

1973 -1989 (Joachim Sauer)

81. R. Ahlrichs, M. Bär, M. Häser, C. Kölmel und J. Sauer, *Nonempirical Direct SCF Calculations on Sodalite and Double Six-Ring Models of SiO₂ and AlPO₄ Minerals: H₂₄Si₂₄O₆₀, H₁₂Si₁₂O₃₀, H₁₂Al₆P₆O₃₀*
Chem. Phys. Lett. **164** (1989) 199 - 204.
80. J. Sauer, C. M. Kölmel, J.-R. Hill und R. Ahlrichs, *Brønsted Sites in Zeolitic Catalysts. An ab Initio Study of Local Geometries and of the Barrier for Proton Jumps between Neighbouring Sites*
Chem. Phys. Lett. **164** (1989) 193 - 198.
79. J. Sauer, *Acidic Sites in Heterogeneous Catalysis: Structure, Properties and Activity*
J. Mol. Catal. **54** (1989) 312 - 323.
78. J. Sauer, *Quantum Chemical Studies of Zeolite Acidity*
In: J. Klinowski und P. J. Barrie (Herausg.), "Recent Advances in Zeolite Science" (Stud. in Surf. Sci. and Catal., Bd. 52), Elsevier, Amsterdam 1989, S. 73 - 90.
77. G. Scholz, J. Sauer und D.-H. Menz, *The HF-AlF₃ Gas-Phase Complex: An ab Initio Molecular Orbital Study*
Chem. Phys. Lett. **156** (1989) 125 - 128.
76. R. Wolff, R. Radeaglia, C. Vogel und J. Sauer, *Theoretical Interpretation of ²⁹Si-NMR Chemical Shifts of Aluminosilicates. Part 2. The Si-O-T (T = Si or Al) Bond Angle Dependence*
J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **138** (1989) 223 - 232.
75. J. Sauer, *Molecular Models in ab Initio Studies of Solids and Surfaces: From Ionic Crystals and Semiconductors to Catalysts*
Chem. Rev. **89** (1989) 199 - 255.
74. J.-R. Hill und J. Sauer, *Harmonic Force Constants of the H₃Si-O⁻-AlH₃ Anion - A Model of ≡Si-O-Al≡ Bonds in Aluminosilicates*
Z. phys. Chem. (Leipzig) **270** (1989) 203 - 206.
73. H. Mix, J. Sauer, K.-P. Schröder und A. Merkel, *Vibrational Properties of Surface Hydroxyls: Nonempirical Model Calculations Including Anharmonicities*
Collect. Czech. Chem. Commun. **53** (1988) 2191 - 2202.
72. J. Sauer und A. Bleiber, *Internal Silanols in Zeolites - Inferences from Quantum Chemical Calculations*
Catalysis Today **3** (1988) 485 - 492.
71. J. Sauer und W. Schirmer, *Factors Affecting the Acidity of Brønsted Surface Sites. An Analysis Based on Quantum Chemical Results*
In: P. J. Grobet, W. J. Mortier, E. F. Vasant, G. Schulz-Eckloff (Herausg.), "Innovation in Zeolite Materials Science" (Stud. in Surf. Sci. and Catal., Bd. 37) Elsevier, Amsterdam 1988, S. 323 - 332
70. J. Sauer, *Molecular Structure of Orthosilicic Acid, Silanol and H₃SiOH·AlH₃ Complex: Models of Surface Hydroxyls in Silica and Zeolites*
J. Phys. Chem. **91** (1987) 2315 - 2319.
69. J. Sauer, B. Kathan und R. Ahlrichs, *The H₂O van der Waals Complex - A Theoretical*

Study

Chem. Phys. **113** (1987) 201 - 209.

