



# Selbstevaluation der Computational Chemistry Coalition (CCC)

an der RWTH Aachen

April 2005

## Zeitpunkt der Gründung des Kompetenzzentrums

Die Computational Chemistry Coalition (CCC) wurde Mitte 2002 von den Aachener Professoren Bernhard Blümich, Richard Dronskowski und Manfred Martin konzipiert. Zu Beginn des Jahres 2003 war die CCC mit bereits elf Mitgliedern wissenschaftlich aktiv, und das Kompetenzzentrum ist gegenwärtig auf vierzehn eigenständig forschende Mitglieder angewachsen. Die CCC wird von einem Sprecher (derzeit Richard Dronskowski) nach außen vertreten.

## Beteiligte Institutionen/Einrichtungen

Ihrer Intention gemäß versteht sich die CCC als institutsübergreifendes Kompetenzzentrum für Forschung und auch Lehre auf dem Gebiet der **Computational Chemistry**. Die CCC steht prinzipiell allen Mitgliedern der RWTH offen, die einerseits genügende Kompetenz auf dem Fachgebiet aufweisen und andererseits gewillt sind, mit eigenen Beiträgen chemische Probleme unter Zuhilfenahme ebendieser Methoden der **Computational Chemistry** zu lösen und auch aktiv ins Kompetenzzentrum einzubringen. Die vierzehn Mitglieder sind:

- Prof. Dr. Dr. h.c. Bernhard **Blümich**, Lehrstuhl für Makromolekulare Chemie und Institut für Technische und Makromolekulare Chemie
- Hochschulassistent Roger **De Souza**, Ph.D., Institut für Physikalische Chemie
- Prof. Dr. Richard **Dronskowski**, Lehrstuhl für Anorganische und Analytische Chemie und Institut für Anorganische Chemie

- Prof. Dr. Ulli **Englert**, Institut für Anorganische Chemie
- Prof. em. Dr. Jörg **Fleischhauer**, Institut für Organische Chemie
- Priv.-Doz. Dr. Peter **Kroll**, Institut für Anorganische Chemie
- Prof. Dr. Walter **Leitner**, Lehrstuhl für Technische Chemie und Institut für Technische und Makromolekulare Chemie
- Prof. Dr. Heiko **Lueken**, Institut für Anorganische Chemie
- Prof. Dr. Arne **Lüchow**, Institut für Physikalische Chemie
- Prof. Dr. Manfred **Martin**, Lehrstuhl für Physikalische Chemie und Institut für Physikalische Chemie
- Priv.-Doz. Dr. Ilona **Merke**, Institut für Physikalische Chemie
- Prof. Dr. Gerd **Raabe**, Institut für Organische Chemie
- Prof. Dr. Ulrich **Simon**, Lehrstuhl für Anorganische und Elektrochemie und Institut für Anorganische Chemie
- Prof. Dr. Wolfgang **Stahl**, Institut für Physikalische Chemie

## Zielsetzung des Kompetenzzentrums

Die Zielsetzung der **CCC** orientiert sich am 1996 verabschiedeten Leitbild der RWTH, das als entscheidende Ziele einerseits die Ausbildung eines hochqualifizierten und verantwortungsbewußten akademischen Nachwuchses sowie die Forschung auf hohem Qualitätsniveau in allen Bereichen formuliert; beide Vorhaben sollen im Sinne praktizierter Interdisziplinarität angestrebt werden. Die Zielvereinbarung des Jahres 2002 hat obiges Programm hinsichtlich einer spezifischen Profilbildung präzisiert; unter anderem betont die RWTH die Bedeutung ihrer interdisziplinären Schwerpunkte **Material-** bzw. **Werkstoffwissenschaften** und **Informationstechnologie** und widmet sich dem Ausbau des besonders zukunftssträchtigen Schwerpunkts **Technisch-wissenschaftliches Hochleistungsrechnen**. Diese richtige Weichenstellung hat die Fachgruppe Chemie an der RWTH schon vor Jahren fachlich vorweggenommen:

Für die Fachgruppe Chemie als Teil der Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften spiegelt sich die Interdisziplinarität ihrer Aktivitäten anhand ihrer Forschungsschwerpunkte **Werkstoffe/Mesoskopische Systeme**, **Asymmetrische Synthese/Wirkstoffe** und **Katalyse** entsprechend dem schon im Jahre 1997 verabschiedeten Strukturplan wider. Zusätzlich wurden in den vergangenen Jahren von einigen Arbeitsgruppen gewichtige Beiträge mit vorwiegend numerisch-theoretischem Charakter erarbeitet, die thematisch dem Arbeitsgebiet der **Computational Chemistry** entstammen. Der enorm hohe Rechenbedarf der Aachener Chemiker gibt sich seit Jahren anhand der allgemein zugänglichen Nutzerstatistiken zu erkennen: In sehr guter Näherung wird die vom hiesigen Rechen- und Kommunikationszentrum bereitgestellte **Rechenleistung** fast ebenbürtig durch **Maschinenbau und Chemie** beansprucht, und dies obschon die Aachener Chemiker seit geraumer Zeit auf eigene Computerressourcen bzw. auswärtige Rechenzentren ausweichen.

