

# Early Ideas in the History of Quantum Chemistry

## Karl Jug



Born in 1939. Studied physics in Frankfurt (Main), Germany. Did his thesis under Hartmann in the field of molecular physics in 1965. Postdoc with P.G. Lykos, 1971 guest-prof. at Johns Hopkins (at R.G. Parr). Assistant and Associate Professor in St. Louis, USA, from 1969-1975. Since then Professor of Theoretical Chemistry at the University of Hannover where he developed his [SINDO-Method](#).

The article is also available in:

[PDF, English](#).

(Please use the BACK button or return to <http://www.quantum-chemistry-history.com/Jug1.htm>.)

<a href="#">Video clip</a>	Jug talks briefly about SINDO	DivX; 5 MB	Just in case, for Win9x,ME,XP: Get the free download player from <a href="#">DivX-Company</a> . . Or you may use Microsoft Media Player 9 or 10, after having installed above the Divx Player (which also installs the codecs) : <a href="http://www.microsoft.com/">http://www.microsoft.com/</a> . .	in German
<a href="#">Video clip download</a>	Jug talks briefly about SINDO (40 sec)	ZIP/AVI, Indeo 5.04; 5 MB	Just in case: Get the Indeo-driver 5.04 in case of emergency <a href="#">here</a> (2 MB). This driver should also work with newer MS Media Players, I guess.	in German
<a href="#">Sound clip</a>	Jug talks about his SINDO method (5 min)	WAV, mono; 4 MB	-	in German

<a href="#">Sound clip</a>	Jug talks about his SINDO method (5 min)	MP3, stereo; 3 MB	This is the stereo version of the above, using newer filtering methods.	in German
----------------------------	--	-------------------	---	-----------

## Interview mit Professor Karl Jug (*in Deutsch*)

Hannover, Univ., Institut Theoretische Chemie, 18. Nov. 1998; 14:00

**Dr. Anders:** Herr Professor Jug, vielen Dank für den Termin, den Sie für dieses Interview freigehalten haben. Denn als Institutsleiter, Editor, Autor (1) und Coautor von Buch- und Zeitschriftenartikeln, es sind deren rund 200, sind Sie sicher vielbeschäftigt Und um gleich mit der Tür ins Haus zu fallen, darf ich Sie fragen, wann sind Sie geboren?

**Prof. Jug:** 1939.

**A:** Damit gehören Sie von der Quantenmechanik oder Quantenchemie her gesehen zur zweiten Generation.

**J:** Richtig, ja, das stimmt.

**A:** Wie kamen Sie zur Quantenchemie und wo haben Sie Ihre Quantenchemie gelernt?

**J:** Ich bin Physiker, habe in Frankfurt studiert. Und mehr durch einen Zufall habe ich im ersten Semester Physikalische Chemie bei Hartmann (2) gehört, die allen Chemikern sehr schwerfiel; das war auch für dritte und fünfte Semester. Ich habe versucht, mit dieser physikalischen Chemie die allgemeine Chemie zu verstehen, die dazu parallel lief. Und Hartmann hatte damals seine Vorlesung schon stark mathematisiert; er hat also Dinge da reingebracht, die ja für die damalige Zeit doch sehr ungewöhnlich waren, den Residuensatz der Funktionentheorie zum Beispiel. Das hat mich sehr angezogen als Physiker, zumal ich mich früher auch schon mit Funktionentheorie befaßt hatte und dadurch einen leichteren Zugang zu diesen Ideen hatte. Und als ich dann, etwa im siebten Semester, anfang mir Gedanken zu machen, was ich denn mal später machen sollte, da schwebte mir eigentlich zunächst vor, vielleicht Kernphysik oder Theoretische Physik zu wählen. Und dann - -

**A:** Wann war das?

**J:** Das war so 1961 bis 1963. Da fing ich an, mir Gedanken zu machen, wie es weitergehen sollte. Ich machte deshalb alle möglichen Praktika, eigentlich alle Praktika, die es in der Physik gab, mehr als gefordert. Nur um schließlich festzustellen: das ist alles nicht so interessant. Und die Kollegen in der Theoretischen Physik waren zum Teil schon wieder auf der Wanderung begriffen zu anderen Universitäten oder kamen - zum Beispiel Greiner (3) war gerade erst gekommen - als ich schon fertig war. Und Herr Steinwedel war dort, Süßmann, Beck.

Aber - ich muß sagen, als ich hörte, daß man auch bei Hartmann als Physiker eine Diplomarbeit machen konnte, und zwar über Molekültheorie, da dachte ich, daß mich das sehr interessieren könnte. Ich bin also zu Hartmann gegangen, das war 1963, ich war im achten Semester, und fragte ihn, ob ich auch so eine Arbeit machen könnte. Und da hat er mir zwei Gebiete zur Wahl gestellt: einmal Statistik, das Ising-Modell (4), da hatten mich andere schon davor gewarnt, und Molekülphysik, ja, so hat man es meist noch ausgedrückt, oder Molekültheorie. Und ich sagte, ich möchte lieber über Moleküle arbeiten.

Und diese Entscheidung war ganz richtig. Ich habe also erst mal das Buch von Ballhausen in die Hand gedrückt bekommen, das hatte er gerade publiziert, die Ligandenfeldtheorie (5). Hartmann sagte zu mir: Wenn Sie gelesen haben, was Sie wissen wollen, dann kommen Sie wieder. Nach einer Woche kam ich wieder; ich hatte das halbe Buch schon durch und wollte dann meine Arbeit beginnen.

Aber wie das damals so in der Physik war, heute auch noch hier so ist: diese Arbeiten waren zeitlich unbegrenzt. Nicht die in der Chemie, wir haben hier in Hannover Chemie-Diplomarbeiten, die sechs Monate dauern. Aber, wie gesagt, in der Physik waren früher diese Arbeiten unbegrenzt und es gab durchaus den einen oder anderen, der viele Jahre an seiner Diplomarbeit saß.

Nun, ich hatte da etwas Glück, denn in diesem Institut stand eine Zuse-Maschine (6). Das war die einzige Rechenmaschine, die es in Frankfurt an der Universität gab. Da war Hartmann also sehr vorausblickend. Ich habe an einem Titankomplex gearbeitet - Übergänge, Spektren - das war alles gut bekannt. Aber ich sollte es jetzt nochmal etwas anders machen, und zwar mit genäherten Funktionen aus einem Kastenmodell (7). Dabei sollte die Elektronenwechselwirkung berücksichtigt werden. Es stellte sich leider bald heraus, daß man dazu Produkte von vier Bessel-Funktionen brauchte und darüber ein Doppelintegral bilden muß, wofür es keine Formeln gab - ich habe selber noch für einige dieser Integrale neue Formeln abgeleitet.

Damit meine Diplomarbeit nicht zu lange dauerte, mußte ich irgendwann mal auf die Numerik umsteigen, wozu auch diese Zuse-Maschine leider nicht mehr ausreichte. Ich mußte daher nach Mainz gehen und habe dort an der Universität in der Nacht gearbeitet, von abends acht bis morgens acht, wenn keiner die Maschine brauchte. Man mußte sie damals noch selbst bedienen. Ich stand da und drückte irgendwelche Knöpfe, um sie zu starten (*sog. Urlader - es war die Zeit vor irgendwelchen EPROMS. Interviewers Notiz*), sie funktionierte. Ich bin einige Male hingegangen und konnte so meine Diplomarbeit (8) abschließen -

**A:** Entschuldigung, was für eine Rechenmaschine war das?

**J:** Das war schon eine kleine IBM-Maschine, ich habe an ihr noch mit ALGOL gerechnet (9). ALGOL war damals die Sprache der Wahl, die war ja auch ein bißchen höherstehend als dieses FORTRAN II (10). Ich hatte also mit Lochstreifen zu tun, weniger mit Lochkarten, die eigentlich erst später kamen. Im Umgang mit diesen Lochstreifen mußte man schrecklich aufpassen, daß man sie nicht zerriß, sonst war ein Teil der Arbeit hinüber und man hatte wieder etwas Mühe, sie neu zu erstellen. Also, es war noch relativ primitiv.

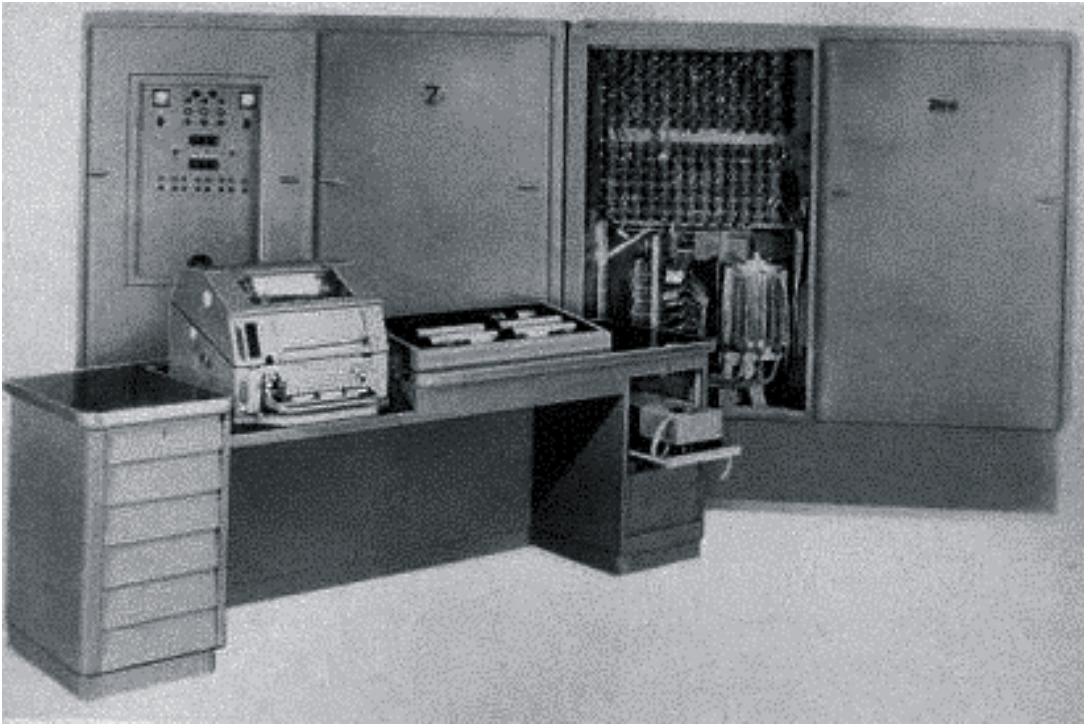
Die Zuse war natürlich von den Dimensionen für heutige Verhältnisse riesengroß. Das war ein freistehendes System, etwa so groß wie ein kleiner Schrank, mindestens 2 Meter breit, 1 Meter tief, und etwa ein 1.50 Meter hoch. Auf Tischhöhe war dann ein Bedienungsbrett befestigt, woran man sitzen und schreiben konnte.

**A:** Auf Assembler-Ebene oder auf welcher Ebene war das?

**J:** Assembler oder ALGOL. Aber ich selber habe nur ALGOL gebraucht.

**A:** Was für ein Typ von Zuse war das

**J:** Das weiß ich nicht mehr, aus folgendem Grund: Für Hartmann waren diese Arbeiten nebensächlich, das muß man ganz klar sagen. Der ist natürlich aus einer Generation herausgewachsen, die ja noch keine theoretische Chemie gelernt hat, schon gar keine Computeranwendung. Zwar war er sehr großzügig im Beschaffen von Mitteln, aber hielt nicht so sehr viel von Rechenmaschinen. Wer aber mit so einer Maschine arbeiten wollte, den hatte er unterstützt. Es war damals allerdings noch nicht angemessen, daß einer seine Leistung der Rechnung an der Maschine herausstellte, und ich hatte auch in dem Sinne nichts besonderes gemacht, jedenfalls nicht, solange ich in Frankfurt war. Es gab auch nur wenige Leute, die sich mit der zugrunde liegenden Theorie befaßten und etwas allgemeineres programmiert hatten. Wir haben gezielt Programme geschrieben, die unser Problem lösten, das wir gerade vorhatten. Das waren keine Universalprogramme, sie waren zweckgebunden, die dann natürlich ihren Zweck verloren hatten, wenn man diese Sache zu Ende gebracht hatte.



**A:** Leider gibt es nirgendwo alte Programme oder die Leute wollen sie nur nicht herausrücken. Ich komme nirgendwo an ein altes FORTRAN II, an ein altes ALGOL-Programm. Haben Sie noch alte Ausdrucke?

**J:** Es ist so: Ich hatte später, im Rahmen meiner Doktorarbeit in Frankfurt und anschließend in Darmstadt, mit ALGOL gerechnet. Da gab es diese größere Maschine, eine IBM 7090 war es, die erste große Maschine (11). Aber als ich nach USA kam, war ALGOL natürlich hinfällig. Da mußte ich alles in FORTRAN umschreiben. Sicherheitshalber hatte ich diese großen Lochkarten-Kästen immer mitgeschleppt, denn man mußte ja alles per Hand auf den Lochkarten eingeben. Das waren durchaus größere Mengen von Lochkarten, vielleicht so 3000 im Laufe der Zeit und die habe ich noch mit nach Hannover gebracht, als ich später wieder aus USA zurückkam. Aber nach zehn Jahren habe ich gesagt, Schluß. Und dann wurden die Lochkarten nur noch für Notizen verwendet; wir haben noch viele dieser Lochkarten.

LP	CR	QTR	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40								
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0						
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2		
3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3		
4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	
5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5		
6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6		
7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7		
8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	
9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9

HUMMEL KO. 3714

Wir haben auch im Keller noch solche Programme, das ist dann schon FORTRAN IV gewesen (10), vielleicht das letzte sogar noch FORTRAN V (12), datiert aus der Zeit in Hannover. Aber aus der älteren Zeit gibt's also leider nichts mehr. Auch diese vorhin angesprochenen Lochstreifen existieren nicht mehr, man kann das nicht mehr nachvollziehen. Ich hätte wahrscheinlich auch Schwierigkeiten zu überlegen, ob ich diese Programme noch irgendwo habe; geschrieben habe ich sie ja, aber diese Ausdrücke habe ich wahrscheinlich auch nicht mehr.

**A:** Das ist schade. Meine ursprüngliche Idee war ja, diese Dinger mal vielleicht auf einer CD, auf der ja viel Platz ist, mitzuliefern, sie als Materialien anzufügen. Schade, denn ein Stück Geschichte geht auf diese Weise verloren!

**J:** Ja, aber bedenken Sie, es sind inzwischen schon 35 Jahre, die da vergangen sind!

**A:** Ja natürlich. Aber für jemanden, der Geschichte wiedergeben, will ist das bedauerlich. Ich möchte ja gerade den Stand in dieser frühen Zeit der Quantenchemie wieder ein wenig zum Leben bringen, mindestens zu beschreiben, jenseits der Literatur. Weiter gefragt: Wie war damals die Stimmung in den 70er Jahren, wo ich ja auch zur Quantenchemie, zu Fraga (13), wechseln wollte.

