

JOACHIM SAUER ZUM 65. GEBURTSTAG



Foto: Humboldt-Stiftung/Peter Himsel

An der Bunsentagung 2013 in Karlsruhe hat die Mitgliederversammlung der Bunsen-Gesellschaft einstimmig Joachim Sauer zum Ersten Vorsitzenden der DBG für die Jahre 2015 und 2016 gewählt, so dass er nach der neuen Satzung gegenwärtig im Jahre 2014 schon das Amt des 2. Vorsitzenden ausübt. In diesem Jahr nun feiert unser 2. Vorsitzender auch seinen 65. Geburtstag, was uns Gelegenheit gibt, ihn als einen international herausragenden theoretischen Chemiker zu würdigen, der bahnbrechende Beiträge zum Verständnis der Struktur und Reaktivität von Zeolithen und anderen festen Katalysatoren geleistet hat.

Joachim Sauer wurde am 19. April 1949 im brandenburgischen Hosena in der Lausitz geboren. Nach dem Abitur und einer begleitenden Berufsausbildung zum Chemielaboranten im Braunkohlenkombinat Lauchhammer begann er 1967 mit dem Studium der Chemie an der Humboldt-Universität

zu Berlin. Er schloss das Studium 1972 als Diplom-Chemiker ab und war anschließend von 1973 bis 1976 als wissenschaftlicher Assistent an der Humboldt-Universität tätig. Im Jahre 1972 erhielt er den Johann-Gottlieb-Fichte-Preis der Humboldt-Universität und schon mit 25 Jahren promovierte er 1974 mit dem Prädikat „summa cum laude“ zum „Doktor eines Wissenschaftszweiges“ (Dr. rer. nat.) mit einer Arbeit über „Konsequenzen des Koopmanschen Theorems in den Restricted Hartree Fock Methoden für open-shell-Systeme“. Von 1977 bis zur Wiedervereinigung arbeitete er zuerst als wissenschaftlicher Assistent, später als Arbeitsgruppenleiter und zuletzt als Abteilungsleiter am Zentralinstitut für physikalische Chemie der Akademie der Wissenschaften der DDR. Zunächst widmete er sich semiempirischen Studien organischer Moleküle. Nach mehreren Forschungsaufenthalten an der Universität Toruń in Polen und bei Rudolf Zahradník am Heyrovský-Institut in Prag befasste er sich zunehmend mit

quantenchemischen Untersuchungen von Zeolith- und Siliciumdioxid-Oberflächen. Seine besonderen wissenschaftlichen Verdienste wurden 1982 mit dem Friedrich-Wöhler-Preis der Chemischen Gesellschaft der DDR honoriert. Im Jahre 1985 leistet Joachim Sauer mit seiner Habilitationsschrift "Quantenchemische Untersuchungen aktiver Zentren und adsorptiver Wechselwirkungen von Siliciumdioxid- und Zeolithoberflächen" grundlegende Beiträge zum Verständnis der Struktur und Eigenschaften der katalytisch aktiven Zentren in Zeolithen. Nach seiner Habilitation (Dr. sc. nat. 1985) beschäftigte er sich weiterhin mit quantenchemischen Untersuchungen der Struktur und Reaktivität fester Katalysatoren. Sein Übersichtartikel über molekulare Modelle in quantenchemischen Studien von Festkörpern und deren Oberflächen, den er 1989 in *Chemical Reviews* veröffentlicht hat, gehört bis heute zu den wichtigsten Werken zu diesem Thema und den wahren Perlen auf dem Gesamtgebiet. In den Jahren 1988 und 1989 war Joachim Sauer für dreimonatige Forschungsaufenthalte bei Reinhart Ahlrichs an der Universität Karlsruhe eingeladen und erlebte dort auch den Tag des Mauerfalls. Direkt nach der deutschen Wiedervereinigung war er für ein Jahr bei BIOSYM Technologies (später Molecular Simulations, Inc. und Accelrys) in San Diego (USA) als technischer Direktor für Katalyse und anschließend bis 2002 neben seiner Aktivität in Berlin als Berater tätig. Zwischen 1992 und 1996 leitete er die Arbeitsgruppe „Quantenchemie“ der Max-Planck-Gesellschaft, die der Humboldt-Universität angegliedert war.