Vor dem Hintergrund dieser rasanten Entwicklung wurde von der Aachener Chemie im Jahre 2002 die Notwendigkeit einer verstärkten Zusammenarbeit erkannt, um den bislang gewonnenen Kompetenzvorsprung auf dem Feld der **Computational Chemistry** sichern und weiter ausbauen zu können. Als besonders vielversprechende bzw. zukunftssträchtige Forschungsthematiken wurden fünf **Großthemen** benannt, deren gemeinsame Bearbeitung eine enorme Herausforderung darstellt, deren Lösung aber zur Sicherung der nationalen wie internationalen Spitzenstellung der Aachener Chemie beitragen soll:

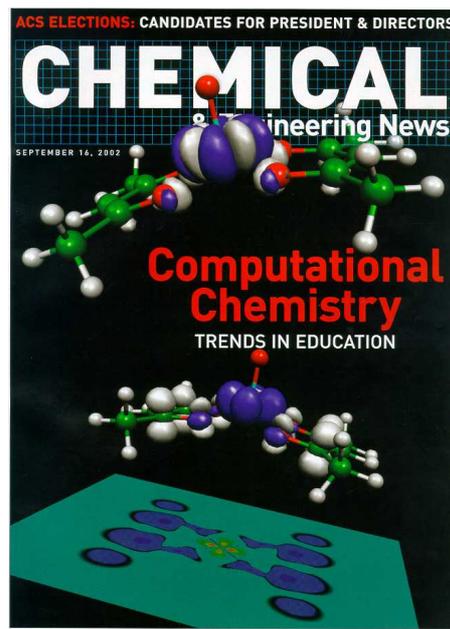
- Atomistische Simulation von Struktur und Dynamik fester und weicher Materie mit und ohne Translationssymmetrie
- Quantenchemie hochgradig elektronenkorrelierter Moleküle und Festkörper
- Entwicklung einer praktikablen Bindungstheorie für (magnetisch aktive) intermetallische Phasen
- Quantenchemische Simulation und visuelle Aufbereitung NMR-spektroskopischer Meßverfahren an kondensierter Materie
- Übertragung quantenchemischer Observablen von Molekülen und fehlgeordneten Feststoffen in die makroskopische Thermodynamik

Für den allgemeinen Bereich von Forschung und Lehre hat die **CCC** die folgenden themenunabhängigen Ziele formuliert:

In der **Forschung** bündeln die Mitglieder der **CCC** ihre jeweilige Kompetenz auf den betreffenden Teilgebieten der **Computational Chemistry** und stellen sie unter Erzielung von Synergieeffekten anderen Mitgliedern zur Verfügung. Die Lösung hochgradig komplexer chemischer Probleme (s.o.) mittels Techniken der **Computational Chemistry** ist vorrangiges Forschungsziel der **CCC**. Gleichzeitig wird die vorhandene Kompetenz innerhalb und außerhalb der RWTH klar präsentiert, um Interessierte am Sachverstand der **CCC** teilhaben zu lassen. Des weiteren bemühen sich alle Mitglieder der **CCC** darum, neue und attraktive Forschungsrichtungen im Bereich der **Computational Chemistry** zu identifizieren und konsequent mitzugestalten. Das mittelfristige Ziel der Einwerbung diesbezüglicher Drittmittel wurde schon von Anfang an erreicht. Zum Zwecke des wissenschaftlichen Gedankenaustauschs und der verbesserten Lehre veranstalten die Mitglieder der **CCC** regelmäßige Seminare in den Räumen der chemischen Institute.

Im Bereich der **Lehre** erkennen die Mitglieder der **CCC** die Dringlichkeit, die mathematisch-theoretischen Fertigkeiten aller Chemiestudierenden qualitativ wie quantitativ zu verbessern. Entsprechende Kenntnisse werden als zukunftsorientiertes Qualitätsmerkmal und auch als Schlüsselqualifikation künftiger Aachener Chemieabgänger verstanden; ihre enorme Bedeutung wurde bereits in der Zielvereinbarung explizit vorweggenommen. Ähnliche Bestrebungen der mit uns konkurrierenden Chemiefachbereiche amerikanischer Spitzenhochschulen (siehe umseitiges Titelbild der Mitgliederzeitschrift der *American Chemical Society* vom September 2002) werden durch ebendiese Universitäten massiv unterstützt, und die Aachener **CCC** hofft dringend auf ähnlichen Rückhalt seitens der RWTH. Konsequenterweise setzt sich die **CCC** für einen Ausbau der chemieorientierten Informationstechnologie (beispielsweise Hochleistungsrechnen im Bereich der Chemie) an der RWTH ein und begrüßt eine

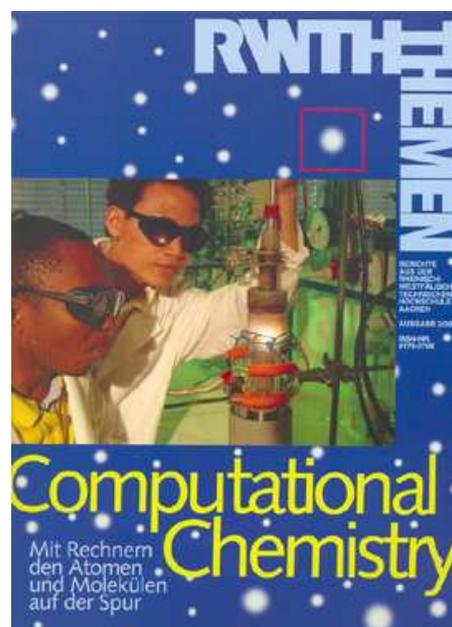
Verstärkung der RWTH-internen IT-Angebote mit Nachdruck, darunter die Verbesserung der informationsrelevanten Basisausbildung (Programmierkurse). Die besonderen IT-Bedürfnisse der Studierenden der Chemie unterscheiden sich von denen anderer Fachbereiche und lassen sich leicht aufzeigen. Schließlich befassen sich die Mitglieder der CCC intensiv mit der inhaltlichen Aktualisierung des Studiengangs Chemie, um vor dem Hintergrund international kompatibler Studiengänge (Bch/Ms) sinnvolle Empfehlungen beizutragen. Es ist wünschenswert, Techniken der **Computational Chemistry** zu einem festen Bestandteil bereits des Bachelor-Studiengangs zu machen.



