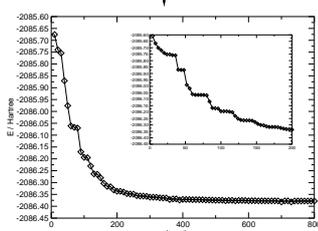
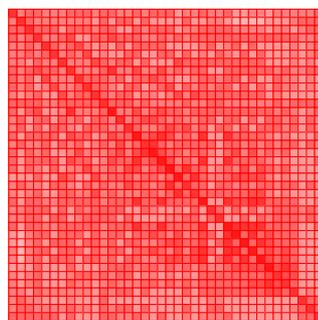
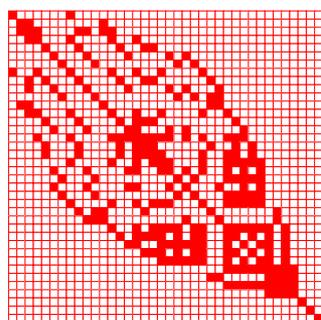
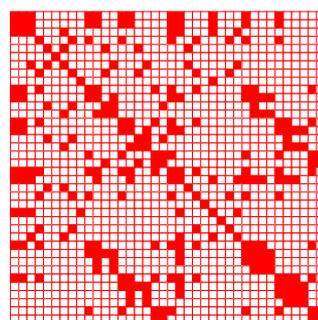
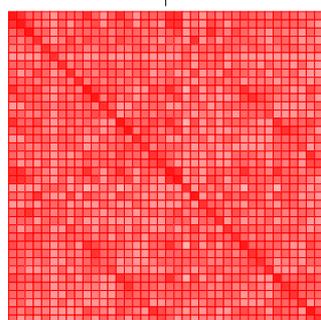
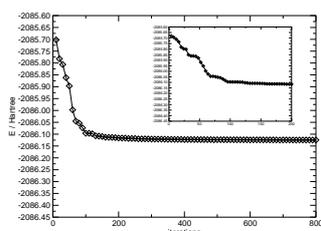


# Info

## Theoretische Chemie



Ausgabe November 2004

### Titelbild<sup>1</sup>:

Das Titelbild zeigt neue Ergebnisse aus systematischen Untersuchungen im Rahmen der Dichtematrixrenormierungsgruppen-(DMRG)-Theorie, die zur Berechnung von Full-CI-Energien herangezogen werden kann. Ein Charakteristikum dieser DMRG-Rechnungen ist die Anordnung der Molekülorbitale auf einem Gitter (dem sog. lattice), die aus der Theorie nicht abgeleitet werden kann. Zunächst sieht man links oben eine Grafik, in der die Gesamtenergie gegen die Zahl der DMRG-Iterationen am Beispiel des  $\text{Cr}_2$ -Moleküls aufgetragen wurde. Hier wurde eine energetische Anordnung der Orbitale verwendet, die jedoch zu einer zu hohen lokalen Minimumsenergie konvergiert. Durch Umordnung der Austauschintegralmatrix  $\{K_{ij}\}$  — ihre Einträge sind in roten Farbabstufungen codiert dargestellt — mit dem Reverse-Cuthill-McKee-Algorithmus erhält man eine hinsichtlich der DMRG-Konvergenz verbesserte Orbitalreihenfolge, für die die konvergierte Energie einer DMRG-Rechnung nahe der FCI-Energie liegt (Diagramm rechts unten; Ref.: G. Moritz, B. A. Hess, M. Reiher, *J. Chem. Phys.* (2004), im Druck).

---

<sup>1</sup>Auf Anregung von J. Manz (Berlin) hin, gibt es in dieser Ausgabe und auch in Zukunft einen kurzen erklärenden Text zum Titelbild.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Editorial</b>	<b>4</b>
<b>2 Rückschau: Symposium für Theoretische Chemie 2004 in Suhl/Tübingen</b>	<b>4</b>
<b>3 Bericht des Vorstands</b>	<b>12</b>
<b>4 Nachrichten</b>	<b>16</b>
4.1 Tagungsvorschau . . . . .	16
4.1.1 November/Dezember 2004 . . . . .	16
4.1.2 Januar–Dezember 2005 . . . . .	16
4.2 Klatsch und Tratsch . . . . .	17
<b>5 Verschiedenes</b>	<b>18</b>
5.1 Theoretische Chemie an der Martin-Luther-Universität Halle — eLearning Theoretische Chemie . . . . .	18
5.2 Informationen zum B. Sc.-Chemie-Studium . . . . .	21
5.3 Aufruf in Sachen Bachelor/Master . . . . .	23
<b>6 Arbeitsgruppen stellen sich vor</b>	<b>23</b>
6.1 Theoretische Chemie an der TU Berlin . . . . .	23
6.2 Theoretische Chemie an der Universität Karlsruhe (TH) . . . . .	25

# 1 Editorial

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

im April dieses Jahres hatten die Bonner Gruppen die Betreuung des “Info Theoretische Chemie” übernommen. Durch den plötzlichen Tod von Professor Bernd Artur Hess im Sommer und durch die Wegberufung von Professor Andreas Görling nach Erlangen hat sich die Situation in Bonn stark verändert. Als ehemalige Mitarbeiter von Bernd Hess werden wir die Betreuung des Info-TC in seinem Namen fortführen und glauben, daß dies in seinem Sinne gewesen wäre.

Wir werden Bernd Hess als einen wissenden, großzügigen und gebildeten Mentor in Erinnerung behalten und sind dankbar für die Zeit, die wir mit ihm verbringen und arbeiten durften. Wir werden uns gerne an die Freiheit, Unterstützung und Unvoreingenommenheit, die uns durch ihn zugute kamen, erinnern. Sein wissenschaftliches Werk werden wir weitertragen im Gedenken an den herausragenden Lehrer, der uns stets zur Seite stand. Er war einer der Wissenschaftler, die sich bei jeder Gelegenheit für die Gesamtheit der Wissenschaften eingesetzt hat und gerne mit Nichtwissenschaftlern in den Dialog getreten ist. Wir haben mit ihm ein großes Vorbild verloren.

Bonn, im November 2004

M. Reiher, B. Kirchner

## 2 Rückschau: Symposium für Theoretische Chemie 2004 in Suhl/Thüringen

Das diesjährige Symposium für Theoretische Chemie (STC2004) wurde von **Gernot Frenking** und **Max Holthausen** (Marburg) unter dem Hauptthema “Computational Chemistry” veranstaltet. Vom 19. bis zum 23. September fanden über 200 Teilnehmer den Weg nach Suhl/Thüringen, um sich über neue Entwicklungen zu informieren. Dieses 40. Symposium der deutschsprachigen Theoretischen Chemiker trug damit der stetig zunehmenden Bedeutung der Computerchemie Rechnung. Den 13 Hauptvorträgen standen 19 Kurzvorträge zur Seite, die das Hauptthema von den theoretischen Grundlagen bis zu Anwendungen behandelten. Wie bereits in den letzten Jahren etabliert, wurde Englisch als Tagungssprache beibehalten, um so die Anknüpfung an die internationale Community zu intensivieren. Dementsprechend kamen die Vortragenden nicht allein aus dem Einzugsbereich der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie, sondern u.a. auch aus den Benelux-Ländern, England, USA, Südafrika, Skandinavien und Indien.

Abbildung 1: Das Marburger Organisationsteam des STC2004 um Gernot Frenking und Max Holthausen.



Die Organisatoren faßten die Ziele der Tagung eindrücklich im Vorwort des Tagungsbandes zusammen: Computational Chemistry is the science of applying theoretical methods for chemical research in all areas of chemistry. The lectures and posters of the STC2004 demonstrate in an exemplary fashion the depth and the scope of this field, and they also show that the pace of development continues to increase.

## Dichtefunktionaltheorie

Methoden basierend auf der DFT sind aufgrund ihrer Vielseitigkeit heute die gebräuchlichsten *first principles*-Methoden in der Computerchemie. Mit der Zahl der DFT-Studien wuchs auch die Kenntnis ihrer speziellen Probleme (z.B. bei der Behandlung von Charge Transfer-Übergängen und van der Waals-Wechselwirkungen). Diese Probleme sind aber immer auch Startpunkt für neue Entwicklungen und so nahmen sich einige Vorträge den Schwächen und möglichen Verbesserungen der Standard-DFT an.

