

Fundstücke	04/2017	<p>Als Fundstücke können viele Sachen auftreten:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Gegenstände, die wir zufällig finden, • Bücher und Texte, die uns zufällig in die Hände fallen, • Gespräche, die sich zufällig ergeben. <p>Wenn sie sich mit der Chemie in Jena in Verbindung bringen lassen, dann werden sie für uns interessant!</p>
Periode	II - VII	
Zeit	19. bis Anfang des 21. Jahrhunderts	
Personen	Jenaer Chemiker auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie	
Anlass	Herausgabe des Buches <i>K. Jug: „Zweihundert Jahre Entwicklung der Theoretischen Chemie im deutschsprachigen Raum“</i>	
Ort	Friedrich-Schiller-Universität Jena, Chemische Institute	
Autoren	KARL JUG (2015) (PETER HALLPAP)	

Jena in der Theoretischen Chemie im deutschsprachigen Raum

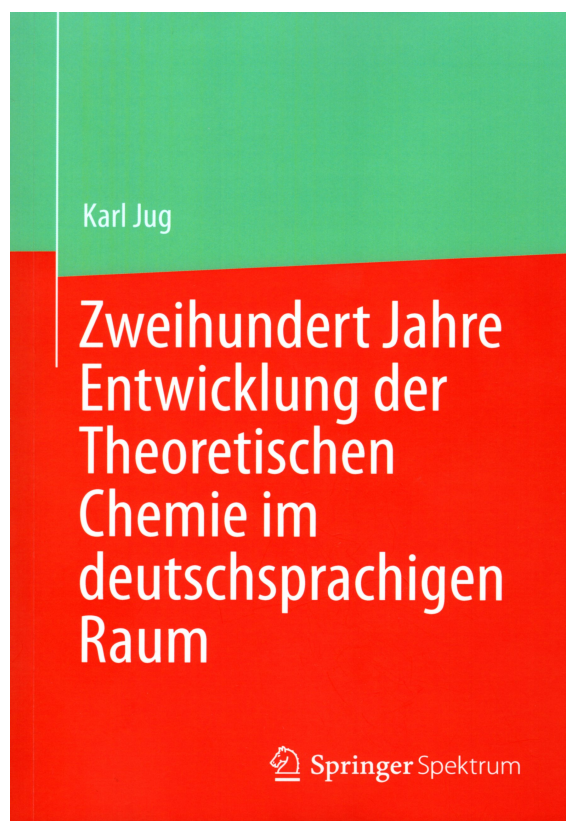
Der Springer-Verlag wirbt für sein kürzlich herausgebrachtes Buch über die Geschichte der Theoretischen Chemie im deutschsprachigen Raum¹ mit folgender kurzen Charakterisierung:

„Die Theoretische Chemie hat eine mehr als zweihundert Jahre alte Tradition in der Chemie. Zu Anfang des 19. Jahrhunderts, als sich die Chemie von einer „Kunst“ zu einer eigenständigen Wissenschaft zu etablieren begann, erschienen erstmals ein- oder mehrbändige Werke zur Theoretischen Chemie in deutscher Sprache. Das vorliegende Werk basiert auf einem Genealogie-Projekt des Autors, stellt gewissermaßen ein Who is Who der Theoretischen Chemie dar und beschreibt ihre Entwicklung im deutschsprachigen Raum in den letzten 200 Jahren. So soll dieses Buch dazu dienen, auch dem fachfremden Leser Einblick in die Entwicklung einer Wissenschaft zu geben. Heute gibt es zahlreiche Anwendungsgebiete der Theoretischen Chemie, die von der Physikalischen Chemie, Anorganischen Chemie und Organischen Chemie bis in die Festkörperchemie und Materialforschung sowie Biochemie und Biologie hineinreichen.“

Den Autor stellt der Verlag mit folgender kurzen Biographie vor:

„KARL JUG, geboren 1939 in Essen, studierte in Frankfurt Physik und promovierte 1965 in Physikalischer Chemie. Nach vier Jahren als wissenschaftlicher Mitarbeiter in Frankfurt und Chicago wurde er 1969 Assistant Professor und 1971 Associate Professor an der Saint Louis University. 1975 kehrte er nach Deutschland zurück und war bis 2004 Professor für Theoretische Chemie in Hannover. Er ist bekannt für die Entwicklung semiempirischer Methoden und chemischer Konzepte und war Gastprofessor an zehn Universitäten im In- und Ausland. Sein Lehrbuch „Mathematik in der Chemie“ erschien in zwei Auflagen.“

Das Buch zeigt folgende Gliederung:



¹ Karl Jug: Zweihundert Jahre Entwicklung der Theoretischen Chemie im deutschsprachigen Raum. - Heidelberg : Springer Spektrum, 2015 (VIII, 295 S., 5 Abb., 29,99 EUR).

