



## Werner Kutzelnigg

1933 – 2019

Mit Werner Kutzelnigg verliert die Quantenchemie einen international prägenden Vertreter dieses Fachs. Er hat in den gut fünfzig Jahren seines dokumentierten wissenschaftlichen Wirkens, von 1963 bis zu seiner letzten Publikation aus dem August 2014, die Quantenchemie in äußerst vielfältiger und ausgesprochen origineller Weise vorangebracht. Mehr dazu aber später.

Während seiner Promotion in Freiburg hat sich Werner Kutzelnigg bei Mecke mit experimenteller Chemie beschäftigt und hierzu eine Fülle von Originalarbeiten in den Jahren 1959 bis 1962 publiziert, eine *Zur KBr-Preßtechnik in der IR-Spektroskopie*. Werner Kutzelnigg war also “Chemiker” von Anfang an, im Gegensatz zu vielen Quantenchemikern seiner Generation, die in der Physik sozialisiert wurden. In der ihm eigenen Art hat er seine Publikationsliste selbst kommentiert, in dem er für ihn selbst wichtige Arbeiten gekennzeichnet hat – denn bekanntlicherweise stand Werner Kutzelnigg der heute weitverbreiteten bibliometrischen Bewertung kritisch bis ablehnend gegenüber; seine “kommentierte Publikationsliste” ist seit langer Zeit über [www.theochem.rub.de](http://www.theochem.rub.de) öffentlich zugänglich. Aus der Zeit seiner Promotion haben zwei von etwa zehn Arbeiten zu IR-spektroskopischen Untersuchungen diese Hervorhebung erfahren.

Der kühne Schritt von der experimentellen zur theoretischen Chemie erfolgte direkt nach der Promotion, als Werner Kutzelnigg nach Paris zu Pullman und Berthier ging (1960-1963) und danach zu Löwdin nach Uppsala. Interessanterweise gibt es keine gemeinsamen Publikationen mit Löwdin in begutachteten Zeitschriften, trotzdem erkennt man prägende Einflüsse, etwa bei Kutzelniggischen Arbeiten aus den 1960er Jahren zu reduzierten Dichtematrizen und natürlichen

Orbitalen. Im Anschluß an Uppsala wechselte Werner Kutzelnigg 1964 nach Göttingen zu Bingel und habilitierte sich dort rasch (1967). Ab 1970 war er kurzzeitig in Karlsruhe, um schließlich 1973 den Ruf auf den neu geschaffenen Lehrstuhl für Theoretische Chemie in Bochum anzunehmen. Diesen baute er bis zu seiner Emeritierung im Jahr 1998 zu einem international sichtbaren Leuchtturm der Quantenchemie auf. Wenn man Kutzelniggs "kommentiertes Publikationsverzeichnis" anschaut stellt man ein starkes Ansteigen der von ihm markierten Publikationen fest mit Beginn der 1970iger Jahre. Dieser Anteil wichtiger Arbeiten bleibt über viele Jahre im wesentlichen konstant, steigt aber nochmal im neuen Jahrtausend, also nach der Emeritierung, signifikant an.

In der Tat sind die vielen bahnbrechenden Beiträge, die Werner Kutzelnigg im Laufe der Jahrzehnte geleistet hat, hinlänglich bekannt. Insbesondere zu nennen sind die direkte Bestimmung der PNOs (Pair Natural Orbitals) um diese in korrelierten Rechnungen zu verwenden, die IGLO (Individual Gauge for Localized Orbitals) Methode zur Berechnung von NMR (Nuclear Magnetic Resonance) chemischen Verschiebungen, Quantenchemie im Fockraum, seine DPT (Direct Perturbation Theory) zur Behandlung relativistischer Effekte, sowie der Einsatz explizit korrelierter Wellenfunktionen in Elektronenstrukturrechnungen. Gerade die erst- und letztgenannten Methoden haben maßgeblich zur Effizienzsteigerung von genauen Rechnungen geführt und sind heutzutage in weiterentwickelter Form, versteckt hinter Akronymen wie PNO, DLPNO,  $r_{12}$  oder F12 im Zusammenhang mit Coupled Cluster Verfahren, in vielen modernen Quantenchemiepaketen zu finden. Seine IGLO Methode, basierend auf der fundamentalen Arbeit *Theory of Magnetic Susceptibilities and NMR Chemical Shifts in Terms of Localized Quantities* (1980 publiziert im Israel Journal of Chemistry), hatte zu ihrer Zeit einen ganz enormen Einfluß auf die Verbreitung von NMR Methoden zur Aufklärung von Molekülstrukturen genommen, wie noch heute experimentelle Chemiker der Generation sich gerne erinnern.

