

Programmspezifischer Abschlussbericht des
DFG-Schwerpunktprogrammes 1145

**Modern and Universal First-principles
Methods for Many-electron Systems
in Chemistry and Physics**

(October 2003 - Oktober 2010)

<http://www.uni-koeln.de/spp1145>

Michael Dolg
Institut für Theoretische Chemie,
Universität zu Köln, Greinstr. 4, D-50939 Köln, Germany

November 29, 2010

1 Wissenschaftlicher Abschlussbericht

Der wissenschaftliche Teil des Abschlußberichts wurde bereits publiziert: Sonderband der Zeitschrift für Physikalische Chemie 224 (3-4), 291 - 713 (2010) und *Modern and Universal First-Principles Methods for Many-Electron Systems in Chemistry and Physics*, in: *Progress in Physical Chemistry*, Vol. 3, M. Dolg (Hrsg.), 422 Seiten, Oldenbourg Verlag (2010) ISBN 978-3-486-59827-8. 2 Exemplare der Buchausgabe wurden diesem Bericht beigelegt.

2 Programmspezifischer Abschlussbericht

Das Schwerpunktprogramm (SPP) 1145 *Modern and Universal First-principles Methods for Many-electron Systems in Chemistry and Physics* wurde 2002 von der DFG bewilligt und lief über drei Förderperioden 2003-2005, 2005-2007 und 2007-2010 (inklusive Auslaufförderung). In den drei Förderperioden wurden 27, 27 bzw. 24 Projekte aus der Theoretischen Chemie, Theoretischen Physik und Angewandten Mathematik gefördert (s. Anhang). Ein Ziel des Programms war es, Wissenschaftler aus diesen unterschiedlichen Gebieten zum Erfahrungsaustausch und ggfs. zu gemeinsamen Forschungsprojekten zusammenzubringen. Hierzu wurden u.a. 7 Symposien (davon 3 mit Begutachtung) und 5 Workshops (zu verschiedenen spezialisierten Themen) jeweils mit Beteiligung internationaler Wissenschaftler abgehalten (s. Anhang) und durch die DFG finanziert. Außer Doktorandenstellen und Postdoktorandenstellen für die einzelnen Projekte wurden auch Reisekosten für die Teilnahme an nationalen/internationalen Tagungen sowie Kosten von wissenschaftlichen Gastaufenthalten durch die DFG finanziert.

Zentrales **Forschungsziel** des Programmes war die Entwicklung und Erprobung neuer/neuartiger und leistungsfähiger first-principles Methoden zur Berechnung der elektronischen Struktur von Atomen, Molekülen und Festkörpern. Es sollten nicht nur bereits etablierte Methoden (ab initio Wellenfunktionsverfahren, Dichtefunktionaltheorie) systematisch verbessert werden, sondern insbesondere auch bisher noch wenig eingesetzte Verfahren (z.B. Dichtematrixtheorie, Quanten-Monte-Carlo-Verfahren, F12-abhängige Wellenfunktionsverfahren) weiterentwickelt werden. Die Mehrzahl der von den einzelnen Projekten anvisierten Ziele wurden im Laufe der drei Förderperioden erreicht, teilweise wurden sogar weitergehende Zielstellungen verfolgt. Die im SPP 1145 erzielten Fortschritte sind in dem 422-seitigen wissenschaftlichen Abschlußbericht detailliert aus Sicht der jeweiligen Projektleiter dokumentiert. Die darin erhaltenen Artikel haben teilweise Review-Charakter und geben auch über die **Entwicklung des Forschungsfeldes im Verlaufe des Programmes** Auskunft. Aus Platzgründen können im folgenden exemplarisch nur einige wenige Teilaspekte dieser Arbeiten erwähnt werden.

Die Zeit von 2003 bis 2010 war durch beachtenswerte Fortschritte bei Elektronenstrukturberechnungen gekennzeichnet, zu denen die Projekte des SPP 1145 sowohl auf dem Gebiet der Wellenfunktionsverfahren (insbesondere explizit korrelierte, teilweise lokale und linear-skalierende sowie parallelisierte ab initio Korrelationsverfahren für Moleküle und periodische Systeme (A. Auer, M. Dolg, C. Hättig, M. Hanrath, W. Klopper, C. Ochsen-

