

Curriculum Vitae Prof. Dr. Joachim Sauer

Name: Joachim Sauer

Geboren: 19. April 1949



Foto: Vincent Leifer | Agentur van ryck

Forschungsschwerpunkte: Quantenchemie großer chemischer Systeme, Festphasenkatalysatoren, Zeolithe, Übergangsmetalloxide, Heterogene Katalyse, Struktur und Reaktivität von Oxidclustern

Joachim Sauer hat quantenchemische Ab-initio-Verfahren mit Verfahren der molekularen Modellierung und Simulation methodisch verknüpft, woraus effiziente Hybrid- bzw. Einbettungsmethoden entstanden, die eine hierarchische Behandlung komplexer Systeme gestatten. Teil dieser Strategie war die Parametrisierung von Kraftfeldern (interatomaren Potentialen) auf der Basis von Ab-initio-Ergebnissen. Dank dieser Methoden konnten er und sein Team eine Reihe von Problemen der Zeolithkatalyse lösen. Wesentliche Erkenntnisse über aktive Zentren auf Festkörperoberflächen gewann Sauer auch durch die Untersuchung von Modellsystemen in der Gasphase, zum Beispiel protonierter Wassercluster. In der letzten Dekade hat sich Joachim Sauer verstärkt mit Übergangsmetalloxid-Katalysatoren (zum Beispiel Vanadiumoxid) auf Trägeroxiden beschäftigt.

Akademischer und beruflicher Werdegang

- | | |
|-------------|---|
| 2021 - 2022 | Key Foreign Researcher, Charles University Center of Advanced Materials (CUCAM), Prag, Tschechien |
| seit 2017 | Senior Researcher, Humboldt-Universität zu Berlin |
| seit 1993 | Professor (C4) für Physikalische und Theoretische Chemie, Humboldt Universität zu Berlin |
| 1992 - 1996 | Leiter, Arbeitsgruppe „Quantenchemie“ der Max-Planck-Gesellschaft, Humboldt-Universität zu Berlin |
| 1990 - 1991 | Deputy Technical Director Catalysis and Sorption, BIOSYM Technologies Inc., San Diego, USA |

1990 - 1991	Abteilungsleiter, Zentralinstitut für physikalische Chemie, Akademie der Wissenschaften, Berlin
1986 - 1989	Arbeitsgruppenleiter, Zentralinstitut für physikalische Chemie, Akademie der Wissenschaften der DDR (AdW)
1985	Dr. sc. nat., AdW
1977 - 1991	Zentralinstitut für physikalische Chemie, AdW
1977 - 1985	Wissenschaftlicher Mitarbeiter, Zentralinstitut für physikalische Chemie, AdW
1974	Dr. rer. nat., Humboldt-Universität zu Berlin
1973 - 1976	Wissenschaftlicher Assistent, Humboldt-Universität zu Berlin
1967 - 1972	Studium der Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

Funktionen in wissenschaftlichen Gesellschaften und Gremien

2022	Mitglied, Scientific Advisory Board, Catalyst Design for Decarbonization (CD4DC), University of Chicago, Chicago, USA sowie European Forum for Reciprocating Compressors (EFRC)
2017 - 2020	Mitglied, Scientific Advisory Board, CUCAM, Prag, Tschechien
seit 2016	Mitglied, Advisory Board, Journal of the American Chemical Society
seit 2015	Editor, Journal of Catalysis
seit 2015	Mitglied, Ownership Board, Physical Chemistry – Chemical Physics
2013	Mitglied, Advisory Board, Catalysis Letters
2013	Mitglied, Advisory Board, Topics in Catalysis
2013	Vorstand, Scientific Advisory Board, UK Catalysis Hub, Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC), Swindon, UK
seit 2012	Zentrenkomitee, Minerva-Stiftung, Max-Planck-Gesellschaft, München
seit 2011	Kuratorium, Friede Springer Stiftung, Berlin
seit 2008	Mitglied, Panel PE4B, European Research Council
seit 2007	Kuratorium, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
seit 2006	Kommission für Chemie, Klug-Wilhelmy-Weberbank-Preis (seit 2014 Klug-Wilhelmy-Wissenschafts-Preis), Otto-Klug-Stiftung an der Freien Universität Berlin,
seit 2004	Wissenschaftlicher Beirat, Alfried Krupp Kolleg Greifswald
2004 - 2012	Fachkollegium „Chemische Festkörperforschung“, Deutsche Forschungsgemeinschaft

1999 - 2011	Fachbeirat, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr
seit 1997	Forschungsbeirat, Fonds der Chemischen Industrie, Verband der Chemischen Industrie, Frankfurt am Main
1998 - 2003	Zentrenkomitee, Minerva-Stiftung, Max-Planck-Gesellschaft, München
1996 - 2000	Ständiger Ausschuss, Deutsche Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie

