



Curriculum Vitae Prof. Dr. Stefan Grimme



Name: Stefan Grimme
Geboren: 4. September 1963

Forschungsschwerpunkte: Entwicklung quantenchemischer Methoden, Wechselwirkungen in großen Molekülen und kondensierten Systemen, Multi-Level-Modellierung, Molekülkristalle, Eigenschaften im angeregten Zustand, Reaktionsmechanismen

Stefan Grimme ist theoretischer Chemiker. Er entwickelt quantenchemische Methoden und wendet sie auf verschiedenste chemische Problemstellungen an. Sein Hauptinteresse gilt großen Molekülen und der Frage, wie deren geometrische und elektronische Struktur, chemische Reaktionen und spektroskopische Eigenschaften effizient und extrem schnell mit modernen Computern berechnet werden können.

Akademischer und beruflicher Werdegang

seit 2011	Professor (W3) für Theoretische Organische Chemie, Universität Bonn
2000 - 2011	Professor (C4) für Theoretische Organische Chemie, Universität Münster
1999 - 2000	Hochschuldozent, Universität Bonn
1997	Habilitation in Theoretischer Chemie an der Universität Bonn
1996 - 1999	Wissenschaftlicher Assistent an der Universität Bonn
1992 - 1996	Habilitand, Theoretische Chemie, Universität Bonn
1991	Promotion in Physikalischer Chemie, Technische Universität (TU) Braunschweig
1989 - 1991	Doktorand an der TU Braunschweig
1989	Diplom in Chemie, TU Braunschweig
1984 - 1989	Studium der Chemie, TU Braunschweig

Funktionen in wissenschaftlichen Gesellschaften und Gremien

- seit 2015 Mitglied der Auswahlkommission für den Erich-Hückel-Preis der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)
- seit 2014 Kuratoriumsmitglied der Fachzeitschrift „Angewandte Chemie“
- 2014 - 2016 Vorsitzender der Fachgruppe Chemie der Universität Bonn
- seit 2013 Vorstandsmitglied der AG Theoretische Chemie der GDCh
- seit 2012 Fachkollegiat im Fachforum Chemie der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)
- 2010 - 2013 Stellvertretender Sprecher des DFG-Sonderforschungsbereichs (SFB) 858
- 2005 - 2007 Mitglied des Senats der Universität Münster
- 2000 - 2011 Direktor des Organisch-Chemischen Instituts der Universität Münster

Mitglied in den Editorial Boards von: Journal of Computational Chemistry, Theoretical Chemistry Accounts, Journal Chemical Theory and Computation, Physical Chemistry Chemical Physics, Wiley Interdisciplinary Reviews Molecular Science

Gutachter für führende Chemie-Journale und Zeitschriften wie Nature, Science und Physical Review Letters

Projektkoordination, Mitgliedschaft in Verbundprojekten

- 2018 - 2019 DFG-Projekt (Fortsetzung) „First Principles-Berechnung von elektronenstoßinduzierten Massenspektren von Molekülen“
- 2018 DFG-Projekt (Fortsetzung) „Modellierung von London-Dispersionswechselwirkungen in der molekularen Chemie“
- 2016 - 2018 DFG-Projekt „Kontrolle und Quantifizierung der interchromophoren Kopplung in definierten formtreuen Oligomereinzelmolekülen“
- seit 2015 Leibniz-Programm
- 2015 - 2018 DFG-Schwerpunktprogramm „Modellierung von London-Dispersionswechselwirkungen in der molekularen Chemie“
- 2015 - 2018 DFG-Projekt „COCOORDCHEM: Kohäsion in der Koordinationschemie“
- 2015 - 2018 DFG-Projekt „First Principles-Berechnung von elektronenstoßinduzierten Massenspektren von Molekülen“
- 2014 - 2017 Projekt mit der BAYER AG „Affinities of ligands in proteins“
- 2014 - 2016 DFG-Projekt „Sustainable Transition -Metal Catalysts for Radical Reactions“