feld, B. Paulus, H.-J. Werner, M. Schütz)) als auch der Dichtefunktionaltheorie (z.B. orbitalabhängige Funktionale und für charge-transfer Zustände modifizierte Ansätze in der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie, relativistische Optimized-Potential-Methode, Kombination lokaler Dichtematrixfunktionaltheorie mit Dichtefunktionaltheorie, u.a. (P. Blöchl, A. Dreuw, H. Ebert, E. Engel, H. Eschrig, A. Görling, E. Gross, M. Kaupp, M. Richter, G. Seifert)) wichtige, international beachtete Beiträge geliefert haben. Es ist hierbei gelungen sowohl größere/komplexere Systeme als bisher möglich zu behandeln als auch die Genauigkeit der theoretischen Vorhersagen (systematisch) zu verbessern. Z.B. sind inzwischen MP2-Berechnungen an Systemen mit über 1000 Atomen (C. Ochsenfeld) sowie genaue (explizit korrelierte) CC-Berechnungen an Molekülen mit 50 - 100 Atomen (H.-J. Werner) möglich. Weitere wichtige Impulse für eine noch effizientere Implementierung der Verfahren wurden von der Angewandten Mathematik geliefert (z.B. Tensorproduktapproximationen für Integrale (W. Hackbusch, R. Schneider, H.-J. Flad), adaptive Mehrgitterverfahren (M. Griebel)). Neben den Aktivitäten auf den beiden großen Arbeitsgebieten wurden im Rahmen des SPP 1145 noch einige weitere Projekte mit teilweise spezialisierten Zielstellungen verfolgt. So konnte sich gefördert durch das SPP 1145 eine neue quantenchemische Arbeitsgruppe auf dem Gebiet der aus der Festkörpertheorie stammenden Dichtematrixrenormierungsgruppe etablieren (M. Reiher). Relativistische Verfahren, die die Spin-Bahn-Wechselwirkung von Beginn an einbeziehen, wurden zu quantenchemischen Routineverfahren weiterentwickelt (C. van Wüllen, T. Fleig). Die GW-Näherung wurde auf Allelektronenniveau zu einer weitverbreiteten und quantitativen Methode für Bandstrukturberechnungen als Alternative zu herkömmlichen Dichtefunktionalberechnungen weiterentwickelt (A. Schindlmayr). Weiter wurde ein Vorgehen vorgeschlagen, um die strukturelle und elektronische Response von periodischen Systemen in elektrischen Feldern zu behandeln und optische Eigenschaften, Piezoelektrizität und Intensitäten von Schwingungsspektren einfach zu berechnen (M. Springborg). Für Wenigelektronensysteme im Magnetfeld wurden exakte analytische Lösungen gewonnen, Schlußfolgerungen auf Grundaussagen der Dichtefunktionaltheorie und auf Jahn-Teller-Übergänge in Wignerkristallen erarbeitet (H. Eschrig).

Eine verstärkte **interdisziplinäre Zusammenarbeit** war von Anfang an ein wichtiges Ziel des SPP 1145. Durch die regelmässigen wissenschaftlichen Kontakte der beteiligten Arbeitsgruppen während der Symposien und Workshops sind einige **fach- und ortsübergreifende Zusammenarbeiten** innerhalb des SPP 1145 entstanden, so z.B. zwischen der Angewandten Mathematik (W. Hackbusch, R. Schneider, H.-J. Flad) und der Quantenchemie (A. Auer) auf dem Gebiet der Tensorproduktapproximation von Integralen, oder zwischen den Arbeitsgruppen in Karlsruhe (W. Klopper) und Köln (M. Hanrath, M. Dolg) bei der Verknüpfung von explizit korrelierten Methoden mit dem Inkrementenverfahren zur Berechnung der Elektronenkorrelation sowie in Frankfurt (E. Engel) und München (H. Ebert) bei Arbeiten über die Spindichtefunktionaltheorie. In einem Projekt wurden Dichtefunktional- und Wellenfunktionstheorie explizit kombiniert (H. Stoll), in anderen wurden Aspekte von Wellenfunktionsverfahren bei der Konstruktion von Dichtefunktionalen berücksichtigt (E. Engel, A. Görling).

Das SPP 1145 hat in den vergangenen Jahren eine hohe **internationale Sichtbarkeit**

erreicht. Diese wird nicht nur durch eine große Zahl von Publikationen in international angesehenen Fachzeitschriften belegt (s. Anhang für eine Auswahl), sondern u.a. auch durch zahlreiche Vortragseinladungen von Wissenschaftlern des SPP 1145 zu internationalen Tagungen und gemeinsamen Projekten mit internationalen Partnern auf Themengebieten des SPP 1145 (z.B. M. Springborg, Saarbrücken und B. Kirtman, Santa Barbara; M. Nest, Potsdam, mit R. D. Levine, Jerusalem; u.v.a.m. (gemeinsame Publikationen s. Anhang)). Weiterhin wurden mehrere jüngere Wissenschaftler des SPP 1145 an Hochschulen im Ausland berufen (s. Anhang). Schließlich wurden zu allen Symposien und Workshops gezielt Wissenschaftler aus dem Ausland zu Vorträgen eingeladen. Diese zeigten sich i.a. von der Breite und der Qualität des SPP 1145 sehr beeindruckt. Der Abschlußbericht des SPP 1145 wurde sowohl als Sonderband einer Fachzeitschrift (Z. Physikal. Chemie) als auch in Buchform publiziert. Ca. 200 Buchexemplare wurden aus den Publikationskosten des SPP 1145 finanziert und außer an Teilnehmer und Gutachter des SPP 1145, sowie an Bibliotheken deutscher Universitäten, auch an zahlreiche ausländische Wissenschaftler versendet. J. Gauss, Mitinitiator des SPP 1145 und Projektleiter in der ersten Förderperiode, wurde 2005 mit dem Gottfried Wilhelm Leibniz-Preis ausgezeichnet.

