

**Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät
der Universität zu Köln
- Der Dekan -**

EINLADUNG

zu dem am Dienstag, den **8. Juli 2003, 14 Uhr c.t.**,
im Hörsaal III der Chemischen Institute, Greinstraße 4
stattfindenden öffentlichen

Antrittsvorlesung

des **Universitätsprofessors für Theoretische Chemie**

Herrn Dr. Michael Dolg

über das Thema

Relativistische ab initio Pseudopotentiale für quantenchemische Berechnungen von Verbindungen schwerer Elemente

Zusammenfassung:

Relativistische Effekte spielen in der Chemie schwerer und superschwerer Elemente neben den Beiträgen der Elektronenkorrelation eine wichtige, teilweise sogar eine entscheidende Rolle. Energiekonsistente ab initio Pseudopotentiale haben sich in den letzten zwei Jahrzehnten als einer der erfolgreichsten Ansätze für quantenchemische Elektronenstrukturberechnungen etabliert, bei denen die wichtigsten relativistische Beiträge implizit näherungsweise berücksichtigt werden. Nach einer kurzen allgemeinen Einführung in relativistische Effekte in der Chemie sowie in die Grundideen der Pseudopotentialmethode werden exemplarisch einzelne Beispiele von quantenchemischen Berechnungen an Systemen mit schweren und superschweren Elementen diskutiert.

**A. Freimuth
Dekan**