## Kurzdarstellung der bisherigen und zukünftigen Aktivitäten

Ihrer Zielsetzung gemäß hat die CCC neben den regelmäßigen Seminarbeiträgen der chemischen Institute bereits im Frühjahr 2003 einen ersten RWTH-Workshop zur **Computational Chemistry** angeboten, der auch von anderen Fachgruppen (Mathematik, Informatik) besucht wurde. Mit diesen Kollegen wurden detaillierte Gespräche geführt, die insbesondere eine Verbesserung der studentischen Lehrsituation zum Ziel hatten. Eine große Kraftanstrengung war das im vergangenen Jahr von der CCC konzipierte, realisierte und vollständig aus eigenen Mitteln finanzierte **RWTH-Themenheft** über **Computational Chemistry**; es ist zugleich das erste RWTH-Themenheft, das durchgängig und ausschließlich chemische Fragestellungen berührt.

Von Mitgliedern der CCC wurden des weiteren folgende Veranstaltungen (zum Teil verantwortlich) veranstaltet, die entweder außerhalb der RWTH stattfanden oder prominente auswärtige Wissenschaftler an die RWTH führten:



- Workshop des Arbeitskreises *Computational Crystallography* der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Februar 2003, Aachen, zum Thema: **Intermolecular Interactions**
- International NRW Graduate School of Chemistry, September 2003, Münster, zum Thema: **Magnetochemistry**

- Workshop in Magnetochemistry im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms **Molecular Magnetism**, September/Oktober 2003, Kaiserslautern
- 85. Bunsen-Kolloquium, Oktober 2003, Rauschholzhausen/Gießen, zum Thema: **Atomic Transport in Solids: Theory and Experiments**
- **Hans-Hellmann-Symposium** im Rahmen der **V. A. Fock School on Quantum and Computational Chemistry**, Mai 2003, Novgorod, Rußland
- Workshop des Arbeitskreises *Computational Crystallography* der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Februar 2004, Aachen, zum Thema: **Calculation of Band Structures**
- Workshop am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Februar 2004, Stuttgart, zum Thema: **Magnetochemistry**
- Workshop innerhalb der *Chemistry Summer School*, August 2004, Peking, China, zum Thema: **Magnetochemistry – Foundations of Molecular Magnetism**
- Workshop des Arbeitskreises *Computational Crystallography* der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Februar 2005, Aachen, zum Thema: **Molecular Dynamics and Crystallography**
- International Conference on **Nonstoichiometric Compounds**, April 2005, Kauai, Hawaii, USA

Für die weitere Zukunft bereiten die Mitglieder der **CCC** folgende Veranstaltungen vor:

- Workshops des Arbeitskreises *Computational Crystallography* der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Februar 2006, Aachen, zum Thema: **Electron Density – Theory and Applications**
- Mikrosymposium im Rahmen der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Freiburg/Bg., 2006
- Jahrestagung der Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung der Gesellschaft deutscher Chemiker, September 2006, Aachen, zum Thema: **Modellbildung im Festkörper**

Des weiteren tragen sich die Mitglieder der **CCC** mit dem Gedanken, hervorragende Studierende gegen Ende ihres Studiums als studentische Hilfskräfte zu gewinnen, um sie einerseits im Rahmen einer "Übungsbetreuung" (6. Semester des Bch-Studienganges) bei der Lehre mitwirken zu lassen und um andererseits verschiedene Ideen der **CCC** für das eLearning umsetzen zu können. Letzteres soll über die **CCC**-homepage (s.u.) erfolgen. Die Hochschule wird um Unterstützung dieser lehrbezogenen Aktivitäten im Sinne einer Anschubfinanzierung gebeten, da eine Drittmittelfinanzierung dafür nicht in Frage kommt.

## Ergebnisse der bisherigen Aktivitäten

Als forschungsorientiertes Kompetenzzentrum betrachtet die **CCC** in erster Linie die Qualität und Anzahl der von ihr publizierten Forschungsergebnisse als Indikatoren ihres

Erfolgs. Schon in den ersten beiden Jahren ihres aktiven Bestehens produziert die CCC rund 30 Originalpublikationen pro Jahr, und zwar in durchgängig referierten Journalen von internationalem Zuschnitt. Bei Interesse sind sämtliche Publikationen direkt von den Korrespondenzautoren als Sonderdrucke erhältlich. Die nachfolgende Auflistung schließt die im RWTH-Themenheft erschienenen populärwissenschaftlichen Artikel **nicht** ein.

