

Herausforderungen der theoretischen Chemie für komplexe Systeme

Die Chemie beschäftigt sich mit Molekülen, insbesondere der Aufklärung ihrer Zusammensetzung und Struktur, der Bestimmung ihrer Eigenschaften sowie ihrer zielgerichteten Synthese. Auch wenn die Zahl der verschiedenen bekannten (und bisher unbekannt)en Moleküle schier unüberschaubar ist [1], so sind diese doch alle aus sehr wenigen einfachen Bausteinen aufgebaut: ca. 100 verschiedenen Atomkernen (von denen die organische Chemie nur sehr wenige verwendet) und Elektronen.

Struktur eines Moleküls (d.h. die Art und die Positionen der Atomkerne sind bekannt) lässt sich die Schrödinger-Gleichung für die Elektronen aufstellen. Wenn man diese löst, erhält man die zugehörige Energie sowie die Wellenfunktion, aus der sich dann alle molekularen Eigenschaften ableiten lassen. So lassen sich zum Beispiel die Energien verschiedener möglicher Strukturen vergleichen, die Energien von chemischen Reaktionen vorhersagen oder Spektren von Molekülen berechnen.

Was ist theoretische Chemie?

Die physikalischen Gesetze, die solche kleinen geladenen Teilchen beschreiben, wurden Anfang des letzten Jahrhunderts entwickelt: die Quantenmechanik. Auch wenn viele populärwissenschaftliche Bücher (und auch manche Lehrbücher) immer wieder behaupten, dass die Quantenmechanik eine sehr „seltsame“ und wenig anschauliche Theorie ist, so ist sie heute gut verstanden und in zahlreichen Experimenten immer wieder bestätigt worden. Damit lassen sich die Eigenschaften von Molekülen direkt vorhersagen. So schrieb der spätere Physik-Nobelpreisträger Paul Dirac bereits 1929: „Die grundlegenden physikalischen Gesetze, die für eine mathematische Theorie weiter Teile der Physik und der gesamten Chemie notwendig sind, sind damit vollständig bekannt.“ [2]

Das Vorgehen der theoretischen Chemie ist dabei in der Regel wie folgt (siehe Abbildung 1a): Für eine gegebene

Näherungsmethoden zur Lösung der Schrödinger-Gleichung

Das obige Zitat von Dirac hat allerdings eine Fortsetzung: „... und die einzige Schwierigkeit ist es daher, dass die exakte Anwendung dieser Gesetze zu Gleichungen führt, die zu kompliziert sind, um lösbar zu sein.“ Sobald ein Molekül mehr als ein Elektron hat, wird es unmöglich, die zugehörige Schrödinger-Gleichung exakt zu lösen. Allerdings konnte Dirac die Entwicklung des Computers nicht voraussehen. In den letzten Jahrzehnten hat die theoretische Chemie zahlreiche Methoden entwickelt, die es erlauben, die molekulare Schrödinger-Gleichung mit Computerprogrammen wenigstens näherungsweise zu lösen.

Dieses Problem der Entwicklung von Näherungsmethoden, welches die theoretische Chemie (oder genauer die Quantenchemie) bisher hauptsächlich beschäftigt hat, ist heute weitgehend gelöst [3]. Es existiert eine Hierarchie von Methoden

