



S. Grimme

Der auf dieser Seite vorgestellte Autor hat seit 2000 mehr als 25 Beiträge in der *Angewandten Chemie* veröffentlicht; seine neueste Arbeit ist:

„Facile Carbon Monoxide Reduction at Intramolecular Frustrated Phosphane/Borane Lewis Pair Tem-plates“: M. Sajid, L.-M. Elmer, C. Rosorius, C. G. Daniliuc, S. Grimme, G. Kehr, G. Erker, *Angew. Chem.* **2013**, 125, 2299–2302; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 2243–2246.

Stefan Grimme

Geburtstag:	4. September 1963
Stellung:	W3-Professor für Theoretische Chemie, Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Bonn
E-Mail:	grimme@thch.uni-bonn.de
Homepage:	www.thch.uni-bonn.de
Werdegang:	1986–1989 Chemiestudium, Technische Universität (TU) Braunschweig 1989–1991 Promotion bei Prof. Herbert Dreeskamp, TU Braunschweig 1992–1999 Postdoc bei Prof. Sigrid D. Peyerimhoff, Universität Bonn 1997 Habilitation
Preise:	2010 Lise Meitner Lectureship Award des Lise Meitner-Minerva Center; 2013 Schrödinger-Medaille der World Association of Theoretical and Computational Chemists
Forschung:	Elektronenstrukturtheorie für große Systeme, Quantenchemie, Dichtefunktionaltheorie, Funktionalentwicklung (Doppelhybride), Störungstheorie (SCS-MP _n), elektronisch angeregte Zustände, Elektronenspektroskopie, Massenspektrometrie, Circulardichroismus, theoretische Thermochemie, Anwendungen in (Bio)Chemie und Organometallchemie, frustrierte Lewis-Paare, Dispersionskorrekturen (DFT-D), nichtkovalente Wechselwirkungen, Protein-Ligand-Wechselwirkungen, supramolekulare Chemie, Molekülkristalle
Hobbies:	Tennis, Laufen, Mountain-Biking, Gitarrespielen

Meine größte Leistung bisher war ... einen Marathon in vernünftiger Zeit zu Ende zu laufen.

Was mich garantiert zum Lachen bringt, ist ... Loriot.

Wem ich nicht widerstehen kann, ist ... eine Tüte Haribo.

Was ich gerne entdeckt hätte, ist ... ein chemisches Element.

Ein Nachteil meines Jobs ist ... mir nicht bekannt.

Der wichtigste wissenschaftliche Fortschritt der letzten 100 Jahre war ... die Entwicklung der Quantenmechanik.

Das größte Problem, dem Wissenschaftler gegenüberstehen, ist ... das Desinteresse der Gesellschaft und der Politik an Wissenschaft.

Nach was ich in einer Publikation als erstes schaue ... ist eine originelle Idee.

Mein Lieblingsort auf der Welt ist ... zu Hause.

Ich bin Chemiker geworden, weil ... mir (theoretische) Chemie Spaß macht.

Meine beste Investition war ... ein BMW-Motorrad.

Wenn ich kein Wissenschaftler wäre, wäre ich ... Taxifahrer.

Meine bisher aufregendste Entdeckung war ..., dass man Massenspektren berechnen kann.

Wie hat sich Ihre Herangehensweise an die chemische Forschung seit Beginn Ihrer Karriere geändert?

Unsere Arbeitsweise in der Quantenchemie hat sich durch die extreme Weiterentwicklung der Computer-Hardware in den letzten zwanzig Jahren sehr stark geändert, wogegen sich meine persönliche Herangehensweise nur wenig verändert hat. Als ich mit Quantenchemie begann, wurden Rechnungen noch wirklich geplant und z. B. die elektronische Struktur von Molekülen zuerst mit Papier und Bleistift analysiert. Das Nachdenken wird einem heutzutage teilweise vom Computer „abgenommen“, und viele Theoretiker führen eher Computer-Experimente durch als eine Theorie im

ursprünglichen Sinn zu entwickeln. Diese Veränderungen haben sehr positive Aspekte (Wegfall von stupiden Routinearbeiten, Zugang zu neuen Forschungsfeldern), können aber im ungünstigen Fall zu einer intellektuellen Verarmung unseres Fachgebiets führen.

Wie, glauben Sie, wird sich Ihr Forschungsgebiet in den nächsten zehn Jahren entwickeln?

Die Quantenchemie wird sich auf der einen Seite immer stärker als Standardmethode in der Chemie etablieren und einen festen Platz neben den experimentellen Spektroskopien erhalten. Schon heute finden sich in einer Vielzahl von experimentellen Arbeiten in Chemiezeitschriften DFT-Rechnungen

zu einfachen Fragen wie Struktur oder Energetik. Auch wenn die Qualität dieser Rechnungen manchmal zu wünschen übrig lässt, so wird sich dieser doch insgesamt positive Trend fortsetzen. Durch weitere Entwicklung von Soft- und Hardware in den nächsten Jahren werden diese Rechnungen für immer größere Systeme immer genauer und robuster werden. Auf der anderen Seite werden durch methodische und grundlegende Weiterentwicklungen die Anwendungsbereiche

breiter werden. Schon jetzt kann eine Vielzahl von speziellen spektroskopischen Techniken nur noch mithilfe der Quantenchemie interpretiert werden, und dies wird weiter an Gewicht gewinnen. Eine eher langsame und bestenfalls konsolidierende Entwicklung ist auf einigen sehr schwierigen Feldern wie der expliziten Berechnung von Lösungsmittelleffekten, der Einbeziehung der Entropie oder bei stark korrelierten Systemen zu erwarten.