**J:** Ja, Fraga war ein bekannter Mann damals.

**A:** Ja, und dann bin ich letztlich, wegen der Berufsaussichten, doch Analytiker geworden und interessiere mich dort unter anderem für die Reinhaltung des Bodenseewassers.

**J:** Ja, in der Theorie sind wir nun auch bald soweit, ich meine, wir kommen der praktischen Anwendung immer näher. Es hat lange Zeit gebraucht, aber früher war es einfach so, daß man doch sehr puristisch vorgegangen ist. Da ging es um die Lösung mathematischer Fragestellungen, die so ein bißchen in Chemie eingebunden waren. Aber die wirklichen chemischen Fragestellungen hat man nur vereinzelt behandelt, und dann auch sehr genähert. Spektroskopie war vielleicht ein Teil, von Hückel her noch, und später kamen die Strukturen von Molekülen dazu. Aber im Laufe der Zeit hat sich vieles geändert.



IBM 7090

**A:** Wie war die Stimmung damals, Anfang der 60er Jahre?

**J:** Die war sehr optimistisch. Als ich anfing bei Hartmann, war da schon eine recht große Gruppe. Das waren fast alles Leute, die viel älter waren als ich und die auch keine ausgebildeten Theoretiker waren. Ich war einer der allerersten, die gewissermaßen Theorie von

der Pike auf gelernt haben. Auch im Hartmannschen Institut gab es viele Doktoranden und Promovierte, die das eben erst nachgelernt haben. Immerhin war die Gruppe der Theoretiker schon groß, es können ungefähr 20 gewesen sein. Andererseits gab es im Hartmannschen Institut insgesamt über 100 Leute, da war diese Theoriegruppe immer noch eine Minorität. Aber eine, ich möchte mal sagen, geachtete, weil Hartmann ein großes Interesse an diesen Dingen hatte. Er hatte Anfang der 60er Jahre begonnen, in Konstanz diese Sommerschulen zu machen, in der alten Ingenieurschule, als Nachholbedarf für Chemiker in Deutschland. Im wesentlichen sah das so aus: da wurden also drei Wochen lang Vorlesungen und Übungen gehalten und ich war dann, als ich '63 anfang, als Diplomand schon dabei als einer der Helfer. Ich konnte also eine dieser Übungen leiten und viele Ältere waren also bei mir in dieser Übung. Ich habe zum Beispiel auch Herrn Bock (14) noch ausgebildet, obwohl der das heute vielleicht nicht mehr hören möchte (lacht). Aber die Vorlesung habe ich natürlich nicht gehalten. Bock war damals Habilitand, muß man sagen, als ich an der Doktorarbeit saß und promoviert hatte. Einige Jahre später hat er dann auch mit Heilbronner (15) diese doch recht bekannten Bücher geschrieben (16).

**A:** Die immer noch sehr beliebt sind bei Studenten - - -

**J:** Weil das eben eine Möglichkeit war, Chemie stärker einzubringen. Was durchaus im Rahmen der Zeit nötig war.

**A:** Ist Bock auch theoretisch tätig gewesen in dieser Zeit?

**J:** Bock hat sich nie als Theoretiker bezeichnet, bei Theoretikern jedenfalls nie. Er ist Anwender, er hat natürlich ein großes Interesse gehabt und er hat wohl auch in seiner Habilitation so eine Art Ausflug in die Theorie mitgemacht (17). Das war in München. Ich bin jetzt nicht ganz sicher, bei wem Bock diese Arbeit gemacht hat {bei E. Wiberg, Prof. Anorg. Chem. Univ. München. I. N}. Aber der war eben auch damals noch mit dabei, wie viele andere auch - - -

**A:** Als Physiker hatten Sie natürlich einen mathematischen Vorsprung?

**J:** Ja, ja. Also ich war selber nur dreimal bei diesen Sommerschulen. Die erste, bei der ich nicht dabei war, ging über die Ligandenfeldtheorie. Und die zweite war 1963 über  $\pi$ -Elektronensysteme, und da war auch Parr (18) dabei, natürlich, aber auch Fukui (19) hatte dort einen Vortrag gehalten, den man aber nur sehr, sehr schlecht verstehen konnte, weil er sehr schlecht Englisch sprach. Und die Tragweite seiner Arbeiten war mir damals wohl noch nicht so bewußt, weil ich ihn kaum verstehen konnte. Auch McWeeny (20) war dort, viele bekannte Leute.

**A:** Frau Pullman auch? In ihrem Interview (21) erzählte sie, daß sie auch irgendwann einmal in Konstanz gewesen war.

**J:** Nein, sicherlich viel später. Also Anfang der 60er Jahre noch nicht. Später gab es alle zwei Jahre eine Sommerschule, die schon einen Symposiumcharakter angenommen hatte. 1965 war dann nochmal eine über Kinetik, da war Herschbach (22) dabei, Nikitin (23) und - - -

**A:** Daudel ?

**J:** Daudel (24) war nicht dabei. Ich habe diese Unterlagen alle noch, also ich könnte es raussuchen, wer alles da war (lacht). Aber dann hat Hartmann auch in dieser Zeit schon dran gedacht, über die Sommerschulen hinauszugehen, in dem Sinne, daß wir uns als Theoretiker irgendwie akzentuieren müßten. Wir waren damals nur eine Handvoll. In der Folge hat er deshalb im April '65 ein Symposium für Theoretische Chemie ins Leben gerufen, das er alleine geleitet hat. Das erste fand daher auch in Frankfurt statt (25). Das war, kurz bevor ich meine Doktorprüfung gemacht habe (26). Ich hatte zwar meine Arbeit schon fertig, und Hartmann hat dann auch darauf Bezug genommen in seinem Vortrag - ich habe natürlich da nicht vorgetragen. Es waren Leute anwesend wie Herr Ruch (27), und ältere, die man heute schon kaum mehr kennt, die alle schon weg sind. Preuß (28), aber auch Kutzelnigg (29) war damals schon dabei, und einige andere. Ich habe das später mal wieder aufgegriffen, ich habe selber 30 Jahre später dieses Symposium organisiert, hier in der Nähe von Hannover (30). Und es waren dann bei diesem Symposium allerdings nur noch ungefähr 10 Personen dabei, die auch schon '65 dabei waren. Die Zeit ist doch recht schnell vergangen, wenn man so zurückgeht. Und diese Symposia, die haben natürlich auch wieder so Wirkungen, gewisse Ideen zu forcieren. Da gab's also auch die semiempirischen Theorien, noch auf dem Hückel-Niveau. Hartmann selber hatte ja auch noch dran gearbeitet -

**A:** Darf ich Sie unterbrechen? Sehr interessant, was Sie erzählen. Da gab es doch - ich nenne im Moment die Quelle nicht, es war etwas ironisch - da gab es doch die Verbesserung der Hückeltheorie durch Hartmann. War da ein Fehler drin?

**J:** Es war eine Arbeit über die Erweiterung des Basissatzes (31). Also die 2p-Orbitale, das ist natürlich das übliche gewesen für  $\pi$ -Elektronen; er wollte 3p dazunehmen, um so eine bestimmte Regel zu belegen, die Regel von Scheibe (32), was ihn sehr bewegt hat. Da hat nicht nur er dran gearbeitet, auch Herr Ruch hat daran gearbeitet (33). Ich denke mal, die Sache ist deshalb eingeschlafen, weil man zwar im Prinzip mit dieser Basissatz-Erweiterung auch einen Teil dieses Phänomens erklären konnte, man aber eigentlich noch mehr Funktionen dazu gebraucht hätte und daß ferner die 3d's noch viel wichtiger gewesen wären.

**A:** Das zu ironisieren wäre dann also etwas übertrieben?

**J:** Ja, ich würde so sagen: Die Idee der Entwicklung, die überholt ist, kommt zu einem Ende. So ist es gewesen, es war ein Versuch, der damals durchaus interessant schien, denn Überlegungen zur Basissatz-Erweiterung sind auch sehr wichtig.

**A:** Aber formale Fehler waren da nicht zu entdecken?

**J:** Nein. Ich denke mal, bis auf die Symmetrie, wo man besser noch 3d hätte einbauen müssen, waren sie grundsätzlich nicht falsch. Aber es war einfach so, daß der Sprung, den man damals gemacht hat, um sie zu verbessern, einfach nicht groß genug war.

**A:** Nach Ihrer Promotion - - -

**J:** Ich war dann später auch noch Redaktionsleiter der Zeitschrift *Theoretica Chimica Acta* (34) nach meiner Promotion. Also ich war 25, als ich -

**A:** Sie machten viele Rezensionen - Sie waren sehr fleißig!

**J:** Da war ich 26 Jahre. Gut, diese Rezensionen habe ich geschrieben eigentlich so ein bißchen gegen die Stimmung bei Hartmann. Diese Bücher waren die *Advances in Quantum Chemistry* von Löwdin. Löwdin hatte damals die sogenannten *Grünen Hefte* (35) herausgegeben, also interne Berichte, die zunächst nicht publiziert wurden, die aber bei seinen eigenen Sommerschulen verwandt wurden. Und ich habe auch noch einige von diesen grünen Heften. Hartmann war dabei so ein bißchen skeptisch. Andererseits war aber das auch wieder ein Schritt weiter, eine ganze Serie, wo man schon *Reviews* schreiben konnte über die Leistungen in der Quantenchemie. Nachdem also der Verlag interessiert war, auch Bücher rezensieren zu lassen, landete das bei mir, weil ich ja der Redaktionsleiter war. Und ich hatte damals natürlich noch nicht soviel Geld, ich dachte: so ein Buch ist sehr teuer, es hat damals vielleicht 180 DM gekostet, und ich sagte mir, daß ich mir einmal das Geld für den Kauf spare und zum zweiten daß ich all das lerne, was da drin steht, wenn ich das bespreche.

Das war also durchaus sehr eigennützig und ich habe dann einige *Reviews* geschrieben und bin dann '67, das war zwei Jahre nach meiner Promotion, nochmal zu Löwdin nach Uppsala zur Sommerschule gegangen. Da hatte Löwdin natürlich die *Reviews* schon gelesen und war sehr angetan und hat mir angeboten, ich sollte sie in Zukunft auch immer weiter rezensieren und darüber schreiben, denn auch für ihn war das, glaub ich, gut, denn die Bände waren ja nicht so bekannt. Wenn man nur ein paar davon verkauft, dann ist die Breitenwirkung auch nicht so groß und auf diese Weise hatten also eigentlich sehr viele Leute von diesen *Advances in Quantum Chemistry* (36) erfahren. Da stehen die übrigens noch - aber irgendwann habe ich aufgehört, sie zu abonnieren. Denn ich habe nur acht rezensiert und dann habe ich gesagt, jetzt reicht's, ich glaube, jetzt kann auch mal ein anderer darüber was schreiben. Und inzwischen sind es über 20 Bände. Damals war das eine hochinteressante Sache. Ich habe also auf breiter Basis Quantenchemie gelernt.

Aber hauptsächlich kamen zu dieser Zeitschrift eben semiempirische Arbeiten, auch von Pullman noch natürlich, und sogar Ladik (37), Berthier (38) - sicher, alle diese Arbeiten habe ich gelesen. Wir hatten damals ein System, das war noch stark lokal orientiert. Mein Vorgänger, Herr von Hirschhausen, war der erste Redaktionsleiter, der arbeitete aber gleichzeitig noch an seiner Doktorarbeit. Eines Tages sagte Hartmann: also der muß jetzt mal seine Doktorarbeit zu Ende bringen. Und er hatte mir angeboten, sobald ich fertig wäre, für eine Stelle entweder als Vorlesungsassistent zu wirken, also die Tafel auszuwischen, oder die Zeitschrift zu leiten. Da habe ich mich entschieden, die Zeitschrift zu leiten und dadurch wurde von Hirschhausen entlastet. Ich habe dann mit drei weiteren Mitarbeitern die Arbeit gemacht. Zwei der früheren Mitarbeiter schieden aus, weil sie nicht unter der Leitung eines so jungen Mannes arbeiten wollten - und die anderen waren dann vielleicht nur so alt wie ich oder ein, zwei Jahre älter. Nur Herr Reinsch war deutlich älter und hat noch mitgewirkt und ist dann wiederum mein Nachfolger geworden.

**A:** Wie kam es zum Start der *Theoretica Chimica Acta* (39)? Wie lief da die Geschichte mit Hartmann und Springer-Verlag?



**J:** Ja, das war ganz einfach. Wir haben nämlich alles in Frankfurt gemacht: Wir haben nicht nur die Manuskripte registriert, wir haben sie sogar alle begutachtet. Wir haben die Manuskripte dann an Springer geschickt und kriegten dafür einen kleinen Zuschuß von Springer, den wir uns dann teilen konnten, womit wir unser bescheidenes Salär etwas aufgebessert haben. Für den Verlag war das sehr günstig.

**A:** Entschuldigung - ist da Springer an Hartmann 'rangetreten oder umgekehrt. Wissen Sie wie das war?

**J:** Ich weiß es nicht ganz genau, denn die Zeitschrift existierte schon ungefähr ein halbes oder ein dreiviertel Jahr, bevor ich überhaupt in dieses Institut kam. Und als ich die Zeitschrift übernommen habe, 1965, war sie erst zweieinhalb Jahre alt. Aber es lief alles reibungslos; das Lektorat bestand aus einem Ehepaar, den Mayer-Kaupps, die sich darum gekümmert haben. Die waren damals unser Kontakt zum Springer-Verlag; ich hatte nur mit Frau Mayer-Kaupp zu tun. Ich nehme an, daß Herr Dr. Mayer-Kaupp Chemiker war, wenn ich das richtig in Erinnerung habe. Später kam dann Herr Boschke und jetzt sind natürlich wieder andere dort. Aber die zwei Jahre, in denen ich das gemacht habe, hatte ich es mit Frau Mayer-Kaupp zu tun, wobei wir unseren Kontakt weitgehend telefonisch abgewickelt haben, es lief alles ganz einfach. Das einzige, was sich während meiner Zeit geändert hat, war, daß ich eines Tages merkte, die Zeitschrift wuchs ja. Am Anfang waren es wenige Manuskripte. Es wurden immer mehr und ich habe immer wieder begutachtet und auch andere - - -

Und jetzt komme ich zum entscheidenden Punkt: Nämlich, warum habe ich mich für semiempirische Methoden interessiert. Einmal, weil ein großer Teil der Manuskripte über solche Methoden war, und zum anderen, da Hartmann selbst wenig Zeit hatte, hatte er uns das vollständig überlassen. Ich sehe heute - früher habe ich das nicht so ganz verstanden - wie das ist, wenn man wenig Zeit hat! Wir haben ihn nur gefragt, wenn es um ganz kritische Fälle ging - und die möchte ich jetzt nicht unbedingt diskutieren - - .