- 2014 - 2015 Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand (ZIM)-Projekt „Simulation von metallorganischen Komplexkatalysator-Anwendungen; Entwicklung der Simulationsmethode“
- 2013 - 2017 Teilprojekte im SFB 813 „Chemie an Spinzentren“
- 2013 - 2015 Marie Curie Intra-European Fellowship MOLMOTDYN „Understanding the dynamics behind the photoisomerization of light-driven molecular rotary motors and switches“
- 2012 DFG-Forschergruppe „Quantum mechanical investigations of the thermodynamic and kinetic properties of H₂-activation“
- 2010 - 2013 Teilprojekte im DFG-Sonderforschungsbereich (SFB) 858 „Synergetische Effekte in der Chemie – Von der Additivität zur Kooperativität“
- 2009 - 2012 DFG-Sscherpunktprogramm-Projekt „Experimentelle Elektronendichte von Organometallverbindungen mit ungewöhnlichen Struktureigenschaften“

Auszeichnungen und verliehene Mitgliedschaften

- seit 2018 Mitglied der Nationalen Akademie der Wissenschaften Leopoldina
- 2017 Ehrenmitglied der Israelischen Chemischen Gesellschaft
- 2017 Gastprofessur der Universität Straßburg
- 2015 Ziegler Lecture des Max-Planck-Instituts für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr
- 2015 Ausgezeichnet von Thomson Reuters (Web of Science) unter den weltweit 3000 meist zitierten Wissenschaftler und weltweit 300 besten im Fach Chemie, Zeitraum 2003 - 2013
- 2015 Karl-Ziegler Lectureship Award, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung Mülheim
- 2015 Gottfried Wilhelm Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)
- 2014 Ausgezeichnet von Thomson Reuters (Web of Science) unter den weltweit 3000 meist zitierten Wissenschaftler und weltweit 200 besten im Fach Chemie, Zeitraum 2002 - 2012
- seit 2013 Mitglied der International Academy of Quantum Molecular Science
- 2013 Schrödinger-Medaille der World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
- seit 2011 Mitglied des DFG-Fachkollegiums Molekülchemie
- seit 2011 Mitglied der Akademie der Wissenschaften und Künste des Landes Nordrhein-Westfalen
- 2010 Lise Meitner Lectureship Award, Universität Jerusalem

1998	Dozentenstipendium des Fonds der Chemischen Industrie
1998	Bennigsen-Förderpreis des Landes Nordrhein-Westfalen
1989	Promotionsstipendium des Fonds der Chemischen Industrie

Forschungsschwerpunkte

Stefan Grimme ist theoretischer Chemiker. Er entwickelt quantenchemische Methoden und wendet sie auf verschiedenste chemische Problemstellungen an. Sein Hauptinteresse gilt großen Molekülen, wie zum Beispiel Proteinen. Ihn interessiert die Frage, wie deren geometrische und elektronische Struktur, chemische Reaktionen und spektroskopische Eigenschaften effizient und extrem schnell mit modernen Computern berechnet werden können.

Mit seiner Arbeitsgruppe hat Stefan Grimme Simulations-Softwarepakete entwickelt, die weltweit in der akademischen Forschung, aber auch in der Industrie routinemäßig verwendet werden. Sie kommen in der Biologie, Syntheseforschung und Materialwissenschaft zum Einsatz. Da quantenmechanische Rechnungen einen enormen Rechenaufwand verursachen, arbeitet er auch an realistischen Simulationen für PC oder Laptop, die weniger Energie und Rechenaufwand benötigen.

Unter anderem hat er die Methode der Dichtefunktionaltheorie (DFT) weiterentwickelt, die zur Berechnung von Bindungslängen und Bindungsenergien verwendet wird. Diese Weiterentwicklung ist als „Grimme Correction“ bekannt.

Auf dem Gebiet der molekularen Spektroskopie entwickelt Stefan Grimme automatische, Quantenchemie-basierte Software, für die in der Analytik sehr weit verbreiteten UV-, CD- und NMR-Spektroskopien und EI-Massenspektrometrie großer Moleküle. Dabei verwendet er „low-cost“-Methoden zur Berechnung von Solvatationseffekten. Diese ermöglichen einen neuen theoretischen Zugang zur Beschreibung der jeweiligen Moleküle, beispielsweise der pharmakologisch sehr wichtigen Protein-Wirkstoff-Affinitäten.