

Inhaltsverzeichnis

Vorbemerkung 11

1 Von der Kindheit in Schwaben zum Studium nach Gießen 13

- 1.1 Vorfahren und Kindheit 15
- 1.2 Schulanfang und Kriegswirren 17
- 1.3 Gymnasium und Interesse an Naturwissenschaften 20
- 1.4 Studium der Physik 22
- 1.5 Wege zur Molekülphysik 26

2 Als Postdoc auf dem Weg zur theoretischen Chemie 29

- 2.1 Chicago und Seattle: Hartree-Fock-Rechnungen mit Slater-Funktionen für zweiatomige Moleküle 31
- 2.2 Princeton: Hartree-Fock-Rechnungen mit Gauß-Lobe-Funktionen für mehratomige Moleküle 38

3 Habilitation und Professur 41

- 3.1 Habilitation und Aufbau einer Arbeitsgruppe in Gießen 43
- 3.2 Mainz: Rechnungen zur Interpretation der MO-Theorie, Woodward-Hoffmann-Regeln 44

4 Elektronenstruktur, Molekülgeometrie und die Walsh-Regeln 47

- 4.1 AH_2 - und AH_3 -Moleküle 50
- 4.2 ABA- und ABAH_n -Moleküle 53

5

Aufbauarbeit in Bonn 57

- 7 . 4 Aufgaben in der Wissenschafts-
politik – DFG-Vizepräsidentin **96**
- 7 . 5 Evaluierung und Beratung in der
Wissenschaft **97**
- 7 . 6 Mitgliedschaft in Akademien,
IAQMS-Präsidentin **101**

6

Das Multi-Konfigurations- wechselwirkungs-Verfahren MRD-CI 69

- 6 . 1 Multi-Referenz-MRD-CI-
Methode **71**
- 6 . 2 Molekülspektroskopie und
Rydberg-Zustände **75**
- 6 . 3 Erweiterung der Werkzeuge **80**

8

Emeritierung und den Ruhestand im Blick 105

- 8 . 1 NATO-Projekt **108**
- 8 . 2 SFB „Template, vom Design
chemischer Schablonen
zur Reaktionssteuerung“ **110**
- 8 . 3 XI. International Congress
on Quantum Chemistry **111**
- 8 . 4 Im Ruhestand **114**

7

Anerkennung der Arbeiten und weitere Aufgaben 85

- 7 . 1 Gottfried-Wilhelm-Leibniz-
Preis **89**
- 7 . 2 SFB „Wechselwirkungen
in Molekülen“ **91**
- 7 . 3 Ausflüge der
Arbeitsgruppe **93**



Anhang 119

- Vita **121**
- Chemistree **122**
- Handschriften **125**
- Dokumente **131**
 - Interview 1974 **132**
 - Faszination Quantenchemie,
1989 **142**
 - History of QC in Germany,
2002 **150**
- Publikationen **174**
- Links **196**
- Bildquellen **199**
- Personen **200**