Wir haben deshalb semiempirische Methoden verstehen müssen. Wir haben sie zum Teil gekannt, aber wir mußten dazu lernen, um sie besser verstehen zu können und dabei fiel mir auf, daß es ja schon ganz systematische Arbeiten darüber gab: das waren die Arbeiten von Lykos und Parr aus den 50er Jahren noch (40) - - -

**A:** Und das Buch von Parr (41) - -

**J:** Parr steht hier sogar, dort schräg hinter Ihnen -(*zeigt auf sein Bücherregal I. N.*), den habe ich damals auch relativ schnell gekauft, das andere da ist jetzt das neue Buch von Parr, über DFT (95b). Über das erste Buch hat Parr damals, schon '63, in Konstanz vorgetragen. Kurz danach, im gleichen Jahr, erschien das Buch. Ich kannte Parr von daher seit '63 und habe mich auch für diese Methoden natürlich interessiert. Als ich mich entschieden hatte, daß ich auch mal einen Ortswechsel brauchte - ich hatte ja in Frankfurt studiert, war da acht Jahre gewesen - bin ich dann nach Chicago gegangen. Ich hatte deswegen einige Leute angeschrieben und die schnellste positive Antwort war eben die von Peter Lykos gewesen, der sagte, daß er gerade Geld zur Verfügung hätte. Ich konnte zum Beispiel nicht zu Martin Karplus gehen, der auch Interesse hatte, der aber damals keine Stelle frei hatte und der mich an die NATO verwiesen hatte, die aber zu der Zeit keine Stipendiengelder frei hatte (43). Da dachte ich gut, ich wollte ohnehin schon immer mehr über semiempirische Methoden wissen, dann gehe ich also nach Chicago und lerne das.

Die Enttäuschung war aber doch recht groß: Als ich nämlich dort ankam, arbeitete Peter Lykos gar nicht mehr an diesen Methoden. Es war ja auch schon 1967, und er fing gerade mit den *ab initio* Methoden an und wollte dazu die Konfigurations-Wechselwirkung. In drei Monaten habe ich ein spezielles Programm geschrieben, über MC-SCF. Die ersten Arbeiten waren aus dieser Zeit. An der Universität von Chicago war Herr Hinze (44) schon als Assistant Professor, der an allgemeineren Programmen dieser Art geschrieben hat. Ich war Postdoc am Illinois Institute of Technology.

Der andere, der in Argonne auch an Programmen dieser Art schrieb, war A.C. Wahl (45). Und Lykos hatte diese Idee gehabt, daß er es selbst auch nochmal machen könne. Ein Doktorand von Lykos, der von Wahl betreut wurde, schrieb daher ein spezielles MC-SCF Rahmenprogramm. Nun hatte der wohl schon vier Jahre dort abgesehen und Lykos meinte, daß der jetzt fertig werden müßte, die Arbeit würde etwas drängen. Er gab mir die Aufgabe und ich habe dieses Programm in drei Monaten geschrieben, worauf der Student sehr unruhig wurde, da ich ihn innerhalb kurzer Zeit überholt hatte. Die Folge davon war, daß mir der Herr Wahl den Zugang zu seinem Integralprogramm brüsk abgeschnitten hat! Ich konnte gar nicht mehr weiter arbeiten. Wir mußten dann Klimmzüge machen; und ich bin auf die Idee gekommen, das Programm, das McLean und Yoshimine für Integrale und Rechnungen an kleinen Molekülen geschrieben hatten (46), zu benutzen. Ich habe in dieses Programm eingegriffen, da Integrale rausgeholt. Das war auch mit Komplikationen verbunden (*nachdenklich, I. N.*) - - -. So haben wir diese Klippe umschifft.

Es war eine kleine, aber effektive Gruppe bei Lykos, vier, fünf Leute, alles Doktoranden, ich war der einzige Postdoc. Während dieser

Zeit gab es Seminare und Lykos kam auf die Idee, daß ich auch so eine Seminarreihe abhalten sollte. Ich habe dann 12 Vorträge in 12 aufeinander folgenden Wochen gehalten, ein ganzes Seminarprogramm bestritten, das war ein ganzes Semester. Ich hatte mich vorbereitet, indem ich die Originalliteratur las, also von Parr, von Pople (47), von Fischer-Hjalms (48), von Koutecky (49) - und wer alles damals da war. Ich habe das wohl so gut gemacht, daß Lykos mir vorgeschlagen hat, ich sollte das doch mal schriftlich niederlegen. Ich war damals noch sehr jung und sehr naiv und habe gesagt: naja, gut, ich habe ja alles alleine gemacht, folglich mache ich eine Arbeit, da steht nur mein Name drauf.

Das war sehr, sehr ungewöhnlich für amerikanische Verhältnisse, denn normalerweise hätte der Name von Lykos da auch draufstehen müssen. Aber der hat es nicht nur toleriert, sondern auch gefördert, weil er sehr großzügig war, und so sind wir auch heute noch in Verbindung, freundschaftlich verbunden, obwohl er 12 Jahre älter ist und auch seinen 70. Geburtstag jetzt schon überschritten hat. Meine Hauptleistung war also diese Vortragsreihe über semiempirische Methoden, das andere ließ sich ja nicht realisieren, weil wir die Integrale nicht mehr bekamen für mein MC-SCF-Programm (*lacht, I. N.*).

Und dann habe ich auf Vorschlag von Lykos daraus ein Manuskript gemacht. Das war das längste, das ich je in meinem Leben geschrieben habe, außer meinem Buch natürlich, es hatte 80 Schreibmaschinenseiten. Das habe ich an alle Leute geschickt, die damals bekannt waren, an Parr, an Pople, an Koutecky, Frau Fischer-Hjalms, ich glaube auch an Berthier, und noch weitere, die sind dann auch alle genannt, ganz zum Schluß, es waren, glaub ich, sieben Leute. Und alle haben sehr positiv reagiert, denn ich war der erste, der eine gemeinsame Nomenklatur gewählt hatte. Alle hatten ja völlig anders geschrieben, und es war sehr schwer, diese Arbeiten zu lesen. Ich hatte das vereinheitlicht, hatte die Methoden vergleichbar gemacht, hatte sie gewissermaßen gestaffelt. Auch Ruedenberg zum Beispiel ist ja in diesem Artikel mit dabei, und klar, daß Ruedenberg (50) damals auch noch ein großes Interesse an semiempirischen Methoden hatte. Kurz vorher hatte Pople diese zweite Serie CNDO (51), NDDO (52), INDO (53) publiziert, und da hat er mit INDO eben einen Kompromiß gefunden. CNDO war die vollständige Vernachlässigung der Überlappungen, NDDO war schon eine relativ geringe Vernachlässigung, es war innerhalb einer kurzen Zeitspanne nur sehr schwer zu implementieren. Diese Methoden haben aber damals nicht so gut funktioniert, die Genauigkeit war nicht groß genug und deshalb hat Pople das Gebiet verlassen (54). Er hat in diese Entwicklung nur noch, ich würde mal sagen, drei Jahre reingesteckt, obwohl er mit guten Mitarbeitern durchaus in der Lage gewesen wäre, auch diese Methoden noch weiter zu verbessern. Er selber hat eben auch kurzfristig keine Möglichkeiten gesehen, sie zu verbessern und ist dann auf *ab initio*-Rechnungen umgestiegen, auf Gaußfunktionen, die er ja auch nicht eingeführt hat, sondern die von Boys stammten (55) und unter anderen auch zum Beispiel später von Preuß in den 60er Jahren bearbeitet wurden (56).

**A:** McWeeny behauptet, er hätte die Gaussians schon vor Boys gehabt. Er hatte eine kristallographische Arbeit (57) gemacht, als Physiker, und da wäre er da drauf gestoßen, sagte er in seinem Interview (58). Es muß vielleicht auch so in der Luft gelegen haben, vielleicht gab es auch eine gewisse Parallelität?

**J:** Das ist durchaus denkbar, weil viele dieser Arbeiten jetzt einfach vergessen sind. Ich habe selber auch noch eine Arbeit über die Hückelmethode geschrieben. Und zwar war das im *Journal of Chemical Physics*, 1969 (59). Ich habe jetzt erneut nachgelesen, worum es damals ging: Die Hückelmethode produziert Orbitalenergien, die gleichzeitig als Summe die Gesamtenergie ergeben sollen, während das SCF-Verfahren, das hinterher von Frau Fischer-Hjalms in die Hückelmethode hineininterpretiert worden ist, es nicht erlaubt, daß die Gesamtenergie die Summe dieser besetzten Hückel-Orbitalenergien ist. Diese Diskrepanz kann sehr leicht bereinigt werden, wenn man den Operator etwas anders definiert. Das war damals noch eine interessante Übung, die parallel zu diesem *Review* lief und die dann zumindest vom Erkenntnistheoretischen her auch die Interpretation von Frau Fischer-Hjalms etwas gefestigt hatte. Das war zwar schon nach Pople, mit dieser zweiten Serie von Arbeiten (60). Aber das Verständnis für die noch einfacheren Methoden kam ja doch sehr spät, das ist von Frau Fischer-Hjalms etwa um 1965 (61) gemacht worden. Ich kannte sie damals nicht persönlich - -

Ich hatte übrigens auch Roald Hoffmann (62) angeschrieben, natürlich auch weil er viel auf diesem Gebiet gemacht hat, um das mit einzubauen, Meine Kontakte mit Hoffmann gehen also auf die Zeit zurück, als ich diesen *Review*-Artikel geschrieben habe. Heute ist er ein Freund von mir.

**A:** Wo ist Hoffmann heute?

**J:** Der ist an Cornell, in Ithaca, New York. Das ist so ein bißchen nördlich von New York City. Da ist es ganz schön. Ich war selber nur einmal dort, 1980, also ein Jahr bevor er den Nobelpreis bekommen hat und er hat damals ja große Auseinandersetzungen mit Dewar (63) gehabt.

Dewar war ein etwas merkwürdiger Mensch, ich kannte ihn lange Zeit auch nicht persönlich. Ich habe ihn erst 1976 kennengelernt. Hoffmann hatte ich früher kennen gelernt, das war schon '73, das war auch in USA natürlich auf einer Konferenz und Hoffmann ist ja

auch immer ein großer Diplomat gewesen. Er war sehr dezidiert in seiner Meinung, die er aber nicht immer so dezidiert ausgedrückt hat. Dewar hat die Kontoverse schon eher gesucht (64).

Anfang der 70er Jahre habe ich mich in den USA umgeschaut, mich beworben, etwas naiv, würde man sagen: Ich habe einfach an die besten Universitäten geschrieben und dachte, jetzt kommt eine Antwort und dann können die ja sehen, was ich nun kann und dann wird man vielleicht auch mal eingeladen. Was im allgemeinen gar nicht üblich ist, die Leute schauen sich selber um und laden jemanden ein. Ich schrieb also unter anderem auch nach Berkeley, ich würde mich da als Assistant Professor betätigen wollen; damals war Pimentel (65) Chairman. Er schrieb mir einen sehr freundlichen Brief mit etwa folgendem Resumée: "Wir haben Ihre Bewerbung hier zur Kenntnis genommen, vielen Dank, *we will put it on file*". Was soviel bedeutet, wie in einen Ordner stecken. Aber so viel Englisch kannte ich noch nicht, daß das nur hieß, daß der sich das wahrscheinlich nie mehr angucken würde, weil schon so viele andere da drin steckten - -und es kam leider auch nicht dazu.

Als ich auch mit Lykos darüber sprach, wie so eine Bewerbung läuft, habe ich mich dann informiert, wo denn nun wirklich Stellen frei wären, wo Theoretiker gesucht würden und da war also eine Stelle in St. Louis frei. Zunächst mal aber noch nicht so präzisiert auf Theorie hin. Ich schrieb hin und der Vorsitzende der Berufungskommission schrieb mir dann zurück: "Es ist sehr schön, daß Sie sich beworben haben. Wir haben uns diesmal für einen Anorganiker entschieden, aber wir möchten noch weiter Hochschullehrer rekrutieren und im nächsten Jahr gibt es wahrscheinlich wieder eine Stelle." Ich habe gesagt: na gut, macht ja nichts, ich bewerbe mich dann wieder. Habe dann einfach auf Verdacht hin geschrieben und bin auch eingeladen worden. Und mußte mich allerdings auch schon gegen junge amerikanische Kollegen behaupten. Es ist nicht so ganz einfach für einen Deutschen, sich da zu etablieren - ich habe mich jedoch durchsetzen können. Zum Glück auch gegen Leute, die von Harvard kamen und die in St. Louis auch gerne eine Stelle gehabt hätten. Es gab sogar jemand, der war als Theoretiker Assistant Professor an der University of Illinois in Urbana, und man munkelte, daß er jetzt kein *tenure* bekommen wird, der sollte dann nach St. Louis 'rübergeschickt werden. Aber die Leute dort dachten, wir wollen keinen, der von anderswo her abgeschoben wird, wir wollen jetzt wirklich einen jungen Mann, der noch vieles vorhat.

Die Erwartungen in St. Louis waren sehr hoch - leider kam dann diese Rezession Anfang der 70er Jahre, und dann ging das schlagartig runter, viele sind dann ja auch gegangen, das Department wurde immer kleiner. Aber am Anfang, 1969, als ich da anfang, war ich ja erst 29, da hatte ich großes Glück. Ich hatte auch noch jüngere Kollegen, der eine Kollege war erst 27. Denn das war damals noch so üblich, wenn man an einer guten amerikanischen Universität fertig war, dann hat man höchstens noch ein Jahr als Postdoc gearbeitet. Wenn man mit 25 fertig war, konnte man mit 26 schon Assistant Professor sein. Und ich habe mich früher immer gewundert, warum solche Leute wie Gell-Mann (66), der mit 40 einen Nobelpreis bekommen hatte, schon 16 Jahre lang führend mit auf der Welt sei. Das fand ich merkwürdig, der war da ja dann 24 - aber Gell-Mann war mit 24 schon Associate Professor, er muß halt mit 23 schon promoviert und dann sehr schnell Karriere gemacht haben.

Das ging in USA durchaus, aber in Deutschland natürlich nicht. Aussichtslos. Da ist diese Habilitation, die eine langwierige Arbeit ist. Ich habe jetzt hier einen Habilitanden, der hervorragend ist, der auch bald woanders eine Stelle bekommen wird, wenn auch nicht in Deutschland, der sitzt jetzt schon eine ganze Weile an dem Schreiben der Arbeit. Das Entwickeln einer neuen Methode kostet Jahre und das Niederschreiben ist sehr langwierig - - .

Ich hatte mich also nicht habilitiert, denn ich wurde in USA nach zwei Jahren zum Associate Professor mit *tenure* befördert und dann haben auch die Kollegen hier in Deutschland gesagt: gut , jetzt ist er ein richtiger Professor. Und vorher war ich halt nur ein Assistant Professor. Und die Kollegen, deren Namen ich jetzt auch nicht unbedingt nennen möchte, haben dann immer noch geschrieben 'Herr Dr. Jug'. Naja, Assistant Professor, das war eben noch kein so gestandener Mann im deutschen Sinne, aber ich hatte dort eben die Möglichkeit, auch selber was zu machen. Und da war genau das, was Sie angesprochen hatten: ich hatte gesehen, daß Pople aufgehört hatte, an semiempirischen Methoden zu arbeiten. Deshalb dachte ich, da ist eine gute Chance, noch was besser zu machen. Und ich habe auch angefangen damit, natürlich (*nachdenklich, I. N.*).

