>
- 19.–22.03.2006, Hamburg:
Chemiedozententagung
<http://www.gdch.de/vas/tagungen.htm>
- 25.–27.05.2006, Erlangen–Nürnberg:
Bunsentagung: “Heterogene Katalyse: Brücke zwischen Ideal- und Realsystemen”
<http://www.bunsen.de>

- 21.–26.05.2006, Kyoto, Japan
XIIth International Conference on Quantum Chemistry (ICQC-2006)
<http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/XII-ICQC2006/>
- September 2006, Berlin
42. Symposium für Theoretische Chemie
wird ausgerichtet werden von Prof. J. Sauer

2.1.3 Januar–Dezember 2007

- 29.05.–03.06.2007, Budapest, Ungarn
Molecular Quantum Mechanics — Analytic Gradients and Beyond: An International Conference in Honor of Professor Peter Pulay
<http://www.ccqc.uga.edu/pulay>

2.2 Klatsch und Tratsch

- **Prof. Dr. Jürgen Gauss** wurde mit dem Gottfried Wilhelm-Leibniz-Preis ausgezeichnet, der mit 1.55 Mio EUR dotiert ist.
- **Prof. Dr. Michele Parrinello** erhielt die Schrödinger Medal der WATOC des Jahres 2005 für die Vereinigung von Molekulardynamik und Dichtefunktionaltheorie.
- **Prof. Dr. Ursula Roethlisberger** erhielt die Dirac Medal der WATOC des Jahres 2005 für ihre Arbeiten zur Car–Parrinello-Simulation von chemischen und biochemischen Systemen.
- **Prof. Dr. Axel Groß** hat zum 1.12.2004 den Ruf auf eine C4-Professur für Theoretische Chemie an der Universität Ulm angenommen.
- **Prof. Dr. Dominik Marx**, Inhaber des Lehrstuhls für Theoretische Chemie der Ruhr-Universität Bochum, hat den Ruf auf den Coulson Chair of Theoretical Chemistry an der University of Oxford, verbunden mit einem Professorial Fellowship am University College, abgelehnt.
- **Priv.-Doz. Dr. Markus Reiher** hat Rufe an die Universitäten Groningen und Jena erhalten und zum 1.4.2005 seine Arbeit in Jena auf einer W2-Professur für Physikalische Chemie (Theorie) aufgenommen.

3 Verschiedenes

3.1 Hans G. A. Hellmann-Preis 2005 für Theoretische Chemie

Auch in diesem Jahr soll auf dem Symposium für Theoretische Chemie der Hellmann-Preis an eine hervorragende Nachwuchswissenschaftlerin oder einen hervorragenden Nachwuchswissenschaftler aus dem deutschsprachigen Raum verliehen werden. Vorschläge können bis zum 15. April 2005 an den Vorsitzenden der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie, Herrn Prof. Dr. Walter Thiel, eingereicht werden (Einzelheiten siehe: <http://www.theochem.de>).

Herrn Prof. Dr. Walter Thiel
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
Kaiser-Wilhelm-Platz 1
D-45470 Mülheim an der Ruhr, Deutschland

Bei der Nominierung sind folgende Unterlagen in achtfacher Ausfertigung beizulegen:

- Anschreiben mit einem zusammenfassenden Satz, für welche Leistungen der Hellmann-Preis vergeben werden soll (Text für die Urkunde);
- eine knapp gefasste Laudatio (typischerweise etwa eine Seite);
- Lebenslauf.

Eine aktuelle Publikationsliste und Reprints der fünf wichtigsten Veröffentlichungen werden in elektronischer Form erbeten (an thiel@mpi-muelheim.mpg.de), wobei die entsprechenden pdf-Files in einem einzigen Archiv-File "name.tar.gz" zusammengefasst sein sollen, damit sie leicht an die Jury weitergeleitet werden können.

3.2 Ergebnis der Vorstandswahl

Bei der Briefwahl zum AGTC-Vorstand für die Jahre 2005-2007 wurden insgesamt 121 Stimmen abgegeben (61% Wahlbeteiligung). Gewählt wurden Wolfgang Domcke (München), Gernot Frenking (Marburg), Jürgen Gauss (Mainz), Gotthard Seifert (Dresden) und Hans-Joachim Werner (Stuttgart). Als Vertreter der Trägergesellschaften benannt wurden Gernot Frenking (GDCh), Michael Schreiber (DPG) und Walter Thiel (DBG). Die konstituierende Sitzung des neuen Vorstands wird am 6.5.2005 während der Bunsentagung stattfinden.

Mülheim an der Ruhr, den 18. Januar 2005

gez. Dr. Michael Bühl

3.3 Rechnerbeschaffung am LRZ München/HLRB

Am Höchstleistungsrechenzentrum Bayern (HLRB) wird als Nachfolgesystem für die Hitachi SR8000 ab 2006 ein SGI Altix System beschafft.

Lieferphase 1 (Anfang 2006): Peak 33 TFlop/s, 20 TByte Hauptspeicher, 512-fach SMP-Knoten mit Dual-Core-IA64-CPU's auf Basis Montecito, 360 TByte Plattenspeicher.

Lieferphase 2 (Mitte 2007): Peak 69 TFlop/s, 40 TByte Hauptspeicher, alle Knoten (6656 Prozessoren) auf Basis Montvale, 660 TByte Plattenspeicher.

Die Vertreter der Theoretischen Chemie haben sich bei der Beschaffung dafür engagiert, daß der neue Rechner den Bedürfnissen unseres Fachs soweit wie möglich entgegenkommt. Die SGI Altix wird für viele Anwendungen in der Chemie besser nutzbar sein als die Hitachi SR8000. Es wäre daher wünschenswert, die relevanten Programme möglichst bald auf die SGI Altix-Plattform zu portieren, damit Chemie-Projekte von der hohen Rechenleistung des HLRB-II von Beginn an profitieren können (weitere Informationen siehe www.lrz.de).

Wie bei den beiden anderen nationalen Höchstleistungsrechenzentren in Jülich und Stuttgart können bundesweit alle Arbeitsgruppen Zugang zum HLRB in München erhalten, sofern ein entsprechender Projektantrag positiv begutachtet wird.

3.4 Online Studie zum Thema: Theoretische Chemie an der Schnittstelle zwischen Hochschule und Industrie — Einladung zur Mitwirkung

Das Institut für betriebswirtschaftliches Management im Fachbereich Chemie und Pharmazie der Universität Münster entwickelt im Rahmen einer Dissertation eine europäische Studie über das Management von Computational Chemistry Technologien in Hochschule und Industrie. Ziel dieser Studie ist es, die Themen Aus- und Weiterbildung im Fach Theoretische Chemie, Kooperationsbereitschaft und -erfolg sowie Technologietransfer aus industrieller und universitärer Perspektive zu beleuchten.

Der erste Teil der Studie beinhaltet den Online-Fragebogen für Hochschullehrer der theoretischen Chemie M³QA (= Management of Molecular Modelling Questionnaire — Academia). Ziel des Fragebogens M³QA ist es, Wissen und Erfahrungen der Hochschullehrer für diese Studie einzufangen. Er beinhaltet u.a. Fragen zur Ausbildung, z.B. wie eine ideale Theoretische Chemie-Ausbildung für Experimentalisten aussehen sollte und inwieweit diese Idealvorstellung von der Realität abweicht. Ein weiterer Abschnitt beschäftigt sich mit Hochschul/Industrie-Kooperationen und deshalb mit Ausgestaltung und Erfolg von Kooperationen aus der Perspektive der Hochschullehrer. Abschließend soll die Frage beantwortet werden wie der Technologietransferprozess effizienter gestaltet, sowie Missstände

und Akzeptanzprobleme abgebaut werden können. Von zentraler Bedeutung ist es, in diesem Zusammenhang auch mögliche Kritikpunkte an Auftritt und Verhalten industrieller Modelling-Gruppen aufzudecken.