Projektkoordination, Mitgliedschaft in Verbundprojekten

seit 2022	Antragsteller, Projekt „Confine: Diffusion von Wasser in hydrophob-hydrophil strukturierten Nanoporen“, DFG sowie National Science Foundation (NSF), USA
seit 2019	Antragsteller, Projekt „Gemischte Metalloxidcluster: Modellsysteme für katalytisch aktive Materialien“, DFG
2015 - 2022	Antragsteller, Projekt „Ab initio-Berechnung Freier Energien mit chemischer Genauigkeit für Molekül-Oberflächen-Wechselwirkungen“, DFG
2014 - 2018	Leiter, Teilprojekt „Quantenchemische Studien an mikrohydratisierten Gasphasen-Metalloxidclustern“, Sonderforschungsbereich (SFB) 546, DFG
2014 - 2018	Leiter, Teilprojekt „Hydratisierung und Hydrolyse bei der Dealuminierung und Desilizierung von Zeolithgerüsten“, SFB 546, DFG
2013 - 2018	Antragsteller, Teilprojekt „Ab initio-Simulation von Isothermen für die Adsorption von Gasen aus Mischungen in metall-organischen Gerüstverbindungen“, Schwerpunktprogramme (SPP) 1570, DFG
2008 - 2011	Vorstandsmitglied, Principal Investigator sowie Koordinator, Bereich A, Exzellenzcluster „Unifying Concepts in Catalysis (UniCat)“, DFG
2008 - 2011	Antragsteller, Teilprojekt „Redox-Active MOF-5 Isotypes: Novel Entatic State Catalysts?“, SPP 1362, DFG
2007 - 2018	Beteiligter Wissenschaftler, Exzellenzcluster (EXC) 314 „Unifying Concepts in Catalysis“, DFG
2003 - 2011	Antragsteller, Teilprojekt „Übergangsstrukturen und Geschwindigkeitskonstanten für Elementarreaktionen in Zeolithen“, SPP 1155, DFG
2002 - 2011	Leiter, Teilprojekt „Structure determination of Vox and related surfaces, thin films and interfaces based on scanned-energy mode photoelectron diffraction“, SFB 546, DFG
2000 - 2008	Antragsteller, Teilprojekt „Säure-Base katalysierte Alkanaktivierung“, SPP 1091, DFG
1999 - 2011	Leiter, Teilprojekt „Struktur und Reaktivität unterschiedlicher Übergangsmetalloxid-Aggregate mit quantenchemischen Methoden“, SFB 546, DFG

- 1999 - 2011 Leiter, Teilprojekt „DFT-Rechnungen mit periodischen Randbedingungen zur Struktur, Dynamik und Reaktivität von Übergangsmetalloxiden auf Trägern im Vergleich zu Einkristallen“, SFB 546, DFG
- 1999 - 2011 Sprecher sowie Leiter, Teilprojekt „Zentrale Aufgaben“, SFB 546, DFG

Auszeichnungen und verliehene Mitgliedschaften

- 2023 Award in Surface Chemistry, American Chemical Society (ACS), USA
- seit 2023 Mitglied, American Academy of Arts and Sciences, USA
- seit 2021 Mitglied, Accademia delle Scienze di Torino, Turin, Italien
- seit 2021 Mitglied, International Academy of Quantum Molecular Science
- 2020 Bunsen-Denkmünze, Deutschen Bunsen-Gesellschaft für physikalische Chemie
- 2019 Schrödinger Medal, World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
- seit 2018 Auswärtiges Mitglied, Royal Society, UK
- 2013 Ehrendoktorwürde, University College London, London, UK
- 2010 Liebig-Denkmünze, Gesellschaft Deutscher Chemiker
- 2009 Kolos Medal and Lecture Award, University of Warsaw, Warschau, Polen sowie Polish Chemical Society, Polen
- seit 2009 Mitglied, Academia Europaea
- seit 2007 Mitglied, Nationale Akademie der Wissenschaften Leopoldina
- seit 2006 Auswärtiges wissenschaftliches Mitglied, Fritz-Haber-Institut, Berlin, Max-Planck-Gesellschaft, München
- seit 1995 Mitglied, Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften
- 1991 Chemiepreis, Niedersächsische Akademie der Wissenschaften zu Göttingen
- 1991 Dozentenstipendium, Fonds der Chemischen Industrie, Verband der Chemischen Industrie, Frankfurt am Main
- 1982 Friedrich-Wöhler-Preis, Chemische Gesellschaft der DDR

Forschungsschwerpunkte

Joachim Sauer hat quantenchemische Ab-initio-Verfahren mit Verfahren der molekularen Modellierung und Simulation methodisch verknüpft, woraus effiziente Hybrid- bzw. Einbettungsmethoden entstanden, die eine hierarchische Behandlung komplexer Systeme

gestatten. Teil dieser Strategie war die Parametrisierung von Kraftfeldern (interatomaren Potentialen) auf der Basis von Ab-initio-Ergebnissen. Dank dieser Methoden konnten er und sein Team eine Reihe von Problemen der Zeolithkatalyse lösen. Wesentliche Erkenntnisse über aktive Zentren auf Festkörperoberflächen gewann Sauer auch durch die Untersuchung von Modellsystemen in der Gasphase, zum Beispiel protonierter Wassercluster. In der letzten Dekade hat sich Joachim Sauer verstärkt mit Übergangsmetalloxid-Katalysatoren (zum Beispiel Vanadiumoxid) auf Trägeroxiden beschäftigt.