Meine fünf Top-Paper:

1. „Improved second-order Møller–Plesset perturbation theory by separate scaling of parallel- and antiparallel-spin pair correlation energies“: S. Grimme, *J. Chem. Phys.* **2003**, *118*, 9095–9102.

Die genaue Berechnung der Korrelationsenergie ist ein fundamentales Problem der Quantenchemie, um „chemische Genauigkeit“ in praktischen Rechnungen zu erreichen. Die Arbeit zeigt, dass sich durch geschickt gewählte Skalierung der beiden fundamental verschiedenen Elektronenpaarkorrelationsenergien (gleicher und entgegengesetzter Spin) eine deutlich höhere Genauigkeit ohne Erhöhung des Aufwandes erreichen lässt. Das hier vorgestellte SCS-MP2-Verfahren wird auch nach zehn Jahren noch als Standardmethode eingesetzt und hat zu einer Familie von Spinkomponenten-skalierten Wellenfunktionsmethoden mit vielen Varianten (z.B. SCS(MI)-MP2, SCS-CC2) geführt.

2. „Semiempirical hybrid density functional with perturbative second-order correlation“: S. Grimme, *J. Chem. Phys.* **2006**, *124*, 034108.

Hybriddichtefunktionale wie das berühmte B3LYP haben eine beschränkte Genauigkeit, da die Korrelationsenergie nur semikontinuierlich aus der Elektronendichte berechnet wird. Die Arbeit stellt ein funktionierendes Funktional (B2PLYP genannt) der fünften Stufe der DFT-„Jakobsleiter“ vor, in dem die Korrelationsenergie über einen MP2-artigen Ausdruck mit der KS-Determinante berechnet und in ein normales Hybriddichtefunktional eingefügt wird. Die Methode ist der Prototyp der Doppel-Hybridfunktionale, die immer noch zu den genauesten verfügbaren DFT-Methoden gehören. Inzwischen ist bekannt, dass sich die zwei verwendeten Skalierungsparameter theoretisch herleiten lassen und dass B2PLYP und Varianten zu einer neuen Klasse von DFT-Methoden (vom „RPA“-Typ) gehören. Bei der Berechnung zeitabhängiger Phänomene mit dem DFT-Formalismus liefern sie auch gute Ergebnisse für elektronische Anregungen.

3. „Scheinbar einfache stereo-elektronische Effekte in Alkan-Isomeren und ihre Auswirkungen für die Kohn-Sham-Dichtefunktionaltheorie“: S. Grimme, *Angew. Chem.* **2006**, *118*, 4571–4575; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45*, 4460–4464.

Überraschenderweise erhält man mit fast allen Standard-DFT-Funktionalen für die einfachsten organisch-chemischen Isomerisierungen drastisch falsche Ergebnisse. So ist das verzweigte Alkan 2,2,3,3-Tetramethylbutan experimentell ca. 2 kcal mol^{-1} stabiler als das isomere lineare *n*-Octan. Ein Funktional wie B3LYP

liefert für diese kleinen, elektronisch sehr einfachen Moleküle nicht nur die qualitativ falsche Antwort, sondern auch einen extrem großen Fehler von ca. 10 kcal mol^{-1} ! Das Problem (das erhebliche Aufmerksamkeit bei Theoretikern erregt hat) und seine Ursache werden in dieser Arbeit im Detail analysiert. Als Ursache wurde die Korrelationsenergie „mittlerer Reichweite“ ermittelt, die durch die meisten Funktionale ungenügend beschrieben wird. Seitdem werden alle neuen DFT-Methoden auf dieses relativ allgemeine Problem hin geprüft. Die Effekte stehen in enger Beziehung zu den London-Dispersionswechselwirkungen.

4. „A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H–Pu“: S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 154104.

Die Berücksichtigung der langreichweiten London-Dispersionswechselwirkungen wird extrem intensiv bearbeitet, weil diese Kräfte in großen oder kondensierten Systemen allgegenwärtig wirksam sind. Die Arbeit stellt die dritte, nichtempirische Version einer Atompaar-basierten Korrektur vor, in der die grundlegenden Größen (Dispersionskoeffizienten) mit Ab-initio-Methoden berechnet werden und mit vielen Funktionalen kombinierbar sind. Die Methode (DFT-D3) erreicht für viele Systeme eine robuste Genauigkeit mit Fehlern von < 5–10% und ist momentan ein weltweit eingesetztes Standardverfahren.

5. „Supramolecular Binding Thermodynamics by Dispersion-Corrected Density Functional Theory“: S. Grimme, *Chem. Eur. J.* **2012**, *18*, 9955–9964.

Die nichtempirische Berechnung der Bindungsaffinitäten (d.h. der freien Assoziationsenthalpien) von beispielsweise Wirt-Gast-Systemen ist eine große Herausforderung, weil Energie-, Entropie- und Lösungsmittelbeiträge mit jeweils kleinem Fehler berechnet werden müssen und nahezu keine Fehlerkompensation auftritt. Die Arbeit zeigt für zwölf realistische supramolekulare Komplexe (S12L-Testsatz) erstmalig, wie mit DFT-D3 und dem COSMO-RS-Lösungsmittelmodell experimentelle ΔG -Werte im Bereich von 0 bis $-20 \text{ kcal mol}^{-1}$ mit einem mittleren Fehler von nur etwa 2 kcal mol^{-1} ohne empirische Anpassung reproduziert werden können. Dabei werden in allen Fällen auch relative Affinitäten quantitativ erhalten. Die Methoden sind routinemäßig auf Komplexe mit bis zu rund 300 Atomen anwendbar und erlauben detaillierte Einsichten in Bindungsmotive und Energie-Entropie-Beziehungen.

DOI: 10.1002/ange.201301621