Der zweite Teil der Studie, der zu einem späteren Zeitpunkt stattfinden wird, umfasst die komplementäre Befragung von Mitgliedern industrieller Modelling-Gruppen zu ähnlichen Aspekten. Damit sollen zum einen die Bedürfnisse und Probleme des industriellen Modelling betrachtet, aber auch die universitäre Perspektive um eine weitere, praktische Perspektive ergänzt werden. Zudem soll die Zweidimensionalität der Befragung zur Objektivierung der Ergebnisse beitragen. Für im universitären Umfeld tätige theoretische Chemiker sollte dieser Teil von besonderem Interesse sein.

Mit dem M³QA möchten wir alle europäischen Hochschullehrer (ob mit oder ohne Industriekooperation) auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie, Computational Chemistry und/oder Molecular Modelling erreichen.

Einladung zur Mitwirkung:

Wir laden Sie deshalb sehr herzlich zur Teilnahme an der Studie ein und bitten Sie, den M³QA auszufüllen, der Ihnen unter folgendem Link permanent zur Verfügung steht:

<http://cgi.uni-muenster.de/exec/Chemie.bm/first.php>
identification: compchem

Die Ausfülldauer des Fragebogens beträgt maximal 20 Minuten. Als Dank erhalten Sie nach Auswertung der Daten eine Zusammenfassung der Studienergebnisse. Wir möchten uns bereits jetzt schon für Ihre Unterstützung bedanken.

Für weitere Informationen:

Michael Kühnel

Institut für betriebswirtschaftliches Management im Fachbereich Chemie und Pharmazie
Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Leonardo-Campus 1; 48149 Münster

Tel: 0251/83 318 23

Mail: mkuehnel@uni-muenster.de

4 Umstellung auf Bachelor/Master

Die Umstellung der alten Chemie-Diplom-Studiengänge auf das neue Bachelor–Master-(BAMA)-Programm ist an einigen Universitäten bereits vollzogen, an anderen in der Planung und hat an weiteren noch nicht begonnen. Seit längerem ist geplant, im Info TC eine Zusammenstellung in Sachen BAMA aufzunehmen, um den Informationsfluß zu verbessern und die Möglichkeiten, die BAMA-Studiengänge bieten, aufzuzeigen. Leider

scheint es zur Zeit immer noch viele offene Fragen zu geben, und echte Erfahrungswerte und wertvolle Informationen von der Planung, Akkreditierung, praktischen Umsetzung bis hin zu einer Revision der ersten Planung etc. sind zur Zeit wohl nur von denjenigen Chemie-Fakultäten zu erhalten, die mit dem BAMA-Programm weit fortgeschritten sind (wie z.B. die Bochumer). Entsprechend hatten wir uns in Bonn bisher vor allem von der Bochumer Aufteilung der Veranstaltungen und Creditpoints (CPs) für die einzelnen Fächer leiten lassen, obwohl der Bonner Bachelor-Studiengang sich dann doch deutlich vom Bochumer unterschied. Erst Anfang März stieß Bernd Engels (Würzburg) einen Austausch von BAMA-Erfahrungen an, um auch eine inhaltliche Abstimmung zu finden, die gerade für das Basisstudium wichtig sein wird, da erst das Master-Studium weitere Differenzierung, Vertiefung und Spezialisierung bringen soll. Daher ist zunächst unten eine Liste nachgedruckt, die auf den AGTC-Internetseiten seit kurzem zur Verfügung steht.

Ich möchte an dieser Stelle noch ergänzen, was zur Zeit der aktuelle Stand der BAMA-Planungen in Bonn ist. Es war nicht allzu schwierig, die Theoretische Chemie in den Bonner Bachelor-Studiengang zu integrieren. Die zur Verfügung stehenden 180 CPs für ein Bachelor-Studium wurden in Bonn vom Start weg wie folgt aufgeteilt: 15 CPs gibt es auf die Bachelor-Arbeit, je 35 CPs stehen für die Organik/Biochemie, die Anorganik/Allgemeine Chemie und die Physikalische/Theoretische Chemie zur Verfügung. Die Mathematik schlägt mit zwei Vorlesungen mit insgesamt 10 CPs zu Buche, die Physik mit einer etwas höheren CP-Zahl wegen des Experimentalphysik-Praktikums, und weitere CPs werden für Toxikologie, Rechtskunde, etc. verwendet. Von den 35 CPs für die Physikalische/Theoretische Chemie entfallen 10 CPs auf die Theorie, die auf zwei Vorlesungen im 3. und 4. Semester aufgeteilt werden (je 2V+2Ü). Die Vorlesung im 3. Semester soll Konzepte der Quantenchemie vermitteln, während die Vorlesung im vierten Semester die Gruppentheorie — allerdings mit starkem Bezug auf die Nachbarfächer — behandelt (detaillierte Studieninhalte sind bereits formuliert worden).

Eine Besonderheit des Bonner Bachelor-Studiums wird das fünfte Semester sein. Man hat versucht, dieses Semester frei von Pflichtveranstaltungen zu halten, damit den Studierenden die Möglichkeit gegeben wird, Veranstaltungen an ausländischen Hochschulen zu belegen, um dort die entsprechenden CPs zu erhalten. Diejenigen Studierenden, die dieses Angebot nicht wahrnehmen möchten, müssen in Bonn zwei Wahlpflichtfächer belegen, von denen jedes 12 CPs zählt, also aus Vorlesung, Übung und zugehörigem Praktikum besteht. Diese 24 CPs kommen zu den je 35 CPs für die oben genannten drei Schwerpunkte hinzu. Von den etwa zehn Wahlpflichtfächern sollen zwei in der Theorie angesiedelt werden. Diese beiden Kurse werden "Grundlagen der Quantenchemie" und "Computational Chemistry" heißen.

M. Reiher, Jena

4.1 Übersicht BAMA-Studiengänge

Neu auf den AGTC-Internetseiten (www.theochem.de/agtcllehre.html):

Um den Informationsaustausch zur Studienreform zu fördern, sind hier Links zu Studienordnungen und Prüfungsordnungen in verschiedenen Hochschulen zusammengestellt, meist begleitet von einer kurzen Zusammenfassung zu dem Studienangebot des Fachs Theoretische Chemie.

Universität Bielefeld

Universität Bochum

Technische Universität München

Universität Siegen

Universität Tübingen

Technische Universität Dresden

Die verantwortlichen Kollegen aus anderen Hochschulen sind aufgerufen, entsprechende Informationen per Email einzureichen, um die obige Sammlung zu erweitern.

4.1.1 Universität Bielefeld (Uwe Manthe)

Stand: Oktober 2004

Studienplan Bachelor siehe <http://www.uni-bielefeld.de/chemie/studium/>

Die Universität Bielefeld stellt die Chemie zum Wintersemester 2004/05 auf Bachelor/Master um.

Die Planungen zum Master sind noch nicht endgültig abgeschlossen, aber schon in einem fortgeschrittenen Stadium. Bachelor und Master sollen dann demnächst akkreditiert werden.

Im Bachelor Chemie, offizielle Bezeichnung "Molekülwissenschaften" mit vertiefendem Nebenfach "Chemie der Materialwissenschaften", wird die Theoretische Chemie die folgenden Veranstaltungen betreuen.