Die erfolgreiche **Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses** im Rahmen des SPP 1145 ist durch 30 Promotionen sowie 6 Habilitationen von Nachwuchswissenschaftlern dokumentiert. Hinzu kommen noch mehrere Erstberufungen von am SPP 1145 beteiligten jungen Wissenschaftlern auf Professuren (s. Anhang). Die Workshops des SPP 1145 wurden sehr gut von jungen Wissenschaftlern (Diplomanden, Doktoranden) besucht und erlaubten diesen eine effiziente Einführung in die im SPP 1145 behandelten Themen auf hohem Niveau. Schließlich ermöglichte auch die eher familiäre Atmosphäre der Workshops jungen Wissenschaftlern das Knüpfen von neuen Kontakten, insbesondere auch mit den eingeladenen internationalen Gästen. Das SPP 1145 konnte jedoch keine besonderen **Maßnahmen zur Gleichstellung von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern** ergreifen, da hierzu keine gesonderten Mittel zur Verfügung standen. 7 der 30 Promotionen (23 %) und 1 der 6 Habilitationen (17 %) wurden von Frauen erlangt. Eine Projektleiterin (B. Paulus) wurde während der Laufzeit des SPP 1145 auf eine W2-Stelle berufen.

Durch das SPP 1145 wurden mehrere Anstöße für **weitergehende Förderaktivitäten** und Anträge für **Programme anderer Forschungsverbünde** gegeben. So konnte z.B. B. Paulus ihre im SPP 1145 durchgeführte Methodenentwicklung auf dem Gebiet der Inkrementenrechnungen erfolgreich im SPP 1187 einsetzen. In Berlin (R. Schneider, H.-J. Flad) sowie in Kaiserslautern (C. van Wüllen) sind SFBs in Planung bzw. wurden bereits beantragt, bei denen im SPP 1145 entwickelte Verfahren eingesetzt werden sollen. In Stuttgart (H.-J. Werner) werden Arbeiten aus dem SPP 1145 in einem NSF-DFG-Projekt sowie im *SimTech Cluster of Excellence* fortgeführt.

Zahlreiche im SPP 1145 erzielte methodische Verbesserungen, Weiter- oder Neuentwicklungen wurden bereits während der Laufzeit der Projekte in Computerprogramme implementiert und stehen nun über diese anderen Anwendern zur Verfügung, z.B. lokale und explizit korrelierte Elektronenkorrelationsverfahren im Programm MOLPRO (H.-J. Werner) oder CRYSCOR (M. Schütz), F12-abhängige Wellenfunktionsverfahren im Programm TURBOMOLE (W. Klopper, C. Hättig), GW-Näherung in einem Allelektronen-FLAPW-

Programm (A. Schindlmayr), u.v.a.m. Insofern werden die im SPP 1145 durchgeführten Arbeiten auch bedeutende **Fortschritte aus Anwendungssicht** bewirken.

Weitere **Hinweise an die DFG**: Deutschland ist auf dem Gebiet der Entwicklung neuer Methoden für Elektronenstrukturberechnungen und damit verbundener Eigenschaftsberechnungen international mit Sicherheit in der Spitzengruppe. Diese Stellung wurde ganz wesentlich auch durch die DFG in Form des SPP 1145 sowie früherer SPPs (z.B. zu relativistischen Methoden, 1994-2000, Koordination B. A. Hess†) erreicht bzw. gefestigt. Gerade die Entwicklung leistungsfähiger theoretischer Methoden und Algorithmen ist für die zukünftige Entwicklung dieses sehr aktiven und wichtigen Gebietes essentiell. Hiervon profitieren auch die reinen Anwender der theoretischen Methoden und Programme auf den unterschiedlichsten Forschungsgebieten. Leider führt der weitverbreitete Zwang zu rein anwendungsorientierter Forschung im Bio-, Nano- und Materialbereich dazu, daß in vielen Ländern Theorie und Methodenentwicklung kaum noch gefördert wird und Fortschritte nur noch durch Leistungssteigerungen bei der Hardware erzielt werden. Die DFG ist hier eine sehr erfreuliche Ausnahme, wie von internationalen Fachkollegen, z.B. auf den SPP 1145 Symposien und Workshops, häufig bekundet wurde. Um die international herausragende Stellung der deutschen Theorie auf dem Gebiet der Elektronenstrukturberechnungen auch weiterhin halten zu können, wäre es sehr wünschenswert, wenn auch in Zukunft ein reines Theorie-SPP durch die DFG gefördert werden würde.