68. Sauer, P. Hobza, P. Cársky und R. Zahradník, *Applicability of the Supermolecule MP2 Approach to Intermolecular Interactions: He₂ and Ne₂*
Chem. Phys. Lett. **134** (1987) 553 - 559.
67. P. Hobza, B. Schneider, J. Sauer, P. Cársky und R. Zahradník, *MP4 Interaction Energies and Basis Set Superposition Error for the (H₂)₂ Dimer*
Chem. Phys. Lett. **134** (1987) 418-422.
66. H. Haberlandt, J. Sauer und G. Pacchioni, *Transition Metal Atom-Water Complexes: A Quantum Chemical Study Including Electron Correlation*
J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **149** (1987) 297-309.
65. R. Wolff, R. Radeaglia und J. Sauer, *Charge Differences between Silicon Atoms in Aluminosilicates and Their Relation to ²⁹Si NMR Chemical Shifts. A Quantum-Chemical Study*
J. Mol. Struct. (THEOCHEM) **139** (1986) 113-124.
64. J. Sauer, *Berichte von internationalen Tagungen - Zweite Liblice Konferenz über statistische Mechanik von Flüssigkeiten*
Mitteilungsblatt der Chem. Ges. der DDR **33** (1986) 186-187.
63. J. Sauer, H. Haberlandt und G. Pacchioni, *Bonding of Water Ligands to Copper and Nickel Atoms: Crucial Role of Intermolecular Electron Correlation*
J. Phys. Chem. **90** (1986) 3051-3052.
62. J. Sauer und K.-P. Schröder, *Silanol und Siloxan-Oberflächengruppen und ihre Wechselwirkung mit H₂O: Quantenchemische Ab-initio-Resultate*
Wissenschaftliche Beiträge der FSU Jena, "Oberflächenchemie fester Körper", 1985, S. 184 - 185.
61. J. Sauer, *Wechselwirkung von Ethen mit Na⁺-Ionen in der Gasphase und in Zeolithen: Ab-initio-Berechnung des Schwingungsspektrums*
Z. Chem. **25** (1985) 254 - 255.
60. J. Sauer, *Nature and Properties of Acidic Sites in Zeolites Revealed by Quantum Chemical ab Initio Calculations*
Proceedings of the International Symposium on Zeolite Catalysis, Siofok/Hungary, May 13-16, 1985
Acta Chimica et Physica Szegediensis, **31**, (1985) 19 - 24.
59. J. Sauer und K.-P. Schröder, *Geminal Hydroxyls on Silica Surfaces and Their Role in Water Adsorption*
Z. phys. Chem. (Leipzig) **266** (1985) 379 - 387.
58. J. Sauer, C. Morgeneyer und K.-P. Schröder, *Transferable Analytical Potential Based on Nonempirical Quantum Chemical Calculations (QPEN) for Water-Silica Interactions*
J. Phys. Chem. **88** (1984) 6375 - 6383.
57. J. Sauer und K.-P. Schröder, *Transferability Test of EPEN/2-Type Potential Functions Based on Quantum-Chemical Interaction Energies (QPEN)*
Chem. Phys. Lett. **107** (1984) 530 - 534.
56. J. Sauer, H. Haberlandt und W. Schirmer, *Local Structure and Bonding in Zeolites by Means of Quantum Chemical ab Initio Calculations: Metal Cations, Metal Atoms and*

Framework Modification

- In: P. A. Jacobs u. Mitarb. (Herausg.), "Proceedings of the Conference on Structure and Reactivity of Modified Zeolites, Prague, July 9-13, 1984" (Stud. in Surf. Sci. and Catal., Bd. 18) Elsevier, Amsterdam 1984, 313 - 320.
55. J. Sauer und R. Zahradník, *Quantum Chemical Studies on Zeolites and Silica* Int. J. Quant. Chem. **26** (1984) 793 - 822.
 54. J. Sauer und P. Hobza, *The Minimal Basis Set MINI-1 - Powerful Tool for Calculating Intermolecular Interactions. II. Ionic Complexes* Theoret. Chim. Acta (Berl.) **65** (1984) 291 - 302.
 53. P. Hobza und J. Sauer, *The Minimal Basis Set MINI-1 - Powerful Tool for Calculating Intermolecular Interactions. I. Neutral Complexes* Theoret. Chim. Acta (Berl.) **65** (1984) 279 - 290.
 52. W. J. Mortier, J. Sauer, J. A. Lercher und H. Noller, *Bridging and Terminal Hydroxyls. A Structural Chemical and Quantum Chemical Discussion* J. Phys. Chem. **88** (1984) 905 - 912.
 51. J. Sauer, C. Morgeneyer, P. Hobza und R. Zahradník, *Neempirische Berechnungen zur Wechselwirkung von H₂O mit Oberflächenclustern von SiO₂* Z. Fiz. Chim. **57** (1983) No. 5, 1176 - 1177.
 50. J. Sauer und C. Morgeneyer, *Fitting EPEN-Type Point Charge Models to ab Initio Molecular Electrostatic Potentials* Studia biophysica **93** (1983) 253 - 258.
 49. J. Sauer, *Molecular Structure of Orthosilicic Acid and Importance of (p-d) π Bonding. An ab Initio Molecular Orbital Study* Chem. Phys. Lett. **97** (1983) 275 - 278.
 48. J. Sauer, R. Zahradník und W. Schirmer, *Nonempirical Quantum Chemical Calculations in Zeolite Chemistry* Preprints of the Workshop "Adsorption of Hydrocarbons in Microporous Solids - II, GDR/Eberswalde, 22-26 Nov. 1982", Academy of Sciences, GDR, Bd. 2, S. 44 - 52.
 47. J. Sauer, *Quantenchemische Berechnungen adsorptiver Wechselwirkungen mit SiO₂- und Zeolith-Oberflächen* Mitteilungsblatt Chem. Ges. DDR, **29** (1982) 246 - 252.
 46. R. Zahradník, P. Hobza und J. Sauer, *Selected Topics in Biological Catalysis* Proceedings of the Symposium on Steric Effect in Biomolecules, Eger, Hungary, 1981; Akadémiai Kiadó, Budapest 1982, S. 327 - 346.
 45. J. Sauer und G. Engelhardt, *Relative Stability of $\equiv\text{Al}-\text{O}-\text{Al}\equiv$ Linkages in Zeolites. A Nonempirical Molecular Orbital Study* Z. Naturforsch. **37a** (1982) 277 - 279.
 44. J. Sauer und D. Deininger, *Interaction of Ethene, 2-Methylpropene, and Benzene with the Na⁺ Ion. 2. Quantum Chemical Study of Sorption Complexes in Faujasites* ZEOLITES **2** (1982) 114 - 120.
 43. J. Sauer und D. Deininger, *Interaction of Ethene, 2-Methylpropene, and Benzene with the Na⁺ Ion. 1. Quantum Chemical Study of Gas-Phase Complexes*