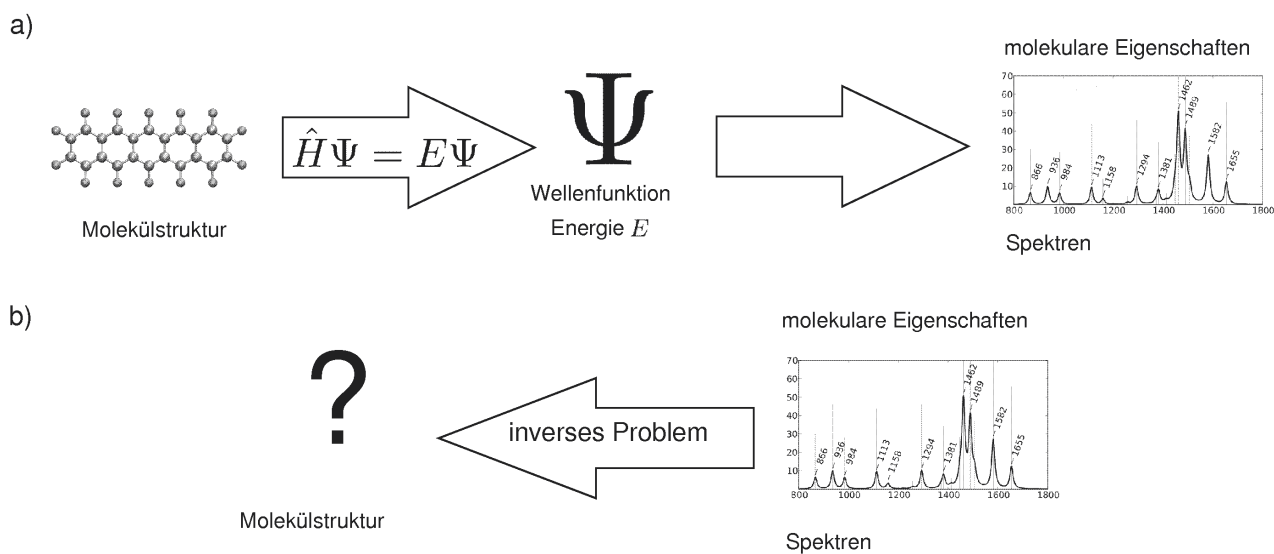


Abbildung 1: (a) Das Grundprinzip der theoretischen Chemie im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung: Für eine Molekül mit einer gegebenen Struktur lassen sich mit Hilfe der elektronischen Schrödinger-Gleichung alle molekularen Eigenschaften vorhersagen. (b) Inverses Problem: Ausgehend von gegebenen molekularen Eigenschaften oder Spektren wird die zugehörige Struktur gesucht.

mit immer größer werdender Genauigkeit. Allerdings bedeutet dabei eine höhere Genauigkeit auch immer einen deutlich höheren Rechenaufwand. Für Moleküle mit wenigen Atomen (je nach Art der Atome bis zu 5-20) lässt sich die Schrödinger-Gleichung mit den heute verfügbaren Computern mit fast beliebiger Genauigkeit lösen [4]. Für größere Molekülen (mit mehreren hundert Atomen) stehen effiziente Methoden zur Verfügung, deren Genauigkeit in den meisten Fällen für die Chemie immer noch ausreichend ist. Insbesondere hat sich hier in den letzten 10-20 Jahren die Dichtefunktionaltheorie (DFT) zum „Arbeitsstier“ der theoretischen Chemie entwickelt [5]. Für noch größere Systeme mit Tausenden von Atomen existieren klassische Methoden, welche nicht explizit auf der Quantenmechanik aufbauen. Diese sind allerdings nur sehr beschränkt zur Beschreibung chemischer Reaktionen oder zur Vorhersage von Spektren geeignet.

Aktuelle Herausforderungen für die theoretische Chemie

Wo liegen also die aktuellen Herausforderungen für die theoretische Chemie? Es gibt mehrere Themenbereiche, die völlig neue Herangehensweisen erfordern und die immer mehr theoretische Chemiker beschäftigen [6]: Eine Fragestellung lautet, wie sich das in Abbildung 1a dargestellte Vorgehen (ausgehend von der gegebenen Struktur werden bestimmte molekulare Eigenschaften vorausgesagt) umkehren lässt. Wie lässt sich zum Beispiel ausgehend von einem gegebenen Spektrum die zugehörige molekulare Struktur bestimmen? Dieses „inverse Problem“ (siehe Abbildung 1b) bildet den Kern der Strukturbestimmung mit spektroskopischen Methoden. In manchen Fällen, wie der Röntgenbeugung oder der NMR-Spektroskopie, lassen sich aus experimentell beobachteten Spektren direkt Strukturinformationen, insbesondere Abstände zwischen einzelnen Atomen, ableiten.