1	Einleitung.....	1
2	Theoretische Chemie im 19. Jahrhundert	3
3	Die Ursprünge der modernen Theoretischen Chemie aus der Physik	13
3.1	Quantentheorie und Quantenmechanik	13
3.2	ERICH HÜCKEL	21
3.3	HANS HELLMANN	25
4	Die Gründungsphase der modernen Theoretischen Chemie aus der Chemie	31
4.1	Vorläufer	31
4.2	HERMANN HARTMANN	33
4.3	Weitere Repräsentanten der Gründungsphase (G. DREFAHL, G. RASCH).....	37
5	Die Etablierung an den Universitäten	55
5.1	Die resultierenden Zentren	55
5.1.1	Frankfurt	55
5.1.2	Marburg	73
5.1.3	Göttingen	76
5.1.4	München	85
5.1.5	Berlin	91
5.1.6	Stuttgart	92
5.1.7	Gießen	95
5.1.8	Wien.....	102
5.1.9	Zürich	107
5.2	Weitere Einflüsse	110
5.2.1	Inland	110
5.2.2	Ausland	115
5.3	Entwicklung in der DDR	123
5.3.1	Ostberlin	123
5.3.2	Leipzig	124
5.3.3	Dresden	128
5.3.4	Jena (HEINZ DUNKEN, K. GUSTAV, H. MÜLLER).....	130
5.3.5	Merseburg	131
5.3.6	Halle	132
6	Nationale und internationale Akzeptanz	135
6.1	Ausbildung von Forschungsrichtungen	135
6.1.1	Modellmethoden	136
6.1.2	Semiempirische Methoden	137
6.1.3	Ab initio-Methoden einschließlich relativistischer Effekte	141
6.1.4	Dichtefunktionalmethoden und Molekulardynamik	145
6.1.5	Green'sche Funktionen und vibronische Kopplung	147
6.1.6	Simulationsmethoden	150
6.2	Anwendungen in der Chemie	151
6.2.1	Moleküle und Cluster	151
6.2.2	Reaktionsdynamik	155
6.2.3	Spektroskopie	158
6.2.4	Oberflächen und Katalyse	160
6.2.5	Festkörper	164
7	Weitere Entwicklung bis heute (L. GONZÁLES, M. REIHER).....	165
8	Die Zeitschrift Theoretica Chimica Acta	177
9	Sommerschulen für Theoretische Chemie	181
10	Symposien für Theoretische Chemie (HEINZ DUNKEN, HELGA DUNKEN, H. MÜLLER).....	187
11	Die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie	193
12	Das Info Theoretische Chemie	197
13	Tabellen (HELGA DUNKEN, H.-G. FRITSCHKE, L. GONZÁLES, S. GRÄFE, K. GUSTAV, P. KADURA, L. D. KÜNNE, H. MÜLLER, G. RASCH, J. SÜHNEL, M. REIHER, M. SIERKA).....	199
14	Quellen und Danksagung	221

14.1	Quellen	221
14.2	Danksagung	221
	Literatur	223
	Sachverzeichnis	283
	Personenverzeichnis	289

In diesem Inhaltsverzeichnis wurden die im Buch genannten Jenaer Chemiker den jeweiligen Abschnitten namentlich zugeordnet. Die entsprechenden Textstellen folgen als Auszüge, wobei die von K. Jug angegebenen Literaturstellen weggelassen werden:

4	Die Gründungsphase der modernen Theoretischen Chemie	31
4.3	Weitere Repräsentanten der Gründungsphase(G. DREFAHL, G. RASCH).....	37

(S. 45)

„... Ebenfalls sehr früh begann **GERHARD RASCH** (1926 - 2008) sich für die Theoretische Chemie zu interessieren. Er begann sein Chemiestudium 1947 an der Universität Jena und schloss es 1952 mit einer Diplomarbeit „Über die Fluoreszenz bei Stilbenen“ ab. Sein Betreuer war der Organiker **GÜNTER DREFAHL**. Bei diesem fertigte er auch eine theoretische Doktorarbeit „Über Bindungsverhältnisse am Stilben“ an, mit der er 1956 promovierte. Rasch arbeitete weiter auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie und konnte sich 1963 mit der Habilitationsschrift „Molekülberechnungen an tricyclischen Aromaten und Quasi-Aromaten“ in Jena habilitieren. 1966 wurde er Dozent an der Technischen Hochschule für Chemie Leuna-Merseburg. In dieser Zeit befasste er sich mit der Verallgemeinerung eines von **POLANSKY** auf der Basis der **HÜCKEL**-Methode entwickelten Konzepts zur Beschreibung des lokalen Charakters von ungesättigten Verbindungen auf nicht alternierende Systeme. Er wurde 1969 zum außerordentlichen Professor für Quantenchemie ernannt und wirkte dort bis 1989. **RASCH** war Anwender semiempirischer Methoden wie der **HÜCKEL**-Methode und der **CNDO**-Methode, später auch der Pseudopotentialmethode oder von ab initio-Methoden. Seine **MO**-Rechnungen behandelten organische oder metallorganische Verbindungen. Nach der Wende lebte er bis zu seinem Tod 2008 in Hannover...“