3 Anhang: Übersichten und Verzeichnisse

3.1 Geförderte Teilprojekte 2003-2005

1. *Local ab initio schemes to describe excitons in polymers and solids*; Martin Albrecht (Siegen) Al 625/1-1
2. *Wave-function-based correlation method for ground states and excited electron hole and attachment states of periodic systems*; Uwe Birkenheuer (Dresden) Bi 822/1-1
3. *Wannier-type orbital based Hartree-Fock (-Wigner) electronic structure theory and wavefunction-based correlation treatment for periodic systems*; Michael Dolg (Köln) Do 440/6-1
4. *Relativistic Optimized Potential Method for magnetic solids*; Hubertus Ebert (München) Eb 154/13-1
5. *Density functional theory with implicit functionals: Correlation energy*; Eberhard Engel (Frankfurt) En 265/4-1
6. *Orbital magnetism in molecules and solids*; Helmut Eschrig, Manuel Richter (Dresden) Es 85/10-1, Gotthard Seifert (Dresden) Se 651/28-1
7. *Development of a Relativistic Hilbert-Space Multi-Reference Coupled-Cluster Program*; Timo Fleig (Düsseldorf) Fl 356/2-1
8. *Accurate wave functions for open-shell atoms including open d- and f-shell elements*; Stephan Fritzsche (Kassel) Fr 1251/11-1
9. *Spin-adapted coupled-cluster theory for the treatment of low-spin open-shell states*; Jürgen Gauß (Mainz) Ga 370/4-1
10. *Concepts from the optimized potential method and orbital-dependent kernels in time-dependent density-functional theory*; Andreas Görling (Bonn, ab 2004 Erlangen) Go 523/13-1
11. *A dimension-adaptive sparse grid method for the Schrödinger equation*; Michael Griebel (Bonn) Gr 1144/12-1
12. *Development of a reduced-density-matrix functional theory for solids*; Eberhard K. U. Groß (Berlin) Gr 1267/7-1
13. *Development and application of explicitly-correlated coupled-cluster methods for non-linear optical properties*; Christof Hättig, Willem Marten Klopper (Karlsruhe) Ha 2588/3-1
14. *Development and application of quantum-chemical density-matrix renormalization group methods*; Bernd A. Heß † (Bonn), fortgeführt von Markus Reiher (Bonn, ab 2005 Jena) He 1553/7-1
15. *Development and implementation of modern density functional methods for property calculations*; Martin Kaupp (Würzburg) Ka 1187/6-1
16. *Development, implementation and application of the analytical calculation of energy derivatives, especially nuclear gradients, of electron-correlation methods employing wavefunctions that depend explicitly on the interelectronic distances*; Willem Maarten Klopper (Karlsruhe) Kl 721/2-1
17. *Development and investigation of orbital functionals in density- and current- density functional theory*; Stefan Kurth (Berlin) Ku 1126/3-1
18. *Development of electron structure quantum Monte Carlo methods*; Arne Lüchow (Aachen) Lu 588/7-1

19. *One- to four-component correlated relativistic electronic structure methods based on density matrix renormalization group techniques*; Markus Reiher (Bonn, ab 2005 Jena) Re 1703/1-1
20. *Ab initio electron dynamics with the multi-configuration (explicitly) time- dependent Hartree-Fock (MCTDHF) method*; Peter Saalfrank (Potsdam) Sa 547/6-1
21. *First-principle method for the calculation of magnons in real materials*; Leonid M. Sandratskii (Darmstadt) Sa 798/2-1
22. *Electronic structure and excitation spectra of magnetic materials within first- principles many-body perturbation theory*; Arno Schindlmayr, Gustav Bihlmayer, Stefan Blügel (Jülich) Schi 570/3-1
23. *Operator calculus of density matrices and sparse wavelet representations*; Wolfgang Hackbusch, Heinz-Jürgen Flad (Leipzig) Ha 1324/24-1, Reinhold Schneider (Kiel) Schn 530/4-1
24. *Development of local electron correlation methods for periodic systems*; Martin Schütz (Stuttgart, ab 2004 Regensburg) Schu 1456/3-1
25. *Constructing density functionals compatible with exact exchange, utilizing the strong interaction limit*; Michael Seidl (Regensburg)
26. *Ab initio QED calculations of spectra and transition probabilities in atomic few-electron systems*; Gerhard Soff † (Dresden), fortgesetzt von Günther Plunien (Dresden) So 333/17-1
27. *Coupling of density-functional and configuration-interaction-type methods*; Hermann Stoll and Hans-Joachim Werner (Stuttgart) Sto 305/3-1

3.2 Geförderte Teilprojekte 2005-2007

1. *Local ab initio schemes to describe excitons in polymers and solids*; Martin Albrecht (Siegen) Al 625/1-2
2. *Wave-function-based correlation method for ground states and excited electron hole and attachment states of periodic systems*; Uwe Birkenheuer (Dresden) Bi 822/1-2
3. *Wannier-type orbital based Hartree-Fock (-Wigner) electronic structure theory and wavefunction-based correlation treatment for periodic systems*; Michael Dolg, Michael Hanrath (Köln) Do 440/6-2
4. *Relativistic optimized potential method for magnetic solids*; Hubertus Ebert (München) Eb 154/13-2
5. *Density functional theory with implicit functionals: Correlation energy*; Eberhard Engel (Frankfurt) En 265/4-2
6. *Orbital magnetism in molecules and solids*; Helmut Eschrig, Manuel Richter (Dresden) Es 85/10-2, Gotthard Seifert Se 651/28-2
7. *Test and improvement of current density functionals using an exactly solvable two-electron model*; Helmut Eschrig, Manuel Richter (Dresden) Es 85/11-1
8. *Optimization of fragment electron densities for the usage in mixed quantum mechanical molecular mechanical (QM/MM) and fragment-based quantum mechanical methods*; Thomas Eckart Exner (Konstanz) Ex 15/8-1
9. *Development of a relativistic Hilbert-space multi-reference coupled-cluster program*; Timo Fleig (Düsseldorf) Fl 356/2-2