Inverse theoretische Spektroskopie

Für andere wichtige spektroskopische Techniken wie zum Beispiel die Schwingungsspektroskopie ist der Zusammenhang zwischen molekularer Struktur und den beobachteten Spektren nur indirekt. Hier kann die theoretische Chemie entscheidende Beiträge leisten [7]. Der einfachste Ansatz, mit quantenchemischen Rechnungen zur Strukturaufklärung beizutragen, ist, auf „Brute-Force“-Art die Spektren für möglichst viele in Frage kommende Strukturen zu berechnen und das Ergebnis jeweils mit dem Experiment zu vergleichen. Da hierfür sehr viele einzelne Rechnungen nötig sind und die Zahl der möglichen Strukturen mit der Größe der Moleküle sehr schnell (genauer: exponentiell) ansteigt, ist dies aber meist nur für sehr kleine Moleküle möglich.

Effizientere und stärker zielgerichtete Methoden zur Lösung dieses inversen Problems sind daher wünschenswert. Ein Schritt in diese Richtung ist es, nicht die vollständigen Schwingungsspektren zu berechnen, sondern gezielt nur die „interessanten“ Schwingungen [8]. Des Weiteren kann man versuchen, aus den quantenchemischen Rechnungen einfache Regeln oder Modelle zu extrahieren, um so die in Frage kommenden Strukturen stärker eingrenzen zu können und eine effiziente Suche zu ermöglichen.

Theoretisches molekulares Design

Wenn man das Feld der theoretischen Spektroskopie verlässt, stößt man auf weitere inverse Probleme. Zum Beispiel: Wie lassen sich Moleküle mit bestimmten Eigenschaften oder Funktionen gezielt vorhersagen? Da die Anzahl möglicher Moleküle riesig ist, ist es nicht möglich und auch nicht hilfreich, einfach quantenchemische Rechnungen für alle in Frage kommenden Kandidaten durchzuführen. Stattdessen sind neuartige Verfahren nötig, um den Raum der chemischen Verbindungen („chemical compound space“) abzusuchen [9].

Ein sehr aktuelles Thema in diesem Bereich ist das theoretische Design von Enzymen, die in der Natur nicht vorkommen und eine gegebene chemische Reaktion katalysieren. Für eine sehr einfache organische Reaktion ist dies kürzlich erstmals gelungen und die Aktivität des so designten Enzyms konnte experimentell bestätigt werden [10]. Für solch ein erfolgreiches Proteindesign sind Verfahren nötig, die verschiedenste theoretischen Methoden miteinander kombinieren und weit über das einfache Anwenden von vorhandenen Algorithmen der Quantenchemie hinausgehen.

Komplexe molekulare Systeme und Materialien

Dies führt direkt in einen weiteren spannenden Themenbereich. Da kleine, einfache Moleküle mittlerweile sehr ausführlich erforscht sind, beschäftigt sich die Chemie allgemein immer mehr mit komplexen molekularen Systemen (siehe Abbildung 2). Darunter versteht man einerseits sehr große Moleküle (insbesondere Biomoleküle wie Proteine) oder