Um die gängigen DFT-Methoden zu verbessern, ist ein Verständnis der Ursachen von “Fehlerquellen” notwendig. **Elfi Kraka** (Göteborg) näherte sich in ihrem Vortrag dem so genannten Selbstwechselwirkungsfehler vieler Dichtefunktionale, indem sie an Beispielen Einzelbeiträge konzeptionell aufschlüsselte. So diskutierte sie inter- und intramolekulare Beiträge auf der Basis lokalisierter Orbitale und studierte Multireferenzfälle am Beispiel von Diradikalen im Rahmen von restricted, unrestricted und broken-symmetry Ansätzen für die Wellenfunktion, wobei ihr das Doppeltzählen von Beiträgen der Elektronenkorrelation ein besonderes Anliegen war. **Andreas Dreuw** (Frankfurt) zeigte die unzulängliche Beschreibung von angeregten Zuständen vom charge-transfer-Typ im Rahmen der Time-Dependent DFT-Methoden am Beispiel von Porphyrinsystemen und präsentierte einen pragmatischen Lösungsansatz zur Behebung des so genannten Elektronentransfer-Selbstwechselwirkungsfehlers. In einem dritten Vortrag von **Lothar Fritsche** (Clausthal-Zellerfeld) kam zusätzlich noch das oft diskutierte “Dispersionsproblem” zur Sprache, mit dem man das Versagen der Standard-Dichtefunktionale bei der Beschreibung von van der Waals-Wechselwirkungen be-

zeichnet. In seiner didaktisch sehr geschickten Präsentation rollte Fritsche das Problem von den Grundlagen der DFT her auf. Die schwachen Wechselwirkungen waren auch das Thema von **Georg Jansen** (Essen), der einen DFT-Ansatz mit der symmetrie-adaptierten Störungstheorie (SAPT) verband, um so die beiden Vorteile der SAPT — qualitatives Verständnis und quantitative Genauigkeit — nutzen zu können.

## Theoretische Spektroskopie

Inzwischen ist die Berechnung von molekularen Strukturen und von Energetiken chemischer Reaktionen längst Routine geworden — selbst für große Moleküle. Darum liegt der Fokus zur Zeit auf der Berechnung aller Arten von molekularen Eigenschaften wie NMR- und EPR-Parametern und moderner Schwingungsspektroskopie, die zur Identifizierung und Charakterisierung von Molekülen herangezogen werden können. In dieser Hinsicht ließ das Vortragsprogramm keine Wünsche offen. Speziell die Berechnung von Eigenschaften für Übergangsmetallverbindungen war Thema dieser Vorträge, da sich hier die größten Herausforderungen stellen (Stichworte: komplizierte Elektronenstrukturen, relativistische Effekte).

**Frank Neese** (Mülheim) machte den Anfang mit Vorträgen zur Spektroskopie von offenschafligen Übergangsmetallkomplexen und stellte sein ORCA-Programm vor, das ein breites Spektrum an quantenchemischen Methoden für die Theoretische Spektroskopie zur Verfügung stellt. In der zweiten Hälfte seines Vortrags beschrieb er im Detail die Spectroscopy-Oriented CI-Methode (SORCI), die auf dem Malrieuschen difference-dedicated CI und einigen weiteren Konzepten beruht. Im Anschluß stellte **Martin Kaupp** (Würzburg) neue Ergebnisse zur Berechnung von NMR- und EPR-Parametern vor. Seine Betonung lag zum einen auf der Berücksichtigung von relativistischen Effekten im Rahmen der Douglas–Kroll–Hess-Methode und zum anderen auf der Verwendung des Görling’schen lokalen exakten Austausch in DFT-Berechnungen dieser Parameter. In einem dritten Vortrag über die Berechnung von chemischen Verschiebungen in der NMR-Spektroskopie wies **Michael Bühl** (Mülheim) auf die Bedeutung von thermischen und Nullpunktkorrekturen hin. In seinen Studien berücksichtigt er diese Korrekturen und Lösungsmittelleffekte im Rahmen eines MD-Protokolls.

Drei weitere Vorträge behandelten moderne Methoden der Theoretischen Schwingungsspektroskopie. **Jens Dreyer** (Berlin) stellte sein Protokoll zur Simulation von kohärenten zweidimensionalen IR-Spektren basierend auf *ab initio*-Berechnungen vor. Er analysierte im Detail die anharmonischen Kopplungen und den linearen wie nicht-linearen zweidimensionalen Response auf verschiedene Essigsäuredimer-Isotopomere. Über Fortschritte und signifikante Effizienzsteigerungen bei der aufwendigen Berechnung von Schwingungsspektren im Rahmen von Schwingungs-CI-Ansätzen konnte **Guntram Rauhut** (Stuttgart) berichten, die es nun erlauben, kleine Moleküle mit genauen Methoden zu studieren. Das Thema von **Peter Bours** (Prag) Vortrag war die Modellierung von Schwingungsspektren in komplexen Systemen. In diesem Zusammenhang stellte er auch seine Arbeiten zur Berechnung von Vibrational-Optical-Activity-Spektren vor, deren Intensitätsberechnung sehr rechenzeitintensiv ist und für die erfolgreich ein Fragmentansatz zum Transfer von atomaren Eigenschaftstensoren auf

größere Systeme gemacht werden kann.

Abbildung 2: Peter Schwerdtfeger bei seinem instruktiven und unterhaltsamen Vortrag zur relativistischen Quantenchemie.



Gerade bei den Vorträgen zur Spektroskopie von Übergangsmetallen war unterschwellig immer das Thema “Relativistik” präsent. Die Organisatoren haben dies vorhergesehen, und daher nahmen sich gleich zwei Vorträge dieses Aspekts an. **Peter Schwerdtfeger** (Auckland) gab eine sehr anschauliche und didaktisch sehr gut aufbereitete Einführung in alle Facetten der relativistischen Quantenchemie und ihrer Methoden, um sich dann einigen seiner Hauptarbeitsgebiete — der Berechnung von Kernquadrupolmomenten, dem Point-Charge-Nuclear-Quadrupole-Moment-Modell, der Paritätsverletzung und der Vorhersage von Eigenschaften von superschweren Elementen — zuzuwenden. In einem weiteren Vortrag zur Relativistik bereitete **Christoph van Wüllen** (Berlin) die Douglas–Kroll–Hess-Methode auf, die schon immer eine der bewährtesten und stringentesten der quasi-relativistischen Verfahren war. Sie konnte aber gerade in den letzten Jahren durch neuere Arbeiten besser verstanden werden. Die neuen analytischen und numerischen Ergebnisse wurden von Christoph van Wüllen detailliert präsentiert und analysiert. In diesem Zusammenhang stellte er sein Programm zur Berechnung von Douglas–Kroll–Hamilton-Operatoren bis zur 6. Ordnung und damit erzeugte hochgenaue Referenzdaten vor.

## Modeling und Simulationen

Zum Studium von komplizierten Systemen sind oft Verfahren notwendig, die über gut etablierte quantenchemische Methoden hinausgehen und ebenfalls in Vorträgen behandelt wur-

den. Angefangen bei Übergangsmetallkomplexen, für die heutzutage immer noch erfolgreich Ansätze aus der Ligandenfeldtheorie verwendet werden können, über Proteinstrukturen, für deren Simulation man traditionelle Kraftfelder verwendet und für die das Faltungsproblem eine große Herausforderung darstellt, war bis hin zu fortgeschrittenen Simulationsmethoden wie der Car–Parrinello-Molekulardynamik ein breites Spektrum vertreten.

**Robert Deeth** (Coventry) gab in seinem Vortrag zunächst eine detaillierte Einführung in die Ligandenfeldtheorie und das Angular-Overlap-Modell und widmete sich dann der Behandlung von Übergangsmetallkomplexen durch ligand-field molecular mechanics, dessen Parametrisierung er im einzelnen erläuterte. **Kevin Naidoos** (Cape Town) Ziel war die Beschreibung der konformativen und reaktiven Dynamik von Kohlenhydraten im Hinblick auf die Entwicklung neuer Arzneimittel. Er präsentierte dazu Ansätze zur Interpretation von Kraftmikroskop-Experimenten und zum Sampling von Potentialflächen mittels einer modifizierten adaptiven Umbrella-Prozedur in Kombination mit der so genannten weighted histogram analysis method. Der Strukturvorhersage von Biomolekülen mit stochastischen Methoden galt die Präsentation von **Wolfgang Wenzel** (Karlsruhe), bei der er eine effiziente Methode zum Überqueren von Barrieren vorstellte. **Gotthard Seifert** (Dresden) entwickelte ein Modell zum Studium der Einlagerung von molekularem Wasserstoff zwischen Graphitschichten — einem potentiellen Speichermedium für diese Energiequelle — mittels *first principles*-Simulationen. Die dabei auftretenden Wechselwirkungen stellen große Herausforderungen dar, die mit Møller–Plesset-Störungstheorie angegangen wurden und dann in ein klassisches Kraftfeld basierend auf Lennard-Jones-Potentialen übertragen wurden. **Rochus Schmid** (Bochum) vervollständigte schließlich das Programm mit seiner Arbeit zur Car–Parrinello-Simulationsmethode, in der er einen voll numerischen Ansatz zur Darstellung der Orbitale und aller zu lösender Gleichungen verwendet. Dieser Ansatz eignet sich besonders, wenn eine massiv-parallele Implementierung zur Lösung dieser Gleichungen möglich ist. Zum Abschluß der Tagung zeigte **Bernd Rode** (Innsbruck) Simulations-Ergebnisse für Ionen in Lösung, die mit QM/MM-MD-Techniken gewonnen wurden, wobei der QM-Teil durch Hartree–Fock oder MP2 beschrieben wurde und für den Molekulardynamik-Teil Born–Oppenheimer-MD verwendet wurde.