Dann kam mir der Zufall zu Hilfe, so etwa 1971, als ich schon zwei Jahre in St. Louis war und noch keinen einzigen Mitarbeiter hatte. Schließlich kam doch jemand (*nachdenklich*), gerade zu dem Zeitpunkt, als ich mal einige Monate in Deutschland war, im Sommer 1971. Man wird ja in USA formal im Sommer gar nicht bezahlt, man bekommt einen 9-Monate Vertrag. Pro Monat ist das gar nicht so schlecht, aber man muß das umlegen auf das Jahr, auf diese Weise muß man schon sparen für die drei Monate, wo man nichts bekommt. Und da dachte ich, daß das gar nicht so schlecht ist, wenn ich auch mal woanders arbeite. Ich habe dann als Gastprofessor gearbeitet: einmal 1970 an der Florida State University in Talahassee. Eigentlich wollte ich zunächst bei Michael Kasha (67) arbeiten, weil mich die strahlungslosen Übergänge interessierten. Ich war dann aber bei Rhodes gewesen, weil Kasha in diesem Sommer gerade selbst irgendwo anders war. Dann, 1971, war ich Gastprofessor an der Johns Hopkins University bei Parr, nur einen Monat, und anschließend noch bei Labhart (68) in Zürich. Das hat natürlich die Kontakte gestärkt, und auch das Gehalt aufge bessert.

In dieser Zeit hatte ich eben doch schon eigene Ideen, wie man semiempirische Methoden entwickeln könnte, und nachdem ich dann

1971 zurückkam, da kam dieser Student, Patrick Coffey. Der hatte schon einen *Master's degree* in Organischer Chemie, aber er wollte gerne was programmieren. Und das ging natürlich nur bei mir. Ein Programm schreiben hatte er wohl gelernt, er war nämlich bei der Armee gewesen und dort hatte er programmieren gelernt. Er wollte dies nutzen, und das war für eine Arbeit in der Theoretischen Chemie gar nicht so schlecht. Da sagte ich, daß ich aber jetzt für ein Jahr eine Gastprofessur hätte, die ich '72 in Stuttgart bei Preuß antreten würde. Preuß hatte dafür gesorgt, den kannte ich ja auch schon von Frankfurt und der Sommerschule '63 her, wo er die Vorlesung über die LCAO Methode gehalten hatte, während ich die Übungen dazu gemacht hatte. Für Preuß, der 1963 ja noch Privatdozent war - - -

**A:** Er war eigentlich sehr lange Privatdozent.

**J:** Ja , bis 1969, bis er nach Stuttgart ging. Er war seit zwei Jahren dort und hatte dann den Antrag für mich gestellt. Ich war also offizieller Gastprofessor der Universität Stuttgart und bekam ein offizielles Schreiben, natürlich nicht nur von Preuß sondern auch vom Rektor. Und da ging Herr Coffey mit, dessen Aufgabe es nun war, dieses Verfahren als Doktorarbeit zu entwickeln (69). Was wir gemacht haben, ist ganz einfach: wir haben uns nämlich gesagt, wir wollen die Methode von Pople verbessern. Ich bringe das heute noch in meiner Vorlesung: Die Ergebnisse waren eigentlich so schlecht, daß man hoffen konnte, sie einfach besser zu machen, wenn man was tut. Ich hatte mich ja mit diesen Formeln bei Lykos schon genügend befaßt und hatte bemerkt, daß Pople versehentlich eine Formel aus der alten Hückeltheorie übernommen hatte, diese Formel für das Resonanzintegral, die so, in dieser Art, falsch sein mußte. Die war einfach nicht haltbar, deshalb hatte diese Methode auch versagt!

Mit diesem kleinen Trick, die Formel jetzt richtig abzuleiten - - - da war von Linderberg, der bei Löwdin in Schweden war und später in Dänemark Professor wurde, eine ganz kleine Arbeit erschienen über dieses  $\beta$ -Integral (70). Ich habe mir das angeguckt, habe das dann vollständig durchgearbeitet - meine ersten Arbeiten waren über dieses Integral. Und dann habe ich diese Erkenntnisse (70a-b) in die Pople-Methode eingebaut. Ich habe sie verändert und der Doktorand wurde mein bisher schnellster, es ist nie jemandem gelungen so schnell zu sein. Er hat nur eineinhalb Jahre für seine Doktorarbeit gebraucht und danach mußte er ein halbes Jahr warten, bis seine Promotionsurkunde ausgestellt wurde. Er war schon als Postdoc weg, nach anderthalb Jahren schon bei van Wazer (71). Eigentlich wollte er zu Dewar und ich hatte ihm auch einen Kontakt mit Dewar verschaffen wollen, aber Dewar hatte keine Stelle und er hatte es dann wieder weitergegeben, bei van Wazer ist er dann geblieben. Coffey hat unsere semiempirische Methode als Doktorand entwickelt (72a-b), aber ohne Namen, den habe ich erst zwei Jahre später vergeben, weil wir damals nicht so vermessen waren, der Methode einen eigenen Namen zu geben. Diese Veröffentlichung ist also ohne den Namen SINDO 1973 im *Journal of the American Chemical Society* erschienen (72a).

Als ich dann bemerkt habe, daß man der Methode einen eigenen Namen geben *muß*, weil man sonst von außen nicht damit identifiziert wird, da habe ich unser Verfahren **SINDO** genannt (73). Das Verfahren interessierte auch sofort die Gutachter. Ich bin auch ziemlich sicher, wer es war: das war Whitehead, in Kanada (74). Whitehead hatte damals so circa 70 Parameter und ich hatte vielleicht 7, der war sehr beeindruckt, daß man es mit sowenig Parametern so weit bringen konnte! Aber da hatte Dewar inzwischen schon seine MINDO-Methode entwickelt (75) und Dewar war nicht nur sehr viel älter, mehr als 20 Jahre, sondern der hatte natürlich einen Riesenstab von Mitarbeitern und hat natürlich viel flotter arbeiten können als ich mit einem und anschließend wieder keinem.

Als ich merkte, daß es in St. Louis im Laufe der Zeit doch sehr, sehr schwer werden würde - in dem Jahr in Stuttgart habe ich natürlich einige andere Dinge am Computer rechnen können, die in St. Louis nicht möglich waren, da mußte ich mir halt überlegen, ob ich dort bleiben wollte. Eine andere Stelle in USA zu finden war damals zu schwierig, dafür war die Situation zu schlecht, man schrieb '71, '72, es gab gerade eine Wirtschaftsrezession. Dann habe ich mich halt um eine Stelle in Deutschland bemüht. 1972 bin ich auch schon eingeladen worden von verschiedenen Unis, zum Beispiel auf Stellen wie auf die in Bonn, auf der Frau Peyerimhoff (76) sitzt, dann auch nach Bochum, die heute Kutzelnigg (*vor*) inne hat und bei denen ich auch in der engeren Auswahl war. Und ja (*nachdenklich, I. N.*) - man hat durchaus von außen her natürlich noch eine gewisse Sichtweise gehabt, über Deutschland hinaus. Mein letztendlicher Erfolg lag auch darin, daß ich zwei Gutachter hatte, die wohl offenbar immer Positives über mich geschrieben haben. Das war einmal Hartmann und dann Löwdin (77).

**A:** Löwdin ist aber kein Semiempiriker?

**J:** Er hat natürlich mehr methodisch gearbeitet, und ich möchte sagen, wenn es um Nobelpreise geht, hätte Löwdin auch einen erhalten können. Aber manchmal ist die Konstellation nicht so und man fragt sich dann auch oft, warum dieser und jener und der andere nicht.

**A:** Nun gut, Löwdin hat bei seiner Verleihung eines Ehrendoktors an der Universität Konstanz (77) erzählt, daß er selber viele Jahre dem Nobelkomitee angehört hatte.

**J:** In der Physik. Er war in dem Physikkomitee, aber das war auch zu nahe bei der Chemie! Es haben viele versucht, ihn vorzuschlagen; und ich denk' mal, man hat nicht die genügende Zahl aufgebracht, immer im gleichen Jahr. Die diesjährigen Nobelpreise sind natürlich nicht aus Zufall so geworden -

**A:** Warum sind die so geworden?

**J:** Ich glaube, Sie sollten den Artikel von Herrn Kutzelnigg mal lesen, der in diesen Blauen Blättern erschienen ist (78), jetzt vor drei Tagen (*nachdenklich, I. N.*) - die Kommentierung der Nobelpreise. Tja, - - (*nachdenklich, I. N.*). Es gab dort eine große Gruppe von Leuten, die auch identifizierbar sind über die Kommentierung im Internet. Ich habe es schriftlich. Ein Kollege hat es mir ausgedruckt und übergeben (79). Ich hatte es noch nicht selbst gesucht. Da steht hinten so ein kleiner Annex und da stehen auch noch Zitate; und aus denen kann man sehr deutlich erkennen, wer dahinter steckt.

**A:** Unter was findet man das? Unter Nobelpreis?

**J:** Nein, das ist ein bißchen schwierig. Man muß die Akademie anwählen, in Stockholm. Und die hat eine Abkürzung. Die Akademie der Wissenschaften muß man dort anwählen und dann kann man es finden (*lacht*). Es ist natürlich deshalb besonders interessant, daß Pople diesmal den Nobelpreis bekommen hat, wo ich auch selbst voll dahinter stehe, weil ich ihn ja auch 30 Jahre kenne. Ich habe ihn so etwa '68 oder '69 in Florida kennengelernt. Er ist nicht sehr gesprächig, wenn man ihn nicht kennt. Ich war damals noch sehr jung und versuchte, mit ihm ein Gespräch anzufangen, das ungefähr so endete: Ich habe eine Frage gestellt und er hat darauf eine Antwort gegeben, die sehr kurz war und damit war das Gespräch beendet. Im Laufe der Jahre wurden unsere Gespräche immer länger. Inzwischen wären sie natürlich sehr lang, wenn er die Zeit hätte.

**A:** Gestatten Sie mir an dieser Stelle einen Themenwechsel, Herr. Prof. Jug. Gestern Abend konnte ich noch mit Prof. Tietz sprechen, der Hückels Assistent in Marburg war und der später hier in Hannover Professor für Mathematik wurde. Hückel erwähnt ihn namentlich in seiner Autobiographie. Das Gespräch mit Prof. Tietz war sehr aufschlußreich (80). In diesem Gespräch ging es mir mehr um die menschliche Seite von Hückel in Marburg. Leider habe ich aus anderen Gründen nicht an der Feier zum 100. Geburtstag von Hückel teilnehmen können. Seine Autobiographie wird nirgends gelesen. Kennen Sie die Autobiographie von Hückel (81)? Wie denken Sie darüber?

**J:** Ich habe sie hier stehen, habe sie natürlich auch gelesen. Hückel ist ein seltener Fall von mißverstandenen Wissenschaftler in Deutschland. Und wenn man bedenkt, daß sein Bruder, der Chemiker, natürlich viel bekannter war und so ein dickes Buch geschrieben hat in der Organischen Chemie (82) und der arme Hückel - ich meine, der sich sogar zweimal habilitiert hat, der sich umhabilitiert hat, der einfach - ja, kein richtiger Physiker war und kein richtiger Chemiker. Und dadurch eben in gewissen Kreisen einfach - nicht anerkannt war. Das kam ja erstmal nach dem Krieg. Ich habe seine Arbeiten aus den 30er Jahren natürlich gelesen, die waren originell und bahnbrechend für die damalige Zeit. Mehr intuitiv vielleicht, aber Hückel war eben auch als Physiker in der Lage, solche mathematischen Probleme leicht aufzurollen.

Die Hauptentwicklung kam eben von Physikern, das muß man so sagen - die kam aus der Physik. Mulliken (83) und, ja, Heitler (84) in Zürich. Ich habe selber Heitler noch gehört als ich Gastprofessor an der Universität Zürich war, 1971, da hat Heitler noch Vorlesungen gehalten. Aber es saßen da nur fünf oder sechs Studenten im Saal. Die meisten kennen Heitler nur noch als Namen. Aber alle diese Leute konnten eben ein gerütteltes Maß an Mathematik. Und so ähnlich ist es ja auch in Deutschland gelaufen. Bei der ersten Generation der Theoretischen Chemiker, da waren noch die richtigen Chemiker dabei (*nachdenklich, I. N.*), die ausschließlich Chemie gelernt hatten, und dann kamen Physiker dazu. In der zweiten Generation gibt es sehr viele Physiker. Auch Preuß, Frau Peyerimhoff sind aus der Physik, haben selber Physik studiert. Und insofern - ja, diese Möglichkeit, die Mathematik zu beherrschen war natürlich absolut relevant. Und heute sind wir wieder an dem Punkt.

Also da ist auch die Verknüpfung: wie kann man semiempirische Methoden überhaupt entwickeln? Indem man sehr, sehr viel Mathematik kann und ein Einfühlungsvermögen hat, wie sowas funktionieren kann. Und da sind die semiempirischen Methoden, sage ich manchmal, die am wenigsten verstandenen Methoden., weil sie eigentlich die schwierigsten sind. Die Verbesserungen sind nicht trivial, die kann man nicht systematisch machen. Man kann sich jetzt nicht hinsetzen und sagen, ich nehme nochmal eine Funktion dazu oder ich nehme nochmal etwas Korrelation, das geht so nicht. Und man muß feilen an einem internen System, das gewisse Dinge hergibt und andere offenbar nicht. Aber die Grenzen sind eben auch noch nicht erreicht und deshalb haben auch viele dieser Methoden heute noch Gültigkeit.

Auf der Schiene von Dewar wurden sie weiterentwickelt. Der fing an mit dem MINDO, dann hat er das nächste MINDO/2 genannt, mit

einem Schrägstrich, und dann MINDO/3. Wir hatten hier mal einen Gast, der natürlich kein Theoretiker war, der von MINDO-Drittel gesprochen hat, dem Bruchstrich nach, der lag aber nicht so schräg - und insofern (*lacht*) - - -. Und die Methoden wurden auch angewandt von Leuten, die keine Ahnung hatten, die nicht mal wußten, wie das ausgesprochen war - MINDO-Drittel also. Kurz danach kam MINDO, ich habe in dieser Zeit dort auch vorgetragen, 1976, bei Dewar. Er hatte mich eingeladen, weil ich auf einer Konferenz in der Nähe war, in New Orleans. Ich hatte also über SINDO berichtet, damals, das war die allerälteste Version. Da hatte noch keine große Verbesserung stattgefunden gegenüber der, die Coffey gemacht hatte. Wir hatten aber interessante Probleme schon mal angefangen, nämlich thermische Reaktionen. Und da ging es um Aktivierungsenergie von Cyclopropan zu Propen zum Beispiel. Da gab es also eine Aktivierungsenergie von 62 kcal/mol, und ich glaube, wir hatten 48 kcal/mol. Das habe ich vorgetragen, es waren viele Leute da, durchaus gut besucht, und als Gastgeber sagte dann Dewar: "Jetzt liegt es sicher vielen meiner Mitarbeiter auf der Seele, etwas zu fragen, aber keiner wagt es, deshalb muß ich es tun: Warum benutzen Sie eine so schlechte Methode?" (*lacht*). Darauf sagte ich: "Ja, Herr Dewar, das liegt daran: Sie haben 70 Parameter, und ich nur 7." Aber dann wurde ich klüger, ich sagte: "Wenn ich es vielleicht mit 14 schaffe, so gut zu sein wie jemand mit 70, dann bin ich besser." Ich habe als Purist angefangen im Hartmannschen Institut, wir haben Hartmann-Methodik gelernt.

