



---

## Curriculum Vitae Prof. Dr. Frank Neese



**Name:** Frank Neese  
**Geboren:** 13. Dezember 1967

### **Forschungsschwerpunkte: Theoretische Chemie, Quantenchemie, Metalloenzyme, Katalyse-Mechanismen, chemische Energiekonversion**

Frank Neese erforscht die Theoretische Chemie, die molekulare Spektroskopie und Metalloenzyme. Er entwickelte mit seinem Team eine Quantenchemie-Software (ORCA), mit der die Elektronenstruktur großer Moleküle berechnet werden kann. Außerdem analysiert er Metalloenzyme, um ihren Katalyse-Mechanismus zu verstehen. Seine Forschung kann zu effizienteren und energiesparenderen Katalysatoren in der Industrie und Energiegewinnung führen.

### **Akademischer und beruflicher Werdegang**

- seit 2018 Direktor am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim (Ruhr)
- seit 2013 Honorarprofessur an der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
- 2011 - 2017 Wissenschaftliches Mitglied und Direktor am Max-Planck-Institut für Bioorganische Chemie (seit 2012 Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion)
- 2006 - 2011 Professur (W3) für Theoretische Chemie an der Universität Bonn
- 2001 - 2006 Gruppenleiter am Max-Planck-Institut für Bioorganische Chemie
- 1999 - 2001 Habilitation in Bioorganischer und Theoretischer Chemie an der Universität Konstanz
- 1997 - 1999 Postdoktorand an der Stanford University, Kalifornien, USA
- 1997 Promotion in Biologie an der Universität Konstanz
- 1993 - 1997 Doktorarbeit in Biologie
- 1993 Diplom in Biologie

1987 - 1993 Studium der Biologie an der Universität Konstanz

### **Funktionen in wissenschaftlichen Gesellschaften und Gremien**

- seit 2016 Mitglied im Editorial Board der Buchserie „Structure and Bonding“
- seit 2016 Mitglied des Internationalen Beirats des Instituts für Organische Chemie und Biochemie der Tschechischen Akademie der Wissenschaften, Prag, Tschechien
- seit 2016 Mitglied des Fachkollegiums „Physikalische und Theoretische Chemie“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)
- seit 2015 Sprecher und Gründer der International Max Planck Research School on Reactive Structure Analysis for Chemical Reactions (IMPRS Recharge)
- seit 2015 Associate Editor, Inorganic Chemistry
- seit 2014 Mitglied des Auswahlkomitees für die Liebig-Denkmünze, Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)
- seit 2012 Mitglied der International Academy of Quantum Molecular Science
- seit 2012 Associate Editor, Physical Chemistry Chemical Physics
- 2009 - 2015 Vorsitzender des Hellmann-Preis-Auswahlkomitees
- seit 2007 Mitglied im Editorial Board, Journal of Biological Inorganic Chemistry
- seit 2001 Mitglied der AG Theoretische Chemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker

### **Projektkoordination, Mitgliedschaft in Verbundprojekten**

- seit 2019 beteiligter Wissenschaftler im DFG-Exzellenzcluster EXC 2089: e-conversion
- seit 2019 beteiligter Wissenschaftler im DFG-Exzellenzcluster EXC 2033: RESOLV (Ruhr Explores Solvation)
- seit 2018 Teilprojektleiter im DFG-Projekt: Multiskalen-Methoden für die theoretische Spektroskopie von Oxidoberflächen in elektrochemischen Umgebungen, Teilprojekt im Transregio TRR 247: „Heterogene Oxidationskatalyse in der Flüssigphase – Materialien und Mechanismen in der thermischen, Elektro- und Photokatalyse“
- seit 2016 DFG-Projekt „Die Evolution der elektronischen Strukturen von Eisen-Schwefel Clustern. Beiträge der Elektronenstruktur zum Verständnis ihrer vielfältigen Funktionen“, Teilprojekt zu SPP 1927 „Iron-Sulfur for Life“
- 2015 - 2020 DFG-Projekt „Quantifizierung der Londoner Dispersionseffekte durch neuartige lokale Korrelationstechniken“, Teilprojekt zu SPP 1807 „Control of London dispersion interactions in molecular chemistry“

