



Curriculum Vitae Professor Dr. Walter Thiel



Name: Walter Thiel

Geboren: 7. März 1949

Verstorben: 23. August 2019

Akademischer und beruflicher Werdegang

- seit 2001 Honorarprofessor, Universität Düsseldorf
- seit 1999 Direktor, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
- 1992 - 1999 Professor, Universität Zürich, Schweiz
- 1987 Gastprofessor, University of California at Berkeley, USA
- 1983 - 1992 C3-Professor, Universität Wuppertal
- 1981 Habilitation, Universität Marburg
- 1973 - 1975 Post-Doc, University of Texas at Austin (M.J.S. Dewar), USA
- 1973 Promotion, Universität Marburg (A. Schweig)
- 1966 - 1971 Chemiestudium, Universität Marburg

Projektkoordination, Mitgliedschaft in Verbundprojekten (Auswahl)

- 2006 - 2010 MPG Projekt, Triple-M: Multiscale Materials Modeling
- 2005 - 2013 Volkswagenstiftung: QM / MM Methods for Biomolecular Simulation
- 2005 - 2010 DFG Projekt, SFB 663: Electronically Excited States in Large Molecules
- 2005 - 2009 EU Projekt: Quantitative Spectroscopy for Atmospheric and Astrophysical Research
- 2004 - 2008 Koordinator, DIP Projekt: Asymmetric Catalysis

- 2000 - 2003 EU Projekt: Spectroscopy of Highly Excited Rovibrational States
1998 - 2001 EU Projekt: Quantum Simulations in Industry

Funktionen in wissenschaftlichen Gesellschaften und Gremien (Auswahl)

- seit 2012 Mitglied des Vorstands, Gesellschaft Deutscher Chemiker
seit 2012 Editorial Advisory Board, Accounts of Chemical Research
seit 2012 Editorial Advisory Board, ACS Catalysis
seit 2011 Präsident, World Association of Theoretical and Computational Chemists
2010 Vorsitzender, Gordon Conference on Computational Chemistry
seit 2009 Mitglied des International Advisory Board, State Key Laboratory of Physical Chemistry (PCOSS), Xiamen, China
seit 2008 Associate Editor, WIREs: Computational Molecular Sciences
seit 2006 Mitglied des Kuratoriums, Angewandte Chemie
2006 - 2012 Vorsitzender, BAR-Ausschuss der Max-Planck-Gesellschaft
2006 - 2008 Geschäftsführender Direktor, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
seit 2004 Mitglied des Scientific Advisory Board, Lise-Meitner Minerva Center for Quantum Chemistry, Jerusalem, Haifa, Israel
2004 - 2007 Mitglied, Ständiger Ausschuss der Bunsengesellschaft
2002 - 2008 Section Editor, Encyclopedia of Computational Chemistry
2001 - 2005 Vorsitzender, Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie
2000 - 2006 Mitglied des Lenkungsausschusses, Höchstleistungsrechenzentrum Bayern
2000 - 2008 Fachkollegiat, Deutsche Forschungsgemeinschaft
seit 1998 Advisory Editor, Journal of Computational Chemistry
seit 1997 Advisory Editor, Theoretical Chemistry Accounts
1986 - 1992 Mitglied des Vorstands, Institut für Angewandte Informatik, Wuppertal

Auszeichnungen und verliehene Mitgliedschaften (Auswahl)

- 2012 Liebig-Denk Münze, Gesellschaft Deutscher Chemiker
2008 Mitglied, Nordrhein-Westfälische Akademie der Wissenschaften
2007 Mitglied, International Academy of Quantum Molecular Sciences

2007	Mitglied, Deutsche Akademie der Naturforscher Leopoldina
2002	Schrödinger-Medaille, World Association of Theoretical Chemists
1988	Förderpreis, Alfried-Krupp Stiftung
1982	Heisenbergstipendium, Deutsche Forschungsgemeinschaft
1975	Liebigstipendium, Verband der Chemischen Industrie

Freitext über die persönlichen Arbeitsschwerpunkte

Unser zentrales Forschungsgebiet ist die Theoretische Chemie und insbesondere die Quantenchemie. Wir befassen uns mit der Entwicklung von theoretischen Methoden, hauptsächlich für große Moleküle, und wir tragen durch theoretische Rechnungen an konkreten chemischen Problemen zu deren Lösung bei, meist in enger Kooperation mit experimentellen Partnern. Unsere Aktivitäten decken ein breites methodisches Spektrum ab, einschließlich ab-initio-Methoden, Dichtefunktionaltheorie, semiempirische Verfahren und kombinierte quantenmechanische/molekülmechanische Methoden.

Anwendungen umfassen die Vibrations-Rotations-Spektroskopie kleiner Moleküle, katalytische Reaktionen von Übergangsmetallverbindungen, die Dynamik elektronisch angeregter Zustände und enzymatische Reaktionen. Sie reichen somit von hochgenauen Rechnungen an kleinen Molekülen bis zur Modellierung sehr komplexer Systeme mit Tausenden von Atomen.