## Konzepte

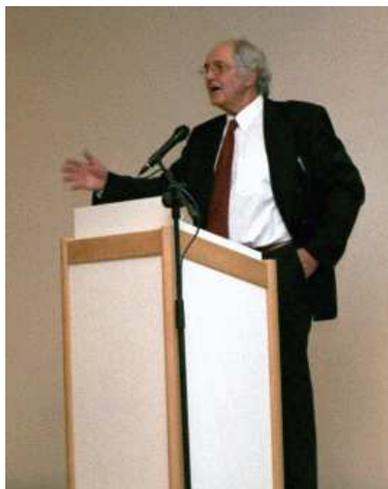
Auf einer Tagung zur Computerchemie darf die Entwicklung chemischer Konzepte nicht fehlen. So referierte **Frank Weinhold** (Madison) über alle Aspekte seiner populären Natural Bond Orbital-Analyse, die er als ein einheitliches Konzept zur Beschreibung verschiedenster Bindungssituationen verstanden wissen will. Im Anschluß stellte **Frank de Proft** (Brüssel) neue Arbeiten zu althergebrachten chemischen Konzepten vor, die im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) ein neues zuhause gefunden haben. Zu diesen Konzepten gehört speziell das HSAB-Konzept, das von Pearson phänomenologisch eingeführt wurde und heute auf DFT-Basis diskutiert werden kann. In beiden Vorträgen wurde auf eine wohl definierte theoretische Grundlage der behandelten Konzepte verwiesen, die in der Diskussion dann ausgiebig hinterfragt und diskutiert wurde.

Elektronenabzählregeln waren das Thema des Vortrags von **Eluvathingal Jemmis** (Hyderabad). Er erläuterte seine mno-Regel als Ordnungsprinzip für Boranpolyeder und Metallaborane. Seine Regel kann auf die Hückel-Regel reduziert werden, wenn man sich auf zweidimensionale Systeme beschränkt, und bietet einen Bezug zu Fullerenen. **Matthias Bickelhaupt** (Amsterdam) zeigte in seiner Präsentation, wie Energiezerlegungsanalysen zur Interpretation von Wechselwirkungen in DNA-Basenpaaren und in der Metallkatalyse verwendet werden können. Das Entstehen von Reaktionsbarrieren deutete er im Rahmen des Activation-Strain-Modells, einem fragmentorientierten Ansatz zur Analyse von Übergangszuständen.

## Philosophie und Geschichte der Chemie

Im Gegensatz zu den STC-Tagungen der vergangenen Jahre wurden heuer Gastvorträge nicht von Experimentatoren gehalten, sondern von Vertretern der “anderen Kultur”. Den Eröffnungsvortrag der Konferenz übernahm der Philosoph **Peter Janich** (Marburg), einer der Vorreiter der Philosophie der Chemie in Deutschland, der über die Begriffe “Theorie” und “Praxis” in der Antike und in den heutigen Naturwissenschaften dozierte.

Abbildung 3: Peter Janich beim Eröffnungsvortrag.



**W.H.E. Schwarz** eröffnete die sich anschließende lebhafte Diskussion der von Janich vorgestellten Thesen mit der provokanten Zusammenfassung “Der Theoretiker ist der, der zuschaut, ob die Banausen im Labor richtig arbeiten.” (Nota Bene: Peter Janich begann seinen Vortrag mit einer ähnlichen Bemerkung und erläuterte dann, daß Banause vom griechischen “banausos” (= Handwerker) abstammt und daß diese Bezeichnung ursprünglich in einem positiven Sinne verstanden wurde).

Ebenso wie Janichs Vortrag wurde die After-Dinner-Speech von **Helge Kragh** (Aarhus) zur geschichtlichen Entwicklung der frühen Quantentheorie mit großem Interesse von den

Tagungsteilnehmern verfolgt. Kragh zeigte, daß die Bohrsche Atomtheorie vor 1926 nicht ausschließlich für Atome diskutiert wurde, sondern daß man sich schon früh Gedanken gemacht hatte, wie diese Theorie zur Beschreibung von Molekülen und speziell zur Behandlung der kovalenten Bindung zu verwenden ist.

Abbildung 4: W. H. Eugen Schwarz im Gespräch mit Helge Kragh.



## Hans G. A. Hellmann-Preis 2004

Wie seit 1999 üblich, wurde auch in diesem Jahr der Hellmann-Preis zur Auszeichnung der wissenschaftlichen Leistung von jungen Theoretischen Chemikern verliehen. Mit dem diesjährigen Hellmann-Preis wurden die Arbeiten von **Christof Hättig** (Karlsruhe) gewürdigt, die zu einer breiteren Anwendbarkeit von hochgenauen Coupled-Cluster-Methoden und speziell zur Berechnung von Anregungsenergien und molekularen Eigenschaften geführt haben.

In der Laudatio heißt es dazu: *“Die Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie verleiht den Hans G. A. Hellmann-Preis an Herrn Priv.-Doz. Dr. Christof Hättig für seine wichtigen Arbeiten zur Coupled-Cluster-Response-Theorie sowie zur genauen Behandlung elektronisch angeregter Zustände großer Moleküle mit dem RI-CC2-Verfahren. Christof Hättig hat zur Coupled-Cluster-Response-Theorie wichtige methodische Beiträge geliefert und damit entscheidend zur Etablierung dieser Methode als gängiges quantenchemisches Rechenverfahren zur Bestimmung nichtlinearer optischer Eigenschaften und elektronischer Anregungsenergien beigetragen.”*

Im sich an die Preisverleihung anschließenden Vortrag arbeitete Hättig dann seine Entwicklungen sehr verständlich auf und demonstrierte eindrucksvoll, was die von ihm vorangetriebenen Methoden zu leisten im Stande sind.

## Weitere Kurzvorträge und Poster

Abgesehen von den oben behandelten Schwerpunktthemen zeigten weitere interessante Kurzvorträge und die 131 Posterpräsentationen die volle Spannweite der Theoretischen Chemie im allgemeinen und der Computerchemie im besonderen. **Robert Berger** (Berlin) stellte neue Ergebnisse seiner quantenchemischen Studien zur asymmetrischen Induktion mit möglichen Konsequenzen für die Entstehung von Homochiralität auf der Erde vor. Er diskutierte die autokatalytische Realisierung der asymmetrischen Synthese bei der Sato-Reaktion im Rahmen von kinetischen Modellen für den Reaktionsmechanismus. Ferner waren das high-throughput screening zum Studium metallkatalysierter Reaktionen (**Peter Deglmann**, Heidelberg) und das massiv parallele Grid Computing (**Wibke Sudholt**, Zürich) Themen von Kurzvorträgen, genauso wie die Entwicklung von lokalen Coupled-Cluster-Korrelationsmethoden für die Berechnung von Grundzustand und angeregten Zuständen von Festkörpern (**Uwe Birkenheuer**, Dresden), die automatische Erzeugung von Coupled-Cluster-Programmen zur Weiterentwicklung lokaler Methoden (**Alexander Auer**, Chemnitz), und das Studium der Gitterparameter und kohäsiven Eigenschaften von kristallinem Quecksilber mittels Inkrementmethoden (**Beate Paulus**, Dresden). **Dage Sundholm** (Helsinki) stellte eine neue voll numerische Methode zur Berechnung von elektrostatischen Potentialen vor, die sich (aufgrund der formalen Gleichheit der zugrunde liegenden Wechselwirkung) auf Gravitationspotentiale übertragen läßt.

B. Kirchner, M. Reiher, Bonn

### 3 Bericht des Vorstands



Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie beim  
40. Symposium für Theoretische Chemie in Suhl

Mittwoch, 22. September 2004.

Beginn: 18.10 Uhr.

Tagesordnung:

1. Genehmigung der Tagesordnung
2. Protokoll zur Mitgliederversammlung 2003
3. Bericht des Vorsitzenden
4. Kassenbericht und Wahl des Kassenprüfers
5. Symposien 2005 und 2006
6. Kandidatenbenennung für den Vorstand 2005-2007
7. Verschiedenes

Protokoll:

TOP 1

Die vorgeschlagene Tagesordnung wird ohne Änderung akzeptiert.