- J. Phys. Chem. **86** (1982) 1327 - 1332.
42. J. Sauer, P. Carsky und R. Zahradník, *INDO/S Calculations on Simple Silicon Compounds and Some Silicon Organic Molecules*
Collect. Czech. Chem. Commun. **47** (1982) 1149 - 1168.
41. R. Zahradník, P. Hobza und J. Sauer, *Vyzname rysy biokatalitických procesu*
Chemické listy (CSSR) **76** (1982) 312 - 329.
40. A. Mehlhorn, J. Sauer, J. Fabian und R. Mayer, *The Electronic Structure and Physical Properties of Thionitroso Compounds - A Quantum Chemical Study*
Phosphorus and Sulfur **11** (1981) 325 - 334.
39. J. Sauer, *Basizität von Disiloxan: Nichtempirische Berechnung der Protonierungsenergie*
Z. Chem. **22** (1982) 60 - 61.
38. P. Hobza, J. Sauer, C. Morgeneyer, J. Hurych und R. Zahradník, *Bonding Ability of Surface Sites on Silica and Their Effect on Hydrogen Bonds. A Quantum-Chemical and Statistical Thermodynamic Treatment*
J. Phys. Chem. **85** (1981) 4061 - 4067.
37. T. Bernstein, H. Ernst, D. Freude, I. Jünger, J. Sauer und B. Staudte, *NMR-Untersuchungen an Kieselgel-Hydroxylgruppen*
Z. phys. Chem. (Leipzig), **262** (1981) 1123 - 1134.
36. P. Hobza, J. Sauer und R. Zahradník, *Strukturní jednotky a modelové interakce v zeolitech a kremení: ab initio kvantovechemické studie*
ROPA a UHLIE (CSSR) **23** (1981) 405 - 408.
35. J. Sauer, P. Hobza und R. Zahradník, *Quantum Chemical Investigation of Interaction Sites in Zeolites and Silica*
J. Phys. Chem. **84** (1980) 3318 - 3326.
34. P. Scharfenberg und J. Sauer, *Biological Response as a Function of Conformation, Chirality, and Electronic Characteristics - A Catecholamine Study*
Int. J. Quant. Chem. **18** (1980) 1309 - 1337.
33. J. Sauer, K. Fiedler, W. Schirmer und R. Zahradník, *What Can Be Expected from Quantum Chemistry in the Investigation of Adsorption in Zeolites*
Proceedings of The Fifth International Conference on Zeolites; Naples, Italy, 2-6 June 1980 (Herausg.: L. C. V. Rees), Heyden, London 1980, S. 501 - 509.
32. K. Fiedler, U. Lohse, J. Sauer, H. Stach, H. Thamm und W. Schirmer, *Thermodynamic Study on the Influence of the Electrostatic Field upon the Adsorption of n-Paraffins in Zeolites of Faujasite-Type*
Proceedings of the Fifth International Conference on Zeolites; Naples, Italy, 2-6 June 1980 (Herausg.: L. C. V. Rees), Heyden, London 1980, S. 490 - 500.
31. J. Sauer, *Möglichkeiten zur quantenchemischen Behandlung der Wechselwirkung von Molekülen mit Oberflächen nichtmetallischer Festkörper*
Tagungsband "Zwischenmolekulare Wechselwirkungen, Kühlungsborn 1980", Physikalische Gesellschaft der DDR, Berlin 1980, S. 209 - 216.
30. D. Deininger, K. Fiedler und J. Sauer, *Quantenchemische und statistisch-thermodynamische Untersuchungen zur Adsorption in Zeolithen*
Tagungsband "Zwischenmolekulare Wechselwirkungen, Kühlungsborn 1980",