Pflichtbereich (1.-4.Semester):

- Mathematik I (2V+2Ü, 1.Semester)
- Mathematik II (2V+2Ü, 2.Semester)
- Theoretische Chemie I (2V+2Ü, 4.Semester)

Wahlpflichtbereich (5. und 6. Semester):

- Theoretische Chemie II (2V+2Ü, 5.Semester)
- Computational Chemistry (jeweils 1V+3P, zweisemestrig, 5.+6.Semester)

Im 5. und 6. Semester gibt es keine Pflichtvorlesungen, vielmehr wählen Studierende im Rahmen von Vorgaben aus dem Wahlpflichtangebot aus.

4.1.2 Universität Bochum (Dominik Marx)

Stand: November 2004

Infos zu den gestuften Bachelor- und Master-Studiengängen siehe

<http://www.theochem.rub.de/go/lehre.html>

4.1.3 Technische Universität München (Wolfgang Domcke)

Stand: Oktober 2004

Studienplan Bachelor siehe http://www.ch.tum.de/common_new/StudPlanBach.htm

Studienplan Master siehe http://www.ch.tum.de/common_new/StudPlanMast.htm

Beide Studienpläne sind vom Bayerischen Ministerium genehmigt und werden seit 2001 (Bachelor) bzw. 2002 (Master) praktiziert. Die Akkreditierung ist noch nicht erfolgt.

Kurze Charakterisierung:

Im Bachelor-Studium (6 Semester/180 CP) sind keine Wahlfächer vorgesehen. Lediglich die Bachelor's Thesis kann wahlweise in Synthesechemie oder in Physikalisch-Technischer Chemie durchgeführt werden.

Die Theoretische Chemie ist vertreten mit:

2 SWS Vorlesung + 1 SWS Übung "Einführung in die Quantenmechanik" (3. Semester),

2 SWS Vorlesung + 1 SWS Übung/Praktikum "Computational Chemistry" (6. Semester).

Im Master-Studium (3 Semester/90 CP) besteht weitgehende Wahlfreiheit. Ein Hauptfach, ein Vertiefungsfach, mehrere Wahlfächer sowie (nichtchemische) Ergänzungsfächer können beliebig gewählt werden.

Es wird ein Vertiefungsfach "Theoretische Chemie/Computational Chemistry" im Umfang von 20 CP, verteilt auf 2 Semester, angeboten. Das Vertiefungsfach umfasst pro Semester 2 Vorlesungen mit 3 bzw. 2 SWS, sowie ein Computerpraktikum zu 5 SWS, also 10 SWS pro Semester.

4.1.4 Universität Siegen (Eugen Schwarz)

Stand: Oktober 2004

Studienordnung Bachelor siehe

http://www.uni-siegen.de/dept/fb08/bama/Ba_StO.pdf

Prüfungsordnung Bachelor siehe

<http://www.uni-siegen.de/dept/fb08/bama/BaPO.pdf>

Studienordnung Master siehe

http://www.uni-siegen.de/dept/fb08/bama/Ma%20StO_Mai%202004.pdf

Prüfungsordnung Master siehe

http://www.uni-siegen.de/dept/fb08/bama/Ma%20PO_Mai%202004.pdf

In Siegen gibt es einen schon akkreditierten Bachelor–Master-Studiengang. Der Diplomstudiengang läuft aus.

Kurze Charakterisierung:

- 1.B-Studienjahr: 20 SWS Mathematik und Physik (V,Ü,P) = 25 CP.
- 2.B-Studienjahr: 07 SWS Theoretische chemie (TC) (V,Ü,P), teils in gemeinschaftlichen 5-SWS-PC-TC-Blöcken, entspricht etwa 8 CP.
- 3.B-Studienjahr: Es gibt viele Wahlmöglichkeiten, auch TC, je Fach 05, 10 oder 15 SWS VÜP = 5, 10 oder 15 CP, Bachelor-Arbeit = 15 CP.

Die meisten M-Lehrveranstaltungen werden auf Englisch angeboten.

- 1.M-Semester: Es gibt nur 5-Credit-Pflichtfächer; davon 2 SWS Theoretische Chemie als Teil eines gemeinschaftlichen 5-Credit-PC-TC-Blocks, entspricht 2 CP.
- 2.M-Semester: Es gibt nur Wahlpflichtfächer mit je 5 oder 10 CP, TC kann eines davon sein.
- 3.M-Semester: Es gibt nur Wahlpflichtfächer mit je 5 oder 10 CP, TC kann eines davon sein.
- 4.M-Semester: Master-Arbeit, kann in TC angefertigt werden, 30 CP.

4.1.5 Universität Tübingen (Christian Ochsenfeld)

Stand: Oktober 2004

Informationen zum Lehrplan Theoretische Chemie siehe www.uni-tuebingen.de/qc/lehre.html

Studienplan Chemie siehe <http://www.uni-tuebingen.de/Chemie/>

Pflichtveranstaltungen:

3. Semester: Theoretische Chemie 1: Vorlesung 2 SWS, Seminar 2 SWS, Praktikum 2 SWS (insgesamt 8 CP)

6. Semester: Theoretische Chemie 2: Vorlesung 2 SWS, Seminar 1 SWS (insgesamt 4 CP)

6. Semester: 2-tägiger Praktikumsversuch Theoretische Chemie im PC Fortgeschrittenenpraktikum. Hierbei kann zusätzlich ein 2-wöchiger Mitarbeiterteil in der Theoretischen Chemie gewählt werden.

Nach dem Pflichtstudium haben die Studenten die Wahl zwischen einer Gewichtung der Theorie als Wahlpflichtfach (12 SWS) oder als Schwerpunktfach (15 SWS).

7.+ 8. Semester: Theoretische Chemie 3 + 4: Vorlesung + Seminar + Praktikum (wahlweise insgesamt 12 oder 15 SWS, 15 oder 19 CP)

Daneben werden Veranstaltungen in Theoretischer Chemie auch im Rahmen des Biochemie-Studiengangs angeboten. So kann Theorie entweder als 2. Hauptfach (neben der Biochemie) oder als Nebenfach gewählt werden. Derzeit ist ein neuer Studiengang für die Biochemie in der Planung, in dem die Theoretische Chemie auch als Focus gewählt werden kann.

4.1.6 Technische Universität Dresden (Gotthard Seifert)

Stand: Dezember 2004

Noch keine Informationen auf dem Internet freigeschaltet.

Zum geplanten Studienplan Bachelor:

Die Ausbildung in Theoretischer Chemie ist in die Physikalische Chemie integriert und dort mit je zwei Modulen vertreten.

1) Theorie der Chemischen Bindung / Grundlagen der Spektroskopie:

Vorlesung 3 SWS, Übungen 1 SWS, Praktikum 2 SWS, 5 CP, voraussichtlich im 3. Fachsemester.

2) Quantenchemie:

Vorlesung 2 SWS, Übungen 1 SWS, Praktikum 2 SWS, 5 CP, voraussichtlich im 6. Fachsemester.

Diese beiden Module sind Pflichtmodule. Im Dresdner BA-Programm wird grosser Wert auf die Kernfächer (AC, OC, PC - mit integrierter TC) gelegt. Eine zu grosse Auftrennung

in eine Vielzahl von Wahlfächern wird vermieden.

Mathematikausbildung: 2x2 SWS Vorlesung + 2x2 SWS Übungen.

Das Programm für die Master-Ausbildung befindet sich noch in der Diskussionsphase.

