

- Montgomery, Jr., R.E. Stratmann, J.C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A.D. Daniels, K.N. Kudin, M.C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G.A. Petersson, P.Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J. Cioslowski, J.V. Ortiz, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, J.L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E.S. Replogle, and J.A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998. <http://www.gaussian.com>
- [18] M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S.J. Su, T.L. Windus, together with M. Dupuis, J.A. Montgomery, *J. Comput. Chem.* **1993**, *14*, 1347. <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>
- [19] E.J. Baerends, D.E. Ellis, P. Ros, *Chem. Phys.* **1973**, *2*, 41; L. Versluis, T. Ziegler, *J. Chem. Phys.* **1988**, *322*, 88; G. te Velde, E.J. Baerends, *J. Comput. Phys.* **1992**, *99*(1), 84; C. Fonseca Guerra, J.G. Snijders, G. te Velde, E.J. Baerends, *Theor. Chem. Acc.* **1998**, *99*, 391, <http://www.scm.com/>
- [20] J. Ridley, M.C. Zerner, *Theoret. Chim. Acta* **1976**, *42*, 223.
- [21] by H. Baumann ETHZ.
- [22] M. Dupuis, J.D. Watts, H.O. Villar, G.J.B. Hurst, *Comput. Phys. Comm.*, **1989**, *52*, 415.
- [23] A. Derecskei-Kovacs, D. S. Marynick, *Internat. J. Quantum Chem.*, **1996**, *58*, 193.
- [24] <http://www.pdb.org>
- [25] Xmol of Minnesota Supercomputer Center, Inc., <http://www.msc.edu/msc/docs/xmol/XMol.html>
- [26] S. Portmann, A. Inauen, H.P. Lüthi, S. Leutwyler, *J. Chem. Phys.* **2000**, *21*.
- [27] M.L. Connolly, *J. Appl. Cryst.* **1983**, *16*, 548.
- [28] M.L. Connolly, *Quantum Chemistry Program Exchange Bull.* **1981**, *1*, 74.
- [29] P.S. Heckbert, *IEEE Computer Graphics and Applications* **1986**, *56*.
- [30] P.S. Heckbert, 'Fundamentals of Texture Mapping and Image Warping', M.Sc. Thesis, Department of Electrical Engineering and Computer Science, University of California, Berkeley, **1989**.
- [31] <http://reality.sgi.com/grafica/sgiimage.html>
- [32] <http://www.libtiff.org>
- [33] P.F. Flükiger, S. Portmann, H.P. Lüthi, **1999** Proceedings, Lecture Notes in Computer Science 1615, Springer, 11.

Chimia 54 (2000) 770

© Neue Schweizerische Chemische Gesellschaft
ISSN 0009-4293

Verleihung des Hellmann-Preises für Theoretische Chemie



Aus Anlass des 95. Geburtstages und des 60. Todestages des Quantenchemie-Pioniers Hans G.A. Hellmann hatten 1998 die deutsche, österreichische und schweizerische Trägerorganisation des 'Symposiums für Theoretische Chemie' be-

schlossen, jährlich einen Hellmann-Preis für hervorragende Leistungen in diesem Gebiet an Nachwuchswissenschaftler und -wissenschaftlerinnen zu vergeben. Nach der ersten Verleihung an Wim Klopper 1999 wurde der Preis dieses Jahr an Andreas Görling vergeben. Wir publizieren nachstehend die Laudation verbunden mit unserer Gratulation an den Preisträger.

Andreas Görling, Jahrgang 1960, studierte Chemie an der Technischen Universität München. Ende der 80er Jahre rankten sich seine Dissertationsarbeiten bei Prof. Rösch um verschiedene anwendungsorientierte Themenstellungen der Theoretischen Chemie. Dabei machte er erste Bekanntschaft mit der damals auch bei Chemikern in Mode gekommenen Dichtefunktionalmethode (deren Förderung durch Kohn und Pople 1998 mit dem Nobelpreis für Chemie ausgezeichnet wurde). Während eines längeren Gastaufenthaltes in New Orleans liess

sich Andreas Görling von Prof. Levy in die theoretische Analyse der Grundlagen der Dichtefunktionale einführen. Andreas Görling hat dann sowohl den grundlegenden Formalismus wie die anwendungstechnischen Rechenverfahren weiterentwickelt und wurde mit diesen Ergebnissen, zurück in München, im Jahre 1995 habilitiert. Seither hat er weitere Beiträge zur verbesserten dichtefunktionaltheoretischen Behandlung von Grund- und insbesondere von angeregten Zuständen in kleineren Molekülen wie in ausgedehnten Festkörpern, mittels selbstwechselwirkungsfreier Austauschpotentiale und unter Lösung des Symmetriedilemmas, neuerdings auch zur Untersuchung nichtlinearer optischer Phänomene, erarbeitet. Die vornehmlich in *Physical Review* erschienenen Arbeiten wurden am 11. September 2000 auf dem 36. Symposium für Theoretische Chemie in Litschau, Niederösterreich, mit dem 'Hans G.A. Hellmann-Preis 2000' ausgezeichnet.