### Publikationen im Jahre 2003

- *Time-Dependent Density-Functional Theory Calculations on the Chiroptical Properties of Rubroflavin. Determination of its absolute Configuration by comparison of Measured and Calculated CD Spectra*, Y. Wang, G. Raabe, C. Reppes, J. Fleischhauer, *Int. J. Quantum Chem.* **2003**, 93, 265.
- *6-Methoxy-3,3'-trimethylspiro[2H-1-benzopyran-2,1'[2]oxaindan] Separation of Enantiomers, Circular Dichroism Measurements and Determination of the Absolute Configuration*, N. Voloshina, Y. Wang, N. A. Voloshin, G. Raabe, H.-J. Gais, J. Fleischhauer, *Z. Naturforsch.* **2003**, 58a, 443-450.
- *The Structure of the Dication of an 1,4,7-triazacyclononane (TP-TACN-H<sub>2</sub><sup>2+</sup>) and the Reason for the High Proton Affinity and Basicity of the Corresponding Base*, N. C. Meyer, C. Bolm, U. Kölle, G. Raabe, *Z. Kristallogr.* **2003**, Suppl. 20, 55.
- *Room-Temperature Activation of Aromatic C-H-Bonds by Non-Classical Ruthenium Hydride Complexes Containing Carbene Ligands*, D. Giunta, M. Hölscher, C. W. Lehmann, R. Mynott, C. Wirtz, W. Leitner, *Adv. Synth. Catal.* **2003**, 345, 1139.
- *Chiralität und Kristallbau*, U. Englert, R. Härter, A. Häring, C. Hu, I. Kalf, S. Reemers, X. Zheng, *Z. Kristallogr.* **2003**, Suppl. 20, 52.
- *Computing energy levels by inversion of imaginary time-cross correlation functions*, A. Lüchow, D. Neuhauser, J. Ka, R. Baer, J. Chen, V. A. Mandelshtam, *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107, 7175.
- *Linear Scaling for the Local Energy in Quantum Monte Carlo*, S. Manten, A. Lüchow, *Chem. Phys.* **2003**, 119, 1307.
- *A computational study of cation defects in LaGaO<sub>3</sub>*, R. A. De Souza, J. Maier, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, 5(4), 740.
- *Cetineites: Nanoporous Semiconductors with Zeolite-Like Channel Structure*, F. Starrost, O. Tiedje, W. Schattke, J. Jockel, U. Simon, in: *Nanoporous Crystals*, F. Laeri, F. Schüth, U. Simon (Eds.), Wiley-VCH, **2003**, 451.
- *Modeling and simulation of amorphous silicon oxycarbide*, P. Kroll, *J. Mater. Chem.* **2003**, 13, 1657.
- *Pathways to Metastable Nitride Structures*, P. Kroll, *J. Solid State Chem.* **2003**, 176, 530.

- *Hafnium Nitride, Hf<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, with Thorium Phosphide Structure: Physical Properties and an Assessment of the Hf-N, Zr-N, and Ti-N Phase Diagrams at High Pressures and Temperatures*, P. Kroll, *Phys. Rev. Lett.* **2003**, 90, 125501-1.
- *Cation tracer diffusion of <sup>138</sup>La, <sup>84</sup>Sr and <sup>25</sup>Mg in polycrystalline La<sub>0.9</sub>Sr<sub>0.1</sub>Ga<sub>0.9</sub>Mg<sub>0.1</sub>O<sub>2.9</sub>*, O. Schulz, M. Martin, C. Argirusis, G. Borchardt, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, 5, 2308.
- *Materials in thermodynamic potential gradients*, M. Martin, *Pure Appl. Chem.* **2003**, 75, 889.
- *Kinetics of Oxidation Processes in the System Co/Ga studied by in situ X-Ray Diffraction*, U. Koops, M. Martin, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2003**, 629, 1688.
- *X-Ray absorption and X-ray diffraction studies on molybdenum doped vanadium pentoxide*, F. Haaß, A. H. Adams, Th. Buhrmester, G. Schimanke, M. Martin, H. Fuess, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, 5, 4317.
- *Thermodynamic investigations of Sr- and Mg-doped lanthanum gallate by Knudsen effusion mass spectrometry and defect chemical analysis*, A. Matraszek, L. Singheiser, D. Kobertz, K. Hilpert, M. Miller, M. Martin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, 5, 3042.
- *Cation self-diffusion of <sup>44</sup>Ca, <sup>88</sup>Y and <sup>96</sup>Zr in single-crystalline calcia- and yttria-doped zirconia*, M. Kilo, M. A. Taylor, Ch. Argirusis, G. Borchardt, B. Lesage, S. Weber, S. Scherrer, H. Scherrer, M. Schroeder, M. Martin, *J. Appl. Phys.* **2003**, 94/12, 7547.
- *Internal Rotation and Chlorine Nuclear Quadrupole Coupling of o-Chlorotoluene Studied by Microwave Spectroscopy and Ab Initio Calculations*, D. Gerhard, A. Hellweg, I. Merke, W. Stahl, M. Baudelet, D. Petitprez, G. Wlodarczyk, *J. Mol. Spectrosc.* **2003**, 220, 234.
- *General analytical description of spin-diffusion for a three domain morphology. Application to melt-spun nylon-6 fibers*, A. Buda, D. E. Demco, M. Bertmer, B. Blümich, L. V. Litvinov, J. P. Penning *J. Phys. Chem. B* **2003**, 107, 5357.
- *Order Parameters of the Orientation Distribution of Collagen Fibers in Achilles Tendon by <sup>1</sup>H NMR of Multipolar Spin State*, R. Fechete, D. E. Demco, B. Blümich, *NMR Biomed.* **2003**, 16, 479.
- *Self-diffusion measurements by a constant-relaxation method in strongly inhomogeneous magnetic fields*, M. Klein, R. Fechete, D. E. Demco, B. Blümich, *J. Magn. Res.* **2003**, 164, 310.
- *Selective NMR excitation in strongly inhomogeneous magnetic fields*, M. Todica, R. Fechete, B. Blümich, *J. Magn. Res.* **2003**, 164, 220.
- *Domain Sizes in Heterogeneous Polymers by Spin Diffusion Using Single-Quantum and Double-Quantum Dipolar Filters*, A. Buda, D. E. Demco, M. Bertmer, B. Blümich, B. Reining, H. Keul, H. Höcker, *Solid State NMR*, **2003**, 24, 39.
- *Chemical Reactivity of Tetrasulfur Tetranitride: Synthesis, Physical Properties, and Structure Characterization of the Amorphous Phase Cu<sub>7</sub>S<sub>4</sub>N<sub>4</sub>*, S. H. Irsen, P. Kroll, R. Dronskowski, Th. E. Weirich, M. Eppe, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **2003**, 629, 1751.