4.2 Keine Theoretische Chemie mehr im Studium? — Anmerkungen des GDCh-Geschäftsführers Prof. Wolfram Koch

Die gemeinsamen Empfehlungen der GDCh und des VCI zur Einführung von Bachelor- und Masterstudiengängen in der Chemie vom Januar 2004 haben offensichtlich in der Theoretischen Chemie zu Irritationen geführt, wie die Diskussion anlässlich der Mitgliederversammlung der AGTC in Suhl gezeigt hat. Ich hatte bereits bei dieser Gelegenheit versucht, die entstandenen Mißverständnisse auszuräumen und möchte dies an dieser Stelle für ein größeres Publikum gerne noch einmal wiederholen.

Basis aller Überlegungen zur Ausgestaltung eines sechs-semesterigen Basisstudiums (nach heutiger Terminologie ist das Bachelorstudium gemeint) Chemie sind die Empfehlungen der Studienreformkommission der GDCh vom März 1998. In diesen Empfehlungen, an deren Genese die Kollegen Kutzelnigg und Domcke aus der Theoretischen Chemie maßgeblich beteiligt waren, ist das Fachgebiet Theoretische Chemie mit zehn Kreditpunkten in den sechs Semestern des Basisstudiums berücksichtigt. Diese übersetzen sich größenordnungsmäßig in sechs Semesterwochenstunden für Vorlesungen, Übungen und Seminare und vier Semesterwochenstunden Praktikum (Lösung chemischer Probleme mit dem Computer). Diese Empfehlungen sind nach wie vor und in vollem Umfang gültig. Die provokante Frage in der Überschrift kann daher bereits nach diesen wenigen Zeilen mit einem entschiedenen “Nein” zurückgewiesen werden. (Wie die meisten wissen werden, war ich zum Zeitpunkt der Verabschiedung dieser Empfehlungen noch nicht bei der GDCh tätig, sondern habe an der TU Berlin die “Theoretische Organische Chemie” vertreten. Angesichts dieser Herkunft kommt diese Aussage sicher nicht überraschend).

Die GDCh/VCI-Empfehlungen zum Bachelorstudium vom Januar 2004, an deren Formulierung ich im Übrigen nicht unmittelbar beteiligt war, knüpfen an diese früheren Empfehlungen nahtlos an. Ihr Ziel ist es, in Anlehnung an die Diskussion um den “Eurobachelor” einen möglichen europäischen Rahmen für die ganze Bandbreite von Chemiestudiengängen zu skizzieren. Daher wird in diesen Empfehlungen ganz bewußt nicht detailliert auf die inhaltliche Beschreibung und Details der einzelnen Studiengänge eingegangen. Vielmehr geben die GDCh/VCI-Empfehlungen den Fachbereichen einen möglichst breiten Rahmen für die inhaltliche Gestaltung ihrer Studiengänge. Zugegebenermaßen nicht auf den ersten Blick erkennbar ist, daß sich die Empfehlungen an Universitäten, Technische Hochschulen und Fachhochschulen gleichermaßen wenden und damit die sehr breite Vielfalt von chemiebezogenen Studiengängen abzudecken suchen. Und hier liegt m. E. der Auslöser für die Irritationen, die nicht nur in der Theoretischen Chemie, sondern auch in anderen Teil-

disziplinen auftauchten. In den Empfehlungen vom Januar 2004 sind 15 Kreditpunkte für die Wahlpflichtmodule vorgesehen und 60 Kreditpunkte sind gar nicht festgelegt. Bei den Wahlpflichtmodulen werden exemplarisch Biologie, Technische Chemie oder Makromolekulare Chemie genannt. Diese Nennung von nur einigen wenigen Fachgebieten an dieser Stelle ist vielleicht etwas unglücklich, eine Ausgrenzung der dort nicht explizit genannten Teildisziplinen ist damit jedoch nicht intendiert. Vielmehr ist der offen belassene Bereich für jeden einzelnen Studiengang bzw. von jedem Fachbereich auszugestalten. Die klassische Chemieausbildung wird und soll sich dabei weitgehend an der GDCh-Empfehlung von 1998 orientieren.

Um es noch einmal festzuhalten: Die GDCh/VCI-Empfehlungen können nicht als eine wie auch immer geartete Relativierung der Empfehlungen der Studienreformkommission für eine Neugestaltung des Chemiestudiums gewertet werden, sie ergänzen diese vielmehr und erweitern sie um Bachelorstudiengänge an Fachhochschulen oder andere, im Kontext des "Eurobachelors" angesiedelte chemierelevante Studiengänge. Insbesondere ist eine Schwächung der Theoretischen Chemie in Bachelorstudiengängen Chemie ebenso wenig beabsichtigt, wie die anderer, in den Empfehlungen nicht explizit genannter Teildisziplinen.

Für weitere Fragen und Kommentare stehe ich natürlich gerne unter w.koch@gdch.de zur Verfügung.

W. Koch, GDCh-Geschäftsführer

5 Arbeitsgruppen stellen sich vor

5.1 Theoretische Chemie an der Universität Mainz

Die Theoretische Chemie ist in Mainz traditionell am Institut für Physikalische Chemie angesiedelt. Obwohl schon in den siebziger Jahren Prof. Sigrid Peyerimhoff (heute in Bonn) und Prof. Wilfried Meyer (heute in Kaiserslautern) als C3-Professoren in Mainz tätig waren, besteht eine Kontinuität in diesem Fach in Mainz (nach einer längeren Phase ohne eine Professur in Theoretischer Chemie) erst seit den Berufungen von Prof. Michael Schreiber (1990, heute in Chemnitz in der Theoretischen Physik) und Prof. Jürgen Gauss (1995). Die C3-Professur wurde schließlich im Jahre 2001 zu einer C4-Professur aufgewertet.

Die Forschungsschwerpunkte der Arbeitsgruppe sind die Entwicklung und Anwendung neuer quantenchemischer Methoden zur genauen Berechnung von Energien und Moleküleigenschaften. In diesem Zusammenhang ist in der quantenchemischen Beschreibung der Elektronenstruktur die genaue Erfassung der Elektronenkorrelation unerlässlich. Anders als heute oft üblich werden dazu in Mainz so genannte "Many-Body"-Ansätze verwendet

wie die Vielteilchenstörungstheorie (auch bekannt als Møller-Plesset-Störungstheorie) und vor allem die Coupled-Cluster Methoden. Die Berechnung von Eigenschaften ist thematisch eng sowohl mit der Theorie analytischer Ableitungen wie auch der Response-Theorie verknüpft. Die Anwendungen quantenchemischer Methoden bei chemischen Fragestellungen erfolgen oft in enger Zusammenarbeit mit experimentell arbeitenden Gruppen. In den letzten Jahren interessieren dabei in Mainz vor allem Fragen aus dem Bereich der NMR-Spektroskopie, der Rotationsspektroskopie sowie der UV/VIS-Spektroskopie.