Wie anfangs betont war Werner Kutzelnigg Chemiker und "suchte" die Chemie konzeptionell in der Quantenphysik – also jenseits numerischer Berechnungen konkreter molekularer Systeme. So hat er in der kommentierten Publikationsliste seine wegweisenden Arbeiten in der Angewandten Chemie zur einfach klingenden Frage *Was ist chemische Bindung?* (1973), und eine Dekade später zur chemischen Bindung bei den höheren Hauptgruppenelementen (1984), als herausragend eingestuft. Entsprechend widmete Werner Kutzelnigg auch dem Verständnis der chemischen Bindung(en) den gesamten zweiten Band (*Teil II: Die chemische Bindung*) seiner bedeutenden Monographie *Einführung in die Theoretische Chemie* aus den 1970iger Jahren (erfreulicherweise 2001 nachgedruckt von Wiley-VCH). Daran schließt sein Artikel *What I like about Huckel theory*

(2007) logisch an, in dem Werner Kutzelnigg argumentiert, daß auch heute noch das Hückel MO Modell seine Daseinsberechtigung habe, um zentrale Aspekte der chemischen Bindung qualitativ zu verstehen. Ebenso war Werner Kutzelnigg daran interessiert, überwiegend empirische Konzepte wie die Hundschen Regeln (*Hund's Rules, the Alternating Rule, and Symmetry Holes*, 1993, sowie *Hund's rules*, 1996) oder Fermis Kontaktwechselwirkung (*Origin and meaning of the Fermi contact interaction*, 1988) aus der Quantenmechanik heraus fundamental zu verstehen. Bei Hund interessierte ihn darüberhinaus, welche Konzepte der Quantenphysiker in the Quantenchemie eingebracht hat (*Friedrich Hund and Chemistry*, 1996).

Die vielfältigen und überaus bedeutsamen Beiträge aus Werner Kutzelniggs Hauptschaffensphase wurden bereits mehrfach in Laudationes gewürdigt. Sie sind zudem die Grundlage vielfältiger Ehrungen in Deutschland und weltweit: Carl-Duisberg-Gedächtnispreis der GDCh (1971), Schrödinger Medal der World Association of Theoretical and Computational Chemists (1995), Liebig-Denkmünze der GDCh (1996), Dionýz Ilkovič Medal der Slovak Academy of Sciences (1998) sowie den 2016 erstmals vergebenen Erich-Hückel-Preis der GDCh, der Werner Kutzelnigg auf der Bochumer STC von Wolfram Koch überreicht wurde. Werner Kutzelnigg wurde auch in die International Academy of Quantum Molecular Science berufen, aber ganz erstaunlicherweise in keine Akademie der Wissenschaften in Deutschland.

Nach seiner Emeritierung im Jahr 1998 blieb Werner Kutzelnigg weiterhin wissenschaftlich hochaktiv, ja er begründete in der Dezemberausgabe 2001 des *Info Theoretische Chemie* die neue Rubrik *Emeriti stellen sich vor*. Nach einer aufschlußreichen Einleitung entwickelt er dort sein Forschungsprogramm für den formalen Ruhestand wie folgt: 1. Elektronenkorrelation, 2. Relativistische Quantenchemie, 3. Konvergenz von Basisentwicklungen, 4. Nichtadiabatische Korrekturen. Werner Kutzelnigg verzeihe mir den Blick ins *Web of Science*, aber dadurch erkennt man rasch die große Resonanz, die seine Publikationen – insbesondere zu den Punkten 1 und 2 dieser Agenda – zuteilwurde. Zur Behandlung der Elektronenkorrelation haben ihn in der Spätphase seines Schaffens insbesondere die Grundlagen der Dichtekumulantenfunktionaltheorie (DCFT) fasziniert, wie er 2001 explizit schreibt: *Diese Arbeiten stehen im Zusammenhang damit, daß ich die Erfolge der Kohn-Sham-artigen Dichtefunktionaltheorie als eine Herausforderung an die ab-initio Theorie empfinde, nach besser begründeten Ansätzen zu suchen, die bei vergleichbar geringem Rechenaufwand die richtige Antwort aus dem richtigen Grund geben können, wodurch es möglich sein sollte, das verlorene Terrain 'wiederzuerobert'.* Seine DCFT hat er im Jahr 2006 in der Einautorennarbeit *Density-cumulant functional theory* in JCP eingeführt und ab 2010 im Rahmen einer externen Zusammenarbeit implementiert und getestet. Sich daran

anschließende Entwicklungen der Kooperationspartner befassen sich übrigens mit Density Fitting, analytischen Gradienten und linearer Antworttheorie basierend auf DCFT. Die überhaupt letzte Arbeit Werner Kutzelniggs, die im *Web of Science* erfaßt wird, ist dem Thema *Density cumulant functional theory from a unitary transformation . . .* gewidmet und stammt aus dem Jahr 2014. Ad 2, der Relativistik, hat insbesondere sein Œvre ab Mitte 2000 zur Matrixformulierung des Dirac Operators und der daraus resultierenden quasirelativistischen Theorie eine beeindruckende Resonanz in der aktuellen Literatur erzeugt.

Dies zeigt, daß Werner Kutzelnigg auch noch bis ins hohe Alter wissenschaftlich in der obersten Liga gespielt hat, und sich nach seiner Emeritierung eben nicht primär mit historischen Rückblicken oder Übersichtsarbeiten abgegeben hat. Dazu passt auch der Titel des Bochumer Festkolloquiums im Oktober 2013, den Werner Kutzelnigg für dieses internationale Symposium zu seinem 80. Geburtstag gewählt hat: *40 Years of Concepts in Theoretical Chemistry from the Bochum Perspective*.

Werner Kutzelnigg wird als Grandseigneur seines Fachs noch lange Zeit im kollektiven Gedächtnis der Theoretischen Chemie – aber auch darüber hinaus – lebendig bleiben und durch sein Werk weiterhin tief in die Quantenchemie hinein wirken.

Dominik Marx  
Lehrstuhl für Theoretische Chemie  
Ruhr-Universität Bochum

# Information Theoretische Chemie

April 2020