- *Experimental and Quantum-Chemical Studies on the Thermochemical Stabilities of Mercury Carbodiimide and Mercury Cyanamide*, X. Liu, P. Müller, P. Kroll, R. Dronskowski, W. Wilsmann, R. Conradt, *ChemPhysChem* **2003**, 4, 725.
- *Temperature-Dependent Diffraction Studies on the Phase Evolution of Tetraindium Heptabromide*, M. Scholten, P. Kölle, R. Dronskowski, *J. Solid State Chem.* **2003**, 174, 349.
- *The impact of theoretical methods on solid-state chemistry*, R. Dronskowski, *J. Solid State Chem.* **2003**, 176, 285.
- *Electronic Structure, Chemical Bonding, and Spin Polarization in Ferromagnetic MnAl*, Y. Kurtulus, R. Dronskowski, *J. Solid State Chem.* **2003**, 176, 390.
- *The Electronic Structure of Tantalum Oxynitride and the Falsification of  $\alpha$ -TaON*, M.-W. Lumey, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2003**, 629, 2173.

#### Publikationen im Jahre 2004

- *(E)-4-Methyl-1-tributylstannyl-oct-1-en-6-yn-3-ol: Circular Dichroism Measurement and Determination of the Absolute Configuration by Quantum-chemical CD Calculations*, E.N. Voloshina, G. Raabe, J. Fleischhauer, G.J. Kramp, H.-J. Gais, *Z. Naturforsch.* **2004**, 59a, 124.
- *Semiempirical Calculations on the Dipole Moment Enhancement in the Solid States*, G. Raabe, *Z. Naturforsch.* **2004**, 59a, 977.
- *An Unusual Series of Thiomethylated Canthin-6-ones from the North American Mushroom *Boletus curtisii**, M. G. Bröckelmann, J. Dasenbrock, B. Steffan, W. Steglich, Y. Wang, G. Raabe, J. Fleischhauer, *Eur. J. Org. Chem.* **2004**, 4856.
- *An enantiomerically pure dinuclear triple-stranded helicate: X-ray structure, CD spectroscopy and DFT calculation*, M. Albrecht, I. Janser, J. Fleischhauer, Y. Wang, G. Raabe, R. Fröhlich, *Mendeleev Commun.* **2004**, 250.
- *The Use of Quantum-Chemical Semiempirical Methods to Calculate the Lattice Energy of Organic Molecular Crystals. Part III: The Lattice Energy of Borazine ( $B_3N_3H_6$ ) and its Packing in the Solid State*, G. Raabe, *Z. Naturforsch.* **2004**, 59a, 609.
- *Determination of the Absolute Configuration of Calliactine by Quantum Chemical Calculations*, E. Voloshina, G. Raabe, M. Estermeier, B. Steffan, J. Fleischhauer, *Int. J. Quantum Chem.* **2004**, 100, 1104.
- *Synthetic and Spectroscopic Investigation of N-Acylated Sulfoximines*. C. P. R. Hackenberger, G. Raabe, C. Bolm, *Chem. Eur. J.* **2004**, 10, 2942.
- *Magnetic Circular Dichroism of Nonaromatic Cyclic  $\pi$ -Electron Systems. 5. Biphenylene and Its Aza Analogues*. J. Fleischhauer, U. Höweler, J. Spanget-Larsen, G. Raabe, J. Michl, *J. Phys. Chem. A* **2004**, 108, 3225.