**A:** War Hartmann Physiker oder Chemiker?

**J:** Er war Chemiker, hat bei Wulff (85) promoviert, hat auch bei Sommerfeld (86) mal einige Monate gearbeitet. Ja, ja, er hat tatsächlich bei Sommerfeld gearbeitet, das war gewissermaßen der Höhepunkt seiner Ausbildung, in den 40er Jahren noch.

**A:** Ich wollte Sie aber nicht unterbrechen.

**J:** Ja, ja, Dewar war sehr direkt. Und Matsen (87), der auch sehr viel an mehr formalistischen Entwicklungen beteiligt war, sagte mir hinterher: "Ach, der Dewar, der hat gar nicht gesehen, wie schön Ihre Theorie ist. Die ist ja theoretisch so sauber abgeleitet, alles strukturiert." Aber in diesem Feld bewegen sich semiempirische Methoden noch heute, sie sollen theoretisch einwandfrei sein, aber sie sollen auch noch effektiv sein. Sie sollen sehr genau sein, und mit der Zeit muß man für diese Genauigkeit immer einen Teil der Theorie wieder opfern. Also das ist so wie ein Dominospiel: da kippt man 'mal was um und dann muß man sehen, daß man es wieder neu aufbaut.

**A:** Wie ist das: die *ab initio* Leute sagen dann: tja, die Semiempiriker, die rechnen ja bei Null Kelvin - - -

**J:** Stimmt auch schon nicht mehr. Wir haben in diesem Jahr eine Doktorarbeit abgeschlossen. Herr Ahlswede hat gerade vor einem Monat seinen Dokortitel erworben mit der Weiterentwicklung unserer Methode, bei der die Bildungsenthalpie bei Zimmertemperatur enthalten ist (88). Und zwar nicht, wie bei Dewar und allen Nachfolgearbeiten, die keine Nullpunktenergie dabei haben. Herr Ahlswede hat die Schwingungsenergie einbezogen. Er hat justiert, um Übereinstimmung mit den Meßdaten zu erreichen, aber auch mit den *ab initio*-Rechnungen. Wir können das auch. Wir haben Nullpunktenergien genommen, aber bei null Kelvin bisher, und ab diesem Jahr bei 298 Kelvin. Und das ist also auch ein beträchtlicher Fortschritt. Abgesehen davon, ist die numerische Genauigkeit jetzt so gut wie die der Standardmethoden von Pople, für die er den Nobelpreis bekommen hat. Pople hat eine große Verbesserung des Programms GAUSSIAN erreicht und es wird eben auch viel zitiert. Aber unsere Genauigkeit ist jetzt ungefähr vergleichbar mit 6-31G\*, für Strukturen.

**A:** Mit kleineren Rechenzeiten?

**J:** Mit wesentlich kleineren Rechenzeiten. Aber es ist natürlich für uns absolut uninteressant, diese kleinen Systeme zu behandeln, das kann man *ab initio* auch. Zwar mit größerem Aufwand, aber man kann die Genauigkeit ja immer weiter steigern. Unsere Domäne ist zur Zeit die Berechnung von sehr großen Systemen, da sind wir eben auch führend.

**A:** Die Industrie behauptet, daß sie die heutigen semiempirische Programme teilweise noch nicht gebrauchen kann. In der Industrie scheint sich da streckenweise eine gewisse Enttäuschung bezüglich der Quantenchemie abzuzeichnen. Wie sehen Sie das?

**J:** Ja, aber das ist ja einfach zu erklären. Die haben nämlich versucht, abzuheben auf Pharmazeutika. Und (*lacht*), das sind die chemischen Systeme, die zum Teil recht groß sind. Wenn man das jetzt einfach nur durch die Mühle zieht und dann eine Struktur herausbekommt, dann nützt das für die Reaktivität solcher Stoffe überhaupt nichts. Das Verfahren ist ja sehr viel komplexer. Auch auf diesem Gebiet haben wir zufällig einmal gearbeitet, weil einer meiner Mitarbeiter, der von Hause aus Biochemiker gewesen ist, ein Problem lösen wollte. Wir haben dann eine Kooperation gemacht mit einem Biochemiker, der jetzt in Köln ist, aber früher in Braunschweig war. Und wir haben ein System bei vorgegebener Struktur mit 8000 Atomen berechnet - allerdings nicht mit SINDO,

noch etwas einfacher. Und dieses aktive Zentrum rechnerisch zu erfassen, das können die Leute in der Industrie nicht, dafür haben die eigentlich nicht die Voraussetzungen. Das sind Forschungsarbeiten, für die die Industrie gar keine Zeit hat. Und ein Programm zu nehmen und da schnell mal was zu rechnen, das funktioniert so nicht. Ich weiß, daß auch bei Schering mal jemand war, der von Labhart kam und der an solchen Fragestellungen gearbeitet hat. Das hat nicht so weit geführt, wie man sich das erhofft hat. Wo ich mehr Aussichten sehe, das ist im Bereich von Adsorptionen an Oberflächen, nicht an allen, bei Metallen ist das sehr schwierig.

**A:** Mit welchen Programmen?

**J:** Gut. Wir können jetzt, sagen wir mal, 1000 Atome mit SINDO behandeln. Das ist eine ansprechende Zahl. Jimmy Stewart vertreibt jetzt dieses PM3 (89). Er war auch früher mal bei Dewar, hatte dann aber Differenzen mit Dewar, arbeitet jetzt für Fujitsu (90), hat aber auch eine eigene Firma sozusagen, eine Firma Stewart Computational Chemistry und verbreitet das PM3 - Programm. Das PM3 ist eine Abzweigung aus dem MNDO. Beim MNDO, da gab es drei Weiterentwicklungen: eine von Dewar selbst, AM1, Austin Model 1 (91), - er wollte unbedingt, daß es einen Namen hat, der identifizierbar bleibt. Und Stewart hat eine andere Philosophie gehabt: statistische Genauigkeit, wo alles, was eingegeben wird, zur Parametrisierung verwertet wird. Ich habe das vor einem Jahr auch noch abgelehnt, aber heute sehe ich das nicht mehr so eng (*nachdenklich l. N.*). Ich kann mir durchaus vorstellen, daß man damit auch größere Erfolge erzielen kann. Wir haben es gerade auch demonstriert, daß diese Idee nicht falsch ist. Wir haben uns auf Wunsch unserer Kollegen hier in Hannover mit der Adsorption beschäftigt. Adsorption von kleinen Molekülen an Kochsalzoberflächen ist noch eine verhältnismäßig einfache Sache. Verständlich ist es aber auch am MgO, was für die Katalyse interessant ist. Da haben wir unter anderem auch Dissoziation von Wasser an defekten Oberflächen studiert. Aber das ist natürlich viele Jahre Arbeit, wir arbeiten inzwischen auch schon acht Jahre daran. Für diese Untersuchungen ist gerade SINDO geeignet, das wir ab 1980 weiter entwickelt hatten. 87, '92 waren die nächsten Stationen (92). Wir haben dann einige Male Verbesserungen versucht, zweimal ist es uns mißlungen, aber das kostet eben 10 Jahre, so eine wirkliche Verbesserung zu machen. In seiner Doktorarbeit hat Herr Ahlswede einfach kleine MgO-Cluster in die Parametrisierung eingesteckt - MgO, (MgO)<sub>2</sub>, (MgO)<sub>3</sub>. Die kann man *ab initio* berechnen. Man hat also jetzt nachgeschaut, wie sind da die Längen, und jetzt haben wir in dieser Parametrisierung die Justierung auf Längen getrimmt. Dabei hat sich herausgestellt, daß die Ergebnisse automatisch besser werden. Wir waren also erfolgreich, während vorher diese Cluster von niemandem behandelt wurden, jedenfalls nicht auf diese Weise, sondern unter anderen Gesichtspunkten. Es gibt schon noch größere Cluster dieser Art, aber für andere Zwecke, will ich einmal sagen, die man nie zur Parametrisierung eingesetzt hat und es gibt auch keine Messungen darüber. Und da kann man eben an kleinen Systemen mit *ab initio*-Rechnungen vergleichen und diese Methoden verbessern. Das haben jetzt einige schon gemacht.

Aber es gibt zur Zeit auch nur - ich würde mal sagen, fünf Methoden auf der Welt, die man ernst nimmt. Die also für die Forschung regulär eingesetzt werden können und einen großen Bereich abdecken. Es gibt noch einzelne Methoden, die für spezielle Fälle konstruiert worden sind. Das sind:

- 1.) Zunächst AM1 von Dewar, das aus MNDO weiterentwickelt wurde. Leider ist der Nachfolger von Dewar, einer der letzten Schüler wohl nicht so erfolgreich, der kommt da nicht so recht vom Fleck. Es gibt noch ein SAM1, aber da ist leider noch nicht viel herausgekommen.
- 2.) Dann das zweite ist eben das von Stewart, das PM3.
- 3.) Das dritte, von Thiel (93), der auch mal bei Dewar gearbeitet hatte, der das MNDO/d jetzt kreiert hat, aus dem MNDO heraus, und da nimmt er d-Orbitale als Polarisationsfunktion und macht es dadurch besser. Aber das haben wir auch schon lange dabei. Das ist also nicht die Idee von Thiel, das ist eigentlich eine, die wir mit als erste hatten.
- 4.) Zerner hat natürlich noch sein ZINDO, für Spektren (94).
- 5.) Schließlich unser SINDO.

Die eben erwähnten Autoren sind natürlich alles gute Bekannte von mir, die ich immer wieder sehe und wir sprechen darüber. Zum Glück ist es so, daß in diesem Kreis keine unnötige Konkurrenzsituation erwächst in der Gestalt, daß einer meint, er sei besser als die anderen. Denn das ist sehr, sehr schädlich. Also Thiel hat mich 'mal vor vielen Jahren gefragt: "Arbeiten Sie da noch dran, an einer Verbesserung?" Und ich sagte dummerweise: "Nein." Daraufhin sagte er: "Ah, das ist ja eine gute Sache, dann kann ich ja daran arbeiten, wir müssen das ja nicht alles duplizieren." Und als der fertig war, blieb mir nichts über, als wieder damit anzufangen. Denn seine neue Methode war ja besser. Also insofern - - - es kann sich ja durchaus positiv auswirken, wenn man das in den Grenzen hält. Viele der Methoden lassen sich auf Dewar zurückführen -

**A:** Die DFT-Methoden (95) auch? Kohn ist da - - - ?

**J:** Ja, das klingt merkwürdig. Walter Kohn (96) ist ein Physiker, der schon in Vergessenheit geraten war.

Er hatte mit Hohenberg zusammen ein Theorem abgeleitet, das nichts weiter besagt als daß es ein Funktional der Dichte für den Grundzustand gibt (97). Aus den Arbeiten geht aber im wesentlichen auch hervor, daß man dieses Funktional *niemals* wirklich explizit aufschreiben kann. Das ist nicht möglich. Er hat nur gezeigt, daß man damit zwei Ungleichungen erfüllen kann. Es gibt nur ein einziges, es gibt nicht zwei. Weil er dieses Funktional nicht finden konnte, und sicher war, daß es so nicht möglich ist, das analytisch aufzuschreiben - also Dichte ohne Orbitale zu machen, hatte er ein Jahr später eine neue Idee. Er ist nämlich zurückgegangen auf Orbitale und hat die Dichte wieder aus den Orbitalen aufgebaut, hat die sogenannten Kohn-Sham-Gleichungen abgeleitet (98), die ihm wieder Kohn-Sham-Orbitale erzeugten. Aber das sind keine Hartree-Fock-Orbitale! Die sind in mancher Hinsicht pfiffiger und können Korrelation schon mit einschließen.

Und dann kamen Leute, die haben mehr puristisch daran gearbeitet. Damit hat's noch nicht wirklich funktioniert. Dann kamen Leute wie Becke (99), der war damals noch recht jung, also ich denk 'mal Ende 30, und hat ein sogenanntes Gradienten-korrigiertes Funktional aufgestellt. Das ist deshalb etwas merkwürdig, weil man in diesen Kohn-Sham-Gleichungen die kinetische Energie überhaupt nicht korrekt berechnet, die ist falsch! Diese Korrektur steckt man jetzt in die potentielle Energie und muß dafür aber einen Korrekturterm haben. Das ist Becke als einem der ersten gelungen, ein anderer war noch Perdew (100). Die haben also Funktionale aufgestellt, die hinterher die Genauigkeit enorm gesteigert haben. Dann fingen immer mehr Leute an, damit zu arbeiten und Funktionale zu entwickeln, zu prüfen. Und auf diese Weise ist eine Bewegung in Gang gekommen, die immer größer wurde.

Und dann ist Parr hergegangen und hat Walter Kohn hinzugezogen. Walter Kohn kenne ich nur vom Sehen, also ich habe ihn nur ein-, zweimal gesehen. Er ist jetzt immer auf Konferenzen für Dichtefunktionaltheorie, gewissermaßen das Aushängeschild, eine Art Galionsfigur. Man brauchte jemanden, weil kein einziger sonst vielleicht in die Nähe des Nobelpreises gekommen wäre. Walter Kohn war 1991 einmal auf einer Konferenz in Menton (101) dabei, von dieser Zeit her kenne ich ihn. Er hat also über DFT gesprochen, was damals die meisten noch nicht als umwerfend empfunden haben. Aber in den nächsten fünf Jahren waren die Verbesserungen enorm.

Dichtefunktionaltheorie ist eine semiempirische Theorie, die aber auch verbesserungsfähig ist, leichter als die eigentlichen semiempirischen Theorien. Man nimmt nämlich Funktionale, die empirisch gewählt werden. Ich habe einmal in einer meiner Arbeiten geschrieben, daß es drei Stufen der Semiempirie gibt (102):

a) Die alte Stufe, Hückel, und Pariser-Parr-Pople, diese Methoden, beruhen darauf, daß man gewisse Integrale zum Beispiel anpaßt, man rechnet sie nicht aus, man paßt sie an Experimente an.

b) Die nächste Stufe, bessere Stufe ist, daß man sich Formeln ausdenkt, die Flexibilität in sich tragen. Und zwar nicht die alten, die Hückel genommen hat, das funktioniert nicht, da kommt man nicht sehr weit. Also - Schaffung von Formeln. Und das ist, was die Dichtefunktional-Anhänger heute machen, nichts anderes. Nur deren Theorie ist allgemeiner, man kann dann mehr Orbitale einbauen, sehr viel bequemer, und die Ergebnisse werden dann irgendwann mal genauer. Und man kann Dinge behandeln, die semiempirisch eben nicht funktionieren.

c) Die dritte Stufe ist die Konsistenz der Parameter innerhalb einer Elementreihe. Das schließt Willkür aus.