10. *Concepts from the optimized potential method and orbital-dependent kernels in time-dependent density-functional theory*; Andreas Görling (Erlangen-Nürnberg) Go 523/13-2
11. *A dimension-adaptive sparse grid method for the Schrödinger equation*; Michael Griebel (Bonn) Gr 1144/12-2
12. *Development of a reduced-density-matrix functional theory for solids*; Eberhard K. U. Groß (Berlin) Gr 1267/7-2
13. *Operator calculus of density matrices and sparse wavelet representations*; Wolfgang Hackbusch, Heinz-Jürgen Flad (Leipzig) Ha 1324/24-2, Reinhold Schneider (Kiel) Schn 530/4-2
14. *Development and application of explicitly-correlated coupled-cluster methods for non-linear optical properties*; Christof Hättig (Karlsruhe, ab 2006 Bochum), Willem Marten Klopper (Karlsruhe) Ha 2588/3-2
15. *Development, implementation and application of the analytical calculation of energy derivatives, especially nuclear gradients, of electron-correlation methods employing wavefunctions that depend explicitly on the interelectronic distances*; Willem Marten Klopper (Karlsruhe) Kl 721/2-2
16. *Development and investigation of orbital functionals in density- and current- density functional theory*; Stefan Kurth (Berlin) Ku 1126/3-2
17. *Development of electronic structure quantum Monte Carlo methods*; Arne Lüchow (Aachen) Lu 588/7-2
18. *Development of a linear-scaling MP2 method for large molecules by rigorous integral criteria*; Christian Ochsenfeld (Tübingen) Oc 35/3-1
19. *Development of a wavefunction-based ab initio method for metals applying the method of increments*; Beate Paulus (Dresden) Pa 1360/1-1
20. *Development and application of quantum chemical density matrix renormalization group methods*; Markus Reiher (Bonn, ab 2005 Jena, ab 2006 Zürich) Re 1703/1-2
21. *Ab initio electron dynamics with the multi-configuration (explicitly) time- dependent Hartree-Fock (MCTDHF) method*; Peter Saalfrank, Tilman Klamroth (Potsdam) Sa 547/6-2
22. *Electronic structure and excitation spectra of magnetic materials within first- principles many-body perturbation theory*; Arno Schindlmayr, Gustav Bihlmayer, Stefan Blügel (Jülich) Schi 570/3-2
23. *Development of local electron correlation methods for periodic systems*; Martin Schütz (Regensburg) Schu 1456/3-2
24. *Development and implementation of theoretical methods for dealing with functions of the quantum mechanical operator r in extended systems*; Michael Springborg (Saarbrücken) Sp 439/20-1
25. *Coupling of density-functional and configuration-interaction-type methods*; Hermann Stoll (Stuttgart) Sto 305/3-2
26. *Local explicit correlation methods*; Hans-Joachim Werner (Stuttgart) We 984/15-1
27. *Development of an efficient and quasirelativistic two-component program package for Hartree-Fock and density functional calculations*; Christoph van Wüllen (Berlin) Wu 288/4-1

3.3 Geförderte Teilprojekte 2007-2010

1. *Development of alternative, screening based, local coupled cluster methods and efficient algorithms for parallel architectures*; Alexander Auer (Chemnitz) Au 206/2-1
2. *Lokale Korrelationen in Dichtefunktionaltheorie mit einer gemischten Dichte- und Dichtematrixfunktionaltheorie*; Peter Blöchl (Clausthal) Bl 539/6-1
3. *Hartree-Fock-Wigner correlation model and wavefunction-based correlation treatment for large and periodic systems*; Michael Dolg, Michael Hanrath (Köln) Do 440/6-3
4. *Entwicklung eines additiven, korrigierenden Potentials für Charge-Transfer Zustände in zeitabhängiger Dichtefunktionaltheorie*; Andreas Dreuw (Frankfurt) Dr 428/2-1
5. *Relativistic optimized potential method for magnetic solids*; Hubert Ebert (München) Eb 154/13-3
6. *Determination of parameters of the magnetic band structure in strong magnetic fields from quantum oscillations using exactly solvable models*; Helmut Eschrig, Manuel Richter (Dresden) Es 85/11-2
7. *Non-collinear orbital magnetism in molecules, nano-structures and solids*; Helmut Eschrig, Manuel Richter (Dresden) Es 85/10-3, Gotthard Seifert (Dresden) Se 651/28-3
8. *Development of a relativistic Hilbert-space multi-reference coupled-cluster program*; Timo Fleig (Düsseldorf) Fl 356/2-3
9. *Concepts from the optimized potential method and orbital-dependent kernels in time-dependent density-functional theory*; Andreas Görling (Erlangen) Go 523/13-3
10. *Dimension-adaptive sparse grid product methods for the Schrödinger equation*; Michael Griebel (Bonn) Gr 1144/12-3
11. *Polaronic effects in the density functional theory for superconductors*; Eberhard Gross (Berlin) Gr 1262/7-3
12. *Adaptive solution of coupled cluster equation and tensor product approximation of two-electron integrals*; Wolfgang Hackbusch, Heinz-Jürgen Flad (Leipzig) Ha 1324/24-3, Reinhold Schneider (Berlin) Schn 530/4-3
13. *Development and application of explicitly-correlated coupled-cluster methods for non-linear optical properties and excited states*; Christof Hättig (Bochum), Willem Marten Klopper (Karlsruhe) Ha 2588/3-3
14. *Entwicklung und Implementierung moderner Dichtefunktionalmethoden zur Berechnung von Eigenschaften*; Martin Kaupp (Würzburg) Ka 1187/10-1
15. *Development, implementation and application of the analytical calculation of energy derivatives, especially nuclear gradients, of electron-correlation methods employing wavefunctions that depend explicitly on the interelectronic coordinates*; Willem Marten Klopper (Karlsruhe) KL 721/2-3
16. *Analysis and reduction of the node location error in electron structure quantum Monte Carlo methods*; Arne Lüchow (Aachen) Lu 588/7-3
17. *Development of a linear-scaling MP2 method for large molecules by rigorous integral criteria*; Christian Ochsenfeld (Tübingen) Oc 35/3-2
18. *Development of a wavefunction-based ab-initio method for metals applying the method of increments*; Beate Paulus (Berlin) Pa 1360/1-2
19. *Ab initio correlated electron dynamics with the multi-configuration (explicitly) time-dependent Hartree-Fock method*; Peter Saalfrank (Potsdam) Sa 547/6-3

