

**Kontakt:**

Tatjana Erkert  
Public Relations

DFG-Centrum für Funktionelle  
Nanostrukturen (CFN)

KIT-Campus Süd  
Wolfgang-Gaede-Str. 1a  
76131 Karlsruhe

Telefon: 0721 608-4-43409  
Fax: 0721 608-4-48496  
E-Mail: [tatjana.erkert@kit.edu](mailto:tatjana.erkert@kit.edu)  
Web: [www.cfn.kit.edu](http://www.cfn.kit.edu)

Datum: 15.11.2012

## CFN-News

# CFN - Theoretische Chemie: Wegweisendes Grundlagenpapier

## Dichtefunktionaltheorie (DFT) für offenschalige Moleküle: Spin-Berechnungen

Mit ihrem Grundlagenpapier über die Berücksichtigung des Spins in der Dichtefunktionaltheorie (DFT) schließen die Wissenschaftler Dr. Christoph Jacob vom Centrum für Funktionelle Nanostrukturen (CFN) am Karlsruher Institut für Technologie und Professor Markus Reiher von der ETH Zürich eine elementare Wissenslücke in der theoretischen Chemie.

Die DFT ist ein wichtiges Werkzeug in der Theoretischen Chemie. Mit ihr werden Eigenschaften von Molekülen und Festkörpern, wie beispielsweise Bindungslängen und -energien berechnet.

Zurzeit können mithilfe der DFT im Wesentlichen nur Berechnungen für Moleküle mit gepaarten Elektronen durchgeführt werden. Für Moleküle mit ungepaarten Elektronen, auch offenschalige Systeme genannt, kann sie noch nicht zufriedenstellend genutzt werden. Ungepaarte Elektronen führen zu einem magnetischen Moment, dem Spin, dessen Berücksichtigung in der DFT noch eine große Herausforderung darstellt.

In Übergangsmetallen und deren Verbindungen sorgen diese ungepaarten Elektronen für eine reiche und komplexe Chemie, die sie für eine Vielzahl von Anwendungen interessant macht. Der Wechsel des Spins kann beispielsweise in bioanorganischen Reaktionen dafür verantwortlich sein, dass ein Übergangsmetallkomplex als Katalysator agiert. Übergangsmetallcluster in Einzelmolekülmagneten spielen in der (Quanten-) Informationsverarbeitung als Verbindungen für Speicherelemente ebenfalls eine aussichtsreiche Rolle.

Diese zahlreichen Anwendungsmöglichkeiten erklären das starke wissenschaftliche Interesse, das Verhalten von offenschaligen Systemen mit theoretischen Methoden berechnen zu können. Dieser Aufgabe haben sich die Wissenschaftler Jacob und Reiher in den vergangenen Jahren systematisch angenommen und Lösungsansätze entwickelt. Entsprechend fundiert präsentierten sie ihre Ergebnisse nun im [International Journal of Quantum Chemistry](#) in Form eines Tutorials, das sowohl für Anfänger als auch für fortgeschrittene Praktiker von großem Nutzen ist.

„Da das Verständnis der zugrunde liegenden exakten Theorie eine Voraussetzung für die Entwicklung eines zuverlässigen Näherungsverfahrens ist, rekapitulieren wir zunächst diese Grundlagen“, so Jacob. Sie erklären die nicht-relativistische Behandlung des Spins für ein einzelnes Elektron – ein Thema vieler Grundstudiumstexte über Quantenmechanik. Anschließend betrachten sie die Behandlung von Spin sowohl im Rahmen der Hohenberg-Kohn als auch der Kohn-Sham DFT. Die verschiedenen Möglichkeiten zur Berücksichtigung des Spins in der DFT werden beschrieben und analysiert. Jacob und Reiher komplettieren ihren Ansatz, indem sie die Situation auch für die relativistische DFT untersuchen. Das Tutorial schließt mit Vorschlägen, wie die näherungsweise Beschreibung des Spins in der DFT künftig weiter verbessert werden kann.

*rund 350 Wörter*

### Dichtefunktionaltheorie (DFT)

In den 1960er Jahren entwickelte sich die Theoretische Chemie mit Hilfe einer neuen Computergeneration zu einem eigenständigen Zweig der Chemie. Bis zu diesem Zeitpunkt war es kaum möglich, komplexe Gebilde wie Moleküle mithilfe von mathematischen Gleichungen zu beschreiben und dadurch ihr Verhalten zu berechnen. Die grundlegenden Gesetze waren zwar vollständig bekannt, allerdings waren sie zu komplex, um sie für Berechnungen verwenden zu können. Erst durch die Entwicklung von Näherungsverfahren und der neuen Computergenerationen in den 1960er Jahren rückte die Berechenbarkeit der chemischen Bindungen zwischen den Atomen eines Moleküls in realistische Nähe. Diese Entwicklung bedeutet für die Chemie nichts weniger als den Übergang von einer experimentellen zu einer berechenbaren Wissenschaft. Zwei der führenden und Grundlagen schaffenden Wissenschaftler in dieser Zeit waren Walter Kohn und John A. Pople. Sie erhielten 1998 gemeinsam den [Nobelpreis in Chemie](#), Kohn für die Entwicklung der DFT und Pople für die Entwicklung von Rechenverfahren in der Quantenchemie. Die Rechnerkapazität hat sich seither immer wieder vervielfacht und auch die DFT entwickelte sich weiter, sodass sie heute für immer größere und spezifischere Gebilde genutzt werden kann.