5	Die Etablierung an den Universitäten	55
5.3	Entwicklung in der DDR	123
5.3.4	Jena(HEINZ DUNKEN, K. GUSTAV, H. MÜLLER).....	130

(S. 130/31)

„... In Jena begann sich die Theoretische Chemie aus der Physikalischen Chemie zu entwickeln. **HANS MÜLLER** (1933 -) begann sein Physikstudium 1951 und schloss es mit dem Aufbau einer Ultraschallapparatur zur Strukturuntersuchung wässriger Systeme erfolgreich ab. Es waren die besonders interessanten Vorlesungen in moderner Physikalischer Chemie von **HEINZ DUNKEN** (1912 - 1974), die ihn zu einem Wechsel von Experimentalphysik zu Theoretischer Chemie veranlassten. 1963 promovierte er mit einer Arbeit „Berechnung physikalischer Eigenschaften zweiatomiger Moleküle im Zusammenhang mit dem Charakter der chemischen Bindung“, für die er den Fakultätspreis erhielt. Danach arbeitete er mit **DUNKEN** an einem dreidimensionalen Elektronengasmodell, wie es schon **HANS KUHN** Ende der 1940er Jahre in einer Dimension präsentiert hatte. Mit diesem Modell freier Elektronen in einem zylinderförmigen Potentialtopf wurden die Bindungsenergien zahlreicher zweiatomiger Moleküle über **BESSEL**-Funktionen berechnet. Ähnlich wie bei **KUHN** wurden auch die langwelligen Absorptionsbanden dieser Moleküle berechnet. Kurz darauf wurde das Modell auf das lineare symmetrische Trijodid-Anion ausgedehnt, um die Bindungsverhältnisse in einer Reihe von Edelgasverbindungen zu verstehen. 1970 habilitierte sich **MÜLLER** mit der Arbeit „Anwendungen künstlicher Randbedingungen in der Quantenchemie“ und wurde 1971 zum ordentlichen Professor berufen. Zunächst führte er die Untersuchungen zu Bindungsverhältnissen und Elektronenverteilung am Br_4^{2-} -Ion weiter. Schwerpunkte der weiteren Forschung wurden die Wechselwirkungen zwischen Festkörper und Molekül, insbesondere die Elementarprozesse der Chemisorption. So wurde die Chemisorption von Wasserstoff an einem Clustermodell für den Festkörper Niobjodid entworfen und die Elektronenverteilung

mit der α -Methode berechnet. Allgemeiner war die Arbeit zur Chemisorption kleiner Moleküle wie CO und H₂ auf Nickel und von H₂ auf Magnesiumoxid- und Calciumoxidoberflächen. Bemerkenswert ist auch die Untersuchung der Elementarprozesse beim Plasmaätzen im System Fluor/Silizium. Parallel zu dieser Entwicklung fand eine Reihe von Auslandsaufenthalten an den Universitäten in Prag, Krakau, Warschau, Budapest, Moskau und Leningrad statt, was umgekehrt zu entsprechenden Gegenbesuchen in der Jenaer Arbeitsgruppe führte. HANS MÜLLER wurde 1991 emeritiert.

In der Organischen Chemie in Jena² trug **KLAUS GUSTAV** (1936 -) zur Einführung quantenchemischer Methoden bei. Er hatte in Greifswald Chemie studiert und dort 1965 mit der Dissertation „Über die Existenz einiger Verbindungen des Dipyridyls mit den Elementen Yttrium und Lanthan“ in Anorganischer Chemie promoviert. Er begann sich Ende der 1960er Jahre für Elektronenstrukturmethoden zu interessieren. 1971 wurde er in Jena zum Dozenten ernannt. Seine Habilitation (Promotion B) erfolgte 1973 mit der Arbeit „Beitrag zur CNDO-approximierten Molekülorbitaltheorie und Elektronenstruktur einiger Koordinationsverbindungen“ bei HANS MÜLLER. GUSTAV beschäftigte sich in Folge mit spektroskopischen Fragestellungen bei organischen Molekülen. So entstand eine Arbeit zu Struktur und spektroskopischen Eigenschaften von Binaphthyl, bei der auch die Geometrie des ersten angeregten Zustands berechnet wurde. Dem folgte kurz darauf eine ähnliche Arbeit am Biphenyl. Eine größere Herausforderung war die Untersuchung der vibronischen Kopplung von Elektronenzuständen, für die ein mathematisches Modell entworfen wurde. 1984 wurde GUSTAV zum Professor ernannt. Danach führte er diese Untersuchungen an nichtadiabatischen Prozessen fort. So entstand eine Studie zu strahlungslosen Übergängen, speziell zur inneren Umwandlung (engl. internal conversion) im Azulen. Jahre später folgten theoretische Untersuchungen zur Absorption und Fluoreszenz von Perylen und seinen Tetracarbonsäurederivaten. GUSTAV trat 1999 in den Ruhestand...“

