

## Björn O. Roos (1937–2010)

Björn Olaf Roos, geboren am 28.6. 1937 in Malmö, promovierte 1968 als Schüler von Inga Fischer-Hjalmars in Stockholm über die „zero differential overlap“-Näherung, die in der damals dominierenden semi-empirischen Quantenchemie eine wichtige Rolle spielte. Er war als Postdoktorand ein Jahr in der Gruppe von Enrico Clementi am IBM Research Institute in San Jose (USA), wo er in die relativ neue numerische Ab-initio-Quantenchemie eingeweiht wurde.

Der erste wichtige Beitrag von Björn Roos zur Quantenchemie war 1972 das Verfahren, das heute als „direct CI“ bekannt ist. Dabei wird nicht, wie früher üblich, zuerst die CI-Matrix konstruiert und dann diagonalisiert, sondern beide Schritte gehen in einer iterativen Weise Hand in Hand. Damit war eine Verringerung des Rechenaufwandes um eine bis zwei Größenordnungen möglich.

Frühe Erfolge waren die Berechnung des H<sub>2</sub>O-Dimers mit „chemischer Genauigkeit“ (Fehler in der Größenordnung von 1 kcal mol<sup>-1</sup>) oder die Vorhersage des experimentell unbekannten Rotationsspektrums des HNC-Moleküls mit einer Genauigkeit, die seinen Nachweis im Weltraum ermöglichte.

1977 ging Björn Roos nach Lund, wo er 1983 Professor und Leiter des Instituts für Theoretische Chemie wurde. Ähnlich wichtig wie „direct CI“ war die gemeinsam mit Peter Taylor und Per Siegbahn entwickelte und 1980 publizierte CAS-SCF-Methode, wobei CAS für „complete active space“ steht. Roos sah später im Acronym CAS ein Markenzeichen für seine Gruppe und wählte deshalb den Namen MOLCAS für das in Lund entwickelte und inzwischen weithin verwendete quantenchemische Programmpaket.

CAS-SCF war, zusammen mit dem etwa gleichzeitig entwickelten FORS (full optimized reaction space) von K. Ruedenberg das erste allgemein anwendbare Verfahren im Rahmen der Erweiterung der SCF-Näherung auf einen Multi-Konfigurations-Ansatz, womit die Berechnung von Potentialhyperflächen für chemische Reaktionen im Bereich der Dissoziation von Bindungen oder von konischen Überschneidungen möglich wurde.

Während „direct CI“ und CAS-SCF vor allem Methoden für elektronische Grundzustände von Molekülen sind, hat Björn Roos mit dem CAS-PT2, seinem dritten Meilenstein von 1995, einen leistungsfähigen, aber auch robusten Ansatz zur Berechnung von Spektren und für die Photochemie eingeführt. CAS-PT2 beruht auf einer Kombination von CAS-SCF und MP2 (Møller-Plesset-Störungstheorie 2. Ordnung) und ermöglicht die genäherte Berechnung von sowohl statischer als auch dynamischer Korrelation.



Björn O. Roos

Als weitere methodische Fortschritte muss man die Verwendung von „atomic natural orbital“- (ANO)-Basen von 1995 und, aus jüngerer Zeit (2004), die Kombination von CAS-SCF mit relativistischer Quantenchemie im Rahmen der Douglas-Kroll-Hess(DKH)-Näherung erwähnen.

Björn Roos gehört zu den wichtigsten Entwicklern von quantenchemischen Methoden. Die Methoden-Entwicklung war aber nie Selbstzweck, sondern ergab sich aus Herausforderungen der Praxis. Am Anfang standen immer Probleme aus der Chemie, die auf eine theoretische Lösung warteten. Dabei dominierten Themen aus der anorganischen Chemie, wie das Verständnis von Bindungsmechanismen und der Struktur von Verbindungen schwerer Atome wie Komplexe von Actinoiden oder das Problem der Mehrfachbindungen bei anorganischen Molekülen, wo das Cr<sub>2</sub> oder das U<sub>2</sub><sup>2+</sup> besondere Herausforderungen darstellen (siehe hierzu seinen gut lesbaren neueren Übersichtsartikel Lit. [1]). Auch wichtige biochemische Anwendungen, z.B. zu den „blauen Kupfer-Proteinen“, fehlen nicht unter seinen Publikationen.

In gewisser Weise stellte Björn Roos innerhalb von Schweden, aber auch im gesamten skandinavischen Raum einen Gegenpol zu Per Olov Löwdin dar. Beide legten großen Wert auf Didaktik und waren für die von ihnen veranstalteten Sommer Schulen berühmt. Während Löwdin vor allem die elementare Quantentheorie und die zugehörige Mathematik lehrte, waren die von Roos begründeten Sommerschulen, die nach wie vor regelmäßig stattfinden, an den verfügbaren quantenchemischen Methoden und deren Anwendung auf Probleme der Chemie orientiert. Mittlerweile ist übrigens mit Roland Lindh ein Schüler von Björn Roos indirekter Nachfolger Löwdins in Uppsala geworden.

Der erste und bekannteste Mitarbeiter von Björn Roos, Per Siegbahn, hat 1983 einen Ruf an die Universität Stockholm erhalten und dort seine eigene Gruppe aufgebaut. Während Siegbahn seither bevorzugt auf die Dichtefunktionaltheorie (DFT) gesetzt hat, womit ihm sehr große Systeme wie Enzyme zugänglich wurden, ist Roos der Ab-initio-Theorie treu geblieben und hat sich mit Problemen beschäftigt, deren Lösung die Zuverlässigkeit von Ab-initio-Ansätzen verlangen.

Björn Roos hat viele bedeutende Auszeichnungen erhalten. Erwähnen möchte ich hier nur die Mitgliedschaft in der „International Academy of Quantum Molecular Sciences“ (IAQMS, seit 1991), die Schrödinger-Medaille der WATOC (World Association of Theoretically Oriented Chemists) 1999 und die Mitgliedschaft im Nobelkomitee für Chemie 1992–2000. Ich glaube, Björn würde mir zustimmen, wenn ich seinen „scientometrischen Parametern“ keine Aufmerksamkeit schenke.

Mit Björn Roos verlieren wir einen Kollegen, der die Ab-initio-Quantenchemie von den Anfängen um etwa 1970 bis heute entscheidend mitgeprägt hat, aber auch einen überaus liebenswerten, bescheidenen, gebildeten und humorvollen Menschen, den alle, die ihn gut kannten, sehr vermissen werden.

Werner Kutzelnigg  
Universität Bochum

- 
- [1] „Reaching the maximum multiplicity of the covalent chemical bond“: B. O. Roos, A. C. Borin, L. Gagliardi, *Angew. Chem.* **2007**, *119*, 1491–1494; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 1469–1472.

DOI: 10.1002/ange.201002676