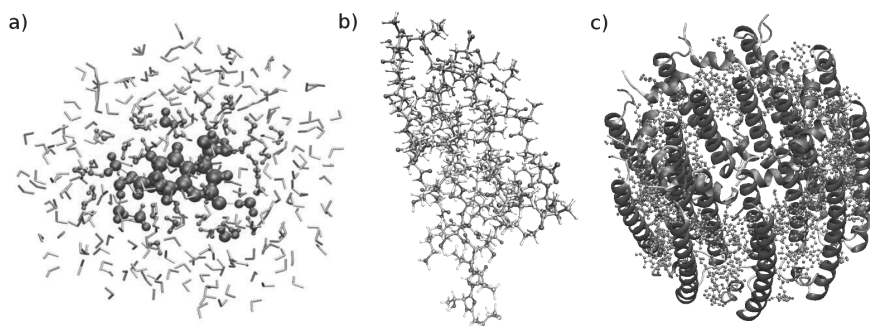


Abbildung 2: Beispiele für komplexe molekulare Systeme. (a) Ein Aminocoumarin-Farbstoffmolekül in Wasser. (b) Ein relativ kleines Protein aus 76 Aminosäuren (alle Atome explizit dargestellt). (c) Lichtsammelkomplex LH2 von höheren Pflanzen (die Proteine sind hier nur noch schematisch dargestellt).

molekulare Materialien (zum Beispiel in organischen Solarzellen) und andererseits das Zusammenspiel vieler einzelner Moleküle. Dies ist bereits dann der Fall, wenn man kleinere Moleküle nicht isoliert, sondern in einem Lösungsmittel betrachtet. Zahlreiche biologische Systeme verwenden ebenfalls ein Zusammenspiel vieler verschiedener Bestandteile. Ein prominentes Beispiel hierfür ist die Maschinerie, welche für die Photosynthese verantwortlich ist: Hier spielen Lichtsammelkomplexe zum Einfangen des Lichts und verschiedene Proteine zur Übertragung der Energie sowie zu deren Umwandlung in chemische Energie auf sehr komplizierte Art zusammen. Dabei sind auch die einzelnen Bestandteile sehr komplex, bei den Lichtsammelkomplexen handelt es sich in der Regel um Aggregate von mehreren einzelnen Proteinen, in die zahlreiche Chlorophyll- und Carotinoid-Moleküle eingebettet sind.

Die quantenchemische Beschreibung solcher komplexen molekularen Systeme ist aus mehreren Gründen schwierig. Zum einen steigt bei allen theoretischen Methoden der Rechenaufwand mit der Größe des Systems an. Auch wenn sich einzelne quantenchemische Rechnungen für Systeme mit mehreren Hunderten von Atomen durchführen lassen, so stößt man sehr schnell an Grenzen, wenn sehr viele Rechnungen nötig sind. Dies ist aber meist unerlässlich, um die Dynamik komplexer Systeme zu erfassen, die bei endlicher Temperatur nicht eine starre Struktur besitzen, sondern sich „bewegen“. Auch um die oben beschriebenen inversen Probleme anzugehen, sind in der Regel immer noch sehr viele einzelne Rechnungen nötig. Dies erfordert die Entwicklung effizienter Methoden für derartige komplexe molekulare Systeme. Besonders vielversprechend sind dabei Ansätze, welche die Möglichkeit bieten, sich auf die wichtigsten Aspekte zu beschränken.

Als zweite Schwierigkeit kommt hinzu, dass für große Systeme die Wahl der theoretischen Methoden stark eingeschränkt ist. Für molekulare Systeme mit mehreren Hunderten Atomen ist die Dichtefunktionaltheorie (DFT) in der Regel die einzige mögliche Wahl. Dies ist oft ausreichend, es ist aber für große Systeme auch nicht mehr möglich, genauere Methoden anzuwenden, um solche DFT-Rechnungen zu überprüfen und, wenn nötig, zu verbessern.

Meist sind solche Verbesserungen aber nicht für das gesamte System, sondern nur für einzelne Aspekte nötig. So möchte man zum Beispiel in Enzymen die katalysierte chemische Reaktion so genau wie möglich beschreiben. Diese findet aber nur im aktiven Zentrum, also in einem relativ kleinen Bereich, statt. Daher sind theoretische Methoden nötig, die in der Lage sind, in die interessanten Teile eines komplexen Systems „hereinzuzoomen“ und so die entscheidenden Aspekte zu fokussieren.