7 Weitere Entwicklung bis heute(**L. GONZÁLES, M. REIHER**).....165

(S. 172)

„... Einige Jahre nach SAALFRANK und DE VIVIE-RIEDLE kam **LETICIA GONZÁLEZ** (1971 -) aus Spanien zu MANZ nach Berlin, zunächst als HUMBOLDT-Stipendiatin, dann als wissenschaftliche Assistentin. 2004 habilitierte sie sich mit einer Analyse und Kontrolle unimolekularer chemischer Reaktionen durch Quantensimulationen. 2007 wurde sie nach Jena auf eine Professur für Theoretische Chemie berufen. Seit 2011 ist sie Professorin an der Universität Wien. Ihr Arbeitsgebiet ist Photochemie, Reaktionsdynamik und Laserkontrolle. 2011 erhielt sie die DIRAC-Medaille der World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)..“

(S. 175)

„... Mit DFT-Methoden arbeitete auch **MARKUS REIHER** (1971 -), der sich 2003 in Erlangen bei BERND HESS habilitierte. Seine Habilitationsschrift spannte den Bogen von der fundamentalen Theorie zu Konzepten in der bioanorganischen Chemie. Er ging anschließend mit HESS nach Bonn. Dort beschäftigte er sich wie schon sein Mentor HESS mit relativistischer Quantenchemie und schlug ein Entkopplungsschema für negative und positive Energiezustände vor, Hier entstand auch eine Arbeit über optische Aktivitäten in der Raman-Spektroskopie, 2005 nahm er einen Ruf an die Universität Jena an, blieb aber nur ein Jahr und wechselte dann als außerordentlicher Professor an die ETH Zürich. 2011 wurde er dort ordentlicher Professor...“

10 Symposien für Theoretische Chemie ...(**HEINZ DUNKEN, HELGA DUNKEN, H. MÜLLER**)..187

(S. 188/89)

„... Beim dritten Symposium wurde der Name der Symposiumsreihe endgültig festgelegt. Es hieß „3. Symposium für Theoretische Chemie“ und wurde vom 29. März - 1. April 1967 von O. E. POLANSKY in Wien veranstaltet. Auch diese Tagung war wieder sehr erfolgreich. Die Teilnehmerzahl wuchs noch einmal auf 108 an. Diesmal waren 70 Teilnehmer aus der BRD, 24 aus Österreich, neun aus der Schweiz, vier aus der DDR darunter W. HABERDITZL. G. L. HOFACKER kam aus den USA. Damit war die Dominanz der BRD nicht mehr so ausgeprägt. Das angekündigte Vortragsprogramm war mit 68 Vorträgen an den dreieinhalb Tagen schon deutlich überlastet, zumal einige Vortragende mehrfache Vorträge angemeldet hatten...“

2 Klaus Gustav begann seine theoretischen Arbeiten auf dem Gebiet der anorganischen Chemie und gehörte in Jena zum Wissenschaftsbereich Photochemie. (P. H.)

Deshalb musste der Tagungsleiter die Sprechzeiten kürzen. Dies und andere Gründe veranlasste eine Reihe von Vortragenden, nicht zu erscheinen... Wahrscheinlich aus anderen Gründen fehlten dann auch die Vorträge von J. FABIAN (Dresden), A. MEHLHORN (Dresden), H. DUNKEN (Jena), W. GRÜNDLER (Halle) und einiger anderer. Das bereinigte Vortragsprogramm war schließlich mit 52 Vorträgen noch immer sehr umfangreich und demonstrierte das in wenigen Jahren enorm gewachsene Interesse an der Theoretischen Chemie...“

(S. 191/92)

„... Auch in der damaligen DDR konnte sich die Theoretische Chemie durch die Initiative von HEINZ DUNKEN organisieren und „Arbeitstagungen über Probleme der Quantenchemie“ veranstalten. Die erste fand im Herbst 1966 in Mönchenfrei bei Freiberg statt. HANS MÜLLER und HELGA DUNKEN (1939 -) [1458] aus Jena berichteten darüber in der Zeitschrift für Chemie. Spätere Tagungen fanden vor allem in Kühlungsborn oder Heiligendamm an der Ostsee statt. Über die vierte Tagung 1970 und die fünfte 1971 berichteten C. WEISS bzw. F. DIETZ aus Leipzig ebenfalls in der Zeitschrift für Chemie. Die Tagungen fanden dann im Turnus von meist zwei Jahren statt, später auch mit internationaler Beteiligung. Die 15. und letzte Tagung in der DDR wurde im Frühjahr 1989 in Kühlungsborn veranstaltet.