**A:** Sie führen aber das SINDO weiter?

**J:** Wir haben es jetzt weiterentwickelt und es reicht jetzt auch, mit weniger Parametern ist es deutlich besser.

**A:** Die Industrie möchte ja schier immer das ganze Periodensystem. Wieviel Elemente können Sie jetzt mit SINDO behandeln?

**J:** Ja, gut, wir können halt nur die ersten drei Reihen. Und damit muß Schluß sein, dann kommen in der vierten relativistische Effekte herein, man muß dafür was tun. Wir können durchaus Dinge machen, die für die Industrie interessant sind. Wir haben angefangen, als eine der ersten Gruppen, auch die Übergangsmetalle semiempirisch einzubinden, Scandium bis Zink, das geht. Aber die Genauigkeit ist doch geringer. Herr Ahlswede hat jetzt die ersten beiden Reihen, das ist dann Wasserstoff mit eingeschlossen, Lithium bis Fluor, Natrium bis Chlor. Das ist sehr, sehr gut.



Die Übergangsmetalle, an denen arbeiten wir noch; wenn man das genau so versucht, ist es mühsam, die Genauigkeit ist noch nicht groß genug. Der Grund ist, daß die Systeme komplizierter aufgrund der d-Orbitale sind, die eben dann am Atom gewissermaßen frei schweben. Die Atome haben einen Spin und es gibt verschiedene Orientierungen, da hat man sehr naheliegende Zustände. Das ist auch das Problem, das alle haben, die Spektren untersuchen. Das ist ganz, ganz schwer. Zerner hat das Verfahren komplett auf Übergangsmetallverbindungen getrimmt, damit es funktioniert. Bei uns wäre das jetzt eine Folgearbeit, ob das jetzt auch geht. Wir haben an Spektren nur vereinzelt gearbeitet, wir hatten auch einmal einen Gast aus Moskau, der solche Verbindungen untersucht hat. Wir sind aber interessiert an der Adsorption auf Oxiden von Übergangsmetallen. Titandioxid ist letztendlich in den verschiedenen Formen Rutil und Anatas ein Katalysator, Vandiumpentoxid ist ebenfalls ein Katalysator. Aber da sind die *ab initio*-Leute noch nicht, das können sie nicht. Da liegt das Problem. Wir haben jetzt natürlich auch Kooperation, sehr viele Kooperationen und eine ist auch mit Russen. Da gibt es ein Programm zur Förderung. Da ist eine russische Gruppe in Novosibirsk an der Akademie der Wissenschaften. Das ist eine sehr gute Gruppe dort -

**A:** Welcher Name steht da vorn?

**J:** Also Frau Lapina macht die Experimente, sie ist vielleicht noch nicht so bekannt. Der bekanntere Theoretiker ist Zhidomirov, er ist unter den Russen, die auf diesem Gebiet der Semiempirik arbeiten, vielleicht der bekannteste (103). Der kam ursprünglich einmal aus Moskau und ist aber jetzt schon sehr lange in Novosibirsk. Er ist auch schon über 60, also ist kein junger Mann mehr. Und es sind dort auch noch viele andere. Wir sind an den Experimentatoren interessiert und versuchen, nach deren Experimenten auch Simulationen von Oberflächen zu machen, dann auch Reaktionen auf Oberflächen. Das ist sicherlich etwas, was große Zukunft hat, zumal hier in Hannover ein Schwerpunkt Festkörperchemie existiert. Wir hatten Glück, daß wir da rechtzeitig mitgemacht haben, weil wir jetzt natürlich auch große Erfahrung haben und der Schwerpunkt soll auch weiter bleiben, noch ausgeweitet werden. Hätten wir also uns mit diesen Pharmazeutika befaßt, dann müßten wir jetzt Organische Chemie machen.

Der Punkt, der *mich* heute mehr bewegt natürlich als früher, ist einfach, wie kommen die eigenen Arbeiten an? Welches Interesse besteht an diesen Arbeiten? Wenn man jung ist, setzt man sich zum Ziel, ein interessantes Problem zu lösen und es zu präsentieren. Damals war die Anwendungsbezogenheit sekundär. Da ging es um eine Behauptung innerhalb des Kreises der Theoretischen Chemiker, die Meinungen waren auch schon damals durchaus verschieden, und Pople war ja nicht der erste, der *ab initio*-Rechnungen gemacht hat, ganz im Gegenteil, er kam recht spät dazu.

Es gab also auch schon in den 60er Jahren die Meinung, man kann alles nur *ab initio* machen. Und da gab es den Herrn Wahl, der hat eine Methode propagiert auf Tagungen, die ich als sehr merkwürdig empfunden habe, die er *brute force* nannte.

**A:** War das das paper von Wahl und Das (104)?

**J:** Durchaus. Er hat da mal was gemacht. Er hat mit diesem Inder für ein Jahr zusammengearbeitet. Ich hab den nie persönlich kennengelernt. Und Wahl ist ja auch schon verstorben, in jungen Jahren, mit 44, das ist schon lange her. Wahl hatte diese Schiene propagiert, und da war ja Clementi (105), und da war Roothaan (106), es waren viele Leute, die das schon alles gemacht haben, die ganze Roothaan-Schule. Und natürlich in Deutschland Preuß. Und der Boys in England (107), und seine Schüler, wie Handy (108) heute, die haben daran gearbeitet. Und dann gab's diese Semiempiriker, die also nie sehr zahlreich waren. Zunächst mit Pople und dann nur noch Dewar und dann kam Zerner wieder, dann kamen wir und -

**A:** Thiel?

**J:** Thiel kam viel später, er ist ja auch viel jünger. Auch Stewart, der war einmal schon mit dabei, aber er hat sich erst in den letzten 10 Jahren sehr, sehr bekannt gemacht. Er hat genauso bei Pople mitgearbeitet, sein Name steht auch auf dem Programm GAUSSIAN (109). Er hat jetzt sein eigenes Programm, das durchaus die Meriten hat, die ihm zugebilligt werden. Es ist sehr, sehr effektiv und auch natürlich sehr bekannt. Und gerade Stewart macht jetzt diese biochemischen Rechnungen, während wir die nicht machen.

Aber das was ich Ihnen eigentlich sagen will ist, wer liest denn das, was man schreibt? Es gilt jetzt nicht nur, die Semiempirik zu verteidigen, sondern Interessenten zu finden - und was wir machen, findet Interesse. Und zwar, weil Leute bestimmte Sachen haben wollen, da muß ich auch sondieren. Ich habe aus Gründen, die auf der Hand liegen, natürlich viele Jahre an organischen Systemen gearbeitet, das ist leichter, weil diese Systeme einfacher sind als anorganische. Das Ergebnis ist aber, daß die Resonanz bei Organikern, bei wirklichen organischen Chemikern, doch viel kleiner war, obwohl ich viel mehr Zeit da 'reingesteckt habe, auch methodisch, das weiterzuentwickeln. Wir haben den Begriff der Bindungsordnung weiterentwickelt, um zu verstehen, wie Bindungen überhaupt gebrochen werden. Das von Coulson (110) war ja alles überholt, das konnte man nicht mehr brauchen. Das anzupassen an *ab initio*-Rechnungen, nicht nur semiempirisch, Biradikale, Zwitterionen, Valenz - alles das ist bei uns mitentwickelt worden und auch in

diese semiempirischen Programme eingegangen, weil wir damit arbeiten wollten. Die Resonanz der wirklichen Organiker war relativ gering.

Und natürlich, wenn so jemand wie Schleyer (116) in einer Diskussion über Aromatizität sagt: "... das sind nur semiempirische Rechnungen und deshalb haben die nicht so eine große Tragweite ..." dann ist das einfach ein großes Mißverständnis. Denn Theorie ist etwas anderes, nicht wahr. Und deshalb gibt es, natürlich, immer wieder auch Reibungsstellen, wo Leute andere Entwicklungen forcieren. Schleyer hat sich nun natürlich vollständig auf diese *ab initio*-Seite geschlagen, hat nie behauptet, daß er Theoretiker sei, aber er rechnet sehr viel, hat sehr, sehr viel Arbeiten publiziert, hat einen großen Einfluß, zu Recht auch wegen origineller Ideen. Aber die Auffassung, daß semiempirische Methoden in der Organischen Chemie ja gar nicht so weit tragen können, weil sie nicht so genau sind, ist absolut irrig! Wir haben jetzt eine Arbeit publiziert, zusammen mit Katritzky, die das beweist (117). Aber das war eine meiner wenigen organischen Arbeiten in den letzten Jahren.

Wir sind völlig abgekommen davon, weil eben auch die Kooperationen oft nicht so gut funktionieren. Da kommt mal jemand - ich sag's jetzt mal pauschal - und sagt: "Wir haben hier dies Problem, können Sie das 'mal rechnen?" Und dann setzt man sich hin und arbeitet dran und nach einem halben Jahr kommt man wieder und präsentiert das Ergebnis. Der gleiche Kollege, ein Organiker, sagt dann: "Ach, wir sind da schon weiter, das interessiert uns jetzt nicht mehr." Ich denke 'mal, die Organiker werden sich noch auf den Hosenboden setzen müssen, wenn sie das Interesse bei Theoretikern wachhalten wollen! Sie können immer jemanden bestellen, der ein Programm zum Laufen bringt, und Ergebnisse mit einem Programm erzeugt. Aber das ist auch nicht immer vertrauenswürdig. Auch das GAUSSIAN-Programm kann man nicht als *black box* laufen lassen. Man muß verstehen, wieviel man mit diesem und jenem Teil erreicht. Ich muß sagen, bei Physikochemikern und Anorganikern - Physikochemikern schon seit langer Zeit, Anorganikern seit einigen Jahren - sind diese Kooperationen sehr viel effektiver. Weil die nicht nach einem halben Jahr sagen: "Ach, das interessiert mich nicht mehr."

Man kann ja den Spieß auch umdrehen: ich könnte jetzt sagen: "Schauen Sie mal, ich habe hier dieses interessante Phänomen berechnet, können Sie das mal messen?" Und dann sagen die Leute, (*lacht*), Organiker: "Ja, aber das ist giftig, damit arbeite ich nicht so gerne!" Mit solchen Kollegen kann man nicht kooperieren. Und das habe ich bei Anorganikern bisher nicht gefunden, die können natürlich auch alles mögliche als giftig erklären - ich habe keine Zweifel, daß das nicht so schön ist.

Aber wenn man an Katalyse arbeitet, an Umweltentgiftungen und so - das ist auch ein Ziel, was wir haben, natürlich noch wenig realisiert - wenn man sich mit CO und NO befaßt, und fängt da an zu messen - das ist auch nicht ohne. Aber es muß ja gemacht werden. Und zum Beispiel Katalysatoren eben in Autos, die dieses NO beseitigen sollen, das kann man heute simulieren, wir können sowas rechnen. Nur, ob das Modell jetzt perfekt ist, das weiß bis heute keiner, es gibt vereinzelt Leute, die sowas schon rechnen. Wir haben sowas gerechnet aber noch nicht publiziert (1998, *I. N.*), weil wir nicht sicher sind, daß der Mechanismus auch so geht, aber es gibt zuwenig Experimente dazu, die das aufklären.

Also es gibt durchaus auch einen Sinneswandel bei anderen Kollegen, und auch da ist es ganz klar: Semiempirik ist weiterhin interessant für viele Dinge und man kann eben einiges damit machen, was man *ab initio* nicht kann! Dichtefunktionalmethoden liegen so dazwischen, die können etwas größere Systeme bewältigen, sind etwas effektiver als die ursprünglichen *ab initio*-Methoden. Mit semiempirischen Methoden kann man heute Dinge machen, die so mit anderen nicht möglich sind. Es hat sich einfach das Interessengebiet verlagert. Und das andere, was man auch immer noch machen kann, man kann ganze Reihen abgrasen - Chemie ist ja eine vergleichende Wissenschaft. Wenn ich also jetzt Substitutionseffekte rechnen will und ich will da 50 Systeme durchziehen, dann kann ich das natürlich semiempirisch genau so machen wie *ab initio*. Nur *ab initio* läuft das ganze vielleicht im schlimmsten Fall in drei Monaten ab und semiempirisch in drei Tagen. Da liegt der große Unterschied: in der Industrie will man halt nach drei Tagen schon mal was wissen, wo wollen wir weitermachen - und nicht nach drei Monaten.

**A:** Mit welchen Rechnerarten arbeiten Sie? Eher mit Parallelrechnern oder

**J:** Mit allen. Wir haben ursprünglich natürlich mit PC's mal hier intern gearbeitet, aber diese PC's waren gleichzeitig Terminals zu einem Rechner, der zentral im Rechenzentrum steht (111). Und das ist ein regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, das zum Glück in Hannover steht, dadurch haben wir den besseren Kontakt. Wir sind die größten Nutzer dieses Rechenzentrums. Aber inzwischen ist dieses Rechenzentrum für uns zu klein und wir mußten uns um eigene Rechner bemühen. Das Rechenzentrum hat einen Vektorrechner, der einen großen Speicher hatte, aber heute gibt es auch Workstations mit großen Speichern, die kaum langsamer sind. Das Rechenzentrum hat auch einen Parallelrechner ebenso wie einen Workstation-Cluster.

Ich habe heute gehört, d.h. ein Mitarbeiter kam zu mir und sagte: "Das Rechenzentrum will uns die ausgemusterten Workstations schenken, die (*lacht*) für die gesamte Universität da waren." Ich sage: "Natürlich nehmen wir die, denn wir können sie immer noch gebrauchen." Das kostet Geld; wenn wir so was kaufen, das sind 4 mal 10 000 oder 20 000 Mark pro Rechner, die wir ausgeben

müßten. Und die hatten insgesamt, glaub ich, vier, und jetzt existieren davon noch drei. Und der fragte : "Wieviel wollen Sie haben?"  
Mein Mitarbeiter: "Alle drei."

**A:** Programmieren Sie heute in FORTRAN? Vektorisiert?

**J:** Ja, das ist natürlich - es ist ein schwieriges Problem. Wir sind bei FORTRAN geblieben, natürlich mit allen Aufstockungen, die es gibt. Das ist nicht mehr FORTRAN II, IV oder V, ich weiß nicht, was es ist - 90 oder noch mehr. Weil es sich als zweckmäßig erwiesen hat. Früher hatte man, um Rechnungen zu beschleunigen, versucht, in Assembler zu gehen, oder gar Maschinensprache. Das lohnt sich alles nicht mehr. Die Compiler werden besser, und die sind auch auf solche Sachen zugeschnitten. Unsere Programme hier, vor allen Dingen natürlich das SINDO, geben Testprogramme für das Rechenzentrum ab. Die ziehen das als eines durch, um jetzt ihren Compiler auch darauf abzustellen. Wenn das sehr langsam läuft, dann wissen sie also, daß ihr Compiler noch nicht so gut ist. Man muß natürlich manchmal auch ein bißchen auf das Programmieren achten, dabei sind jetzt natürlich diese Parallelrechner ins Gespräch gekommen. Parallelrechner haben eine Rechenleistung, die zusammen geringer ist als die aller Einzelteile. Aber dadurch, daß sie zusammenwirken, können sie die Zeiten schrumpfen lassen. Wenn man das alles hintereinander macht, dauert es fünf Monate, und so hat man es vielleicht in einer Woche, wenn man entsprechend viele parallel schaltet. Und dazu muß man aber auch ein Programm haben, daß so konzipiert ist.

