

## **Mitgliederversammlung der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie beim 37. Symposium für Theoretische Chemie in Bad Herrenalb**

---

**Mittwoch, 26. September 2001.**

**Beginn: 17.40 Uhr.**

**Tagesordnung:**

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

**Protokoll:**

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

Der Bericht betont insbesondere die folgenden Punkte:

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

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

Seit kurzem besteht die Möglichkeit, auch seitens der Theoretischen Chemie durch Notizen in den "Blauen Blättern" über aktuelle Forschungsergebnisse zu informieren. Die Koordination

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

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

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

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

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

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

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

- 7) Zur Organisation des Symposiums 2003 in der Schweiz haben sich M. Quack und H.P. Lüthi (ETH Zürich) bereit erklärt. Die Mitgliederversammlung begrüßt dies einhellig und überträgt den beiden Kollegen die Ausrichtung des Symposiums (voraussichtlich im September 2003).
- 8) Es werden weitere Tagungen auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie vorgestellt.
  - a) S. Peyerimhoff: 11th International Congress of Quantum Chemistry, Bonn, 20.-25. Juli 2003, mit drei vorangehenden Satellitentagungen jeweils am 17.-18. Juli 2003 (Dynamik,

Berlin, J. Manz; Katalyse, Mülheim, W. Thiel; Korrelation, Bad Herrenalb, H.-J. Werner), einem direkt anschließenden Hellmann-Tag am 26. Juli 2003 (Bonn, W.H.E. Schwarz) und einer zeitlich nachgeschalteten Relativistik-Tagung vom 27.-31. Juli (Bad Herrenalb, C. van Wüllen).

- b) R. Jaquet: Arbeitstagung für Theoretische Chemie zum Thema "Dichtefunktional-Theorie" (organisiert von A. Sax), Mariapfarr, 19.-22. Februar 2002.  
<http://www.kfunigraz.ac.at/tchwww/sax/mariapfarr/index.html>
- c) N. Doltsinis: Winterschule "Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms" (organisiert vom Forschungszentrum Jülich), Kerkrade (NL), 25. Februar - 1. März 2002.  
<http://www.fz-juelich.de/wsqs>

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

Ende der Mitgliederversammlung: 18.15 Uhr

gez. W. Thiel