- Montgomery, Jr., R.E. Stratmann, J.C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A.D. Daniels, K.N. Kudin, M.C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G.A. Petersson, P.Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J. Cioslowski, J.V. Ortiz, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, J.L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E.S. Replogle, and J.A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998. <http://www.gaussian.com>
- [18] M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S.J. Su, T.L. Windus, together with M. Dupuis, J.A. Montgomery, *J. Comput. Chem.* **1993**, *14*, 1347. <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>
- [19] E.J. Baerends, D.E. Ellis, P. Ros, *Chem. Phys.* **1973**, *2*, 41; L. Versluis, T. Ziegler, *J. Chem. Phys.* **1988**, *322*, 88; G. te Velde, E.J. Baerends, *J. Comput. Phys.* **1992**, *99*(1), 84; C. Fonseca Guerra, J.G. Snijders, G. te Velde, E.J. Baerends, *Theor. Chem. Acc.* **1998**, *99*, 391, <http://www.scm.com/>
- [20] J. Ridley, M.C. Zerner, *Theoret. Chim. Acta* **1976**, *42*, 223.
- [21] by H. Baumann ETHZ.
- [22] M. Dupuis, J.D. Watts, H.O. Villar, G.J.B. Hurst, *Comput. Phys. Comm.*, **1989**, *52*, 415.
- [23] A. Derecskei-Kovacs, D. S. Marynick, *Internat. J. Quantum Chem.*, **1996**, *58*, 193.
- [24] <http://www.pdb.org>
- [25] Xmol of Minnesota Supercomputer Center, Inc., <http://www.msc.edu/msc/docs/xmol/XMol.html>
- [26] S. Portmann, A. Inauen, H.P. Lüthi, S. Leutwyler, *J. Chem. Phys.* **2000**, *21*.
- [27] M.L. Connolly, *J. Appl. Cryst.* **1983**, *16*, 548.
- [28] M.L. Connolly, *Quantum Chemistry Program Exchange Bull.* **1981**, *1*, 74.
- [29] P.S. Heckbert, *IEEE Computer Graphics and Applications* **1986**, *56*.
- [30] P.S. Heckbert, 'Fundamentals of Texture Mapping and Image Warping', M.Sc. Thesis, Department of Electrical Engineering and Computer Science, University of California, Berkeley, **1989**.
- [31] <http://reality.sgi.com/grafica/sgiimage.html>
- [32] <http://www.libtiff.org>
- [33] P.F. Flükiger, S. Portmann, H.P. Lüthi, **1999** Proceedings, Lecture Notes in Computer Science 1615, Springer, 11.

Chimia 54 (2000) 770

© Neue Schweizerische Chemische Gesellschaft
ISSN 0009-4293

Verleihung des Hellmann-Preises für Theoretische Chemie



Aus Anlass des 95. Geburtstages und des 60. Todestages des Quantenchemie-Pioniers Hans G.A. Hellmann hatten 1998 die deutsche, österreichische und schweizerische Trägerorganisation des 'Symposiums für Theoretische Chemie' be-

schlossen, jährlich einen Hellmann-Preis für hervorragende Leistungen in diesem Gebiet an Nachwuchswissenschaftler und -wissenschaftlerinnen zu vergeben. Nach der ersten Verleihung an Wim Klopper 1999 wurde der Preis dieses Jahr an Andreas Görling vergeben. Wir publizieren nachstehend die Laudation verbunden mit unserer Gratulation an den Preisträger.

Andreas Görling, Jahrgang 1960, studierte Chemie an der Technischen Universität München. Ende der 80er Jahre rankten sich seine Dissertationsarbeiten bei Prof. Rösch um verschiedene anwendungsorientierte Themenstellungen der Theoretischen Chemie. Dabei machte er erste Bekanntschaft mit der damals auch bei Chemikern in Mode gekommenen Dichtefunktionalmethode (deren Förderung durch Kohn und Pople 1998 mit dem Nobelpreis für Chemie ausgezeichnet wurde). Während eines längeren Gastaufenthaltes in New Orleans liess

sich Andreas Görling von Prof. Levy in die theoretische Analyse der Grundlagen der Dichtefunktionale einführen. Andreas Görling hat dann sowohl den grundlegenden Formalismus wie die anwendungstechnischen Rechenverfahren weiterentwickelt und wurde mit diesen Ergebnissen, zurück in München, im Jahre 1995 habilitiert. Seither hat er weitere Beiträge zur verbesserten dichtefunktionaltheoretischen Behandlung von Grund- und insbesondere von angeregten Zuständen in kleineren Molekülen wie in ausgedehnten Festkörpern, mittels selbstwechselwirkungsfreier Austauschpotentiale und unter Lösung des Symmetriedilemmas, neuerdings auch zur Untersuchung nichtlinearer optischer Phänomene, erarbeitet. Die vornehmlich in *Physical Review* erschienenen Arbeiten wurden am 11. September 2000 auf dem 36. Symposium für Theoretische Chemie in Litschau, Niederösterreich, mit dem 'Hans G.A. Hellmann-Preis 2000' ausgezeichnet.