- *Semiempirical Calculations on the Dipole Moment Enhancement in the Solid State*, G. Raabe, *Z. Kristallogr.* **2004**, Suppl. 21, 116.
- *Origin of Enantioselectivity in Asymmetric Hydrovinylation Catalyzed by Phosphoramidite Nickel Catalysts: An Experimentally Supported Density Functional Study*, M. Hölscher, G. Francio, W. Leitner, *Organometallics*, **2004**, 23, 5606.
- *Assessment of the Hf-N, Zr-N, and Ti-N phase diagrams at high pressures and temperatures: balancing between MN and M<sub>3</sub>N<sub>4</sub> (M = Hf, Zr, Ti)*, P. Kroll, *J. Phys.: Cond. Matter*, **2004**, 16, 1235.
- *A DFT Study of the Compressibility of Amorphous Silicon Oxynitride*, P. Kroll, *J. Non-Cryst. Solids*, **2004**, 345-346, 720.
- *Computerized magnetic studies on d, f, d-d, f-f, and d-s, f-s systems under varying ligand and magnetic fields*, H. Schilder, H. Lueken, *J. Magn. Magn. Mater.* **2004**, 281, 17.
- *The valence of uranium in K<sub>6</sub>Cu<sub>12</sub>U<sub>2</sub>S<sub>15</sub>*, H. Lueken, H. Schilder, M. Speldrich, M. G. Kanatzidis, A. C. Sutorik, *J. Alloys Comp.* **2004**, 374, 249.
- *Thermodynamic and kinetic influences on the morphology of moving interfaces during solid state reactions*, M. Martin, H. Teuber, *Z. Metallk.* **2004**, 95, 4.
- *Trapping during hopping conduction of electronic defects: A conductivity model for doped transition metal oxides*, M. Martin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2004**, 6, 3627.
- *Secondary Ion Mass Spectroscopy: A powerful tool for diffusion studies in solids*, R. A. De Souza, M. Martin, *Archives of Metallurgy and Materials*, **2004**, 49, 431.
- *Reactivity of solids studied by in situ XAS and XRD*, M. Martin, U. Koops, N. Lakshmi, *Solid State Ionics*, **2004**, 172, 357.
- *Thermodynamics of New Materials*, M. Schroeder, M. Martin, in: *Chemical thermodynamics for industry*, ed. by T. M. Letscher, *The Royal Society of Chemistry*, **2004**, 180.
- *Modeling of cation diffusion in oxygen ion conductors using molecular dynamics*, M. Kilo, M. A. Taylor, C. Argirusis, G. Borchardt, R. A. Jackson, O. Schulz, M. Martin, M. Weller, *Solid State Ionics*, **2004**, 175, 823.
- *Structure and Methyl Groups Internal Rotation of Difluorodimethylsilane*, M. Schnell, J.-U. Grabow, H. Hartwig, N. Heineking, M. Meyer, W. Stahl, W. Caminati, *J. Mol. Spectrosc.* **2004**, 228, 1.
- *Rotational Spectra of Isotopic Species of SO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>: Experimental and Ab Initio Structures*, I. Merke, N. Heineking, J. Demaison, *J. Mol. Spectrosc.* **2004**, 228, 308.
- *Mobile NMR Device for Measurements of Porosity and Pore Size Distributions of Drilled Core Samples*, S. Anferova, V. Anferov, D. G. Rate, B. Blümich, J. Arnold, C. Clauser, P. Blümmler, H. Raich, *Concepts in Magnetic Resonance*, **2004**, 23B(1), 26.

- *Complex morphology of melt-spun Nylon-6 fibers investigated by  $^1\text{H}$  double-quantum-filtered NMR spin-diffusion experiments*, A. Buda, D. E. Demco, B. Blümich, V. Litvinov, J. P. Penning, *ChemPhysChem*, **2004**, 5, 876.
- *Enhanced sensitivity to residual dipolar couplings of elastomers by higher-order multiple-quantum NMR*, R. Fechete, D. E. Demco, B. Blümich, *J. Magn. Res.* **2004**, 169, 19.
- *Itinerant Ferromagnetism and Antiferromagnetism from the Perspective of Chemical Bonding*, R. Dronskowski, *Intl. J. Quant. Chem.* **2004**, 96, 89.
- *Quantum-Chemical Studies on the Geometric and Electronic Structures of Bertholloide Cobalt Oxynitrides*, M.-W. Lumey, R. Dronskowski, *Adv. Funct. Mat.* **2004**, 14, 371.
- *Hydrogen Bonding in the Crystal Structures of the Ionic Liquid Compounds Butyldimethylimidazolium Hydrogen Sulfate, Chloride and Chloroferrate(II,III)*, P. Kölle, R. Dronskowski, *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 2803.
- *A Theoretical Search for Intermetallic Compounds and Solution Phases in the Binary System Sn/Zn*, J. von Appen, K. Hack, R. Dronskowski, *J. Alloys Compds.* **2004**, 379, 110.
- *Metallic Behavior of the Zintl Phase  $\text{EuGe}_2$ : Combined Structural Studies, Property Measurements and Electronic Structure Calculations*, S. Bobev, E. D. Bauer, J. D. Thompson, J. L. Sarrao, G. J. Miller, B. Eck, R. Dronskowski, *J. Solid State Chem.* **2004**, 177, 3545.
- *Magnetic and electronic structure of  $\text{TlCo}_2\text{S}_2$* , S. Ronneteg, M.-W. Lumey, R. Dronskowski, U. Gelius, R. Berger, S. Felton, P. Nordblad, *J. Solid State Chem.* **2004**, 177, 2977.
- *Formation of Complex Three- and One-Dimensional Interpenetrating Networks within Carbodiimide Chemistry:  $\text{NCN}^{2-}$ -Coordinated Rare-Earth-Metal Tetrahedra and Condensed Alkali-Metal Iodide Octahedra in Two Novel Lithium Europium Carbodiimide Iodides,  $\text{LiEu}_2(\text{NCN})\text{I}_3$  and  $\text{LiEu}_4(\text{NCN})_3\text{I}_3$* , W. Liao, C. Hu, R. K. Kremer, R. Dronskowski, *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 5884.
- *$\text{LiSr}_2(\text{NCN})\text{I}_3$ : the first empty tetrahedral strontium(II) entity coordinated by carbodiimide units but without strontium–strontium bonding*, W. Liao, J. von Appen, R. Dronskowski, *Chem. Commun.* **2004**, 2302.
- *Electronic-structure Calculations from First Principles of Platinum-Group Metal Nitrides*, J. von Appen, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **2004**, 630, 1705.