Schließlich steht man bei komplexen molekularen Systemen noch vor einem weiteren Problem: Selbst wenn vollständige quantenchemische Rechnungen möglich sind, so liefern diese eine meist unüberschaubare Menge an Daten. Dadurch ist die Interpretation solcher Ergebnisse extrem schwierig. Im Hinblick auf ein „chemisches“ Verständnis ist man aber meist daran interessiert, aus den quantenchemischen Rechnungen einfache Prinzipien und allgemeine Regeln zu extrahieren. Diese könnten dann als Richtschnur dienen, um inverse Probleme effizient anzugehen oder um ein zielgerichtetes Design zu ermöglichen. Dieses Interpretationsproblem ist von den hier aufgeführten Herausforderungen der theoretischen Chemie für komplexe Systeme vermutlich die bedeutendste.

Die Interpretation solcher Ergebnisse ist extrem schwierig. Im Hinblick auf ein „chemisches“ Verständnis ist man aber meist daran interessiert, aus den quantenchemischen Rechnungen einfache Prinzipien und allgemeine Regeln zu extrahieren. Diese könnten dann als Richtschnur dienen, um inverse Probleme effizient anzugehen oder um ein zielgerichtetes Design zu ermöglichen. Dieses Interpretationsproblem ist von den hier aufgeführten Herausforderungen der theoretischen Chemie für komplexe Systeme vermutlich die bedeutendste.

Subsystem-Quantenchemie

Ein Ansatz, um diese Herausforderungen anzugehen, den auch ich mit meiner Nachwuchsgruppe in Karlsruhe verfolge, ist die Entwicklung von sogenannten Subsystemmethoden. Die zugrunde liegende Idee ist dabei, nicht ein sehr großes komplexes System als eine Einheit zu betrachten, sondern dieses in mehrere Subsysteme zu unterteilen. Ein solches Vorgehen ist aus der Sicht eines Chemikers sehr natürlich: In komplexen Systemen, die aus vielen einzelnen Molekülen bestehen, ist es naheliegend, eine Unterteilung in die einzelnen Moleküle vorzunehmen. Auch für komplexe Moleküle bietet sich eine Unterteilung in die einzelnen chemischen Bausteine an - in Proteinen wären dies zum Beispiel die einzelnen Aminosäuren. Ein solches Denken in kleineren Einheiten und funktionellen Gruppen wird Chemikern in ihrem Studium von Beginn an beigebracht. Diesen Ansatz auch in die theoretische Beschreibung zu übertragen, bietet sich daher an.

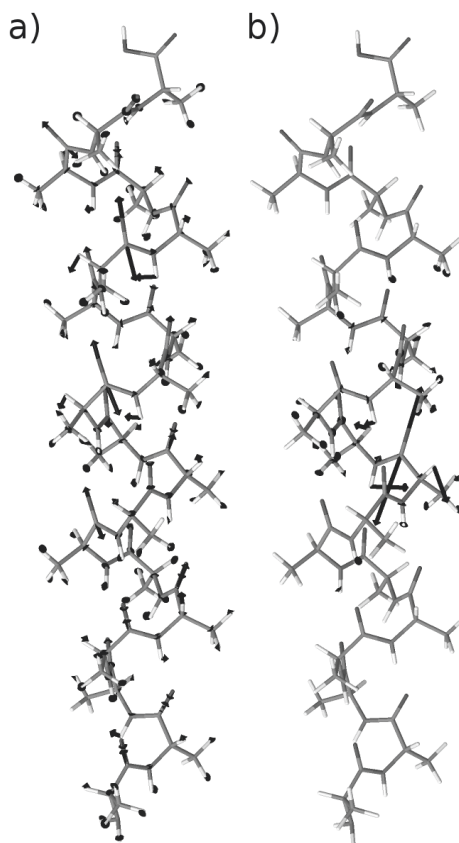


Abbildung 3: Rekonstruktion eines Subsystembildes in der theoretischen Schwingungsspektroskopie: (a) Eine delokalisierte Normalmode aus einer quantenchemischen Rechnung für eine α -Helix aus 20 Alanin-Einheiten. (b) Eine der zugehörigen lokalisierten Moden. Hier schwingen nur Atome einer einzelnen Alanin-Einheit.