TOP 2

Das Protokoll zur Mitgliederversammlung 2003 war im Info TC (November 2003) abgedruckt.  
Es wird ohne Änderung genehmigt.

TOP 3

Zu Beginn seines Berichts würdigt der Vorsitzende die Verdienste von Bernd Hess, der im Juli 2004 im Alter von 50 Jahren verstorben ist. Nach einer Schweigeminute wird darauf hinge-

wiesen, dass am 26. Oktober um 16:15 Uhr an der Universität Bonn ein Gedenk-Kolloquium mit drei wissenschaftlichen Vorträgen stattfinden wird (P. Pyykkö, M. Havenith-Newen, R. Saalfrank).

Danach berichtet der Vorsitzende über die laufende Arbeit der AGTC. Er dankt allen Mitgliedern, die sich für die Belange der AGTC engagieren. Das Info TC ist bis Ende 2003 von P. Botschwina und danach von B. Hess herausgegeben worden, es wird jetzt von M. Reiher weitergeführt (Beiträge sind willkommen). Daneben ist die AGTC auch auf eigenen Webseiten präsent ([www.theochem.de](http://www.theochem.de)). Beiträge für die aktuellen Notizen in den "Blauen Blättern" werden weiterhin durch D. Marx (Dynamik) und G. Frenking (Elektronenstruktur) koordiniert, die beide für Vorschläge dankbar sind. Für die Jahresrückblicke in den "Blauen Blättern" haben sich in diesem Jahr M. Holthausen, D. Luckhaus und G. Stock als Autoren zur Verfügung gestellt. In DFG-Angelegenheiten stehen die gewählten Fachkollegiaten aus dem Kreis der AGTC als mögliche Ansprechpartner bereit (G. Frenking, J. Manz, J. Sauer, P. Saalfrank, W. Thiel).

Die Zahl der Mitglieder ist auf 196 gestiegen. Der Vorsitzende ruft dazu auf, weiterhin aktiv um neue Mitglieder zu werben (Beitrittsformulare siehe [www.theochem.de](http://www.theochem.de)) und die Interessen der Theoretischen Chemie jeweils vor Ort engagiert zu vertreten. Er weist auf die erfreuliche Tatsache hin, dass im vergangenen Jahr mehrere Professuren in unserem Fach wiederbesetzt oder ausgeschrieben worden sind, darunter auch neu geschaffene Stellen.

Abschließend werden die neuen Bachelor/Master-Studiengänge diskutiert, die derzeit bundesweit eingeführt werden. Nach einer einleitenden Übersicht durch W. Domcke berichten mehrere Kollegen über den Stand der Entwicklung an den einzelnen Hochschulen. Dabei wird deutlich, dass Umfang und Gewicht der Lehrveranstaltungen in Theoretischer Chemie an verschiedenen Hochschulen recht unterschiedlich sind. Es wird beschlossen, die entsprechenden Informationen über die AGTC-Webseiten zugänglich zu machen. Die verantwortlichen Hochschullehrer sind aufgerufen, die Links zu den jeweiligen Bachelor/Master-Studienordnungen an den Vorsitzenden zu senden ([thiel@mpi-muelheim.mpg.de](mailto:thiel@mpi-muelheim.mpg.de)) und zusätzlich in Stichworten die wesentlichen Merkmale hinsichtlich unseres Faches anzugeben (Zahl und Umfang der Lehrveranstaltungen in Theoretischer Chemie, credit points, obligatorisch oder im Wahlpflichtbereich). Kritisiert werden in der Diskussion die Empfehlungen der GDCh, welche die Theoretische Chemie nicht als Pflichtfach im Bachelor-Studiengang nennen, obwohl dies vom AGTC-Vorstand in seiner Stellungnahme vom Oktober 2003 nachdrücklich gefordert worden ist. Der anwesende Geschäftsführer der GDCh, W. Koch, weist darauf hin, dass die Empfehlungen zwar nicht mehr geändert werden können, aber andererseits so flexibel sind, dass die Theoretische Chemie durch entsprechende Entscheidungen vor Ort das ihr gebührende Gewicht erhalten könne.

TOP 4

F. Mark (Mülheim) hat unsere bei der Deutschen Bunsengesellschaft (DBG) geführten Konten geprüft. Da er nicht am Symposium teilnehmen kann, hat er einen ausführlichen schriftlichen Bericht vorgelegt, den der Vorsitzende erläutert. Ende 2002 beträgt der Kassenstand

beim AGTC-Konto 8862.73 Euro und beim Hellmann-Fonds 23007.77 Euro. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die DBG die AGTC-Beiträge für Doppelmitglieder jeweils erst im folgenden Kalenderjahr überweisen kann. Herr Mark hat der DBG eine ordnungsgemäße Kassenführung bescheinigt und keinen Grund für Beanstandungen gefunden, mit dem Vorbehalt, dass die Zinsen 2003 für den Hellmann-Fonds noch gutzuschreiben sind. Die Mitgliederversammlung billigt den Kassenbericht mit diesem Vorbehalt und wählt F. Mark erneut zum Kassenprüfer.

Der Vorsitzende berichtet ergänzend, dass im Jahr 2003 erfreulicherweise Spenden von mehr als 5000 Euro für den Hellmann-Fonds eingegangen sind. Er weist darauf hin, dass weitere Spenden nötig sind, um den Hellmann-Fonds auf eine ähnliche Höhe zu bringen wie andere Preis-Fonds innerhalb der DBG. Spenden sind in jeder Höhe willkommen, eine steuerliche Spendenbescheinigung wird durch die DBG ausgestellt.

#### TOP 5

B. M. Rode berichtet über den Stand der Vorbereitungen zum Symposium 2005, das vom 4.-8. September 2005 in Innsbruck im dortigen Kongresszentrum stattfinden wird. Das Vortragsprogramm ist auf drei Tage konzentriert (5.-7. September, Anreise am 4. September, Abreise am 8. September). Als Schwerpunktthema ist "Simulations in Chemistry" vorgesehen.

Zur Organisation des Symposiums 2006 in Deutschland hat sich J. Sauer (Berlin) bereit erklärt. Die Mitgliederversammlung begrüßt dies einhellig und überträgt ihm die Ausrichtung des Symposiums.

#### TOP 6

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

Folgende Kandidaten werden benannt: M. Dolg (Köln), W. Domcke (München), B. Engels (Würzburg), G. Frenking (Marburg), J. Gauss (Mainz), M. Kaupp (Würzburg), U. Manthe (Bielefeld), G. Seifert (Dresden), R. de Vivie-Riedle (München), 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 2005 aufnehmen kann.

#### TOP 7

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

a) B. Engels: Arbeitstagung für Theoretische Chemie (organisiert von A. Sax) zum Thema "Concepts of Chemical Bonding" in Mariapfarr, 15.-18. Februar 2005.

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

b) C. Marian: REHE Conference 2005, Relativistic Effects in Heavy Elements, zum Thema

“Computational Approaches to Spin-Magnetic Properties of Molecules” in Mülheim, 6.-10. April 2005. <http://www.theochem.uni-duesseldorf.de/REHE2005>

c) W. Klopper: International Karlsruhe Nanoscience Workshop zum Thema “Computational Tools for Molecules, Clusters, and Nanostructures” am Forschungszentrum Karlsruhe, 23.-26. Januar 2005. <http://www.ipc.uni-karlsruhe.de/tch/iknw>

Ende der Mitgliederversammlung: 18.45 Uhr

gez. W. Thiel

## 4 Nachrichten

### 4.1 Tagungsvorschau

(siehe auch: <http://www.tu-berlin.de/~insi/theofach/tagungen.html> (Prof. Dr. K. Helfrich) und <http://www.theochem.de/agtc.tagvors.html>)

#### 4.1.1 November/Dezember 2004

- 14.–16.11.2004, Boppard:  
18. CIC-Workshop (Jahrestagung der GDCh-Fachgruppe Chemie–Information–Computer)  
Thema: Neue Entwicklungen in der Chemoinformatik  
<http://www2.chemie.uni-erlangen.de/external/cic/tagungen/workshop04/index.html>
- 13.–17.12.2004, Helsinki, Finnland:  
Winter School in Theoretical Chemistry 2004  
Thema: A Frontier of Chemistry: New Species  
<http://www.chem.helsinki.fi/Info/WinterSchool/ws2004.html>