Nach dem Ende der DDR wurden die Kollegen und die Arbeitstagungen in die Reihe der Symposien für Theoretische Chemie integriert. Beim Symposium 1991 in Lage-Hörste bei Bielefeld waren schon viele Kollegen aus der ehemaligen DDR dabei, die zuvor noch keine Möglichkeit hatten teilzunehmen... 1993 konnte dann auch die erste gemeinsame Tagung in Oberwiesenthal in Sachsen unter Leitung von JOACHIM REINHOLD stattfinden...“

13 Tabellen(**HELGA DUNKEN, H.-G. FRITSCHKE, L. GONZÁLES, S. GRÄFE, K. GUSTAV, P. KADURA, L. D. KÜNNE, H. MÜLLER, G. RASCH, J. SÜHNEL, M. REIHER, M. SIERKA**).....199

Jenaer Professoren und Dozenten der Theoretischen Chemie und verwandter Fachgebiete
Tab. 13.1 (Auszüge)

Universität/Institut	Hochschullehrer	Status (Zeitraum)	Fach
FU Berlin	LETIZIA GONZÁLES (1971 -)	Hab. (2004)	TC
HU Berlin	MAREK SIERKA (1971 -)	Hab. (2009) Priv.-Doz. (2009 - 2012)	TC TC
U Bonn	MARKUS REIHER (1971 -)	Priv.-Doz. (2003 - 2005)	TC
U Erlangen	MARKUS REIHER (1971 -)	Hab. (2003)	TC
U Jena	GERHARD RASCH (1925 - 2008)	Hab. (1963) Doz. (1963 - 1966)	TOC TOC
	HELGA DUNKEN (1939 -)	Hab. (1969) Prof. (1971 - 2004)	TC TPC
	HANS MÜLLER (1933 -)	Hab. (1970) Prof. (1971 - 1998)	TC TC
	KLAUS GUSTAV (1936 -)	Prom. B(1973) Prof. (1984 - 1999)	TC TC
	PETER KADURA (1932 -)	Prom. B (1983)	TC
	HANS-GERHARD FRITSCHKE (1940 -)	Prom. B (1984)	TC
	LUTZ DIETER KÜNNE (1939 -)	Prom. B (1987)	TC
	JÜRGEN SÜHNEL (1946 -)	Prom. B(1987)	TC
	MARKUS REIHER (1971 -)	Prof. (2005 - 2006)	TC
	LETICIA GONZÁLES (1971 -)	Prof. (2007 - 2011)	PC, TC
	MAREK SIERKA (1971 -)	Prof. (2012 -)	CM
	STEFANIE GRÄFE (1979 -)	Prof. (2013 -)	TC
TH Leuna-Merseburg	GERHARD RASCH (1925 - 2008)	Doz. (1966 - 1969) Ao. Prof. (1969 - 1989)	QC QC
U Wien	LETIZIA GONZÁLES (1971 -)	Prof. (2011 -)	TC

ETH Zürich	MARKUS REIHER (1971 -)	Ao. Prof. (2006 - 2011)	TC
		o. Prof. (2011 -)	TC

CM - Computergestützte Materialwissenschaft
 PC - Physikalische Chemie
 QC - Quantenchemie
 TC - Theoretische Chemie
 TOC - Theoretische Organische Chemie
 TPC - Theoretische und Physikalische Chemie

Die Einordnung der Jenaer Beiträge zur Theoretischen Chemie durch K JUG soll ergänzt werden durch die Nennung der Promotionen und Habilitation von Jenaer Wissenschaftlern, die auf diesem Gebiet bis 2017 insbesondere unter dem Einfluss von HEINZ DUNKEN (1912-1974), GÜNTHER DREFAHL (1922-2013), HANS MÜLLER (geb. 1933), GÜNTHER HEUBLEIN (1933-1989), KLAUS GUSTAV (geb. 1936), HELGA DUNKEN (geb. 1939), ERNST ANDERS (1942-2016) und LETIZIA GONZÁLES (geb. 1971) arbeiteten. Damit lässt sich ein deutlich differenzierteres und vollständigeres Bild der Jenaer Situation erkennen.