### Publikationen im Jahre 2005

- *Semiempirical Calculations on the Dipole Moment Enhancement in the Solid State*, G. Raabe, *Z. Kristallogr.* **2005**, Suppl. 22, 131.

- *Conformational Dimorphism of 1,1,3,3,5,5-hexachloro-1,3,5-trigermacyclohexane: Solvent-Induced Crystallization of a Metastable Polymorph Containing Boat-Shaped Molecules*, V. Ischenko, U. Englert, M. Jansen, *Chem. Eur. J.* **2005**, *11*, 1375.
- *Crystal engineering based on preferred mirror image recognition in square planar Pd(II) complexes*, B. Calmuschi, U. Englert, *CrystEngComm* **2005**, *7*, 171.
- *The crystal structure of the first cis configured cyclopalladated complex*, B. Calmuschi, U. Englert, R. Wang, *Z. Kristallogr.* **2005**, *Suppl. 22*, 108.
- *Performance of diffusion Monte Carlo for the first dissociation energies of transition metal carbonyls*, C. Diedrich, A. Lüchow, S. Grimme, *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*(2), 21101.
- *Modelling Polymer Derived Ceramics*, P. Kroll, *J. Eur. Ceram. Soc.* **2005**, *25*, 163.
- *Practical guide to measurement and interpretation of magnetic properties (IUPAC Technical Report)*, S. Hatscher, H. Schilder, H. Lueken, W. Urland, *Pure Appl. Chem.* **2005**, *77*, 497.
- *The Influence of Cation and Vacancy Distributions on the Ionic Conductivity of Acceptor Doped Oxygen Ion Conductors*, M. Martin, *Z. Phys. Chem.* **2005**, *219*, 105.
- *Diffusion in Oxides*, M. Martin, in: *Diffusion in Condensed Matter, Methods, Materials, Models*, P. Heitjans, J. Kärger (Eds.), Springer, **2005**.
- *Electronic structure and magnetic exchange coupling in ferromagnetic full Heusler alloys*, Y. Kurtulus, R. Dronskowski, G. D. Samolyuk, V. P. Antropov, *Phys. Rev. B* **2005**, *71*, 14425-1.
- *Predicting new ferromagnetic nitrides from electronic structure theory: IrFe<sub>3</sub>N and RhFe<sub>3</sub>N*, J. von Appen, R. Dronskowski, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, *43*, 1205.
- *MCD of Nonaromatic Cyclic  $\pi$ -Electron Systems. Part 6: Pentalenes and Heptalenes*, Fleischhauer, G. Raabe, K.A. Klingensmith, U. Höweler, P.K. Chatterjee, K. Hafner, E. Vogel, J. Michl, *Int. J. Quantum Chem.*, im Druck.
- *Dynamic Behavior of Chiral Sulfonimidoyl-Substituted Allyl and Alkyl (Dimethylamino)titanium(IV) Complexes: Metallotropic Shift, Reversible  $\beta$ -Hydride Elimination/Reinsertion, and Ab Initio Calculations of Allyl Aminosulfoxonium Ylide*, H.-J. Gais, P. R. Bruns, G. Raabe, R. Hainz, M. Schleusner, J. Runsink, G. S. Babu, *J. Am. Chem. Soc.*, im Druck.
- *Modeling the 'Free Carbon' Phase in Amorphous Silicon Oxycarbide*, P. Kroll, *J. Non-cryst. Solids*, im Druck.
- *A DFT Study of Amorphous Silicon Oxynitride*, P. Kroll, *J. Non-Cryst. Solids*, im Druck.
- *Determination of oxygen isotope profiles in oxides with Time-of-Flight SIMS*, R. A. De Souza, J. Zehnpfennig, M. Martin, J. Maier, *Solid State Ionics*, im Druck.

- *Characterization of Mo-V-W Mixed Oxide Catalysts by ex situ and in situ X-Ray Absorption Spectroscopy*, G. Schimanke, M. Martin, J. Kunert, H. Vogel, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, im Druck.
- *Ionic Conductivity of Undoped BaTiO<sub>3-δ</sub> with Electron Transfer Suppressed*, L.-X. He, D.-K Lee, H.-I. Yoo, M. Martin, *Solid State Ionics*, im Druck.
- *Synthesis, Structure and Properties of the New Rare-earth Zintl Phase Yb<sub>11</sub>GaSb<sub>9</sub>*, S. Bobev, V. Fritsch, J. D. Thompson, J. L. Sarrao, B. Eck, R. Dronskowski, S. M. Kauzlarich, *J. Solid State Chem.*, im Druck.
- *A theoretical study on the existence and structures of some hypothetical first-row transition-metal MNCN compounds*, M. Launay, R. Dronskowski, *Z. Naturforsch. B*, im Druck.
- *First-Principles Electronic Structure, Chemical Bonding and High-Pressure Phase Prediction of the Oxynitrides of Vanadium, Niobium and Tantalum*, M-W. Lumey, R. Dronskowski, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, im Druck.
- *Synthesis, Crystal Structure and Properties of MnNCN, the first Carbodiimide of a Magnetic Transition Metal*, X. Liu, M. Krott, P. Müller, C. Hu, H. Lueken, R. Dronskowski, *Inorg. Chem.*, im Druck.
- *Group Functions for the Analysis of the Electronic Structures of Polymers*, A. Tokmachev, R. Dronskowski, *Phys. Rev. B*, im Druck.
- *Oxygen exchange measurements: initial and boundary conditions*, R. A. De Souza, R. J. Chater, *Solid State Ionics*, eingereicht.
- *Chemo- and Periselectivity in the addition of OsO<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>) to ethylene. A Theoretical Study*, M. Hölscher, W. Leitner, M. Holthausen, G. Frenking, *Chem. Eur. J.*, eingereicht.
- *Dopant substitution, oxygen migration and proton incorporation in the complex perovskite oxide Ba<sub>3</sub>CaNb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>: a computational study*, D. E. Ruiz-Trejo, R. A. De Souza, *J. Solid State Chem.*, eingereicht.
- *Electron Group Functions for the Analysis of the Electronic Structures of Molecules*, A. Tokmachev, R. Dronskowski, *J. Comput. Chem.*, eingereicht.
- *A theoretical study on the structures and energetics of hypothetical TiM(NCN)<sub>3</sub> compounds of the 3d transition metals*, M. Launay, R. Dronskowski, *J. Comput. Chem.*, eingereicht.