Eine Möglichkeit, zu einem solchen Subsystembild zu gelangen, ist es, dieses aus einer vollen quantenchemischen Rechnung für das Gesamtsystem zu rekonstruieren. Einen solchen Ansatz haben wir für die Analyse der Schwingungsspektren entwickelt [11]. Für komplexe Moleküle liefern solche Rechnungen sehr viele Schwingungsmoden, die meist sehr delokalisiert sind (siehe Abbildung 3a). Aus diesen lassen sich wesentlich einfachere lokalisierte Moden rekonstruieren (siehe Abbildung 3b). Damit ist es möglich, komplizierte Schwingungsspektren von Biomolekülen im Detail zu verstehen und den Zusammenhang zwischen der Struktur und diesen Spektren genauer zu beleuchten [12].

Eine solche Rekonstruktion eines Subsystembildes geht aber immer von einer vollen quantenchemischen Rechnung aus und erleichtert nur deren Interpretation. Um auch die anderen beiden Herausforderungen (Effizienz und systematische Verbesserung) anzugehen, werden quantenchemische Methoden benötigt, die ein komplexes molekulares System von Anfang an in kleinere Subsysteme zerlegen.

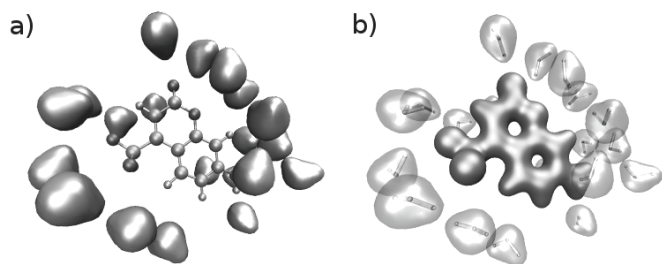


Abbildung 4: Schematische Darstellung des Vorgehens in Subsystem-DFT-Verfahren für ein Farbstoffmolekül umgeben von Wasser. (a) Zunächst wird die Umgebung aus Wassermolekülen konstruiert. Dabei kann diese Umgebung in mehrere Subsysteme unterteilt werden. (b) Die Umgebung wird dann eingefroren und in der Rechnung für das Farbstoffmolekül durch ein Einbettungspotential berücksichtigt.

Ein möglicher Ansatz hierfür sind Subsystem-DFT-Verfahren [13], an deren Entwicklung ich auch beteiligt bin. Diesen liegt die Idee zugrunde, anstelle einer einzigen Rechnung für das Gesamtsystem Rechnungen für die einzelnen Teilsysteme zu verwenden. Dies ist in Abbildung 4 für ein Farbstoffmolekül umgeben von Wasser als Lösungsmittel schematisch dargestellt: In der Rechnung für das Farbstoffmolekül werden die umgebenden Wassermoleküle eingefroren und nur durch ein sogenanntes Einbettungspotential berücksichtigt.

Mit solchen Subsystem-DFT-Verfahren lassen sich zum Beispiel Lösungsmittelleffekte auf molekulare Spektren sehr effizient beschreiben, da die Berechnung des Spektrums nur für eines der Teilsysteme durchgeführt werden muss [14]. Diese Verfahren lassen sich auch auf die Beschreibung von großen Biomolekülen wie Proteinen erweitern, was viele interessante Anwendungen eröffnet [15]. Zum Beispiel lässt sich mit solchen Methoden der Energietransfer in den komplexen molekularen Systemen untersuchen, die bei der Photosynthese eine Rolle spielen [16]. Bei allen diesen

Anwendungen ist nicht nur die Ersparnis von Rechenzeit ein Grund für den Einsatz von Subsystemmethoden, sondern diese bieten auch den Vorteil, dass sie die Interpretation der Ergebnisse stark vereinfachen oder überhaupt erst möglich machen. Schließlich lassen sich solche Subsystemmethoden auch verwenden, um Rechnungen an komplexen Systemen systematisch zu verbessern. Da von Anfang an eine Unterteilung in einzelne Subsysteme vorgenommen wurde, ist es möglich, für einzelne Subsysteme genauere Methoden zu verwenden [17].