20. *Electronic structure and excitation spectra of magnetic materials within first-principles many-body perturbation theory*; Arno Schindlmayr (Paderborn), Gustav Bihlmayer, Stefan Blügel (Jülich) Schi 570/3-3
21. *Development of local coupled cluster linear response method for the calculation of excited state properties of extended molecular systems*; Martin Schütz (Regensburg) Schu 1456/3-3
22. *Development and implementation of theoretical methods for dealing with functions of the quantum-mechanical operator r in extended systems*; Michael Springborg (Saarbrücken) Sp 439/20-2
23. *Local explicit correlation methods*; Hans-Joachim Werner (Stuttgart) We 984/15-2
24. *Development of efficient and quasirelativistic two-component program package for Hartree-Fock and density functional calculations*; Christoph van Wüllen (Kaiserslautern) Wu 288/4-2

3.4 Ausgewählte Publikationen

- T. B. Adler, H.-J. Werner *Local explicitly correlated coupled cluster methods: Efficient removal of the basis set incompleteness and domain errors*, J. Chem. Phys. 130, 241101 (2009)
- O. Yu. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, D. A. Solov'yev, *QED theory of the spectral line profiles and its applications to atoms and ions*, Phys. Rep. 455, 135 (2008)
- J. Anton, B. Fricke, E. Engel, *Non-collinear and collinear relativistic density-functional program for electric and magnetic properties of molecules*, Phys. Rev. A 69, 012505 (2004)
- A. Auer, *A critical evaluation of the dynamical thresholding algorithm in coupled cluster calculations*, Zeitschr. f. Phys. Chem. 224, 293 (2010)
- H. Bahmann, A. V. Arbuznikov, M. Kaupp, *Local hybrid functionals that explicitly depend on spin polarization*, J. Phys. Chem. A 113, 11891 (2009)
- A. Bande, A. Lüchow, F. Della Sala, A. Görling, *Rydberg states with quantum Monte Carlo*, J. Chem. Phys. 124, 114114 (2006)
- U. Benedikt, A. Auer, M. Espig, W. Hackbusch, *Tensor decomposition in post-Hartree Fock methods. I. Two-electron integrals and MP2*, J. Chem. Phys., submitted (2010)
- S.R. Chinnamsetty, M. Espig, W. Hackbusch, B.N. Khoromskij, H.-J. Flad, *Tensor product approximation with optimal rank in quantum chemistry*, J. Chem. Phys. 127, 084110 (2007)
- B. Doser, D. S. Lambrecht, J. Kussmann, C. Ochsenfeld, *Linear-Scaling atomic orbital-based second-order Møller-Plesset perturbation theory by rigorous integral screening criteria*, J. Chem. Phys. 130, 064107 (2009)
- S. Eckard, T. E. Exner, *Improvements for the generalized hybrid orbital method*, Int. J. Quant. Chem. 109, 1451 (2009)
- E. Engel, D. Ködderitzsch, H. Ebert, *Exact exchange in relativistic spin-density-functional theory: Exchange splitting versus spin-orbit coupling*, Phys. Rev. B 78, 235123 (2008)