Konkreter lassen sich die derzeitigen Forschungsthemen wie folgt beschreiben:

(a) Formulierung und Entwicklung von Coupled-Cluster-Methoden unter Berücksichtigung höherer Anregungen (d.h. Dreifach-, Vierfach-, Fünffachanregungen, usw.) im Cluster-Operator. Solche Ansätze sind für das Erreichen "quantitativer Genauigkeit" (d.h. einer Genauigkeit von etwa 1kJ/mol in berechneten Bindungsenergien und Bindungsenthalpien, 0.1pm in Bindungsabständen, 1cm⁻¹ in Schwingungsfrequenzen, usw.) in quantenchemischen Rechnungen unerlässlich;

(b) Coupled-Cluster-Ansätze zur Beschreibung offenschaliger Verbindungen. Bestehende Probleme bei der theoretischen Beschreibung von Radikalen (z.B. Spinkontamination, Symmetriebrechungen, Mehrdeterminantenreferenzproblem) sollen hierbei durch so genannte spin-beschränkte oder spin-adaptierte CC-Ansätze gelöst werden. Dadurch erhofft man sich auch einen neuen Zugang zu Multi-Referenz-CC-Methoden;

(c) Bei den Moleküleigenschaften ist die Berechnung magnetischer Eigenschaften ein Schwerpunkt. Traditionell spielen hier die NMR-Verschiebungen eine dominierende Rolle. Unsere Bemühungen konzentrieren sich derzeit auch auf andere magnetische Eigenschaften wie z.B. indirekte Spin-Spin-Kopplungskonstanten, Magnetisierbarkeiten, Rotationsg-Tensoren aber auch auf die theoretische Bestimmung von EPR-Parametern.

(d) Formulierung und Implementierung von Response-Theorie-Techniken im Rahmen der Coupled-Cluster-Theorie zur Vorhersage von Ionisierungsenergien und elektronischen Anregungsenergien als Ausgangspunkt zur Simulation und Interpretation von Photoelektronen- und/oder UV/VIS-Spektren.

Basis für alle methodischen Arbeiten ist das in Mainz (zusammen mit den Gruppen von Prof. Rodney J. Bartlett (Gainesville, USA), Prof. John F. Stanton (Austin, USA) und Prof. Péter G. Szalay (Budapest, Ungarn)) entwickelte quantenchemische Programmpaket ACES II (für die Mainz-Austin-Budapest-Version, siehe www.aces2.de; das Programm ist für akademische Nutzer kostenlos erhältlich).

Bei den Anwendungen interessiert neben so genannten Benchmark-Untersuchungen zur Kalibrierung quantenchemischer Ansätze vor allem die direkte Zusammenarbeit mit experimentell arbeitenden Kollegen. Die Vorhersage von Rotationsspektren ermöglicht (wie z.B. im Falle des kürzlich detektierten Oxadisulfans (HSOH)) den Nachweis bislang unbekannter Moleküle mittels Mikrowellenspektroskopie. Die Berechnung von Spin-Rotations-

Konstanten andererseits erlaubt die Interpretation der Hyperfeinstruktur von Rotationspektren. Während bei der NMR-Spektroskopie anfänglich ebenfalls der Nachweis neuer Spezies ausgehend von berechneten NMR-Verschiebungen im Vordergrund stand (Carbokationen, Borane und Carborane, Al(I) und Ga(I)-Verbindungen, usw.) steht bei den Arbeiten in Mainz derzeit mehr die Interpretation von Festkörper-NMR-Spektren über quantenchemische Rechnungen im Vordergrund. Über langreichweitige π -Wechselwirkungen und deren Simulation in quantenchemischen Rechnungen lassen sich hier Aussagen über die Molekülanordnung im festen Zustand treffen. Als Beispiel sei die materialwissenschaftlich interessante Klasse der substituierten Hexabenzocoronene erwähnt, bei denen das Zusammenspiel von Theorie und Experiment zu einem detaillierten Verständnis der Stapelstruktur führte.

Die Forschung in Mainz ist im SFB 625 (“Von einzelnen Molekülen zu nanoskopisch strukturierten Materialien”) eingebunden, in dessen Rahmen auch lokale Kooperationen existieren. Weiterhin wird die Forschung der Arbeitsgruppe durch die EU (im Rahmen des EU-RTN-Netzwerks “Nanoquant”), die Deutsche Forschungsgemeinschaft, den Fonds der Chemischen Industrie sowie im Rahmen einer Industriekooperation durch die BASF AG gefördert.

In der Lehre ist die Theoretische Chemie im Diplom-Studiengang traditionell eines der möglichen vierten Fächer. In den letzten Jahren konnte die Theoretische Chemie durch eine Pflichtveranstaltung (“Einführung in die Theoretische Chemie”) stärker im Chemiestudium verankert werden. Darüber hinaus beteiligt sich die Theoretische Chemie in Mainz auch an der Ausbildung in der Physikalischen Chemie (derzeit hauptsächlich durch Übernahme der Vorlesungen “Physikalische Chemie I” (Einführung in die Physikalische Chemie, Thermodynamik und Kinetik) bzw. “Physikalische Chemie II” (Quantenmechanik, chemische Bindung und Spektroskopie)). In der Spezialisierung für das 4. Fach werden die Vorlesungen “Theoretische Chemie I” (Einführung in quantenchemische Methoden: Hartree-Fock-Theorie) und “Theoretische Chemie II” (fortgeschrittene quantenchemische Methoden: Elektronenkorrelation) angeboten sowie zusätzlich ein zweiteiliges Praktikum (zweimal 10 Tage), in dem einerseits (Teil I) ein einfaches HF-SCF-Programm erstellt werden soll und andererseits (Teil II) eine praktische Einführung in die “Computer-Chemie” angeboten wird. Das Lehrangebot wird schließlich durch Spezialvorlesungen (z.B. “Einführung in die Dichtefunktionaltheorie”, “Quantenchemische Berechnung magnetischer Eigenschaften”, usw.) abgerundet. Daneben wird gemeinsam mit der Anorganischen Chemie eine Veranstaltung mit dem Titel “Theoretische Methoden in der Anorganischen Chemie” angeboten. Die Theoretische Chemie in Mainz wird sich weiterhin ab kommendem Wintersemester am Master-Studiengang “Computational Sciences — Rechnergestützte Naturwissenschaften” beteiligen.

Die Arbeitsgruppe umfasst derzeit einen Akademischen Rat (HD Dr. Gregor Diezemann), fünf Doktoranden (Uli Häberle, Michael Harding, Miriam Heckert, Thorsten Metzroth, Christine Michauk) sowie einen System-Administrator (Peter Sigl) und eine Sekretärin (Katja Werner).

Weitere Informationen zu unserer Arbeitsgruppe finden sich unter:

www.uni-mainz.de/FB/Chemie/AG-Theoretische/

J. Gauss, Mainz (gauss@uni-mainz.de)

5.2 Theoretische Chemie an der Universität Zürich

Mit ca. 23.000 Studenten ist die Universität Zürich die grösste Universität der Schweiz. An der Mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät studieren 2'500 Studenten. Die Chemischen Institute sind zusammen mit den anderen naturwissenschaftlichen Instituten auf dem Irchel-Campus angesiedelt. Der Campus ist schön und zentral in einem grossen Park gelegen und ist leicht und schnell zu erreichen.

Die Theoretische Chemie wurde lange Zeit an der Universität Zürich durch Prof. G. Wagnière vertreten. Bis zu seiner Emeritierung 1998 leitete er eine Gruppe in der Physikalischen Chemie. Von 1992 bis 1999 war zudem Walter Thiel am Organisch-chemischen Institut tätig. Im Jahre 2000 wurde ich als Assistenzprofessor an die Universität berufen. Ich übernahm die Infrastruktur der Gruppe Thiel und meine Gruppe war in der Organischen Chemie angesiedelt. Zwei Jahre später, nach der Emeritierung von Prof. Fischer, wechselte ich mit meiner Gruppe zum Physikalisch-chemischen Institut. Auf Oktober 2004 wurde ich zum ausserordentlichen Professor für Physikalische Chemie befördert. Wir sind aber nicht die einzige Gruppe an der Universität die sich mit Computational Chemistry befasst. Seit 2003 leitet Prof. Kim Baldridge eine Gruppe in der Organischen Chemie und Prof. Amedeo Caffisch in der Biochemie befasst sich mit klassischer Moleküldynamik. Nicht zu vergessen ist auch die Gruppe von Prof. Karl Lendi am Physikalisch-chemischen Institut, die sich mit irreversibler Quantendynamik beschäftigt. Mit den Kollegen der ETH Zürich (Prof. W. van Gunsteren, Prof. M. Parrinello und PD H.P. Lüthi) bestehen Kooperationen in Lehre und Forschung. Im C4 Projekt (Competence Center in Computational Chemistry) ist zudem auch noch das IBM Forschungslabor in Rüschlikon involviert.