#### 4.1.2 Januar–Dezember 2005

- 16.–21.01.2005, Capetown, South Africa:  
7th Congress of the World Association of Theoretically Oriented Chemists  
<http://webhost.sun.ac.za/watoc05>
- 23.–26.01.2005, Karlsruhe:  
Computational Tools for Molecules, Clusters and Nanostructures  
[www.ipc.uni-karlsruhe.de/tch/iknw](http://www.ipc.uni-karlsruhe.de/tch/iknw)
- 15.–18.02.2005, Mariapfarr, Österreich:  
Arbeitstagung für Theoretische Chemie  
Thema: Concepts of Chemical Bonding  
[www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr/index.html](http://www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr/index.html)
- 04.–09.03.2005, Berlin:  
Physik seit Albert Einstein — Die Jahrestagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) im World Year of Physics 2005 (Einstein-Jahr 2005)  
[www.dpg-physik.de/kalender/tagung.htm?/kalendertag/tag2005co.htm](http://www.dpg-physik.de/kalender/tagung.htm?/kalendertag/tag2005co.htm)
- 06.–09.03.2005, München:  
Chemiedozenten-Tagung  
[www.gdch.de/vas/tagungen/tg2005.htm](http://www.gdch.de/vas/tagungen/tg2005.htm)

- 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](http://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/>
- 16.–21.07.2005, Los Angeles, USA:  
American Conference on Theoretical Chemistry (chair: Emily A. Carter)  
<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>
- 11.-14.09.2005, Düsseldorf:  
GDCh-Jahrestagung  
<http://www.gdch.de/vas/tagungen/tagungen2005/5560.htm>

## 4.2 Klatsch und Tratsch

- **Prof. Dr. Jürg Hutter** wurde zum ausserordentlichen Professor für Physikalische Chemie an der Mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Zürich ernannt.
- **Prof. Dr. Andreas Görling** hat zum 1.10.2004 die Nachfolge von Prof. Dr. Bernd Hess in Erlangen angetreten.
- **HD Dr. Martin Schütz** hat zum 1.10.2004 seine Arbeit in Regensburg auf einer C3-Professur aufgenommen.
- **Dr. Thorsten Klüner** hat einen Ruf auf eine W2-Professur in Oldenburg angenommen und diese Stelle zum 1.10.2004 angetreten.
- **Dr. Filipp Furche** erhielt den Heinz-Mayer-Leibnitz-Preis der DFG für Nachwuchswissenschaftler.
- Die Arbeiten zur Coupled-Cluster-Theorie von **PD Dr. Christoph Hättig** wurden mit dem Hellmann-Preis auf dem STC 2004 in Suhl ausgezeichnet.

## 5 Verschiedenes

### 5.1 Theoretische Chemie an der Martin-Luther-Universität Halle — eLearning Theoretische Chemie

Am Fachbereich CHEMIE der Martin-Luther-Universität in Halle wird seit einigen Jahren erprobt, wie durch multimediale Module die traditionelle Lehre im Fach Theoretische Chemie nachhaltig ergänzt werden kann; dazu werden im Rahmen des BMBF-Projekts “Vernetztes Studium Chemie” (1999-2004) von 16 Arbeitsgruppen an deutschen Universitäten zu allen Fächern des 6-semesterigen B.Sc.-Studiums Lernmodule nach einheitlichen Standards entwickelt und auf einem Web-Server des FIZ Chemie in Berlin zusammengestellt. Eine Lerneinheit (VLU - valuable learning unit) umfasst einen zusammenhängenden Inhalt der in etwa 10 HTML-Seiten zusammengestellt ist und vom Studierenden in etwa 30 bis 45 Minuten im Selbststudium absolviert werden kann. Ein Lern-Kurs stellt eine chronologische Abfolge von Lerneinheiten z.B. für ein Semester dar und wird als Trajektorie bezeichnet. Auf der Startseite jeder Lerneinheit werden ihre spezifischen Inhalte, die nötigen Vorkenntnisse und Empfehlungen für sich anschließende Lerneinheiten angegeben. Aus diesen Daten (Meta-Daten) sollten vielfältige Lern-Trajektorien (auch unter Einbeziehung von Vorkenntnissen beispielsweise der Mathematik, o.a. Fächer) nach dem Prinzip von JITT (Just-in-Time Teaching) den Bedürfnissen der Studierenden angepasst werden. Multimediale Elemente in den Lerneinheiten tragen wesentlich zur besseren Motivierung und höherer Nachhaltigkeit des Lernprozesses bei und stellen einen erheblichen Mehrwert gegenüber Printmedien dar (Movies, Flash-Animationen, Java-Applets, 3D-Visualisierungen von Molekülstrukturen und Orbitalen und Interfaces für online-Berechnungen) nach dem bewährten Prinzip von “Learning by Doing”.

Medientyp	Medien-Format	Player
Movie	*.avi	QuickTime
3D-Struktur	*.pdb, *.xyz u.a.	CHIME (MDL)
Molekülspektrum (IR, NMR, u.a.)	*.jdx	CHIME (MDL)
Orbitale, VRML I- oder II-Szenario	*.vrml	Cortona
Flash	*.swf	FlashPlayer
Math.-Gleichung, MathML	*.mml	MathPlayer
Java-Applet	*.jar	JRE, JVM

Eine nutzerfreundliche Navigation, die auch einen individuellen Lernweg des Studierenden durch die Lerneinheiten ermöglicht, wird durch die Lernumgebung realisiert. Auf der Nutzer-Seite dieser Client-Server-Architektur benötigt der Studierende lediglich einen PC mit Internetzugang und einen Browser, der die Plug-ins für die multimedialen Elemente installiert hat. Damit kann er dann unabhängig von Ort und Zeit die Lerneinheiten (und die Verzweigungen ggf. zum Auffrischen von Vorkenntnissen) nach seinen Bedürfnissen und Interessen nutzen (Learning on Demand). Zum Abschluss einer Lerneinheit werden einige

Kontrollfragen zum Selbst-Test angeboten und Literaturhinweise gegeben; es ist beabsichtigt später eine umfangreichere Lernerfolgskontrolle zu integrieren. Für jede Lernsituation bietet die Lernumgebung einige Werkzeuge an; realisiert sind z.B. eine Volltextsuche, ein Glossar (zu wichtigen Begriffen), eine Sammlung von Biografien und die interaktive Visualisierung von 3D-Strukturen und Spektren mittels CHIME (Plugin von MDL). Um ein einheitliches Layout aller Module zu gewährleisten, sind sämtliche Inhalte in XML (eXtended Markup Language) codiert auf dem Server abgelegt, wo dann nach Requests durch den Client die HTML-Dokumente für dessen Browser generiert werden. In absehbarer Zeit werden auch ausgewählte Lerneinheiten als off-line Versionen angeboten. Um die erstellten Lernmodule im studentischen Lehrbetrieb am hiesigen Fachbereich zu erproben wurde eine Lernumgebung HALIUS (s.a. unter <http://spin.chemie.uni-halle.de>) erstellt, die insbesondere den Erfordernissen der Theoretischen Chemie näher kommt, indem sie z. B. Teamwork der Studierenden bei online Berechnungen mit dem semi-empirischen MOPAC und ab initio-Berechnungen mit GAUSSIAN auf der Basis von WebMO ermöglicht; hierdurch ergibt sich ein fließender Übergang zu Computerchemie-Experimenten und eine spätere Nutzung in Forschungsarbeiten. Eine eingebundene SQL-Datenbank mit experimentellen 3D-Strukturen, Eigenschaften und Molekülspektren erlaubt gezielte Suchen und "Weiterverwendung" der recherchierten Daten.

Lernkomplexe für das Basis-Fach "Theoretischen Chemie" (5 CreditPoints) im B.Sc. mit Angabe der Anzahl der enthaltenen VLUs:

(eine ausführliche Liste steht unter den weiterführenden LINKs)

- Theoretische Chemie (2)
- Quantenmechanik (6)
- H-Atom (9)
- Mehr-Elektronen-Atom (4)
- Chemische Bindung (5)
- Hückel-MO (6)
- Chemische Reaktivität (8)
- MO-Methoden (8)
- Symmetrie (8)
- Quantentheorie und Spektroskopie (5)
- Molecular Modeling (4)

Zur Zeit wird die Theoretische Chemie im B.Sc.-Studiengang an der MLU in Halle mit 6 Semester-Wochen-Stunden Vorlesung (TC I und TC II) absolviert. Computerübungen sind in den nicht-obligatorischen Lehrveranstaltungen "TC III" und "Molecular Modeling" im 7. Semester enthalten. Alle Materialien des BMBF-Projekts "Vernetzten Studiums CHEMIE" werden über die GDCh allen deutschen Universitäten kostenfrei zur Verfügung stehen; ein Blick auf die Gesamtheit der Module ist über den unteren Link bereits möglich. Auch für anstehende Akkreditierungen der Studiengänge ist es vorteilhaft online-verfügbare Studienmaterialien anzubieten, so dass eine Abstimmung zwischen den Inhalten der Fächer transparent für Studierende wie auch für die beteiligten Lehrer erfolgen kann.