- T. Fleig, L. K. Sørensen, J. Olsen, *A relativistic 4-component general-order multi-reference coupled-cluster method. Initial implementation and application to HBr*, Theor. Chem. Acc. 118, 347 (2007)
- C. Friedrich, S. Blügel, A. Schindlmayr *Efficient implementation of the GW approximation within the all-electron FLAPW method*, Phys. Rev. B 81, 125102 (2010)
- J. Friedrich, M. Hanrath, M. Dolg, *Fully automated implementation of the incremental scheme: application to CCSD energies*. J. Chem. Phys. 126, 154110 (2007)
- J. Friedrich, D. P. Tew, W. Klopper, M. Dolg, *Automated incremental scheme for explicitly correlated methods*, J. Chem. Phys. 132, 164114 (2010)
- E. Goll, H.-J. Werner, H. Stoll, *A short-range gradient-corrected density functional in long-range coupled-cluster calculations for rare-gas dimers*, Phys. Chem. Chem. Phys. 7, 3917 (2005)
- M. Griebel, J. Hamaekers, *Tensor Product Multiscale Many-Particle Spaces with Finite-Order Weights for the Electronic Schrödinger Equation*, Z. Physikal. Chem. 224, 527 (2010)
- M. Griebel, J. Hamaekers, *Sparse Grids for the Schrödinger equation*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis 41, 215 (2007)
- A. Heßelmann, A. Ipatov, A. Görling, *Charge-transfer excitation energies with a time-dependent density-functional method suitable for orbital-dependent exchange-correlation kernels*, Phys. Rev. A 80, 012507 (2009).
- H. Jiang, E. Engel, *Second order Kohn-Sham perturbation theory: correlation potential for atoms in a cavity*, J. Chem. Phys. 123, 224102 (2005)
- D. Kats, M. Schütz, *A multistate local coupled cluster CC2 response method based on the Laplace transform*, J. Chem. Phys. 131, 124117 (2009)
- M. Kaupp, H. Bahmann, A. V. Arbuznikov, *Local hybrid functionals: An assessment for thermochemical kinetics*, J. Chem. Phys. 127, 194102 (2007)
- M. Kaupp, A. V. Arbuznikov, A. Heßelmann, A. Görling, *Hyperfine coupling constants of the nitrogen and phosphorus atoms: a challenge for exact-exchange density functional and post-Hartree-Fock methods*, J. Chem. Phys. 132, 184107 (2010)
- G. Knizia, T. B. Adler, H.-J. Werner, *Simplified CCSD(T)-F12 methods: Theory and benchmarks*, J. Chem. Phys. 130, 054104 (2009)
- E. Kordel, C. Villani, W. Klopper, *Analytical nuclear gradients for the MP2-R12 method*, Mol. Phys. 105, 2565 (2007)
- K. Marti, I. Malkin Ondik, G. Moritz, M. Reiher, *Density matrix renormalization group calculations on relative energies of transition metal complexes and clusters*, J. Chem. Phys. 128, 014104 (2008)
- L. Maschio, D. Usvyat, F.R. Manby, S. Casassa, C. Pisani, M. Schütz, *Fast local-MP2 method with density-fitting for crystals. A. Theory*, Phys. Rev. B, 76, 075101 (2007)
- A. V. Mitin, C. van Wüllen, *Two-component relativistic density-functional calculations of the dimers of the halogens from bromine through element 117 using effective core potential and all-electron methods*, J. Chem. Phys. 124, 064305 (2006)

- G. Moritz, M. Reiher, *Decomposition of density matrix renormalization group states into a Slater determinant basis*, J. Chem. Phys. 126, 244109 (2007)
- M. Nest, T. Klamroth, P. Saalfrank, *The multiconfiguration time-dependent Hartree-Fock method for quantum chemical calculations*, J. Chem. Phys. 122, 124102 (2005)
- S. Pittalis, S. Kurth, N. Helbig, E. K. U. Gross, *Optimized effective potentials in current-spin-density functional theory: an application to open-shell atoms*, Phys. Rev. A 74, 062511 (2006)
- F. Remacle, M. Nest, R.D. Levine, *Laser steered ultrafast quantum dynamics of electrons in LiH*, Phys. Rev. Lett. 99, 183902 (2007)
- C. Sarpe-Tudoran, B. Fricke, J. Anton, V. Pershina. *Adsorption of superheavy elements on metal surfaces*, J. Chem. Phys. 126, 174702 (2007)
- E. Sasioglu, A. Schindlmayr, C. Friedrich, F. Freimuth, S. Blügel, *Wannier-function approach to spin excitations in solids*, Phys. Rev. B 81, 054434 (2010)
- R. Schneider, *Analysis of the projected coupled cluster method in electronic structure calculation*, Numer. Math. 113, 433 (2009)
- M. Springborg, B. Kirtman, *Analysis of vector potential approach for calculating linear and nonlinear responses of infinite periodic systems to a finite static external electric field*, Phys. Rev. B 77, 045102 (2008)
- E. Voloshina, N. Gaston, B. Paulus, *Embedding procedure for ab initio correlation calculations in group II metals*, J. Chem. Phys. 126, 134115 (2007)
- C. van Wüllen, *Relation between different variants of the generalized Douglas-Kroll transformation through sixth order*, J. Chem. Phys. 120, 7307 (2004)
- R. Xiao, D. Fritsch, M. D. Kuz'min, K. Köpernik, H. Eschrig, M. Richter, K. Vietze, G. Seifert, *Co-dimers on hexagonal carbon rings proposed as subnanometer magnetic storage bits*, Phys. Rev. Lett. 103, 187201 (2009)