Meine Gruppe besteht zur Zeit aus zwei Postdoktorandinnen, einer Doktorandin und drei Doktoranden. Unsere Gruppe beschäftigt sich einerseits mit Methoden- und Programmentwicklung und andererseits mit Anwendungen der Moleküldynamik. So untersuchen wir die Struktur und Dynamik von Wasser und wässrigen Lösungen und in einer Kollaboration mit Prof. Ursula Röthlisberger die biochemischen Prozesse, die bei der Schädigung der DNA mit Licht auftreten. Die Methodenentwicklung konzentriert sich auf Entwicklungen basierend auf der GPW-Methode (Gaussian and plane waves). Zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie (TDDFT) und linear skalierende Methoden mit hierarchischen Matrizen werden von Doktoranden untersucht. Die Ausarbeitung von schnellen Methoden zur Berechnung von Eigenschaften in der kondensierten Phase (Lösungen, komplexe Systeme, Biomoleküle) baut auf einer Erweiterung der GPW Methode auf. Dabei wird der schwach variierende Teil der Elektronendichte mittels ebener Wellen beschrieben und die Anteile

le nahe der Atomkerne in einer Produktbasis von Gaussfunktionen. Diese Unterteilung ermöglicht eine effiziente Berechnung der Coulombenergie auch für periodische Systeme. Schlussendlich beschäftigen wir uns auch mit der Entwicklung von approximativen Methoden zur schnellen Berechnung von schwachen Wechselwirkungen in Lösungen.

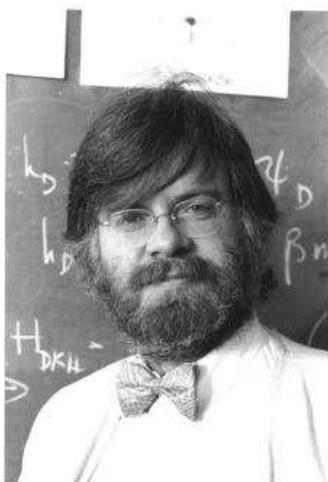
Die Programmentwicklung konzentriert sich auf die beiden Programmsysteme CPMD (www.cpmc.org) und CP2K (cp2k.berlios.de). Der Quellcode beider Programme ist frei erhältlich, wobei CP2K mit der Gnu Public License (GPL) vertrieben wird. Als Verfechter freier Software gewähren wir auch Zugang zur aktuellen Entwicklungsversion von CP2K. Während CPMD in Fortran77 geschrieben ist, versuchen wir im neueren Code CP2K moderne Programmier Techniken unter Fortran90 einzusetzen. Moleküldynamik basierend auf Elektronenstrukturmethoden ist äußerst computerzeitintensiv. Die effiziente Implementierung und gute Parallelisierung von Algorithmen erhalten deshalb hohe Priorität. Zur Zeit ist die effiziente Nutzung von Computern mit mehreren Tausend Prozessoren mit CPMD und mehreren hundert Prozessoren mit CP2K möglich.

Die gruppenintern zur Verfügung stehende Rechenleistung reicht nicht für unsere Anwendungen aus und wird zur Programmentwicklung eingesetzt. Die Anwendungen werden auf den Computern des Rechenzentrums der Universität (eine 128 CPU IBM-SP3 (ein Geschenk von IBM) und ein Cluster mit 512 AMD-Opteron CPUs), des CSCS in Manno (256 CPU IBM-SP4), oder in Zusammenarbeit mit unseren Freunden im Ausland durchgeführt.

Das Chemiestudium an der Universität Zürich ist speziell ausgerichtet. Die Vorlesungen der ersten vier Semester werden von Chemikern und Biochemikern gemeinsam besucht. Dadurch erhält das Studium eine mehr biologische Ausrichtung. Grundlagen der Theoretischen Chemie werden in obligatorischen Vorlesungen in der Physikalischen Chemie vermittelt. Zudem stehen Wahlvorlesungen in Numerischer Quantenchemie und in Moleküldynamik zur Auswahl. Unsere Gruppe veranstaltet ein wöchentliches Gruppenseminar, das unter rege auswärtiger Beteiligung stattfindet. Mehr Informationen zu Lehre und Forschung am Physikalisch-chemischen Institut der Universität Zürich finden Sie auf unserer Webseite www.unizh.ch/pci.

J. Hutter, Zürich

6 Nachruf — Prof. Dr. Bernd Artur Heß



Bernd Artur Heß wurde am 17. April 1954 in Selters im Westerwald geboren und war das einzige Kind seiner Eltern, die einen kleinen mittelständischen Betrieb besaßen. Der Vater war Krugbäcker; der Betrieb stellte Tonkrüge her. Vielleicht hat diese frühe Begegnung mit Stoffen und ihren Umwandlungen bei Bernd Heß die Begeisterung für die Chemie geweckt. Im Sommersemester 1972, also gerade zu seinem 18. Geburtstag, begann er mit dem Chemiestudium in Berlin. Finanziell wurde er unterstützt durch ein Stipendium der Studienstiftung des deutschen Volkes, das er bis zum Abschluß seiner Promotion innehatte. Er studierte insgesamt drei Jahre in Berlin und legte dort auch das Vordiplom ab. Offenbar war Bernd Heß bereits im Grundstudium als origineller Kopf aufgefallen, denn seine erste Publikation entstand noch mit Helmut Schwarz in Berlin: “Mechanismus der NH_3 -Eliminierung aus 3-Phenylpropyl- und 5-Phenylpropyl-Pentylamin” und erschien 1975 in *Organic Mass Spectrometry*. Noch Jahrzehnte später blickte Bernd Heß gern auf seine einzige experimentelle Arbeit zurück und pflegte zu sagen, daß diese Arbeit trotz seiner Mitwirkung zustande gekommen sei — ein für ihn typisches Understatement, das zugleich seinen besonderen Humor andeutet.

Bernd Heß' Interesse galt jedoch nicht dem Experiment, sondern der Theoretischen Chemie, und so wechselte er zum Sommersemester 1975 von Berlin nach Bonn, wo es schon damals einen Studienschwerpunkt Theoretische Chemie gab. Zusammen mit einigen anderen Studierenden — zu dieser Zeit wechselte etwa auch Christel Marian wegen des Studienschwerpunktes von Köln nach Bonn — und Postdoktoranden aus Argentinien, Indien und Jugoslawien kam so eine muntere internationale Theoretische-Chemie-Gruppe zustande. Wie sich herausstellte, wurde Bernd Heß in Bonn von der Theoretischen Chemie völlig absorbiert. Als studentische Hilfskraft wurde er gleich zu Molekülberechnungen mit herangezogen, und so erschien bereits 1976 seine Veröffentlichung zum Elektronenspektrum des Acetons – eine Studienarbeit, die noch vor der Diplomprüfung stattfand.