Die weitere Verbesserung solcher Subsystemansätze ist ein sehr spannendes und aktuelles Gebiet der theoretischen Chemie. Dabei werden solche Entwicklungen meist von konkreten Anwendungen zur Beschreibung komplexer molekularer Systeme getrieben. In vielen Fällen ist die Quantenchemie in der Lage, dadurch zum genaueren chemischen Verständnis komplexer chemischer und biologischer Systeme beizutragen. Dadurch wird es in vielen Fällen auch möglich, inverse Probleme anzugehen und in den kommenden Jahren werden neue Entwicklungen sicher immer mehr zu einen zielgerichteten theoretischen Design beitragen können.

Über den Autor

Christoph R. Jacob

Centrum für funktionelle Nanostrukturen

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Wolfgang-Gaede-Str. 1a

D-76131 Karlsruhe

E-Mail christoph.jacob@kit.edu

Christoph Jacob hat 1997 an der Internationalen Chemie-Olympiade in Montreal teilgenommen und gewann dort eine Bronzemedaille. Er war von 2003 bis 2007 Vorsitzender des Fördervereins Chemie-Olympiade e.V. und ist jetzt Mitglied des Kuratoriums. Seit 2010 leitet er eine Nachwuchsgruppe für theoretische Chemie am Karlsruher Institut für Technologie (KIT).

Referenzen und Anmerkungen

[1] Der „Chemical Abstracts Service“ verzeichnet aktuell über 56 Millionen organische und anorganische Verbindungen, täglich kommen etwa 12.000 weitere hinzu.

[2] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. Ser. A* 123, 714-733 (1929).

[3] Diese Aussage ist so natürlich etwas überspitzt formuliert. Es existieren auch Bereiche, die mit den existierenden Methoden oft nicht angemessen beschrieben werden können. Dies gilt

insbesondere für viele Verbindungen von Übergangsmetallen sowie für Festkörper und Oberflächen.

[4] Einen detaillierten Überblick bietet zum Beispiel: T. Helgaker, P. Jørgensen, J. Olsen, *Molecular Electronic Structure Theory*, John Wiley & Sons, Chichester (2001).

[5] siehe zum Beispiel: W. Koch, M. C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, Wiley-VCH, Weinheim (2001).

[6] Selbstverständlich ist die Darstellung hier von meiner persönlichen Einschätzung geprägt. Es existieren auch andere Ansichten zu den zukünftigen Herausforderungen der theoretischen Chemie, siehe zum Beispiel: *Science* 321, 783 (2008) und folgende Artikel; C. D. Sherill, *J. Chem. Phys.* 132, 110902 (2010); W. Thiel, *Angew. Chem.* 123, 9382 (2011).

[7] C. Herrmann, M. Reiher, *Top. Curr. Chem.* 268, 95 (2007).

[8] C. Herrmann, J. Neugebauer, M. Reiher, *New. J. Chem.* 31, 818 (2007); K. Kiewisch, J. Neugebauer, M. Reiher, *J. Chem. Phys.* 129, 204103 (2008).

[9] M. Wang, X. Hu, D. N. Beratan, W. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* 128, 3228 (2006); X. Hu, D. N. Beratan, W. Yang, *J. Chem. Phys.* 129, 064102 (2008); O. A. von Lilienfeld, *J. Chem. Phys.* 131, 164102 (2009); D. Sheppard, G. Henkelman, O. A. von Lilienfeld, *J. Chem. Phys.* 133, 084104 (2010).

[10] L. Jiang et al., *Science* 319, 1387 (2008); D. Röthlisberger et al., *Nature* 453, 190 (2008).

[11] Ch. R. Jacob, M. Reiher, *J. Chem. Phys.* 130, 084106 (2009); Ch. R. Jacob, S. Luber, M. Reiher, *J. Phys. Chem. B* 113, 6558 (2009).

