

12 Oktober 2023

## Theoretisch chemicus Arno Förster wint Dick Stufkens Prijs 2023

Holland Research School of Molecular Chemistry (HRSMC) beloont innovatief promotieonderzoek op gebied van quantumchemisch modelleren

**De Dick Stufkens Prijs 2023 voor het beste proefschrift van de Holland Research School of Molecular Chemistry (HRSMC) is toegekend aan dr. Arno Förster voor zijn proefschrift 'Many-body perturbation theory with Slater type orbitals'. Förster promoveerde op 9 december 2022 cum laude bij prof.dr. Luuk Visscher aan de Vrije Universiteit Amsterdam, waar hij inmiddels is aangesteld als Universitair Docent. Met zijn promotieonderzoek leverde Förster een belangrijke bijdrage aan het quantumchemisch modelleren van moleculaire systemen.**

Het onderzoek van Arno Förster betreft het modelleren van moleculen en materialen op fundamenteel quantumchemisch niveau. Dit omvat quantummechanische berekeningen van elektronen, hun energieën en hun interacties. Omdat het voor grote systemen onmogelijk is om exacte oplossingen te berekenen, kunnen de modellen slechts benaderingen zijn. Dankzij krachtige computers en geavanceerde software kan dit echter steeds nauwkeuriger. Hieraan heeft Förster nu een belangrijke bijdrage geleverd. Hij implementeerde een nieuwe modelleer benadering, gebaseerd op de 'many-body perturbation theory' (MBPT), in het softwarepakket Amsterdam Density Function (ADF).



Dr Arno Förster. Foto: HRMSC.

### Complexe theorie

De MBPT houdt in dat men begint met een min of meer hypothetische modelsituatie die relatief eenvoudig is op te lossen, met geen of minimale interacties. Van daaruit worden 'verstoringen' (perturbations) aangebracht die meer elektronische interactie introduceren en zo het werkelijke systeem beter benaderen. Förster gebruikte de 'GW-methode' die werd ontwikkeld door de Zweedse quantumchemicus Lars Hedin. Hiermee kunnen ionisatie en optelling van elektronen worden berekend en, met de toevoeging van de zogenaamde Bethe-Salpeter vergelijking (BSE), ook elektronische excitaties. De vrij complexe GW-BSE-methode is al in gebruik voor 'oneindige' systemen

zoals elektrongassen en vaste stoffen, en is sinds kort ook in beeld voor moleculen. Dat laatste vereist echter andere algoritmen en brengt specifieke numerieke uitdagingen met zich mee. Vooral het modelleren van grote moleculen, waar het in praktische toepassingen meestal om gaat, vereist vaak aanvullende benaderingen die geen invloed mogen hebben op de nauwkeurigheid van de resultaten.

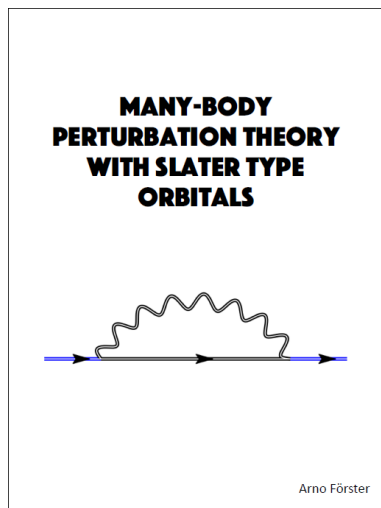
Förster ging al deze uitdagingen aan en het lukte hem de GW-BSE methode te implementeren in de ADF software. Dat is een innovatief programma dat werd ontwikkeld door de Theoretische Chemie groep van de Vrije Universiteit. Het wordt nu door het spin-off bedrijf SCM gedistribueerd en