### **Weiterführende Links:**

AG Theoretische Chemie an der Univ. Halle

<http://theoretische.chemie.uni-halle.de>

Informationen zu eLearning und den verfügbaren Kursen in Halle

<http://spin.chemie.uni-halle.de>

Die Liste der VLUs Theoretische Chemie

[http://theoretische.chemie.uni-halle.de/tc\\_vlus.html](http://theoretische.chemie.uni-halle.de/tc_vlus.html)

BMBF-Projekt "Vernetztes Studium CHEMIE"

<http://vs-c.de/vsengine/index.html>

### **Ihre Mitwirkung:**

Ihre Erfahrungen in unserem Fach und die kritische Sicht werden uns helfen, eLearning in der Theoretischen Chemie auch dort einzusetzen, wo es sinnvoll ist; dabei sind es wohl meist die Studierenden, die sich digitale Medien, multimediale Darstellungen und interaktive Module für ihr Studium wünschen. Die traditionelle Lehre und das Lernen in der Infrastruktur einer Universität werden unverzichtbar sein, um eine hohe Qualität in der Lehre anzustreben und erfolgreiche Absolventen hervorzubringen. Wir möchten Sie aufrufen, uns Ihre Erfahrungen, Übungsmaterialien und Computer-Anwendungen mitzuteilen, damit wir auf der Web-Seite eine sich entwickelnde Diskussion und einen Fundus von guten Beispielen anbieten können (ggf. auch handschriftlich, als WORD-, PDF- oder PPT-Dokument einreichen); hierzu gehören auch Software-Entwicklungen, die hierzulande gemacht wurden; ich denke z.B. an Turbomole (R. Ahlrichs) u.a. die zwar sehr effizient in der Forschung eingesetzt werden, aber in der Ausbildung werden oft andere "nutzer-freundliche" Produkte von den Studenten genutzt. Bitte bedenken Sie, dass das Lehren doch unsere wichtigste Aufgabe an einer Universität ist.

## Das Team der AG Theoretische Chemie:

Dr. R. Spiske: System-, Netzwerk, Web-, XML- und Datenbank-Programmierung

Dr. T. Moenke-Wedler: Chem. Bindung, Symmetrie, Reaktivität (Flash-Programmierung)

Dr. J. Full: Quantenmechanik, Spektroskopie

DC M. Fedorovsky: Java-Programmierung, Java Webstart-Technologie

Dipl.-Inf. G. Müller: Java-Programmierung (2D/3D-Moleküleditor, XML-Editor)

Leiter: Prof. Dr. H. Bögel (eMail: boegel@chemie.uni-halle.de)

Halle, den 22. Oktober 2004

H. Bögel

## 5.2 Informationen zum B. Sc.-Chemie-Studium

Im Rahmen der Harmonisierung der Hochschulbildung in Europa mit den gestuften B.Sc.- und M.Sc.- Studiengänge anstelle der bisherigen Diplom-Studiengänge werden Credit-Points (CP) zur Anerkennung von Studienleistungen vergeben. Ein Vorschlag (Prof. R. Salzer, Bologna-Seminar 2004 in Dresden) basiert auf 180 CP gleichmäßig verteilt auf die sechs Semester:

### Stundenverteilung VS-C Eurobachelor

	5	10	15	20	25	30
1. Sem.	Allg. Chem.	Anorg. Chem.	Org. Chem.	Phys. Chem.	Mathe	Physik
2. Sem.	Anorg. Chem.	Anorg. Chem.	Org. Chem.	Phys. Chem.	Mathe	Physik
3. Sem.	Org. Chem.	Org. Chem.	Analyt. Chem.	Phys. Chem.	Angew. Informatik	Wahlfach
4. Sem.	Analyt. Chem.	Analyt. Chem.	Makromol. Chem.	Theoret. Chem.	Molek.- biologie	Wahlfach
5. Sem.	Biochem.	Biochem.	Techn. Chem.	Angew. Informatik	Vertief- fach	Vertief- fach
6. Sem.	Schwerp.- fach	Schwerp.- fach	Wahlfach	Thesis	Thesis	Thesis

Darin ist die Theoretische Chemie als eigenständiges Fach mit 5 CPs aufgeführt und sollte auch an den 10 CPs für "Angewandte Informatik" (mit MO-Berechnungen und Molecular Modeling) beteiligt sein. Blöcke zu 5 CPs sind die Grundeinheit für die Fächer, die mit einer

“Prüfung” abgeschlossen werden. Nach diesem Schema könnte ein Student die Theoretische Chemie neben den obligatorischen 5 CP (Basis) noch zusätzlich 15 CPs als Wahlfach, 10 CPs als Schwerpunktfach, 10 CPs in der Vertiefung und dann ggf. auch die Thesis in Theoretischer Chemie anfertigen; wo bliebe da eine etwa vergleichbare Ausbildung beim Übergang zum M.Sc.-Studium (in letzterem hingegen könnte eine derartige Spezialisierung angeraten sein). Die Relationen von Zeitstunden in Vorlesung, Seminar und Praktikum werden durch sog. Workload-Faktoren erreicht (z.B. Vorlesung : Seminar : Praktikum = 3 : 2 : 1); dabei geht man in Deutschland davon aus, dass der Studierende etwa 50 Stunden pro Woche mit “Pflichtaufgaben” beschäftigt ist. Das Eckwertepapier (s.u.) rechnet für das ECTS mit 900 Stunden je Semester; also 30 Stunden “Pflichtaufgaben” je CP. Jeder Student muß in den Basis-Fächern 130 CPs erwerben (vgl. folgende Tabelle) und kann in Wahlfächern weitere 35 CPs belegen, so dass mit der Thesis (15 CPs) das 6-semstrige Studium 180 CPs umfasst. An obigem Schema gibt es mehrfache Kritik:

- Kernfächer zu gering gewichtet
- zu vielfältige Fächer selbst wenn ein Fachbereich die Wahlmöglichkeiten einschränkt
- das B.Sc.-Studium sollte ein stärker einheitliches grundlegendes Studium sein, das zu vergleichbaren Abschlüssen führt einen Wechsel zu anderen Hochschulen ermöglicht und das aufbauend zum M.Sc. und dann zum PhD weiterführen kann.

Fach	Basis-	Wahlfächer		
	fächer	Vertiefg.	Schwerpkt.	Zusatz
	CP	CP	CP	CP
Allg. Chem.	5			
Anorg. Chem.	15	10	10	15
Org. Chem.	20	10	10	15
Phys. Chem.	15	10	10	15
Analyt. Chem.	15	10	10	15
Makromol. Chem.	5	10	10	15
Techn. Chem.	5	10	10	15
Theor. Chem.	5	10	10	15
Chemoinformatik	10	10	10	15
Biochem./Molbiol.	15	10	10	15
Physik	10			15
Mathe	10			15
<b>Summe</b>	<b>130</b>	<b>90</b>	<b>90</b>	<b>165</b>

Diese unvollständige Übersichten sollten Sie einstimmen in die anstehende Problematik der Einführung von B.Sc.-/ M.Sc.-Studiengängen an deutschen Universitäten.

Weiterführende Links:

Eckwertepapier der MLU vom Juli 2004

[http://www.prorektoratsl.uni-halle.de/bachelor\\_\\_master/](http://www.prorektoratsl.uni-halle.de/bachelor__master/)

Halle, den 22. Oktober 2004

H. Bögel

## 5.3 Aufruf in Sachen Bachelor/Master

Auf dem letzten TC-Symposium wurde versucht einen Überblick über die neuen Bachelor/Master-Studiengänge zu gewinnen (vgl. Bericht des Vorsitzenden der AGTC in diesem Info). Es wurde in Suhl beschlossen, Informationen über Studiengänge, die an einigen Universitäten bereits akkreditiert sind, auf den AGTC-Webseiten zugänglich zu machen. Da sich der Rücklauf zur Zeit noch in Grenzen hält, wird ein detaillierter Bericht über die Einbindung der Theoretischen Chemie in verschiedene bereits akkreditierte Studiengänge erst in der nächsten Ausgabe des Infos im April 2005 erscheinen können. In diesem Info findet sich aber bereits eine Darstellung der BA/MA-Situation im voranstehenden Bericht von H. Bögel.