Promotionen Jenaer Wissenschaftlern auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie 1945 - 2017 (Auswahl)³

Name, Vorname	Datum	Thema der Dissertation	Gutachter/ Betreuer
Rasch, Gerhard	12.10.56	Über Bindungsverhältnisse am Stilben	Drefahl Dunken
Kühmstedt, Rolf	1961	Spektroskopische Untersuchungen an ungesättigten und aromatischen Kohlenwasserstoffen und Versuch einer quantenmechanischen Deutung	((U Jena))
Kadura, Peter	05.04.63	Das Wasserstoffatom als rotierender Oszillator. Einheitliche Auffassung des Energieschemas des Wasserstoffatoms und der Rotations-Schwingungs-Energieschemen zweiatomiger Moleküle fixer Elektronenkonfiguration	Dunken Weber
Müller, Hans	13.11.63	Berechnung physikalischer Eigenschaften zweiatomiger Moleküle im Zusammenhang mit dem Charakter der chemischen Bindung	Dunken Drefahl
Dunken, geb. Fichtner, Helga	04.11.65	IR-spektroskopische Untersuchungen und theoretische Betrachtungen der Chemisorption aus Lösung an Metallen	Dunken Uhlig
Fritsche, Hans- Gerhard	04.11.67	Quantenmechanische Berechnung der Wechselwirkungsenergie zweier Heliumatome im Elektronengrundzustand	Dunken Weber
Gottschlich, Klaus	26.06.69	Elektronendichteverteilung kleiner Moleküle	Dunken Rudakoff
Hallpap, Peter	12.07.69	Berechnungen zur Bromaddition an Olefine	Heublein Dunken Martin (Berlin)
Leyh, Frank- Dieter	09.09.70	Zur anschaulichen Interpretation quantenchemischer Vorstellungen des Atombaus und der chemischen	Dunken Müller

³ - Peter Hallpap: Promotionen und Habilitationen in der Chemie 1945 - 2000. - In: Peter Hallpap: Geschichte der Chemie in Jena - Materialien, Bd. V. - Jena : FSU Jena, 2012.

- Homepage der Chemisch-Geowiss. Fakultät der FSU Jena: „Promotionen und Habilitationen der letzten Jahre“ [http://www.chemgeo.uni-jena.de/Forschung_page_130903.html] (am 26.10.2017)]

		<i>Bindung</i>	<i>Renneberg (Leipzig)</i>
<i>Opitz, Christian</i>	<i>09.09.70</i>	<i>LCAO-MO-theoretische Behandlung der Chemisorption kleiner Moleküle an Metallen</i>	<i>Dunken Müller Taubе (Greifswald)</i>
<i>Kirchhof, Johannes</i>	<i>05.12.73</i>	<i>Mathematische und experimentelle Untersuchungen zur thermischen Desorption</i>	<i>Helga Dunken Meyer Völter (Berlin)</i>
<i>Sühnel, Jürgen</i>	<i>1975</i>	<i>Quantenchemische und spektroskopische Untersuchungen an Azoverbindungen</i>	<i>((TU Dresden))</i>
<i>Hüller, Georg</i>	<i>03.11.76</i>	<i>Beiträge zur Theorie der Chemisorption im Rahmen der CI-Methode</i>	<i>Hans Müller Gustav Haberditzl (Berlin)</i>
<i>Wittkopf, Hartmut</i>	<i>20.09.78</i>	<i>Zur thermodynamischen und statistisch-thermodynamischen Behandlung der Adsorption; Modellierung der Potentialhyperfläche für die Wechselwirkung zwischen Gas und Festkörperoberfläche</i>	<i>Helga Dunken Hans Müller Spangenberg (Berlin)</i>
<i>Bohl, Martin</i>	<i>28.02.79</i>	<i>Erprobung und Anwendung des CNDO-Verfahrens zur Beschreibung von Elementarprozessen der Chemisorption</i>	<i>Hans Müller Gustav Haberditzl (Berlin)</i>
<i>Vettermann, Stefan</i>	<i>17.06.81</i>	<i>Quantenchemische Untersuchungen zur Farbe, Molekülstruktur und (E,Z)-Isomerisierung von arylsubstituierten acyclischen Azinen</i>	<i>Gustav Scholz (Leipzig) Rasch (Merseburg)</i>
<i>Colditz, Roland</i>	<i>23.02.83</i>	<i>Theoretischer Beitrag zur Potentialadaption und vibronischen Kopplung von Elektronenzuständen sowie deren Einfluß auf radiative Prozesse</i>	<i>Gustav Hans Müller Zülicke (Berlin)</i>
<i>Fricke, Dieter K.</i>	<i>15.06.83</i>	<i>Quantenchemische Beiträge zur Modellierung der heterogenen Teilschritte beim reaktiven Plasmaätzen im System Fluor/Silizium – Der erweiterte Balloneffekt</i>	<i>Hans Müller Tiller Rasch (Merseburg)</i>
<i>Dübler, Friedrich</i>	<i>04.01.84</i>	<i>Quantenchemische Untersuchungen an sechskernigen Übergangsmetallclusterverbindungen im Rahmen der SW-X^v-SCF-Methode. Beziehungen zwischen anorganischer Chemie und Oberflächenchemie</i>	<i>H. Müller Uhlig Rasch (Merseburg)</i>
<i>Bölke, Martin</i>	<i>11.09.85</i>	<i>Theoretische Berechnungen zur kationischen Polymerisation – Einfluß des Lösungsmittels</i>	<i>Heublein Weiss (Leipzig) Zahradnik (Prag)</i>
<i>Führ, Udo</i>	<i>24.02.88</i>	<i>Quantenchemische Berechnungen an Metallatom-Clusterverbindungen – Ein Beitrag zur Cluster-Festkörper-Analogie</i>	<i>H. Müller Uhlig Rasch (Merseburg)</i>
<i>Böer, Jürgen Peter</i>	<i>15.09.89</i>	<i>Quantenchemische Beiträge zum Verständnis der Elementarreaktionen des Plasmaätzens der Metalle</i>	<i>H. Müller Tiller Rasch (Leipzig)</i>
<i>Storch, Michael</i>	<i>15.09.89</i>	<i>Theoretischer Beitrag zum vibronischen Spektralverhalten und zur inneren Konversion von ausgewählten organischen Molekülen</i>	<i>Gustav Hartmann (Merseburg) Fabian (Dresden)</i>
<i>Kodlaa, Adnan</i>	<i>06.09.90</i>	<i>Quantenchemische Untersuchungen der Elementarschritte heterogener chemischer Reaktionen zwischen einfachen Gasen und Festkörpern</i>	<i>H. Müller Tiller Reinhold (Leipzig)</i>
<i>Almasri, Zaki</i>	<i>15.11.90</i>	<i>Ein Beitrag zur Quantenchemie von Metallclustern und Metallclusterverbindungen</i>	<i>Müller Uhlig Reinhold (Leipzig)</i>
<i>Pineda De</i>	<i>28.01.91</i>	<i>Quantenchemische Untersuchung ausgewählter</i>	<i>Müller</i>