**A:** Wer entscheidet die Parallelschaltung? Das Programm oder der Master, der alles steuert?

**J:** Ich glaube nicht, daß wir das tun; ich glaube nicht, daß wir parallelisieren, sondern die Compiler sind jetzt weiter. Man hat es früher schon versucht, da waren die sehr schlecht, da mußte man das tatsächlich selbst machen. Und ich glaube auch die Meinung von unserem Rechenzentrum - das natürlich seine Existenzfähigkeit immer wieder unter Beweis stellen will und muß - ist, daß es nicht sinnvoll ist, wenn jeder in seinem einzelnen Programm Parallelisierung macht, denn dann müssen 100 Leute ihr Programm ändern. Das ist weniger effektiv, als wenn die einen Compiler konzipieren, der auf solche Fragestellungen schon eingerichtet ist. Und genauso war das mit den Vektorrechnern. Früher wollte man vektorisieren, da mußte man es im Programm tun. Ein Teil läßt sich oft automatisch vektorisieren, schon, aber je nach Qualität dieses Compilers ist das besser oder schlechter. Und wir haben eigentlich weniger daran gearbeitet, dann noch diese Programme umzustellen, den wechselnden Notwendigkeiten nach. Denn was wir nicht tun können: Wir können nicht so viele Programme nebeneinander laufen haben. Es gab mal auch ein EU-Projekt - Herr Thiel war da beteiligt, ich glaube auch Ahlrichs (112) - 'Parallelisierungsversuche' (113). Für MNDO von Thiel gibt es ein parallelisiertes Programm (114). Wir hatten auch einmal verschiedene Versionen, eine kleine Version, die für einen kleinen Rechner langte, und dann eine für einen großen. Und dann hatten wir ein periodisches Programm, das auch wieder etwas anders lief.

Dann habe ich festgestellt, (*lacht*): da sind unglaublich viele Leute damit beschäftigt, immer diese einzelnen Teile zu warten. Wir mustern jetzt immer die alten aus, wenn die neuen laufen! Wir haben jetzt alles wieder vereinheitlicht und damit Flexibilität schon eingebaut, damit das auch anpassungsfähig ist. Also es ist gewissermaßen dynamisch, daß sich das aufbaut und nicht beliebig viel Platz braucht. Das hat sich nicht bewährt, daß man diese Versionen streckt. Denn kaum war der Mitarbeiter, der das konnte, weg, schaffte man es nicht mehr, das Programm weiter zu verbessern.

**A:** Das war auch der Grund warum die Quantenchemie bei FORTRAN bleiben will? Jemand hat mal geschrieben, daß es viel Arbeitsaufwand ist, die immer in die gerade aktuelle Sprache umzuschreiben.

**J:** Ja. Solange man Compiler schreiben kann, die dieses FORTRAN umsetzen, spielt das keine Rolle mehr.

**A:** Das ist dann die Aufgabe des Informatikers.

**J:** Ja, obwohl die sich häufig nicht so sehr für die Bedürfnisse der Anwender interessieren, wie man es wünschen möchte. Also nur dann, wenn sie meinen, es sei auch ein Informatikproblem, das interessant ist. Aber gut, wenn der Bedarf sehr groß ist, dann gibt es natürlich immer Leute, die sich da auch einsetzen.

**A:** Ist die Rechenzeit frei, die Sie haben

**J:** Die ist frei, allerdings kontingentiert. Und da stehen wir nicht so gut da (*lacht*) - diese Kontingentierung ist ja demokratisch: nach Zahl der Mitarbeiter. Früher, als ich sehr wenig Mitarbeiter hatte, da kam ich ganz, ganz schlecht weg. Heute habe ich doch immerhin noch über 10 Mitarbeiter und auf diese Weise läßt sich das machen. Aber wir passen auch auf, daß immer da, wo diese Limitierung vielleicht nicht so scharf greift, daß wir da auch uns einsetzen, um unsere Programme durchzukriegen. Wir rechnen auf allen Clustern,

im Prinzip könnten wir auch noch in Berlin rechnen auf einem Cray-Rechner (115). Immer dann, wenn der Bedarf entsteht, suchen wir uns neue Quellen. Das tun wahrscheinlich auch andere Kollegen. Aber bisher hatten wir damit auch Erfolg. Aber, wie gesagt, ich muß jetzt natürlich sagen: semiempirische Methoden verbrauchen halt nicht soviel Rechenzeit, deutlich weniger als *ab initio*- und Dichtefunktionalmethoden und deshalb können wir auch größere Systeme rechnen, ohne daß wir diese Grenzen sprengen müssen, die uns wirklich auch gesetzt sind.

**A:** Ja das waren so ungefähr meine Fragen -

**J:** Ich hab nicht allzuviel, glaub ich, aus der Urzeit erzählt - - -

**A:** Ich finde, daß die Darstellung Ihrer persönlichen Entwicklung und die der SINDO-Methode einen guten Einblick in die Entwicklung der zweiten Generation der Quantenchemie gibt und die gleichzeitig die Fortsetzung der ursprünglichen semiempirischen Ideen preisgibt. Herr Professor Jug, vielen Dank für Ihre detailreiche Darstellung.

### **References and Notes**

(1) K. Jug, *Mathematik in der Chemie*. Springer, Berlin, 1981 und 1993.

(2a) H. Hartmann (1914-1984) war Professor an der Universität Frankfurt.

Damals sehr bekannt mit dem Buch *Theorie der chemischen Bindung* (2b).

(2b) H. Hartmann, *Theorie der chemischen Bindung*. Springer, Berlin, 1954.

(3) H. Greiner. Professor für Theoretische Physik an der Universität Frankfurt.

Autor einer langen Reihe von Lehrbüchern zur Theoretischen Physik: Bände 1-10, 1975 -.

(4) Zum Ising Modell siehe Lehrbücher der Theoretischen Physik, z.B. W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik. Bd. 6:*

*Statistical Physics*. Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1994.

(5) C.J. Ballhausen, *Introduction to Ligand Field Theory*. McGraw-Hill, New York, 1962.

(6) Die Rechenmaschinen von Zuse wurden von 1936-1964 in Deutschland gebaut. Die ersten Typen waren elektro-mechanisch, spätere auf Röhrenbasis.

(7) Dreidimensionales Kastenmodell mit Stufe in Polarkoordinaten, im Gegensatz zu Kuhn mit

Elektronenwechselwirkung als Störungsterm. (Nachtrag von K. Jug.)

(8) Quantenchemisches Modell für einen oktaedrischen Titankomplex, Frankfurt 1964.

(9) Das war etwa zu der Zeit der IBM 704-709 (1955-1958) bzw. IBM 7080 (1960).

**(10)** FORTRAN, ALGOL: In der Kategorie der algorithmischen Sprachen waren ALGOL und FORTRAN die ersten Vertreter. FORTRAN kam 1957 auf, ALGOL 1958. FORTRAN IV, erstmals 1966 erschienen, war anschließend lange Zeit im Gebrauch, da man damit erstmals nahezu alle notwendigen Rechnungen der Naturwissenschaften durchführen konnte. Subroutinen, später auch bekannt unter dem Begriff Prozeduren, waren hier erstmals in FORTRAN möglich, während sie bei ALGOL von Anfang an implementiert waren. FORTRAN IV enthielt noch keinerlei Grafikprogramme, bei den grafischen Darstellungen wurde z.B. die Elektronendichte eines Orbitals mit teilweise mehrfach überdruckten Buchstaben realisiert.

**(11)** Die IBM 7090 kam 1959 auf den Markt. Sie war die erste volltransistorisierte Rechenmaschine. 1962 und 1964 tauchten die IBM 7094 bzw. 7094 II auf.

**(12)** FORTRAN V kam um 1967 auf.

**(13)** S. Fraga, Prof. of Theoretical Chemistry, University of Alberta, 1962-1995; now Prof. emerit.

**(14)** H. Bock, Später Prof. der Anorganischen Chemie an der Universität Frankfurt.

**(15)** E. Heilbronner, Prof. der Theoretischen Organischen Chemie an der Universität Zürich

und später Basel. Zusammen mit Bock Autor der Bücher von Ref. 16.

**(16)** E. Heilbronner, H. Bock, *Das HMO-Modell und seine Anwendung. 3 Bände.* Verlag Chemie, Weinheim, 1968 und 1970.

**(17)** H. Bock, *Zur Chemie der anorganischen Stickstoff-Verbindungen. Farbe und Konstitution bei Azo-Verbindungen.*

Naturwiss. Fakultät, Ludwig-Maximilians-Universität, München, 1964.

**(18)** R.G.Parr, born 1922, Prof. of Theoretical Chemistry, Univ of North Carolina, Chapel Hill, USA.

**(19)** K. Fukui, 1918-1998. Grenzorbital-Theorie. Nobelpreis 1981, zusammen mit R. Hoffmann. Japanischer Theoretischer Chemiker mit dem Hauptinteresse chemische Reaktivität.

**(20)** R. McWeeny, born 1924, Ph.D. at Oxford under Coulson in 1948. Prof at the Universities Newcastle upon Tyne, Keele and Sheffield. Since 1981 Professor of Theoretical Chemistry at the University of Pisa (being the brother in law of G. Del Re).

See also my interview with R. McWeeny at Pisa 1993.

**(21)** A. Pullman and B. Pullman. Institut de Biologie Physico-Chimique, Paris.

See also my interview with Mme A. Pullman in Paris in 1997.

**(22)** D. Herschbach, Prof. of Physical Chemistry. Harvard University. Nobel Prize 1986.

**(23)** E.E. Nikitin, Russische Akademie der Wissenschaften Moskau, jetzt Technion, Haifa.

**(24)** R. Daudel. Prof. in Paris.

See also my interview with R. Daudel in Paris in 1997.

**(25)** Symposium für Theoretische Chemie, Frankfurt 1965.

**(26)** K. Jug, *Anwendung einer Einzentrenmethode auf die  $\pi$ -Elektronensysteme von Fünferheterocyclen*. Dissertation, Frankfurt 1965.

**(27)** Ruch, emerit. Prof. an der FU Berlin.

**(28)** H. Preuß, emerit. Prof für Theoretische Chemie, Universität Stuttgart.

**(29)** W. Kutzelnigg, Prof. für Theoretische Chemie an der Universität Bochum.

See also my interview with W. Kutzelnigg at Bochum in 1997.

**(30)** 31. Symposium für Theoretische Chemie, Loccum 1995.

**(31a)** H. Hartmann, *New Developments in the One-Electron Theory of  $\pi$ -Electron Systems*. Advances in Chemical Physics **5**, 1(1963)

**(31b)** H. Hartmann, *Zur Theorie der  $\pi$ -Elektronensysteme*. Z. Naturforsch. **1960**,15a, 993-1003.

**(32)** siehe dazu: G. Hohlneicher und G. Scheibe, *Die erweiterte Hückelsche  $\pi$ -Elektronentheorie und ihre Anwendung auf einfache Konjugationssysteme*. Tetrahedron, **1963**, Suppl. 2, 189-200.

**(33)** E. Ruch, *Zur Theorie der  $\pi$ -Elektronensysteme*. Z. Naturforsch. **1961**,16a, 808-815.

**(34)** Die Zeitschrift *Theoretica Chimica Acta* wurde 1962 gegründet. Die ersten Editoren: H. Hartmann, K. Ruedenberg

**(35)** Berichte der Quantum Chemistry Group, Uppsala.

**(36)** Die *Advances in Quantum Chemistry* wurden 1964 gestartet.

**(37a)** Janos Ladik, geb 1929 in Ungarn. Studierte chemische Ingenieurwissenschaften in Budapest, danach Leiter einer Forschungsgruppe am Zentralforschungsinstitut für Chemie der Ungarischen Akademie der Wissenschaften. 1972 Wechsel an die TU München als Prof. für Theoretische Chemie, 1975 erfolgte seine Berufung nach Erlangen wo er bis zu seiner

Emeritierung als Prof. für Theoretische Chemie tätig war. (Quelle: *Erlanger Nachrichten* vom 2.6.1989).

**(37b)** J. Ladik, *Quantenchemie*. Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart, 1973.

**(38)** G. Berthier, born 1923, Ph.D. in chemistry Paris 1948. Prof. at the ENS.

See also my interview with G. Berthier in Paris in 1997.

**(39)** Start der *Theoretica Chimica Acta* im Jahr 1962.

**(40)** P.G. Lykos and R.G. Parr, *On the Pi-Electron Approximation and its Possible Refinement*. J. Chem. Phys. **24**, 1166 (1956)

and **25**, 1301 (1956).

**(41)** R.G. Parr, *The Quantum Theory of Molecular Electronic Structure*. W. A. Benjamin, New York, 1964.

**(42)** R.G. Parr and W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press, New York, 1989.

**(43)** Stipendiengelder der NATO. In den Jahren 1945-jetzt vergab und vergibt die NATO Stipendien für

Auslandsaufenthalte, die den Austausch des wissenschaftlichen Nachwuchses fördern hilft.

**(44)** J. Hinze, Prof. der Theoretischen Chemie, Bielefeld.

**(45)** A.C. Wahl, R.H. Land, *The Evaluation of Multicenter Integrals by Polished Brute Force Techniques. I. Analysis, Numerical Methods, and Computational Design of the Potential-Charge Distribution Scheme*. Int. J. Quant. Chem **1S**, 375-401 (1967).

**(46)** M. Yoshimine, A.D. McLean, *Ground States of Linear Molecules: Dissociation Energies and Dipole Moments in the Hartree-Fock Approximation*. Int. J. Quant. Chem. **1S**, 313-326 (1967).

**(47a)** John A. Pople was born in Somerset, UK, in 1925. He got his Ph.D. in Cambridge, UK, in 1951.

Prof. at Carnegie-Mellon University in Pittsburg, USA, 1964-1986, then Prof. at Northwestern.

University, Evanston, Illinois, USA. He remained British citizen. Nobel Prize 1998.

**(47b)** J.A. Pople and D.L. Beveridge, *Approximate Molecular Orbital Theory*. McGraw-Hill, New York, 1970.

**(48)** Inga Fischer-Hjalmars, born 1918 in Stockholm. Later Prof. in Theoretical Physics at the University of Stockholm.

See also my interview with I. Fischer-Hjalmars in Stockholm in 1999.

