

Schwerpunktprogramm 1178 "Experimentelle Elektronendichte als Schlüssel zum Verständnis chemischer Wechselwirkungen" - zweite Förderperiode

11. Oktober 2006

Der Senat der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) hat die Fortsetzung des Schwerpunktprogramms "Experimentelle Elektronendichte als Schlüssel zum Verständnis chemischer Wechselwirkungen" beschlossen.

Dieses interdisziplinär methodenorientierte Schwerpunktprogramm befasst sich mit der topologischen Analyse der Elektronendichte in ausgewählten Substanzklassen auf der Basis hochaufgelöster Einkristall-Röntgen-, -Synchrotron- und -Neutronenbeugungsdaten bei tiefen Temperaturen. Jüngste Ergebnisse zur experimentellen Elektronendichtebestimmung zeigen, dass die Methode Antworten auf bislang kontrovers diskutierte Fragen zur Natur der chemischen Bindung gibt und damit fundamentale Erkenntnisse zur Erweiterung und Verfeinerung chemischer Bindungskonzepte liefern kann. Im Schwerpunktprogramm wird die Methode durch die Einbindung führender Forschergruppen auf dem Gebiet der Elektronendichtebestimmung, der präparativen Chemie und von Hochleistungsinstrumenten an nationalen Großforschungsanlagen (FRM II, Synchrotron) systematisch weiterentwickelt. Dabei sollen auch moderne quantenchemische AIM-Konzepte und spektroskopische Methoden, die einen komplementären Einblick in die Elektronendichteverteilung ermöglichen, eingebunden werden. Die beteiligten präparativen Gruppen stellen methodisch und chemisch relevante Leitstrukturen zur Verfügung. Die Vernetzung und der interdisziplinäre Dialog der methodisch arbeitenden und der präparativ orientierten Gruppen ergibt wichtige Synergien und trägt zu einem tieferen Verständnis und neuen Konzepten bei. Die Ergebnisse der Elektronendichteuntersuchungen werden so für eine breite Forschergemeinschaft nutzbar.

Folgende Themenfelder sollen im Schwerpunktprogramm gefördert werden:

1. Die Weiterentwicklung der Methode der experimentellen Elektronendichtebestimmung im Hinblick auf

- leistungsstarke Computerprogramme zur Elektronendichtemodellierung,
- Transferierbarkeit submolekularer Dichteigenschaften auf Aggregate und
- die Implementierung schwerer Elemente.

2. Das Instrumentarium der Analyse der Topologie der Elektronendichteverteilung und die Möglichkeit,

- die Eigenschaften von Atomen und Bindungen zu quantifizieren,
- der Anwendung auf breit gefächerte intra- und intermolekulare Wechselwirkungen,
- der Anwendung auf Elemente höherer Ordnungszahlen durch optimierte Radialfunktionen,
- der Korrelation mit den Messgrößen klassischer Analyseverfahren wie der Spektroskopie und
- des Vergleichs mit den theoretischen Ergebnissen der ELF und von Bandstrukturrechnungen.

3. Die Klärung der Wechselwirkungen in Leitstrukturen, die

- Atome in bislang nicht verstandenen Bindungssituationen enthalten,

- aufgrund bislang nicht quantifizierbarer molekularer Organisationsprinzipien entstehen,
- infolge bislang nicht scharf gefasster intermolekularer Wechselwirkungen spezifische Wirk- und Werkstoffeigenschaften zeigen (z. B. Struktur-Wirkungs-Beziehung, molekulare Erkennung, Wirt-Gast-Aggregate).

Um einen hohen Grad an Fokussierung und Vernetzung zwischen den methodisch und präparativ arbeitenden Gruppen im Schwerpunktprogramm zu gewährleisten, sind nur Projektanträge zugelassen, in die mindestens eine Gruppe integriert ist, die auf dem Gebiet der experimentellen Elektronendichtebestimmung aus Beugungsmethoden arbeitet. Nicht gefördert werden Projekte, die sich mit Beugungsexperimenten an Pulvern oder Streuexperimenten an Oberflächen oder dünnen Filmen befassen. Bei den theoretischen Grundlagen der Methodenentwicklung werden Gruppen eingebunden, die neue Ansätze zur Analyse der Topologie der Elektronendichte nach der AIM-Methode entwickeln, sodass sie sich zum direkten Vergleich mit dem Experiment eignen. Nicht gefördert wird die Berechnung von Referenzstrukturen aus MO- oder DFT-Methoden, die bereits in der Computational Chemistry etabliert sind.

Weiterführende Informationen

Die in englischer Sprache abgefassten Anträge für die zweite zweijährige Förderperiode sind ungeheftet und gelocht in fünffacher Ausfertigung (Anlagen ebenfalls fünffach) möglichst früh, spätestens bis zum 15. Dezember 2006 bei der Geschäftsstelle der DFG (Dr. Johannes Janssen, z.Hd. Karin Grütering) unter dem Stichwort "SPP 1178 ExpED" einzureichen. Die entsprechenden Einzeldateien (Antrag, Lebenslauf, Fragebogen für Antragsteller, Publikationsliste der vergangenen fünf Jahre, Publikationen, Angebote über 10.000 Euro, deutsche Kurzfassung) sind auf CD-ROM als PDF-Dateien beizufügen. Die Kurzfassung beinhaltet eine Übersetzung des Titels, der Zusammenfassung (Punkt 1.6) und der beantragten Mittel (Punkt 4) sowie deren Begründung in deutscher Sprache.

Ein weiteres Antragsexemplar erhält der Koordinator des Schwerpunktprogramms, Professor Dr. Dietmar Stalke, Institut für Anorganische Chemie der Universität Göttingen, Tammannstraße 4, 37077 Göttingen, E-Mail: dstalke@chemie.uni-goettingen.de. Inhaltliche Rückfragen zum Schwerpunkt beantwortet der Koordinator.

Auskunft zur Antragstellung erteilt Dr. Johannes Janssen, DFG-Geschäftsstelle, Bonn, Tel.: 0228-885-2430, E-Mail: johannes.janssen@dfg.de.