Castro, Luis Felipe		Eigenschaften von Übergangsmetall-Cluster-Verbindungen	Uhlig Reinhold (Leipzig)
Mittelbach, Thomas	28.07.93	Moleküldynamische Untersuchung von Silicium-Clustern	Müller, H. Recknagel (Konstanz) Seifert (Dresden)
Möllhoff, Margit	12.07.94	Berechnungen zur Struktur von β -D-Glucose und Anwendung der Bindungspolarisationstheorie zur Berechnung von atomspezifischen Werten	Klemm, D. Sternberg (Jena) Karpfen (Wien)
Knöll, Thomas	18.12.96	Molekulardynamische Untersuchungen an Lithiumclustern Li_N : Struktur, Stabilität und Phasenübergänge	Müller, H. Seifert (Dresden) Bernacic (Berlin)
Nordhoff, Karsten	09.12.98	Ab-initio- und UFT-Untersuchungen an substituierten Diazenen und kombinierte ab-initio- und semiempirische Modellierung der Mitsunobu-Reaktion	Anders Grummt Fabian (Dresden)
González, Leticia	1998	Ab-initio-theoretische Studien zu inter- und intramolekularen Wasserstoffbrückenbindungen	((Univ. Autón. de Madrid))
Reiher, Markus	1998	Development and implementation of numerical algorithms for the solution of multi-configuration self-consistent field equations for relativistic atomic structure calculations	((U Bielefeld))
Bräuer, Michael	26.04.00	Quantenchemische Untersuchungen an Carboanhydrase-Modellen und verwandten Systemen	Anders Grummt Vahrenlamp (Freiburg)
Bender, Dirk	2000/01	Zur Potentialsensitivität von Struktur und Dynamik zweiatomiger Moleküle im flüssigen Zustand	Oehme
Han, Yongquan	17.12.03	Evolutionary Algorithms as an Approach for Computer Assisted Structure Elucidation of Organic and Bioorganic Compounds	Anders
Schenk, Stephan	14.06.06	Quantenchemische Untersuchung von Carboanhydrase-analogen Modellsystemen	Anders
Hampe, Diana	13.06.07	4-Iminomethylpyridine - neuartige Azomethine und metallierte 4-Iminomethylen-4H-pyridin-1ide: Reaktionen mit Heterocumulenen und anderen Elektrophilen	Anders
Schmidt, Matthias	13.06.07	Ein funktionelles Biomimetikum für die Nickel-Superoxiddismutase	Weston
Kluge, Stefan	12.12.07	Modellierung sequentieller Metalloenzyme auf Magnesiumbasis	Weston
Bangesh, Masroor	16.01.08	Theoretical Studies on Structure and Mechanism of Vanadium Haloperoxidases	Plass
Eger, Wilhelm	17.12.08 Prom.	Aktivierung von Heterocumulenen in Theorie und Experiment: Sind Isothiocyanate geeignete Substrate für Carboanhydrase-Modelle?	Anders
Jahn, Burkhard	21.10.09	Allene und Heteroallene als Substrate zinkvermittelter, biomimetischer Additionsreaktionen	Anders
Pérez Hernández, Guillermo	08.12.10	Light-Triggered Unidirectional Molecular Rotors: Theoretical Investigations on Conformational Dynamics and Laser Control	González
Garms, Stefan	12.01.11	Mechanistische Untersuchungen an Terpensynthesen aus <i>Medicago truncatula</i>	Pohnert Boland