In der Arbeitsgruppe galt damals das Interesse photochemischen Prozessen. Man berech-

nete Potentialflächen von Grund- und angeregten elektronischen Zuständen in Molekülen und wollte auch strahlende und strahlungslose Übergänge zwischen den Potentialflächen berechnen. Für letzteres muß man Spin-Bahn-Wechselwirkungen — eigentlich ein Konzept aus der relativistischen Theorie — berücksichtigen. Den Spin-Bahn-Operator nutzte man in der einfachen Breit-Pauli-Näherung. So fiel Bernd Heß und Christel Marian die Aufgabe zu, als Diplomarbeit entsprechende Vorarbeiten für ein Konfigurationswechselwirkungsprogramm unter Einschluss von Spin-Bahn-Wechselwirkung zu erstellen. Christel Marians Diplomarbeit befaßte sich mit der “Berechnung von Spin-Spin und Spin-Bahn-Wechselwirkungsintegralen über Atomfunktionen” und Bernd Heß’ Arbeit nutzte diese Integrale zur Berechnung der “Matrixelemente zwischen Molekülwellenfunktionen zur Berechnung relativistischer Effekte”.

Einen kleinen Teil seiner Arbeit nach dem Diplom widmete er einem Problem von Ulrich Heinzmann aus Münster (heute Bielefeld), der damals gerade durch seine Messungen mit spin-polarisierten Elektronen Aufsehen erregte. Die theoretische Unterstützung durch Bernd Heß führte zu einer Veröffentlichung mit dem Thema “Spin polarized photoelectrons from CO_2 and N_2O ” in Chem. Phys. Letters. 1980 promovierte Heß dann im Alter von erst 26 Jahren mit der Arbeit “Ab initio Berechnung der Feinstruktur von Molekülen”. Im gleichen Jahr wurde der Sonderforschungsbereich (SFB) 42 “Energiezustände einfacher Moleküle: quantentheoretische und experimentelle Untersuchungen” eingerichtet, mit Wuppertal als Sprecherhochschule und Arbeitsgruppen aus der Angewandten Physik sowie der Physikalischen und Theoretischen Chemie aus Bonn. Bernd Heß ging nach Wuppertal als wissenschaftlicher Mitarbeiter von Robert Bunker und war in diesem SFB sehr aktiv. Durch den SFB hatten die theoretischen Gruppen einen dedizierten Rechner in Wuppertal erhalten: eine Inter-Data 8/32 der Firma Perkin-Elmer mit einer 1200 baud Leitung zur Theoretischen Chemie nach Bonn. Bernd Heß war bald der Dompteur dieser Maschine; sie übte eine Faszination auf ihn aus und keiner konnte mit ihr besser umgehen als er. Die Firma Perkin-Elmer hat wohl verschiedentlich versucht, ihn als DV-Experten abzuwerben, und es war längere Zeit nicht klar, ob ihr dies nicht gelingen würde. Er hat aber doch der Wissenschaft den Vorrang gegeben und sich 1986 — also mit 32 Jahren — in Wuppertal habilitiert mit der aufsehenerregenden Arbeit “Ab initio Berechnungen von Molekülen mit schweren Atomen unter Verwendung von zweikomponentigen Wellenfunktionen”.

Will man Struktur und Spektren von schweren Atomen oder von Molekülen mit schweren Atomen berechnen, so muß der übliche nichtrelativistische Hamilton-Operator durch einen relativistischen ersetzt werden. Statt der Schrödinger-Gleichung benutzt man die Dirac-Gleichung und erhält vierkomponentige Wellenfunktionen — zur Beschreibung eines Elektrons wird ein Satz von vier Funktionen benötigt, die oft in zwei große und zwei kleine Funktionen (Komponenten) unterteilt werden. Für Moleküle werden solche Rechnungen sehr aufwendig, da man für die Basissatzentwicklung der kleinen Funktionen einen großen Aufwand treiben muß. Die kleinen Komponenten der Wellenfunktion verdanken sich den negativen Energiezuständen, die von Dirac als die Zustände der Positronen gedeutet wurden. Es stellt sich daher die Frage, ob man hier wirklich den Rechenaufwand

für die kleinen Komponenten betreiben muß, da sie ihren Ursprung in den für die Chemie unwesentlichen positronischen Zuständen haben.

Einen Ausweg bietet eine unitäre Transformation der Dirac-Gleichung für ein einzelnes Elektron auf zwei Komponenten. Eben diese hat Bernd Heß sehr geschickt durchgeführt und in Anlehnung an eine Veröffentlichung von 1974, die er wiederentdeckt hatte, Douglas–Kroll-Transformation genannt, weshalb heutzutage von der Douglas–Kroll–Hess-Methode gesprochen wird. Die Leistung von Bernd Heß ist außerordentlich bemerkenswert, da sie die volle Spannweite von der Entwicklung formaler Theorie bis hin zum Nachweis der Praktikabilität und Effizienz in quantenchemischen Berechnungen abdeckt. Viele Untersuchungen haben gezeigt, daß die Ergebnisse dieser (quasi-)relativistischen Methode sehr gut und hinreichend genau sind. Diese Leistung von Bernd Heß wurde 1994 mit der von der International Academy of Quantum Molecular Science verliehenen Medaille ausgezeichnet. Diese Medaille wird seit 1967 jährlich an einen, wie es heißt “eminent scientist in the field of Quantum Molecular Science, preferably less than 40 years old” verliehen. Bald nach der Habilitation 1986 folgten die Berufung auf eine Stiftungsprofessur “Theoretische Chemie und Molekülphysik” des Stifterverbandes für die Deutsche Wissenschaft in Bonn, die Auszeichnung mit dem Stipendium der Karl-Winnacker-Stiftung und schliesslich 1990 der Ruf auf die neu eingerichtete C3-Professur für Theoretische Chemie in Bonn. Die Arbeitsgruppe von Bernd Heß wuchs, die Arbeitsthemen wurden zunehmend breiter, die ihm zufallenden Aufgaben vielseitiger.

Etwa in dieser Zeit mußte man im Beschaffungsantrag eines Bildschirmes der Universitätsverwaltung die Zeit angeben, die vor dem Bildschirm verbracht wird. Bernd Heß hat der Verwaltung offensichtlich eine realistische Zeit angegeben — viele Stunden am Tag einschließlich samstags — und das summierte sich auf die tarifliche Wochenarbeitszeit. Also kam an das Institut die Rückfrage, ob Bernd Heß’ Gehalt denn gerechtfertigt sei, da er offenbar lediglich Bildschirmarbeit betreibe, die tariflich bedeutend niedriger anzusetzen sei als seine derzeitige Einstufung. Manchmal dauert es lange, bis sich herumspricht, daß Professoren länger als 38 Stunden pro Woche arbeiten.

Bernd Heß verlangte auch von seinen Mitarbeitern den vollen Einsatz. Er konnte bei Manuskripten oder bei der Beurteilung von studentischen Vorträgen im Haus-Seminar recht kritisch sein. Letztlich hat aber jeder seiner Mitarbeiter in Bonn, dann Erlangen und zum Schluß wieder Bonn von den hohen Ansprüchen und dem unvergleichlichen Niveau profitiert, das er seiner Arbeitsgruppe aufprägte. Aber er hatte auch immer ein offenes Ohr für die Mitarbeiter, war sehr hilfsbereit und das beste Vorbild in Sachen Motivation. Trotz der intensiven Arbeit gab es manchmal auch Momente, bei denen man einen ganz anderen Bernd Heß sah. Er liebte die Musik; vor einer Aufführung der Bach’schen Kaffeekantate konnte man aus seinem Büro die lustige Kaffeegeschichte mit seiner schönen Stimme hören. Und in effizienter Weise verband er auch die Reise zu einem wissenschaftlichen Treffen in Cambridge oder Oxford mit einem Abstecher nach London, wo man, wie er sagte, die besten Gamben kaufen kann.