#### CITAAT VAN DE JURY

*“Het proefschrift bevat een toegankelijk en gezaghebbend overzicht over de zeer complexe MBPT. Het blinkt uit in de beschrijving en het zorgvuldig valideren van de vele methodologische vernieuwingen die de implementatie mogelijk gemaakt hebben. Het is een bijzondere prestatie dat Förster dit alles dermate efficiënt heeft weten te maken dat toepassing op grote systemen mogelijk werd. Daarmee is dit proefschrift een zeer belangrijke bijdrage aan de voortgaande ontwikkeling en evaluatie van de MBPT in de quantumchemie.”*

uitgebreid. ADF is vooral sterk in het begrijpen en voorspellen van de structuur, de reactiviteit (katalyse) en spectra van moleculen. Een van de kenmerken is het gebruik van zogenaamde ‘Slater-type’ orbitalen, een set functies die de locatie en het golfgedrag van elektronen in moleculen beschrijven. Vanuit een fysisch perspectief zijn deze beter geschikt dan de veelgebruikte Gaussiaanse orbitalen, maar ze leiden tot veel moeilijkere integralen. Daarom maakt ADF uitgebreid gebruik van numerieke integratie en andere speciale rekentechnieken.

### Een enorme prestatie



*Voorkant van het proefschrift.*

De jury voor de Stufkens prijs spreekt van een ‘enorme prestatie’ dat Förster zich in korte tijd heeft weten in te werken in zowel de complexe GW-BSE theorie als het grootschalige ADF programmasysteem. Het is opmerkelijk dat zijn implementatie, die hij uitvoerig testte en nauwgezet documenteerde, zodanig efficiënt is dat de MBPT toegepast kon worden op grote chemisch relevante systemen op een enkele computer node. Hieronder waren DNA fragmenten en een 6 chromoforen omvattend model van het reactiecenter van photosystem II met ongeveer 2000 elektronen. Gezien de ingewikkelde theorie en complexe implementatie leek dit op voorhand niet erg waarschijnlijk.

Of de ADF/GW-BSE modellering beter zal presteren dan populaire bestaande methoden zoals TD-DFT valt nog te bezien. Het is nog niet onomstotelijk vastgesteld dat de methode resulteert in significant nauwkeuriger excitatie-energieën. Het is echter de verdienste van het werk van Förster dat GW-BSE nu op grote schaal gevalideerd kan worden.

### Over de Dick Stufkens Prijs

*De Dick Stufkens Prijs wordt jaarlijks toegekend voor de beste dissertatie (uit de periode van 1 juli tot 1 juli van het volgende jaar) door een promovendus van de Holland Research School of Molecular Chemistry (HRSMC). De prijs – voor het eerst uitgereikt in 2008 – bestaat uit een certificaat en een bedrag van 2000 Euro. **De prijs wordt overhandigd aan Arno Förster tijdens het [jaarlijkse HRSMC symposium](#) dat op 10 november 2023 plaatsvindt bij Scheltema Leiden. Förster zal dan ook een lezing geven over zijn prijswinnende onderzoek.***

### Over de HRSMC

*De [Holland Research School of Molecular Chemistry](#) werd opgericht in 1994 en is geaccrediteerd door de Koninklijke Nederlandse Akademie voor Wetenschappen (KNAW). De onderzoeksschool is een samenwerking van onderzoeksgroepen op het gebied van synthese, spectroscopische karakterisering en theoretische en computationele beschrijving van moleculaire systemen, van de Universiteit van Amsterdam, VU Amsterdam, de Universiteit Leiden en Radboud Universiteit Nijmegen. Naast het creëren van de juiste voorwaarden voor deze samenwerking biedt de school ook een internationaal hoog aangeschreven lesprogramma voor getalenteerde PhD- en MSc-studenten in moleculaire chemie en natuurkunde. Wijlen Prof. dr. Dick Stufkens, wetenschappelijk directeur gedurende de periode 1997-2001, was een van de drijvende krachten achter de HRSMC. Zijn inspanningen hebben onder andere sterk bijgedragen aan de internationale reputatie van de HRSMC.*

### Zie ook

Het [proefschrift van Arno Förster](#) in de VU repository.