Seit 2003 werden die Aktivitäten der **CCC** von verschiedenen **Drittmittelgebern** gefördert. Im betrachteten Zeitraum (2003–5) wurden folgende Projekte von **CCC**-Mitgliedern bearbeitet:

- *Cokristallisation – molekulare Verbindungen und Legierungen*, DFG-Normalverfahren

- *Racemische Kristalle und Konglomerate*, DFG-Normalverfahren
- *Theoretische Berechnung der Phasendiagramme keramischer Oxidnitride*, DFG-Normalverfahren
- *Quantenchemische und bindungstheoretische Untersuchungen an binären und ternären ferromagnetischen Legierungen der Übergangsmetalle*, DFG-Normalverfahren
- *Untersuchungen zur Defektchemie und Diffusion in Bariumtitanat BaTiO<sub>3</sub>*, DFG-Normalverfahren
- *Electronic Structure by quantum Monte Carlo*, im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms: *First-principles methods for many-electron systems in chemistry and physics*
- *PACVD-Synthese und Charakterisierung von Si/(B)/C/N-Hartstoffschichten für tribologische Anwendungen*, im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms: *Anorganische Materialien durch Gasphasensynthese: Interdisziplinäre Ansätze zu Entwicklung, Verständnis und Kontrolle von CVD-Verfahren*
- *Quantenchemische Untersuchungen zur Existenz, Struktur und Bindung einfacher Oxidnitride der Übergangsmetalle (V. und VIII. Nebengruppe) sowie von Oxidnitriden des Galliums*, im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms: *Substitutionseffekte in ionischen Festkörpern*
- *Nanoporöse Halbleiter mit zeolithähnlicher Struktur*, im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms: *Nanostrukturierte Wirt/Gast-Systeme*
- *Kationendiffusion und chemische Aktivitäten in SOFC-Materialien*, im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms: *Neue Schichtstrukturen für Brennstoffzellen*
- *Aufklärung der Funktion und der Dynamik von Sauerstoff-Spezies in Mo/V-Mischoxid-Katalysatoren bei der Partialoxidation von einfachen Aldehyden* im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms: *Brückenschläge zwischen idealen und realen Systemen in der Heterogenen Katalyse*
- *Oxidnitride des Galliums – Bildungskinetik, Defektchemie und Transportvorgänge*, im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms: *Substitutionseffekte in ionischen Festkörpern*
- *Kristallisationsprozesse*, Forschungs- und Entwicklungsvertrag Grünenthal GmbH

Hinzu kommen weitere Beteiligungen an den DFG-Schwerpunktprogrammen *Organokatalyse* und *Molekularer Magnetismus* sowie die Beteiligung am SFB-*Asymmetrische Synthesen mit chemischen und biologischen Methoden*. Zusätzlich wurden personengebundene Förderungen eingeworben:

- ein einjähriges Stipendium der Alexander-von-Humboldt-Stiftung (*Roman Herzog-Forschungsstipendium*) sowie
- zwei einjährige Postdoc-Stipendien der Alexander-von-Humboldt-Stiftung

## Internetpräsenz

Die CCC ist seit dem Frühjahr 2003 auf dem Internet ([www.ccc.rwth-aachen.de](http://www.ccc.rwth-aachen.de)) zu erreichen. Die homepage ist als Portal der RWTH-spezifischen Kompetenz auf dem Gebiet der **Computational Chemistry** zu verstehen und erlaubt interessierten Besuchern einen Einblick in die vielfältigen Aktivitäten. Insbesondere werden die Forschungsschwerpunkte der beteiligten Mitglieder aufgezeigt, des weiteren die aktuellen Publikationen, Links zu weiteren Seiten der **Computational Chemistry** und vieles mehr. Bei entsprechender Unterstützung durch die RWTH (s.o.) ist geplant, diese Seite verstärkt für die elektronische Lehre einzusetzen.

The screenshot shows a Microsoft Internet Explorer browser window displaying the homepage of the Computational Chemistry Coalition (CCC). The browser's address bar shows the URL <http://www.ccc.rwth-aachen.de/>. The website layout includes a navigation menu on the left with the following links: Home, Mission, Members, Talks, Links, News, Jobs, and Contact. The main content area features a large 3D ball-and-stick molecular model of a complex organic or organometallic structure. The top of the page contains the CCC logo, the text 'Computational CHEMISTRY Coalition', and the RWTH Aachen University logo.