Aus seiner ersten Bonner Zeit verdient sein Einsatz im SFB 334 “Wechselwirkungen in Molekülen: Synthese, spektroskopische Analyse und quantentheoretische Behandlung charakteristischer Strukturen”, dessen Sprecher er insgesamt vier Jahre lang war, besondere Hervorhebung. Zu Beginn des SFBs, in dem Theoretische Physiker und Theoretische Chemiker, Experimentalphysiker, Anorganiker und Organiker zusammenarbeiteten, war das Sprach- und Verständigungsproblem nicht einfach zu lösen. Was ist für einen Theoretischen Physiker ein π^* -Orbital? Und was macht ein Organiker mit einem Floquet-Zustand oder g-Hartree-Feld? Bernd Heß war derjenige, der sowohl mit Kollegen der Theoretischen Physik als auch mit synthetisch arbeitenden Organikern gleichermaßen diskutieren konnte und eine Mittlerfunktion zwischen den Extremen innehatte.

Die internationalen Aktivitäten von Bernd Heß sollen nicht vergessen werden: Er war der Stellvertreter von Pekka Pyykkö im Lenkungsausschuß des Programms der European Science Foundation über “Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics (REHE)” und er hat die zugehörigen, alle zwei Monate erschienen Nachrichten dieses Programms herausgegeben. Das über fünf Jahre finanzierte Programm ermöglichte den Austausch von Mitarbeitern zwischen verschiedenen Arbeitsgruppen für mehrere Wochen; fast alle europäischen Länder waren daran beteiligt. Das Programm war außerordentlich erfolgreich und hat mit gezieltem Einsatz von wenig Mitteln die europäischen Wissenschaftler im Bereich der Relativistischen Quantenchemie zur internationalen Führung verholfen. Auf seiner homepage gab Bernd Heß fünf spezielle Arbeitsgebiete an, von denen er vier in seiner Bonner Zeit bearbeitete: “Relativistische Quantenchemie”, die ihn seit seiner Diplomarbeit und speziell seiner Habilitation intensiv beschäftigte, “Intermolekulare Wechselwirkungen”, wofür sein Interesse durch den SFB 334 geweckt wurde, “Computerchemie” — hier finden wir vielfältige Anwendungen der theoretischen Methoden in unterschiedlichen Bereichen der Chemie — und “Methoden zur Berechnung der Elektronenkorrelation”, ein zentrales Thema der Theoretischen Chemie. Bernd Heß hat sich speziell mit CI-artigen Verfahren, mit störungstheoretischen Methoden und transformierten Einelektronenfunktionen befaßt.

Nach zwölf Jahren in Bonn nahm Bernd Heß 1998 den Ruf auf einen Lehrstuhl an der Universität Erlangen–Nürnberg an. Er hat sich dort sehr wohl gefühlt und neben vielen neuen wissenschaftlichen Anregungen die freundschaftlichen Beziehungen zu vielen Kollegen sehr geschätzt. In Erlangen engagierte er sich sofort bei der Beantragung des SFB 583 “Redoxaktive Metallkomplexe” und streckte seine Fühler nach vielen neuen Betätigungsfeldern und Forschungsgebieten aus. Zu diesen in Erlangen begonnen Arbeiten gehörte neben den Arbeiten im SFB 583 die Resonanz-Raman-Spektroskopie, die Theorie der Dichtematrixfunktionale, die Entwicklung einer schnellen DFT-Methode (“LEDO-DFT”) und auch das Studium völlig neuartiger Algorithmen wie der Dichtematrix-Renormierungsgruppe. Seine Arbeit in Forschung und Lehre war so erfolgreich, daß die Theoretische Chemie nach kurzer Zeit zu einem von vier Schwerpunkten der Chemie in Erlangen benannt wurde.

Seine besondere Erscheinung wird vielen lange in angenehmer Erinnerung bleiben: Er hatte bemerkenswert dichtes Haupthaar und Bart, die nur gelegentlich gestutzt wurden,

wenn er wieder, wie er sagte, “zugewuchert” war. Dazu begann er in seiner Erlanger Zeit einen Gehrock zu tragen, der ihn zu einem Professor alter Schule machte. Denjenigen von uns, die das Glück hatten, ihn näher zu kennen, vertraute der sonst äusserst diplomatische Mentor manche Einschätzung in sehr pointierter Art und Weise an. Sehr teure Supercomputer, die in ihrer Leistung weit hinter den Erwartungen zurückblieben, wurden dann zur “Edelkrücke”; manche Implementierungen, die zwar nötig, aber mühsam waren, wurden von ihm mit der Losung “mühsam ernährt sich das Eichhörnchen” gekennzeichnet. Kollegen und Mitarbeiter schätzten das jährlich stattfindende Sommerfest im Garten des Hauses der Familie Heß, das in Kosbach idyllisch an einem See lag.

Anfang 2002 erhielt Bernd Heß dann den Ruf auf den Lehrstuhl in Bonn. Der Entschluß, dem Ruf 2003 nach Bonn zu folgen, ist ihm schwer gefallen, weil er sich in dem Forschungsumfeld in Erlangen sehr wohl fühlte. Bernd Heß kam zum WS 2003/2004 mit viel Enthusiasmus und Energie und voller Pläne nach Bonn. Im Frühjahr 2004 hatte ihn bereits seine Krankheit gezeichnet, doch mit bewundernswertem Mut hat er bis wenige Wochen vor seinem Tod die Arbeiten im Institut geschultert. Seine vielen Ideen und Pläne in Bonn zu verwirklichen war ihm nicht mehr vergönnt. Aber wie bereits bei seinem Wechsel nach Erlangen, begann er noch im Herbst 2003 in Bonn sich auf neuen Gebieten zu tummeln, von denen eines die Molekulardynamik war: er interessierte sich für traditionelle MD, die er im Rahmen des SFB 624 “Template” auf funktionalisierte DNA und andere biochemische Systeme anwenden wollte, und für die Car-Parrinello-Methode, die ihn gerade wegen ihrer formalen Pffiffigkeit (Abbildung eines quantenmechanischen Systems auf ein klassisches) faszinierte.

Bernd Heß hat an Ideen nicht über das Verfallsdatum hinaus festgehalten, sich nicht in sie verbissen und blieb für Perspektivwechsel stets offen. Er war einer der Wissenschaftler, die sich bei jeder Gelegenheit für die Gesamtheit der Wissenschaften einsetzen, und ist gerne mit Nichtwissenschaftlern in den Dialog getreten. Er hat es außerdem verstanden, universelle Gedanken von Allgemeinwert und Gegensätze in seiner Gruppe zu vereinen. Das Klima in seiner Gruppe war freiheitlich, offen und immer herzlich. Wir werden nicht vergessen, wie Bernd Heß einem jedem aus seiner Gruppe gegenüberstehen und aufmunternd zuzwinkern konnte oder wie er Mitarbeiter hinter seinen Schreibtisch einlud, um an seinem Notebook die neuesten Programmierarbeiten zu begutachten: “Kommen Sie mal hinter den Tresen” (gemeint war sein Schreibtisch).

Bernd Heß verstarb am 17. Juli 2004 im Alter von nur 50 Jahren. Dass wir Bernd Heß, einen guten Kollegen, Mentor und Freund so früh verlieren mußten, trifft uns sehr.

Barbara Kirchner
Markus Reiher
Sigrid D. Peyerimhoff

(Eine leicht gekürzte Fassung des Nachrufs wird in einer der nächsten Ausgaben des Bunsen-Magazins abgedruckt werden)