**(49)** J. Koutecky. emerit. Prof., FU Berlin.

**(50)** K. Ruedenberg, born 1920, M.S. in Chemistry and Mathematics, 1944, University of Fribourg, Switzerland, Ph.D. in Theoretical Physics, 1950, University of Zurich, Switzerland. Associate and Associate Professor of Chemistry and Physics, 1955-62, Iowa State University, Professor of Chemistry and Physics, 1964-1991, Iowa State University. Honorary Ph.D.'s from Basel, Bielefeld, Siegen. Editor in Chief of *Theoretica Chimica Acta* 1985-1996, Associate or Advising Editor of many other journals in this field.

**(51)** CNDO : J. A. Pople D.P. Santry and G.A. Segal, J. Chem. Phys. **43**, S129 (1965).

**(52)** NDDO : J. A. Pople D.P. Santry and G.A. Segal, J. Chem. Phys. **43**, S136 (1965).

**(53)** INDO : J. A. Pople D.L. Beveridge and P.A. Dobosch, J. Chem. Phys. **47**, 2026 (1967).

**(54)** Pople verließ das Gebiet 1968.

**(55)** S.F.Boys Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A, **200**, 542 (1950).

**(56)** H. Preuß,, Z. Naturforsch. 11a, 823 (1956).

**(57)** R. McWeeny, *Note on an Iterative Method in Nuclear Problems*.

Proc. Cambridge Philos. Soc. **45**, 315-317 (1949).

**(58)** See also my interview with R. McWeeny in Pisa in 1993.

**(59)** Journal of Chemical Physics, gestartet 1933.

**(60)** Zweite Serie Pople Arbeiten, siehe Ref. (51) - (53).

**(61)** I. Fischer-Hjalmars, *Zero Differential Overlap in  $\pi$ -Electron Theories*. (Löwdin ed.).

Advances in Quantum Chemistry. **2**, 25-45 (1965).

**(62)** Roald Hoffmann, born 1937 in Poland. B.A., 1958, Columbia College, M.A. 1960 in Harvard, Ph.D. 1962 in Harvard.

Developed the Extended Hückel Method. Together with Woodward 1965 papers on the connection between molecular symmetry and organic reactions. Then came the conservation of orbital symmetry. Nobelprize 1981, together with Fukui.

**(63)** M.J.S. Dewar, 1918-1998.

**(63)** M.J.S. Dewar, *A Semiempirical Life*. Am. Chem. Soc., Washington, 1992.

**(64)** P.-O. Löwdin, priv. Mitteilung (anlässlich des Interviews mit ihm im Juni 1999).



- (65)** G.C. Pimentel, 1922-1990. Prof. of Physical Chemistry, University of California, Berkeley.
- (66)** Gell-Mann, born 1929, Nobel prize 1969. American physicist, professor at the California Institute of Technology in Pasadena till 1993.
- (67)** M. Kasha, Prof. of Chemistry, Florida State University.
- (68)** H. Labhart, Prof. in Zürich, Hauptwirkungszeit Ende der 60er-Jahre.
- (69)** P.J. Coffey, *A Semiempirical Molecular Orbital Method for Molecular Energies*. Ph.D. Thesis, St. Louis, 1973.
- (70)** J. Linderberg, Chem. Phys. Lett. **1**, 39 (1967).
- (70a)** K. Jug, *Determination of  $\alpha$  and  $\beta$  Parameters in Approximate SCF MO Theories*. Theor. Chim. Acta **16**, 95 (1970).
- (70b)** K. Jug, *Operator Equations in Approximate Orbital Theories*. Theor. Chim. Acta **23**, 183 (1971).
- (71)** J. von Wazer, Prof. Emeritus of Inorganic Chemistry, Vanderbilt University.
- (72a)** P. Coffey, K. Jug, *Semiempirical Molecular Orbital Calculations and Molecular Energies: A New Formula for the  $\beta$ -Parameter*. J. Am. Chem. Soc. **95**, 7575-7580 (1973)
- (72b)** P. Coffey, K. Jug, *Semiempirical MO Calculations on Symmetry Governed Reactions*. Theor. Chim. Acta **34**, 213-224 (1974).
- (73a)** K. Jug, *Mechanism of Cyclopropane-Propane Isomerization*. Theor. Chim. Acta **42**, 303 (1976).
- (73b)** D.N. Nanda, K. Jug, *SINDO1. A Semiempirical SCF MO Method for Molecular Binding Energy and Geometry. I. Approximations and Parametrization*. Theor. Chim. Acta **57**, 95-106 (1980).
- (74)** M.A. Whitehead, Prof of Theoretical Chemistry, McGill University, Montreal, Canada.
- (75)** M.J.S. Dewar and E. Haselbach, *Ground States of  $\sigma$ -Bonded Molecules. IX. The MINDO/2 Method*. J. Am. Chem. Soc. **92**, 590 (1970).
- (76)** S. Peyerimhoff, Prof. der Theoretischen Chemie, Universität Bonn.
- (77)** Per-Olov Löwdin, 1916-2000. Born in Uppsala, Sweden. Ph.D. in Physics 1948. From 1960-1983 professor at the University of Uppsala, in parallel professor at Gainesville, Florida until 1993. He was a member of the Swedish Nobel

Committee in Physics for many years. He was the founder of the *International Journal of Quantum Chemistry* and of the series *Advances in Quantum Chemistry*. He started the very famous summer schools of Quantum Chemistry around 1958. In 1955 he came out with what is now known as *Löwdin Orthogonalisation*. In 1998 he obtained a honorary doctor's degree at the University of Constance, one among of many others. See also my interview with P.-O. Löwdin in Uppsala 1999.

**(78)** W. Kutzelnigg, *Quantenchemie*, in: Nobelpreise für die Chemie und Medizin 1998. Nachr. Chem. Techn. Lab. **46**, 1040-1041 (1998).

**(79)** <http://www.kva.se/eng/pg/prizes/nobel/chemistry98.html>.

**(80)** See also my interview with H. Tietz in Hannover, 1998.

**(81a)** E. Hückel, 1896 - 1980 Prof. at the University of Marburg (Germany).

**(81b)** E. Hückel, *Ein Gelehrtenleben. Wahrheit und Satire*. Verlag Chemie, Weinheim, 1975.

**(82)** W. Hückel, *Theoretische Grundlagen der Organischen Chemie*. 2 Bde. Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1935.

**(83)** R.S. Mulliken, 1896 - 1987. Nobel Prize 1966.

**(83)** R.S. Mulliken, *Life of a Scientist*. Springer, Berlin, 1989.

**(84a)** W. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation*. Oxford University Press, London, 1954;

Reprint by Dover Publications, New York, 1984.

**(84b)** W. Heitler, E. London, *Wechselwirkung ....*

Zeitschr. Physik **44**, 455-472 (1927) - one of the classic papers!

**(85)** P. Wulff, 1897-1947. In dem hier betrachteten Zeitraum Privatdozent an der Universität Frankfurt.

**(86)** A. Sommerfeld, 1868 - 1999. Professor in Clausthal, Aachen und München. 1915 Feinstruktur des Wasserstoffspektrums, 1916 Quantentheorie des normalen Zeeman-Effektes. Berühmt durch seine Arbeiten und seine daraus resultierenden Bände *Atombau und Spektrallinien*, die noch heute wie keine anderen die nominativen Grundlagen der Theorie vermitteln können.

**(87)** F.A. Matsen. Veröffentlichte eine Reihe von gruppentheoretischen papers im Bereich der Chemie. Verließ dann aber das Gebiet, um sich ganz der Gruppentheorie zu widmen.

**(88-a)** B. Ahlswede, *Quantenchemische Adsorption von Wassermolekülen an defekten NaCl (100)- und MgO (100)-*

*Oberflächen*. Dissertation, Hannover 1998.

**(88-b)** B. Ahlswede, K. Jug, *Consistent Modifications in SINDO1. I. Approximations and*

*Parameters*. J. Comput. Chem. **20**, 563 (1999).

**(88-c)** B. Ahlswede, K. Jug, *Consistent Modifications in SINDO1. II. Application to First-and Second-Row Elements*. J. Comput.

Chem. **20**, 572 (1999).

**(89)** PM3 : J.J. Stewart, J. Comput. Chem. **10**, 209 (1989).

**(90)** Fujitsu. Großer Japanischer Computerhersteller. Im Jahr 1999 fusionierte Siemens Computer mit Fujitsu Computer.

**(91)** AM1 : M.J.S. Dewar, E.G. Zoebisch, E.F. Healey, J.J.P. Stewart, J. Am. Chem. Soc. **107**, 3902 (1987).

**(92a)** K. Jug, R. Iffert and J. Schulz, Int. J. Quantum Chem. **32**, 265 (1987).

**(92b)** J. Li, P. Correa de Mello, and K. Jug, J. Comput. Chem. **13**, 85 (1992).

**(93)** W. Thiel, Prof. am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim/Ruhr.

**(94)** M. Zerner 1940-2000. Prof. of Theoretical Chemistry, University of Florida.

**(95)** DFT: Density Functional Theory. Beispielhaft seien in der Folge drei breitere Veröffentlichungen genannt:

**(95b)=(42)** R.G. Parr and W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press, New York,

1989.

**(95c)** E.S. Kryachko and E.V. Ludeña, *Energy Density Functional Theory of Many Electron*

*Systems*. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1990.

**(95d)** J.K. Labanowski and J.W. Andzelm (Eds.), *Density Functional Methods in Chemistry*.

Springer, New York, 1991.

**(96)** Walter Kohn, born 1923 in Vienna, Austria. 1945 B.A. in Mathematics and Physics at University of Toronto, Toronto,

Canada, 1946 M.A. in Applied Mathematics, 1948 Ph.D. in Physics at Harvard University, Cambridge, MA, USA. Prof at the

Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh, USA from 1950-1960, then Prof. at the University of California, San Diego, USA

1960-1979, followed from the University of California, Santa, Barbara, USA until 1984.

**(97)** P. Hohenberg, W.Kohn, *Inhomogeneous Electron Gas*, Phys. Rev. B, **136**, 864 (1964).

**(98)** W. Kohn, L.J. Sham, *Self-consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys. Rev. **A**, **140**, 1133 (1965).

**(99)** A. Becke, born 1953. Prof of Theoretical Chemistry, Queen's University, Canada.

**(100)** J.P. Perdew, Prof. of Physics, Tulane University.

**(101)** Menton, Stadt in Südfrankreich, an der Riviera, zwischen Monte Carlo und der italienischen Grenze.

R. Daudel hatte dort mit Pullman 1973 erstmals diese Serie begonnen.

**(102)** K. Jug and M. Krack, *Consistent Parametrization of Semiempirical MO Methods*. Int. J. Quantum Chem. **44**, 517 (1992).

**(103a)** G. Zhidomirov, Prof. am Boreskov Insitute of Catalysis, Novosibirsk, GUS.

**(103b)** V.A. Tikhomirov, G. Geudtner, K. Jug, *Influence of Environment on Water Adsorption and Dissociation at Clean and Stepped Mg(100) Surfaces*. J. Mol. Struct. **458**, 161 (1999).

**(104)** G. Das, A.C. Wahl, J. Chem. Phys. **44**, 87 (1966).

**(105)** E. Clementi. Arbeitete viele Jahre auf dem Gebiet der *ab initio* Methoden, vorwiegend bei IBM, die wohl Interesse daran hatte zu zeigen, wie gut diese Maschinen auf dem Gebiet der Quantenchemie einsetzbar seien.

**(106a)** C.C.J. Roothaan faßte die Ergebnisse der Mulliken-Gruppe zusammen in einem berühmten paper (*106b*).

**(106b)** C.C.J. Roothaan, *New Developments in Molecular Orbital Theory*. Rev. Mod. Phys. **23**, 69-89 (1951).

**(107)** S.F. Boys, formerly Reader of Theoretical Chemistry, Cambridge University, UK.

**(108)** N. Handy, Prof. of Theoretical Chemistry, Cambridge University, UK.

**(109)** Gaussians: See books of introductory quantum chemistry. e.g. W. Kutzelnigg, *Einführung in die Theoretische Chemie*. VCH, Weinheim, 1994. p. 526 ff.

**(110a)** C.A. Coulson, 1910-1974, English theoretical chemist who developed a molecular orbital theory and the concept of partial valency. He developed many mathematical techniques for solving chemical and physical problems.

Coulson was born in Dudley, Yorkshire, and studied at Cambridge. He became professor of theoretical physics at King's

College, London, 1947, professor of mathematics at Oxford 1952, and later Oxford's first professor of theoretical chemistry. He

was chair of the charity Oxfam 1965-71. The molecular orbital theory that Coulson developed is an extension of atomic quantum theory and deals with 'allowed' states of electrons in association with two or more atomic nuclei, treating a molecule as a whole. He was thus able to explain properly phenomena such as the structure of benzene and other conjugated systems, and invoked what he called partial valency to account for the bonding in such compounds as diborane. Coulson also contributed significantly to the understanding of the solid state (particularly metals), such as the structure of graphite and its 'compounds'. He wrote three best-selling books: *Waves* 1941, *Electricity* 1948, and *Valence* 1952. (Taken from the Internet in 4/2001, Source unknown.)

**(110b)** C.A. Coulson, *Hückel Theory for Organic Chemists*. Academic Press, London, 1978.

p. 171 (bez. Hückel-Rechnungen): "*Someone said that if you ask me a question before dinner*

*I am an optimist - after dinner, I am a pessimist.*"

**(111)** Das Rechenzentrum Hannover wurde auch dem breiten Publikum Ende der 90er Jahre bundesweit schlagartig bekannt mit einer ausgezeichneten Meta-Suchmaschine namens *MetaGer*.

**(112)** R. Ahlrichs, Prof. der Theoretischen Chemie, Karlsruhe.

**(113)** Conference "*New Frontiers in Computational Chemistry: Impact of Parallel Computing on the Chemical and Pharmaceutical Industry*". November 28-29, 1995, Le Bischenberg, Frankreich.

**(114)** W. Thiel and D.G. Green, *The MNDO94 Code: Parallelization of a Semiempirical Quantum-chemical Program*. in:

*Methods and Techniques in Computational Chemistry*. METBCC-95. Ed. E. Clementi, G. Corongiu, STEF, Cagliari (Italy) 1995.

**(115)** Cray- Rechner. Gehörte zu den ersten neuen schnellen Rechnern, die nicht von IBM stammten.

**(116)** P. von R. Schleyer, emerit. Prof. Universität Erlangen, jetzt University of Georgia, USA.

**(117)** A.R. Katrizky, M. Karelson, S. Sild, T.M. Krygowski, K. Jug, *Aromaticity as a Quantitative Concept. Part VII: Aromaticity Reaffirmed as a Multi-Dimensional Characteristic*. *J. Org. Chem.* 63, 5228-5231 (1998).

---

---

[Home](#)

[Index](#)

[Up](#)

---

<http://www.quantum-chemistry-history.com>  
Copyright © Oct. 28, 2001 by U. Anders, PhD.  
[e-mail Udo Anders : udo39@t-online.de](mailto:udo39@t-online.de)

Last Updated : Aug. 19, 2006 - - 09:08