3.5 Veranstaltungen des SPP 1145

Veranstaltung [Teilnehmerzahl]	Datum	Ort	Organisation
Symposium (Antragskolloquium) [56]	1.-3.6.2003	CJD Bonn	M. Dolg
Workshop (Numerical Analysis in Quantum Chemistry) [44]	28.-30.6.2004	Univ. Kiel	R. Schneider W. Hackbusch B. Hartke
Symposium [70]	24.-25.5.2004	CJD Bonn	B. A. Hess†
Workshop (Optimized Effective Potential Method) [72]	11.-13.3.2005	Haus Christopherus, Berlin	S. Kurth E. K. U. Gross H. Ebert
Symposium (Antragskolloquium) [90]	4.-5.7.2005	CJD Bonn	M. Dolg
Workshop (Optical and Photoelectron Spectra) [50]	9.-12.3.2006	LMU München	C. Ambrosch-Draxl, H. Ebert, E. K. U. Gross, E. Molinari
Symposium [70]	26.-28.6.2006	Haus der Kirche, Bad Herrenalb	H.-J. Werner J. Gauss
Workshop (Highly Accurate Calculations) [87]	22.-24.3.2007	Haus der Kirche, Bad Herrenalb	W. Klopper
Symposium (Antragskolloquium) [76]	4.-6.7.2007	CJD Bonn	M. Dolg
Symposium [78]	21.-23.5.2008	Akad. f. Polit. Bildung, Tutzing	H. Ebert
Workshop (Efficient Electron Correlation Methods) [60]	11.-13.3.2009	Kardinal Schulte Haus, Bensberg	M. Hanrath, A. Auer, C. Ochsenfeld
Symposium (Abschlußsymposium) [70]	29.3.-1.4.2010	Haus der Kirche, Bad Herrenalb	M. Dolg

3.6 Promotionen im Rahmen des SPP 1145

Name, Vorname	Alter bei Abschluß	SPP Förderphase
Bahmann, Hilke (Würzburg)	29	3
Bande, Annika (Aachen)	28	2
Benedikt, Udo (Düsseldorf)	?	3
Berner, Raphael (Aachen)	30	2
Beyvers, Stephanie (Potsdam)	28	3
Chinnamsetty, Rao Sambasiva (Leipzig)	34	3
Doser, Bernd (Tübingen)	31	3
Eckard, Simon (Konstanz)	28	3
Friedrich, Joachim (Köln)	29	1
Goll, Erich (Stuttgart)	31	2
Götz, Andreas Walter (Berlin)	28	1
Hamaekers, Jan (Bonn)	35	3
Höfener, Sebastian (Karlsruhe)	29	3
Knizia, Gerald (Stuttgart)	28	3
Kats, Danylo (Regensburg)	29	3
Kordel, Elena (Karlsruhe)	29	2
Langermann, Norbert (Berlin)	29	1
Lambrecht, Daniel (Tübingen)	27	3
Moritz, Gerrit (Bonn)	30	2
Neise, Carsten (Dresden)	29	3
Niesert, Manfred (Aachen)	30	3
Pittalis, Stefano (Berlin)	36	3
Rohwedder, Thorsten (Leipzig)	32	3
Sargolzaei, Mahdi (Dresden)	32	2
Schwarz, Annett (Aachen)	28	3
Schweizer, Sabine (Tübingen)	30	3
Soerensen, Lasse Kragh (Düsseldorf)	32	3
Tevekeliyska, Violina (Saarbrücken)	33	3
Walther, Christian (Clausthal)*	30	3
Zienau, Jan (Tübingen)	30	3

* geplant für Anfang 2011.

3.7 Habilitationen im Rahmen des SPP 1145

Name, Vorname	Alter bei Abschluß	SPP Förderphase
Exner, Thomas (Konstanz)	38	3
Fleig, Timo (Düsseldorf)	38	2
Klamroth, Tillmann (Potsdam)	34	2
Kurth, Stefan (Berlin)	39	1
Nest, Matthias (Potsdam)	36	3
Paulus, Beate (Dresden)	38	2

3.8 Berufungen von am SPP 1145 beteiligten Wissenschaftlern

Name, Vorname	Alter bei Berufung	Fach	Stelle	Ort
Auer, Alexander	36	Theor. Chemie	W2	MPI Düsseldorf
Fleig, Timo	40	Physik	Prof.2.cl.	Univ. Toulouse
Gross, Eberhard		Theor. Physik	W3	MPI Halle
Hättig, Christoph	39	Theor. Chemie	W2	Univ. Bochum
Hong, Jiang	33	Physik	Assoc.Prof.	Peking University
Kaupp, Martin	47	Theor. Chemie	W3	TU Berlin
Kurth, Stefan	43	Theor. Physik	Res.Prof.	Univ. San Sebastian
Nest, Matthias	37	Theor. Chemie	W2	TU München
Ochsenfeld, Christian	41	Theor. Chemie	W3	LMU München
Paulus, Beate	41	Theor. Chemie	W2	FU Berlin
Reiher, Markus	33	Phys. Chemie	W2	Univ. Jena
Reiher, Markus	34	Theor. Chemie	AOP	ETH Zürich
Schindlmayr, Arno	37	Theor. Physik	W2	Univ. Paderborn
van Wüllen, Christoph	44	Theor. Chemie	W3	Kaiserslautern