[12] Ch. R. Jacob, S. Luber, M. Reiher, *Chem. Eur. J.* 15, 13491 (2009); T. Weymuth, Ch. R. Jacob, M. Reiher, *J. Phys. Chem B* 114, 10649 (2010).

[13] G. Senatore, K. R. Subbaswamy, *Phys. Rev. B* 34, 5754 (1986); P. Cortona, *Phys. Rev. B* 44, 8454 (1991); T. A. Wesolowski, A. Warshel, *J. Phys. Chem.* 97, 8050 (1993); Ch. R. Jacob, *Frozen-Density Embedding*, Doktorarbeit, Vrije Universiteit Amsterdam (2007).

[14] J. Neugebauer, Ch. R. Jacob, T. A. Wesolowski, E. J. Baerends, *J. Phys. Chem. A* 109, 7805 (2005); Ch. R. Jacob, J. Neugebauer, L. Jensen, L. Visscher, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 8, 2349 (2006); R. E. Bulo, Ch. R. Jacob, L. Visscher, *J. Phys. Chem. A* 112, 2640 (2008).

[15] Ch. R. Jacob, L. Visscher, *J. Chem. Phys.* 128, 155102 (2008); K. Kiewisch, Ch. R. Jacob, L. Visscher, *in Vorbereitung* (2011).

[16] J. Neugebauer, *J. Phys. Chem B* 112, 2207 (2008); C. König, J. Neugebauer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 13, 10475 (2011).

[17] N. Govind, Y. A. Wang, E. A. Carter, *J. Chem. Phys.* 110, 7677 (1999); A. S. P. Gomes, Ch. R. Jacob, L. Visscher, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 10, 5353 (2008).

Die Internationale JuniorScienceOlympiade - ein Schülerwettbewerb im Aufwind

Die Internationale JuniorScienceOlympiade (IJSO) fand zum ersten Mal 2004 in Jakarta statt. Inzwischen sind in der IJSO weltweit etwa 50 Nationen vertreten. Damit wurde ein internationales Forum zur Förderung der jüngsten Talente in den Naturwissenschaften geschaffen: Zielgruppe sind Jugendliche, die 15 Jahre alt oder jünger sind und sich in der Breite für naturwissenschaftliche Themen interessieren; auch experimentelle Fähigkeiten werden angesprochen.

Deutschland nimmt von Beginn an regelmäßig und erfolgreich mit einem sechsköpfigen Schülerteam an den internationalen Wettbewerben der IJSO teil. Die Medaillenerfolge der deutschen Schülerteams auf internationalem Parkett sind beachtlich: in sechs olympischen Wettbewerben gewannen die Schülerinnen und Schüler in der Einzelwertung insgesamt 3 Bronze-, 26 Silber- und 7 Goldmedaillen, 2009 gewann ein deutsches Dreierteam die begehrte Goldmedaille im Experimentalwettbewerb. Wiederholt belegte Deutschland

nach Medaillenspiegel die Ränge vier bis sechs; die deutschen Schülerdelegationen nehmen mit ihren internationalen Erfolgen neben Russland eine führende Rolle unter den europäischen Teilnehmerländern ein.

Auf nationaler Ebene wird die IJSO - jüngstes Familienmitglied im Reigen der ScienceOlympiaden, zu denen auch Chemie-, Biologie- und Physik-Olympiade gehören - am Leibniz-Institut für die Pädagogik der Naturwissenschaften und Mathematik (IPN) an der Universität Kiel betreut. Der Weg ins deutsche IJSO-Nationalteam führt seit 2008 ähnlich wie bei IChO, IBO und IPHO über einen vierstufigen nationalen Auswahlwettbewerb. Auch die Internationale JuniorScienceOlympiade wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert. Sie gehört zum Kanon der von der Kultusministerkonferenz (KMK) empfohlenen Schülerwettbewerbe und ist Mitglied in der Arbeitsgemeinschaft bundesweiter Schülerwettbewerbe.