*rund 180 Wörter*

## Die Autoren

**Christoph R. Jacob** leitet seit 2010 die Nachwuchsgruppe für Theoretische Chemie am Centrum für Funktionelle Nanostrukturen (CFN) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT). Er studierte Chemie und Mathematik an der Philipps-Universität Marburg und der Universität Karlsruhe (dem heutigen KIT). 2007 promovierte er an der VU Amsterdam (Niederlanden). Seine Universitätskarriere war begleitet von Auslandsaufenthalten an der Auckland University (Neuseeland) und an der ETH Zürich (Schweiz).

**Markus Reiher** ist seit 2006 Professor für Theoretische Chemie an der ETH Zürich (Schweiz). Er studierte Chemie, promovierte in Theoretischer Chemie an der Universität Bielefeld und habilitierte 2002 an der Universität Erlangen. Danach arbeitete er drei Jahre als Privatdozent zunächst an der Universität Erlangen und anschließend an der Universität Bonn. 2005 nahm er ein Angebot für eine Professur in physikalischer Chemie an der Universität Jena an und folgte bereits ein Jahr später einem Ruf an die ETH Zürich.

## DFG-Centrum für Funktionelle Nanostrukturen (CFN)

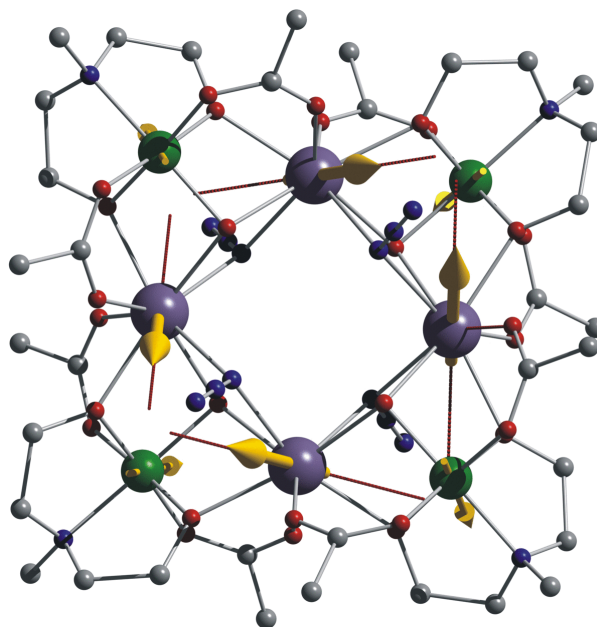
Das DFG-Centrum für Funktionelle Nanostrukturen (CFN) hat sich einem wichtigen Bereich der Nanotechnologie verschrieben: den funktionellen Nanostrukturen. Ziel ist es durch exzellente interdisziplinäre und internationale Forschung Nano-Strukturen mit neuen technologischen Funktionen darzustellen sowie den ersten Schritt von der Grundlagenforschung zur Anwendung zu gehen. Zurzeit arbeiten in Karlsruhe mehr als 250 Wissenschaftler und Techniker über das CFN vernetzt in mehr als 80 Teilprojekten zusammen. Der Fokus liegt auf den Bereichen Nano-Photonik, Nano-Elektronik, Molekulare Nanostrukturen, Nano-Biologie und Nano-Energie. Das Gebäude des CFN befindet sich auf dem Campus Süd des Karlsruher Institut für Technologie. [www.cfn.kit.edu](http://www.cfn.kit.edu)

## Bildmaterial

**Experimentell bestimmte Struktur eines Übergangsmetallclusters auf der Basis der Elemente Chrom und Dysprosium.** Seine ungepaarten Elektronen führen zu besonderen magnetischen Eigenschaften (gelbe Pfeile), welche seinen Einsatz als Einzelmolekülmagnet ermöglichen.

Quelle: CFN, Annie Powell, Forschungsprojekt C1.2: „Synthese und Charakterisierung von neuen nanoskaligen Aggregaten mit kooperativen magnetischen Kopplungen.“

Erstveröffentlichung: Julia Rinck, Ghenadie Novitchi, Willem Van den Heuvel, Liviu Ungur, Yanhua Lan, Wolfgang Wernsdorfer, Christopher E. Anson, Liviu F. Chibotaru, and Annie K. Powell, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010, 49, Single-Molecule Magnets, p. 7585



|    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| H  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | He |
| Li | Be |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | B  | C  | N  | O  | F  | Ne |
| Na | Mg |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | Al | Si | P  | S  | Cl | Ar |
| K  | Ca | Sc | Ti | V  | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| Rb | Sr | Y  | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I  | Xe |
| Cs | Ba | La | Hf | Ta | W  | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | As | Rn |
| Fr | Ra | Ac |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |

### Periodensystem der Elemente:

Die Übergangsmetalle (grün) bilden Verbindungen mit ungepaarten Elektronen. Ihr Verhalten soll künftig mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie berechenbar werden.

Das Bildmaterial steht in druckfähiger Qualität auf [www.cfn.kit.edu](http://www.cfn.kit.edu) zum Download bereit.