An der Einrichtung von Bachelor/Master-Studiengängen beteiligte Hochschullehrer sind aufgerufen, die Links zu den jeweiligen Bachelor/Master-Studienordnungen an den Vorsitzenden zu senden (thiel@mpi-muelheim.mpg.de) und zusätzlich in Stichworten die wesentlichen Merkmale hinsichtlich der Theoretischen Chemie zu beschreiben. Diese Bereitstellung von Informationen ist besonders wichtig, da die Empfehlungen der GDCh die Theoretische Chemie nicht als Pflichtfach im Bachelor-Studiengang nennen, obwohl dies vom Vorstand der AGTC nachdrücklich gefordert worden ist.

M. Reiher, Bonn

## 6 Arbeitsgruppen stellen sich vor

### 6.1 Theoretische Chemie an der TU Berlin

Prof. Christoph van Wüllen

Arbeitsgruppe "Quantenchemie und Computerchemie", Institut für Chemie Sekr. C3, Technische Universität Berlin, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin

Im Januar 2000 wurde ich an die Technische Universität Berlin auf eine Professur für "Quantenchemie und Computerchemie" berufen, die ich im Spätsommer des Jahres (als Nachfolger von Prof. Wolfram Koch) antrat. Zur personellen Ausstattung der Arbeitsgruppe gehören ferner eine technische Angestellte sowie eine bis zwei Doktorandenstellen (Teilzeit).

Im Jahr 2000 bestand die Computer-Ausstattung aus einigen IBM-AIX-Workstations, die allesamt schon einige Jahre auf dem Buckel hatten. Zum Ausbau der Rechenkapazität wurden LINUX-PC beschafft, vor allem wegen ihres sehr attraktiven Preis-Leistungs-Verhältnisses. Da sich der Aufwand für die Pflege der AIX-Maschinen dann nicht mehr lohnte, wurden sie alsbald ausgemustert. Zur Zeit besteht unser LINUX-Cluster aus 40 PCs mit je 1-2 GByte Hauptspeicher. Damit sind wir fast an der Grenze der Kühlkapazität unseres Maschinenraums von derzeit knapp 10 KW angekommen. Rechenaufträge für den LINUX-Cluster werden über ein Warteschlangensystem (DQS) abgesetzt. Zu den Rechnern des LINUX-

Clusters kommen noch die Arbeitsplatzrechner der Mitarbeiter/innen, die aber allenfalls für Testrechnungen eingesetzt werden. Hardware und systemnahe Software der Rechner werden von unserer technischen Angestellten betreut.

Bislang ist die Arbeitsgruppe eher klein: in den ersten drei Jahren bestand sie aus einem Doktoranden, einer Doktorandin und 1-2 ausländischen Postdoktoranden. Nachdem zwei frisch promovierte Mitarbeiter die Gruppe verlassen haben, besteht unser Team zur Zeit neben mir aus 2 Post-Doktoranden, einer Doktorandin und einer Diplomandin. Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit folgenden drei Forschungsthemen: (a) Implementierung zwei-komponentiger quasi-relativistischer Rechenverfahren, (b) Quantenchemische Modellierung Übergangsmetall-katalysierter Michael-Reaktionen und (c) Struktur und Reaktivität kleiner Vanadiumoxid-Cluster. Projekt (a) schließt an Vorarbeiten aus meiner Bochumer Zeit an. Ziel ist es, den Einfluss der (relativistischen) Spin-Bahn-Wechselwirkung auf die Chemie sehr schwerer Elemente im Rahmen von Einkonfigurations-Methoden (wie Hartree-Fock oder Dichtefunktionalverfahren) berücksichtigen zu können. In zweikomponentigen Rechenmethoden sind die Orbitale erstens zweikomponentig (also Mischungen von  $\alpha$ - und  $\beta$ -Spin-Orbitalen) und zweitens notwendigerweise komplex, so dass große Teile des SCF-Programmes neu geschrieben werden müssen. Diese Methoden haben wir in unserer Kopie des TURBOMOLE-Programms für drei verschiedene quasirelativistische Näherungen implementiert, und zwar für die ZORA-Näherung, das Douglas-Kroll-Heß-Verfahren (bis sechster Ordnung) und für zweikomponentige (also spin-abhängige) Pseudopotentiale (ECP). Geometriegradienten sind allerdings bislang nur im Rahmen der ZORA-Näherung implementiert worden, die Erweiterung auf zweikomponentige Pseudopotentiale ist geplant.

Projekt (b) ist eine längerfristige Kooperation mit Prof. Jens Christoffers (früher TU Berlin, jetzt Universität Stuttgart), einem präparativ arbeitendem Organiker. Gemeinsam versuchen wir, den Mechanismus einer basenfreien Michael-Addition aufzuklären, die durch Übergangsmetalle wie Fe(III) und Cu(II) katalysiert wird. Auf der Grundlage unserer Rechnungen wurden neue Experimente durchgeführt, woraus nicht nur ein tieferes Verständnis des Reaktionsmechanismus resultierte, sondern auch Verbesserungen in der experimentellen Reaktionsführung. Wichtig für dieses Projekt ist, dass sich Theorie und Experiment wechselseitig anstoßen: neben Fragen, die die Theorie am besten beantworten kann, gibt es immer auch solche, bei denen ein einfaches Experiment eine klare Antwort liefert. Projekt (c) schließlich ist unser Beitrag zu dem Berliner Sonderforschungsbereich "Übergangsmetalloxid-Aggregate". Das Interesse an der Struktur und Reaktivität kleiner Vanadiumoxid-Cluster rührt aus der Bedeutung von Vanadiumoxiden in der heterogenen Katalyse selektiver Oxidationen. Fast alle theoretischen Arbeiten auf diesem Gebiet verwenden Dichtefunktionalmethoden, die für diese Art von Anwendung aber nicht ausreichend validiert worden sind. Da es nur sehr wenige genaue experimentelle Daten gibt, untersuchen wir kleine Systeme mit genauen wellenfunktions-basierten ab initio Verfahren und liefern damit Referenzdaten. Wir starten mit CASSCF-Wellenfunktionen und berücksichtigen die kurzreichweitige (dynamische) Elektronenkorrelation dann mit Methoden vom Multireferenz-CI-Typ, wobei wir die (dynamische!) Korrelationsenergie zum Basissatz-Grenzwert extrapolieren.

Die Quantenchemie ist an der TU Berlin (leider) keine Pflichtveranstaltung für Chemiestu-

dentem. Quantenchemie-Vorlesungen werden im Rahmen der Vertiefungsausbildung sowie im Wahlpflichtbereich "Theoretische Chemie" belegt. Daneben besteht die Möglichkeit, im Rahmen des Fortgeschrittenen-Praktikums in Organischer Chemie (5./6. Semester) an Stelle einiger (weniger) präparativer "Stufen" unter der Anleitung meiner Mitarbeiter/innen quantenchemische Rechnungen durchzuführen. Diese Gelegenheit wird von vielen Studierenden wahrgenommen und ist für sie die erste Begegnung mit der Quantenchemie.

Neben einer zweisemestrigen Quantenchemie-Vorlesung, die jedes Jahr stattfindet, biete ich noch Spezialvorlesungen an ("Moleküle in elektrischen und magnetischen Feldern", in Vorbereitung: "Relativistische Quantenchemie"), die jedoch in der Vergangenheit nur einen recht kleinen Kreis interessierter Studenten angesprochen haben. An der TU Berlin gibt es neben der Professur für "Quantenchemie" noch eine weitere für "Theoretische Chemie" (Prof. Martin Schoen), von der Grundvorlesungen in Theoretischer Chemie (Einführung in die Quantenchemie, Statistische Physik) angeboten werden. Es ist mir wichtig, auch Vorlesungen zu halten, die von allen Studenten gehört werden müssen. Daher beteilige ich mich an den Grundstudiumsvorlesungen in Organischer Chemie und Vorlesungen über spektroskopische Methoden zur Strukturaufklärung.

Die Arbeitsgruppe Quantenchemie ist im dritten Stock des "alten Chemiegebäudes" untergebracht. Ende des 19. Jahrhunderts erbaut, ist es (baulich) eines der ältesten Chemie-Institute in Deutschland (Denkmalschutz!) und wurde gerade aufwendig renoviert. An der zentralen West-Ost-Achse Berlins liegt es "mitten im Leben", so führen die LoveParade und der Berliner Marathon direkt am Gebäude vorbei. Mit nur 10 Minuten (Fußweg) Entfernung zum Bahnhof Zoo und 20 Minuten (Bus oder Taxi) zum Flughafen Tegel kann man uns von überall her gut erreichen, also schauen Sie mal vorbei!