Physikalische Gesellschaft der DDR, Berlin 1980, S. 143 - 153.

29. W. Storek, J. Sauer und R. Stöber, *¹³C-NMR chemische Verschiebung phenylsubstituierter polycyclischer Kohlenwasserstoffe*
Z. Naturforsch. **34a** (1979) 1334 - 1343.
28. J. Sauer, *Opening of 3-Membered Rings to 4 π -Electron Systems - State Correlation Diagrams Including Excited States*
Tetrahedron **35** (1979) 2109 - 2112.
27. J. Sauer und B. Zurawski, *Molecular and Electronic Structure of Disiloxane. An ab Initio MO Study*
Chem. Phys. Lett. **65** (1979) 587 - 591.
26. J. Sauer, I. Grohmann, R. Stöber und W. Wegener, *Elektronenstruktur konjugierter Sulfone. SCF- π -Elektronenberechnungen mit expliziter Berücksichtigung der d-Orbitale*
J. prakt. Chem. **321** (1979) 177 - 185.
25. J. Sauer und C. Jung, *Quantumchemical Perturbation Expansion for the Estimation of the Reaction Path in Radical-radical Reactions*
Z. phys. Chem. (Leipzig) **259** (1978) 929 - 936.
24. A. Mehlhorn und J. Sauer, *CNDO/2-Berechnungen zum Einfluß von Wassermolekülen auf die ¹³C-NMR-chemischen Verschiebungen einfacher Merocyanine*
Z. Chem. **18** (1978) 339 - 340.
23. J. Sauer, C. Jung und U. Klügel, *Konfiguration wechselwirkender closed- und open-shell π -Systeme durch Störungsberechnung*
Proceedings of the Intern. Symposium on Structure-Activity-Analysis, Suhl 1976,
Abhandlg. d. AdW d. DDR, Nr. 2 N (1978), 199 - 204.
22. J. Sauer, C. Jung, H. H. Jaffé und J. Singerman, *Orbital Energies in Open Shell Systems*
J. Chem. Phys. **69** (1978) 495 - 496.
21. R. Stöber, J. Sauer, U. Ewert, J. Friedrich und R. Lück, *EPR- und UV-spektroskopische Untersuchungen zur Elektronenstruktur von Cu(II)- und VO(II)-Phenacetylpyridin-Komplexen*
Z. phys. Chem. (Leipzig) **259** (1978) 281 - 288.
20. J. Sauer, *Effective Semi-Empirical Excited State Calculations Using Morokuma's EHP Method*
Chem. Phys. Lett. **55** (1978) 119 - 124.
19. M.-B. Neumann, H.-G. Henning, D. Gloyna und J. Sauer, *Sydnonäthylene III. Chemische Reaktionen elektronisch angeregter 4-Styrylsydnone*
J. prakt. Chem. **320** (1978) 81 - 90.
18. H.-G. Henning, B.-M. Neumann, D. Gloyna und J. Sauer, *Sydnonäthylene II. Elektronische Wechselwirkungen in 4-Styrylsydnonen*
J. prakt. Chem. **320** (1978) 71 - 80.
17. J. Sauer und U. Klügel, *Isomers of Weak π - π -Complexes Predicted by CT Energy Calculations. TCNE Complexes with Stilbene and Analogs*
Adv. in Molec. Relaxation and Interaction Processes **12** (1978) 1 - 11.
16. J. Sauer, J. Bendig und M. Siegmund, *Charge-Transfer-Anregungsenergien von TCNE- und TCNQ-Komplexen und Ionisierungspotentiale substituierter Anthracene*