Leyva Novoa, Veronica	19.10.11	The excited state intramolecular hydrogen transfer mechanism of ortho-Nitrobenzaldehyde: A quantum chemical and molecular study	González
Kupfer, Stephan	06.02.13	Computational characterization of novel solar light-harvesting dyes and electron-transfer systems	González
Kinzel, Daniel	08.05.13	Photoisomerization versus Photodissociation of a Chiral Fluoroethylene Derivative. Quantum Chemistry, Dynamics and Control	González
Theil, Frank	22.10.14	Synthese und Charakterisierung artifizierter Reaktionszentren	Dietzek
Hornig, David	19.11.14	Experimental and Theoretical Investigations on Transition Metal and Lanthanide Containing Molecular Magnets	Plass
Latorre Contreras, Federico Manuel	17.05.17	Quantum chemical investigation towards Raman enhancement effects	González

Habilitationen von Jenaer Wissenschaftlern auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie 1945 - 2017 (Auswahl)³

Name, Vorname	Datum	Thema der Habilitationsschrift	Gutachter
Rasch, Gerhard	06.06.63	Molekülberechnungen an tricyclischen Aromaten und Quasi-Aromaten	Drefahl Heinz Dunken
Dunken, geb. Fichtner, Helga	30.04.69	Beiträge zur Quantenchemie der Adsorption an Festkörpern	Schirmer (Berlin) Rudakoff Hein Heinz Dunken
Müller, Hans	06.01.70	Anwendung künstlicher Randbedingungen in der Quantenchemie	Heinz Dunken Weber Valenta (Prag)
Gustav, Klaus	26.06.73	Beitrag zur CNDO-approximierten Molekülorbitaltheorie und Elektronenstruktur einiger Koordinationsverbindungen	H. Müller Paetzold Taube (Merseburg)
Bräuer, Peter	20.11.79	Anwendung der phänomenologisch-thermodynamischen und statistisch-thermodynamischen Methode zur qualitativen und quantitativen Beurteilung der energetischen Heterogenität von Festkörperoberflächen anhand von Adsorptionsisothermen	Helga Dunken Hans Müller Schirmer (Berlin)
Hallpap, Peter	16.09.80	Die Wechselwirkung zwischen den Reaktionspartnern bei kationischen Polymerisationen	Heublein Helga Dunken Martin (Berlin)
Kadura, Peter	15.03.83	Bedeutung und Nutzung der Symmetrie bei der quantenchemischen Beschreibung von Chemioptionsphänomenen	H. Müller Weber Zülicke (Berlin)
Fritsche, Hans-Gerhard	20.11.84	Quantenchemische Untersuchungen zur Wechselwirkung von Wasserstoff und Kohlenstoff mit Übergangsmetallen an deren Oberflächen, im Kristallinneren sowie in Kernen von Metallatom-Clusterverbindungen im Rahmen der Methode gestreuter Elektronen mit genähertem	H. Müller Zülicke (Berlin) Rasch (Leipzig)

		<i>Austauschpotential</i>	
<i>Künne, Lutz Dieter</i>	<i>15.09.87</i>	<i>Quantenchemische Untersuchung der elektronischen Eigenschaften dünner Filme in Abhängigkeit von der Filmdicke und der Chemisorption an solchen Filmen</i>	<i>H. Müller Weber Zülicke (Berlin)</i>
<i>Sühnel, Jürgen</i>	<i>15.09.87</i>	<i>Beiträge zur Theorie von Protonentransfer-Reaktionen in Lösung</i>	<i>Gustav Schwetlick (Dresden) Zülicke (Berlin)</i>
<i>Sternberg, Ulrich</i>	<i>18.10.88</i>	<i>Entwicklung theoretischer und halbempirischer Methoden zur Berechnung der chemischen Verschiebung der Bindungen in der ersten und zweiten Koordinationssphäre</i>	<i>H. Müller Zschunke (Berlin) Radeglia (Berlin)</i>
<i>Weston, James</i>	<i>15.02.06 Habil.</i>	<i>Mechanistische Untersuchungen zur Reaktivität ausgewählter Metalloenzyme und Metallkatalysatoren</i>	<i>Anders</i>