Chr. van Wüllen, Berlin

## 6.2 Theoretische Chemie an der Universität Karlsruhe (TH)

Nachdem Prof. Dr. Werner Kutzelnigg von 1970 bis 1973 die Theoretische Chemie in Karlsruhe in Forschung und Lehre vertreten hatte, wurde 1975 (Prof. Kutzelnigg war inzwischen dem Ruf nach Bochum gefolgt) der Lehrstuhl für Theoretische Chemie gegründet, dem seitdem Reinhart Ahlrichs vorsteht. Außerdem wurde im Rahmen des DFG-Forschungszentrums für Funktionelle Nanostrukturen (CFN), im Sinne der vorgezogenen Nachfolge von Prof. Ahlrichs, ein neuer Lehrstuhl für Theoretische Chemie ins Leben gerufen, der seit Oktober 2002 von Wim Klopper besetzt wird. Der Lehrstuhl ist — bzw. die Lehrstühle sind — dem Institut für Physikalische Chemie (früher unter dem Namen Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie bekannt) zugeordnet. Dieses Institut ist eines von neun Instituten innerhalb der Fakultät für Chemie und Biowissenschaften der Universität Karlsruhe (TH). Die Theoretische Chemie ist ferner mit Arbeitsgruppen im INT (Institut für Nanotechnologie) des Forschungszentrums Karlsruhe vertreten.

Die unterschiedlichen Arbeitsgruppen an der Universität Karlsruhe (TH) und am Forschungszentrum Karlsruhe zählen derzeit (Stichtag 01.11.2004) insgesamt 30 Lehrstuhlangehörige, einschließlich Manuela Kühn, die das Sekretariat des Lehrstuhls in Teilzeit führt, und Frank Imhoff als Systemadministrator (allerdings nicht nur für den Lehrstuhl für Theoretische Chemie, sondern auch für die anderen drei Lehrstühle des Instituts). Die Arbeitsgruppen von Prof. Ahlrichs und Prof. Klopper verteilen sich auf die Universität und das Forschungszentrum, während sich die Arbeitsgruppe von Christof Hättig (der im letzten Jahr seine Habilitation abgeschlossen hat) komplett am Forschungszentrum befindet. Die 25 wissenschaftlichen Mitarbeiter(innen) sind im Einzelnen: ein Habilitand (Filipp Furche), 13 Post-Doktorand(inn)en, 10 Doktorand(inn)en und ein Diplomand. Es gibt sechs Mitarbeiterinnen und 19 Mitarbeiter, sieben am INT und 18 an der Universität Karlsruhe (TH).

Während sich der Arbeitskreis Ahlrichs mit der Entwicklung quantenchemischer Methoden innerhalb des Programmpakets TURBOMOLE und deren Anwendung zur Berechnung von Moleküleigenschaften wie Struktur, Bindungsverhältnisse, elektronische Anregungen und IR-Spektren beschäftigt, liegt der Forschungsschwerpunkt des Arbeitskreises Klopper im Bereich der Entwicklung und Anwendung von quantenchemischen Methoden mit hochkorrelierten elektronischen Wellenfunktionen. Das Hauptaugenmerk liegt dabei vor allem auf der Weiterentwicklung dieser Methoden für Anwendungen an größeren molekularen Systemen und für analytische Berechnungen von Energieableitungen und molekularen Eigenschaften. Die Entwicklung und Berechnung der Response-Eigenschaften dieser hochkorrelierten elektronischen Wellenfunktionen erfolgt in enger Zusammenarbeit mit Dr. Hättig. Ein weiterer Forschungsschwerpunkt der Gruppe Klopper liegt in der Implementierung von hochkorrelierten elektronischen Wellenfunktionen in das Programmpaket TURBOMOLE. Auch werden Methoden zur Berechnung relativistischer Effekte (Zweielektronenbeiträge, Zweikomponentenverfahren) entwickelt. Die Berechnung von Response-Eigenschaften mit Coupled-Cluster-Methoden, auch für größere Systeme, bildet den Kern der Arbeiten im Arbeitskreis Hättig.

An Hardware stehen — an der Universität Karlsruhe (TH) — unter anderem ein PC-Cluster mit  $16 \times 2$  Intel-Xeon-Prozessoren (3.06 GHz, 6 GByte RAM), ein PC-Cluster mit  $7 \times 2$  Intel-Xeon-Prozessoren (2.4 GHz, 4 GByte RAM), ein PC-Cluster mit  $11 \times 2$  AMD-Athlon-Prozessoren (1.2 GHz, 2.0 RAM) sowie ein HP-Cluster mit  $7 \times 2$  PA-RISC-785-Prozessoren (750 GHz, 6 GByte RAM) zur Verfügung. Diese Ressourcen konnten in den letzten vier Jahren unter anderem mit Zuwendungen der DFG, des CFN, des Fonds der Chemischen Industrie, sowie des Landes Baden-Württemberg (Landesforschungspreis an Prof. Ahlrichs) beschafft werden. Die Rechnerinfrastruktur des Instituts für Nanotechnologie im Forschungszentrum ist mit der des Lehrstuhls vergleichbar (es stehen dort mehrere PC-Cluster sowie ein IBM-p655-Cluster mit  $3 \times 8$  Power4-Prozessoren zur Verfügung).

In Karlsruhe werden Lehrveranstaltungen in Theoretischer Chemie sowohl im Grundstudium als auch im Hauptstudium angeboten. Diese sind traditionell an die Praktika und Vorlesungen des Instituts für Physikalische Chemie gekoppelt. Innerhalb des Grundstudiums erfolgt eine Einführung in die Theoretische Chemie im Rahmen der Vorlesung "Physikalische Chemie II". Zusätzlich gibt es einen Theorie-Pflichtversuch im physikalisch-chemischen Praktikum für Anfänger, der sich anschaulich mit dem Teilchen-im-Kasten-Problem beschäftigt.

Die Theoretische Chemie bietet ferner (im Wechsel mit Kollegen des Instituts für Physikalische Chemie) die Vorlesung "Einführung in die Physikalische Chemie, Mathematische Methoden" an, die von den Studierenden statt der Vorlesung "Mathematik für Chemiker" gewählt werden kann. Im Hauptstudium (in Karlsruhe gibt es noch keine Entscheidung für die Einführung eines Bachelor-Master-Systems) gibt es zwei Theorie-Pflichtversuche im Rahmen des physikalisch-chemischen Praktikums für Fortgeschrittene, die sich beispielsweise mit der Potentialkurve eines zweiatomigen Moleküls oder mit Walsh-Diagrammen befassen. Des Weiteren werden auch die Theorie-Pflichtvorträge dieses Praktikums durch Lehrstuhlmitarbeiter(innen) betreut. Es besteht zusätzlich die Möglichkeit, ein Wahlfachpraktikum direkt im Arbeitskreis zu absolvieren. Dieses gliedert sich zum einen in die praktische Anwendung von TURBOMOLE und zum anderen in das schriftliche Lösen von quantenchemischen Rechenaufgaben. Des Weiteren werden die Vorlesungen "Quantenmechanik für Chemiker", "Theorie der chemischen Bindung", "Methoden der Quantenchemie" und "Gruppentheorie für Chemiker", jeweils von Übungen begleitet, angeboten. Der Arbeitskreis Klopper bietet außerdem noch zwei Programmierkurse ("Numerische Methoden in der Chemie" und "Modulares Programmieren in Fortran 90") an, die sich immer größerer Beliebtheit unter den Studenten erfreuen. Jeweils donnerstags findet das Gruppenseminar statt, mit anschließender Teerunde.

Ein Charakteristikum des Chemie-Diplom-Studiengangs in Karlsruhe ist die Möglichkeit der Studierenden, zwischen zwei Studiengängen A und B wählen zu können. Während Studiengang A einem traditionellen Chemie-Studium entspricht, legt der Studiengang B mehr Nachdruck auf Mathematik und Physik. Im Studiengang B ist die Zahl der Semesterwochenstunden der Praktika in Anorganischer und Organischer Chemie gegenüber derjenigen im Studiengang A gekürzt. Dafür müssen zusätzliche Leistungen in Vorlesungen und Übungen in Physikalischer Chemie, Physik und in Informatik bzw. Numerischer Mathematik erbracht werden. Der Studiengang B ist insbesondere für diejenigen Studierenden, die sich für die Theoretische Chemie interessieren, eine attraktive und nützliche Alternative.

Alles in allem bietet die Theoretische Chemie in Karlsruhe zahlreiche Herausforderungen und interessante Arbeitsbereiche sowohl für Studierende als auch für Mitarbeiter(innen). Weitere aktuelle Informationen über die Arbeitsgruppen in Karlsruhe finden Sie auf der Webseite unter [www.ipc.uni-karlsruhe.de/tch](http://www.ipc.uni-karlsruhe.de/tch). Dazu gibt es Informationen auf Webseiten des CFN ([www.cfn.uni-karlsruhe.de/newweb](http://www.cfn.uni-karlsruhe.de/newweb)) sowie des INT ([www.fzk.de/int](http://www.fzk.de/int)).

W. Klopper, Karlsruhe