- Z. Chem. **17** (1977) 308 - 309.
15. C. Jung und J. Sauer, *Interactions of Open-Shell Systems, RHF Molecular Potential Equations*
Chem. Phys. Lett. **46** (1977) 438 - 441.
 14. J. Sauer, E. Bauschke und G. Tomaschewski, *MO-Berechnungen an substituierten Sydnonen. III Quantenchemische Charakterisierung UV-spektroskopisch beobachteter angeregter Zustände von Sydnonazomethinen*
J. prakt. Chem. **319** (1977) 83 - 92.
 13. J. Sauer, U. Ladhoff und H.-G. Henning, *Überlappungspopulation als Reaktivitätsmaß: Photozyklisierung von azaanalogen Stilbenen*
Z. Chem. **16** (1976) 370 - 371.
 12. J. Bendig, B. Dobsław, U. Klügel, D. Kreysig und J. Sauer, *Charge-transfer-Anregungsenergien von TCNE-Molekülkomplexen arylsubstituierter Ethylene*
Z. Chem. **17** (1977) 30.
 11. J. Bendig, B. Dobsław, D. Kreysig und J. Sauer, *Charge-transfer-Anregungsenergien von Tetracyanoäthylen Molekülkomplexen phenylsubstituierter Äthylene und substituierter trans-Stilbene*
J. prakt. Chem. **318** (1976) 618 - 626.
 10. J. Sauer und H. Muströph, *Modifiziertes PPP-Verfahren zur Berechnung schwacher Molekülkomplexe. Einfluß der Struktur auf die UV-Spektren von TCNE-Komplexen phenylsubstituierter Äthylene*
Adv. in Molec. Relaxation Processes **8** (1976) 177 - 193.
 9. C. Jung und J. Sauer, *Anwendungsbereich der SCF-Störungsmethode nach McWeeny zur Berechnung zwischenmolekularer Wechselwirkungsenergien*
Z. Chem. **16** (1976) 203 - 204.
 8. J. Sauer und C. Jung, *Konsequenzen des Koopmansschen Theorems in den Restricted Hartree Fock Methoden für open-shell-Systeme*
Theoret. Chim. Acta (Berl.) **40** (1975) 129 - 141.
 7. R. Stöber, R. Lück, J. Sauer, C. Jung und H. Hennig, *UHF- und RHF-CI-Spindichteberechnungen in PPP-Näherung an größeren π -Elektronensystemen*
Z. phys. Chem. (Leipzig) **256** (1975) 574 - 580.
 6. J. Sauer und C. Jung, *MO-Berechnungen an substituierten Sydnonen. II. Mitteilung: CNDO-Del Bene-Jaffé-Berechnung elektronischer Eigenschaften des 3-Methylsydnons*
Z. phys. Chem. (Leipzig) **255** (1974) 412 - 418.
 5. E. Gey, C. Jung und J. Sauer, *Restricted Hartree-Fock-Berechnungen von open-shell-Systemen mittels halbempirischer MO-LCAO-SCF-Verfahren*
Collect. Czech. Chem. Commun. **39** (1974) 1235 - 1245.
 4. C. Jung, J. Sauer und K.-H. Heckner, *Quantenchemische Berechnung thermodynamischer Kriterien für Elektronentransferreaktionen zwischen π -Elektronensystemen mit Beteiligung angeregter Zustände*
J. prakt. Chem. **316** (1974) 75 - 86.

3. R. Stöber, P. Janietz, J. Sauer und C. Jung, *Untersuchungen der spektroskopischen und elektrochemischen Eigenschaften 9, 10-arylsubstituierter Anthracene. III Elektronenspektren der open-shell-Systeme*
Collect. Czech. Chem. Commun. **39** (1974) 812 - 820.
2. J. Sauer und C. Jung, *MO-Berechnungen an substituierten Sydnonen. I. Mitteilung: π -Elektronenberechnungen an substituierten Sydnonen*
Z. Chem. **13** (1973) 434 - 435.
1. R. Stöber, P. Janietz, C. Jung, J. Sauer und J. Preidel, *Untersuchungen der spektroskopischen und elektrochemischen Eigenschaften 9, 10-arylsubstituierter Anthracene. II Diskussion des elektrochemischen und sterischen Verhaltens*
J. prakt. Chem. **315** (1973) 629 - 639.