- 2012 - 2019 DFG-Projekt „Entwicklung effizienter ab initio-Verfahren zur genauen Vorhersage der EPR-Parameter in großen Molekülen“, Teilprojekt zu SPP 1601 „New Frontiers in Sensitivity for EPR Spectroscopy: from Biological Cells to Nano Materials“
- 2009 - 2012 DFG-Projekt „Herleitung und Implementierung von neuen Multireferenz /ab initio/ Methoden zur Behandlung von Spinzentren“, Teilprojekt zu SFB 813 „Chemie an Spinzentren – Konzepte, Mechanismen, Funktionen“
- 2009 - 2012 DFG-Projekt „Quantum chemical studies on the spectroscopic and reactive properties of short lived intermediates in selected anaerobic enzymes“, Teilprojekt zu SPP 1319: „Biological Transformations of Hydrocarbons in the Absence of Oxygen“
- 2008 - 2011 Sprecher des DFG-Sonderforschungsbereichs 813
- 2007 - 2012 DFG-Projekt „Calculation of zero-field splitting parameters by density functional theory and ab-initio methods“
- 2007 - 2012 DFG-Projekt „Templateigenschaften von Nucleinsäuren und verwandten Systemen“, Teilprojekt zu SFB 624 „Template – Funktionale chemische Schablonen“
- 2007 - 2012 DFG-Projekt „Theoretische Modellierung von Übergangsmetall-vermittelten Templateffekten“, Teilprojekt zu SFB 624
- 2007 - 2011 DFG-Projekt „Mechanistic insights into C-H bond activation in mononuclear non-heme iron enzymes from a combination of experiment and quantum chemistry“
- 2005 - 2007 DFG-Projekt „Dichtefunktional- und Hartree-Fock-basierte Berechnung der Nullfeldaufspaltung in großen Molekülen“, Teilprojekt zu SFB 663 „Molekulare Antwort nach elektronischer Anregung“
- 2002 - 2009 DFG-Projekt „Magnetic Circular Dichroism and Theoretical Studies in Molecular Magnetism“, Teilprojekt zu SPP 1137 „Molekularer Magnetismus“
- 1999 - 2002 DFG-Projekt „Elektronische Struktur und Reaktivität von bakteriellen Metallproteinen – Spektroskopische, kinetische und quantenchemische Studien“

### **Auszeichnungen und verliehene Mitgliedschaften**

- 2023 ICR/DD-Award
- seit 2022 Mitglied der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften
- 2016 Coulson-Dozentur, University of Athens, Georgia, USA
- 2015 Davidson-Dozentur, University of Denton, Texas, USA
- 2014 Kohlenforschung Centennial Lectureship
- seit 2013 Mitglied der Nationalen Akademie der Wissenschaften Leopoldina
- 2012 Jean Perrin Reader des Jahres 2013

2010	Gottfried Wilhelm Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)
2010	McElvain Lecture, University of Wisconsin, Madison
2009	Early Career Award der International Society for Bioinorganic Chemistry
2008	Klung-Wilhelmy-Weberbank Preis
2007	Lise Meitner-Preis des Minerva Supercomputer Centers, Hebrew University, Jerusalem, Israel
2005	Karl Arnold-Preis der Nordrhein-Westfälischen Akademie der Wissenschaften und Künste
2005	Hellmann-Preis der Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie
1999 - 2001	Habilitationsstipendium der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)
1997 - 1999	Postdoktorandenstipendium der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

### Forschungsschwerpunkte

Frank Neese erforscht die Theoretische Chemie, die molekulare Spektroskopie und Metalloenzyme. Er entwickelte mit seinem Team eine Quantenchemie-Software (ORCA), mit der die Elektronenstruktur großer Moleküle berechnet werden kann. Außerdem analysiert er Metalloenzyme, um ihren Katalyse-Mechanismus zu verstehen. Seine Forschung kann zu effizienteren und energiesparenderen Katalysatoren in der Industrie und Energiegewinnung führen.

Frank Neese verbindet die Theoretische Chemie mit der Bioanorganischen Chemie. Er erforscht den Zusammenhang zwischen Molekülstruktur und molekularen Eigenschaften, speziell die Struktur und Reaktionsmechanismen von Metalloenzymen. Um seine Forschungen voranzutreiben, entwickelte er Werkzeuge, mit denen eine schnelle Berechnung von Molekülstrukturen möglich wurde. So hat er mit seiner Arbeitsgruppe eine Software (ORCA) entwickelt, die die Elektronenstruktur großer Moleküle berechnet. In dem Quantenchemie-Programmpaket ORCA laufen aufwendige numerische Simulationsverfahren. Es bildet für viele Forscher die Grundlage, um Experimente und Synthesen zu planen sowie Ergebnisse präzise und effizient zu interpretieren. Neese hat auch Werkzeuge entwickelt, mit denen Moleküleigenschaften vor ihrer Synthese vorausberechnet werden können. Solche Werkzeuge und Verfahren sind wichtige Hilfsmittel für die synthetische Chemie, die neue, maßgeschneiderte Moleküle baut (rationales Design).

Frank Neese möchte mit seiner Forschung auch effizientere und sauberere Prozesse in der Industrie etablieren und Grundlagen für die Energiegewinnung der Zukunft liefern. Die von ihm analysierten Metalloenzyme sind die effizientesten chemischen Katalysatoren, die in der Natur vorkommen. Er hat mit seinem Team ein Detail der fotosynthetischen Wasserspaltung aufgeklärt, die Struktur des Mangan-Kalzium-Komplexes. Hier spaltet ein Bakterium unter Verwendung von Sonnenenergie Wasser und erzeugt so Sauerstoff. Dieser Mechanismus kann Grundlage sein für synthetische

lichtgetriebene Katalysatoren, die Wasser mit umweltfreundlichen, verfügbaren Elementen spalten. Im Moment werden in Katalysatoren dafür seltene Metalle eingesetzt. Die Mechanismen aus der Natur können Vorbild sein für eine „saubere Energie“ und effiziente Energiespeicherung.