Im Jahre 1993 wurde Joachim Sauer als C4-Professor für Physikalische und Theoretische Chemie an seiner Alma Mater, der Humboldt-Universität zu Berlin, berufen und etablierte dort eine dynamische Forschungsgruppe. Er setzte seine erfolgreiche Forschung auf dem Gebiet der Struktur, Eigenschaften und katalytischen Funktionen fester Katalysatoren fort. Die Merkmale seiner Forschung waren stets höchste Qualität und grundlegende Bedeutung - zwei Eigenschaften, die besonders schwierig in einem solch komplexen Bereich wie der quantenmechanischen Untersuchung katalytischer Prozesse zu erreichen sind. Ihm ist es auf eine beeindruckende Weise gelungen, auf diesem Gebiet, das von widersprüchlichen und bedeutungslosen Forschungsergebnissen geplagt war und teilweise immer noch ist, richtungweisende Beiträge zu leisten.

Ein besonderes Interesse von Joachim Sauer gilt den katalytischen Prozessen in Zeolithen, die zu den wichtigsten Katalysatoren der chemischen Industrie gehören. Er gehört zu den Vordenkern, welche die Anwendungen von quantenchemischen Methoden zur Untersuchung der Struktur und Eigenschaften von katalytisch aktiven Zentren in Zeolithen sowie deren Wechselwirkung mit kleinen Molekülen etabliert haben. Die Frage, wie die unterschiedliche Struktur des Gerüsts und die Lage der aktiven Zentren in Zeolithen ihre spektroskopischen Eigenschaften und katalytische Aktivität beeinflussen, war in den neunziger Jahren noch weitgehend ungelöst. Bedingt durch die begrenzten Rechenkapazitäten dieser Zeit, die Größe der Elementarzelle sowie die große Zahl von Atomen waren quantenchemische Simulationen von Elementarreaktionen in realistischen, periodischen Modellen von Zeolithen damals eine Rarität. Die einfachen Clustermodelle, die den

Festkörper durch ein Modell mit wenigen Atomen ersetzen, waren neben den Fehlern in der Elektronenstruktur nicht in der Lage zwischen verschiedenen Zeolithgerüsten und zwischen verschiedenen kristallografischen Positionen in einem Zeolithtyp zu unterscheiden. Joachim Sauer ist ein Pionier in der Entwicklung und Anwendung von „quantenmechanisch-molekularmechanischen“ QM/MM-Hybridmethoden, die es ohne wesentlichen Verlust an Genauigkeit erlauben, den Aufwand der quantenchemischen Rechnungen signifikant zu reduzieren und gleichzeitig die vollständige (periodische) Struktur eines Materials zu berücksichtigen. Dazu wurde in seiner Gruppe ein Programm entwickelt, das bis vor kurzem das einzige war, das periodische Randbedingungen in Kombination mit QM/MM-Verfahren verwendete. Mit dessen Hilfe ist es ihm beispielsweise gelungen die Eigenschaften der katalytisch aktiven Zentren, wie deren Azidität oder die Protonmobilität in Zeolithen mit verschiedener Struktur und chemischer Zusammensetzung zu vergleichen. Das Resultat war die Kritik der Anwendbarkeit von Parametern wie etwa O-H-Schwingungsfrequenzen oder ^1H -chemischen Verschiebungen als Maß für die Reaktivität der Zeolithkatalysatoren. Entscheidend für den Erfolg der QM/MM-Hybridmethoden waren Schalenmodell-Ionenpaarpotentiale, die in seiner Arbeitsgruppe durch Anpassung an Ergebnisse der Dichtefunktionaltheorie (DFT) bestimmt wurden. Sein Interesse an Zeolithen war auch die treibende Kraft bei der Entwicklung der MP2:DFT-Hybridmethode. Dabei wird das für die Katalyse entscheidende aktive Zentrum mittels Möller-Plesset-Störungstheorie (MP2) beschrieben. Für den restlichen Festkörper hingegen erfolgt die Berechnung mit der weniger genauen, jedoch auch weniger zeitaufwendigen DFT-Methode. Dies ermöglichte eine hochgenaue Beschreibung der Umwandlungsprozesse von Kohlenwasserstoffen in Zeolithen, insbesondere zur Ermittlung der Stabilität von Carbeniumionen als vermeintliche Intermediate dieser Prozesse und zur Untersuchung der einzigartigen Gestaltselektivität von Zeolithkatalysatoren.

Im Jahre 1999 initiierte Joachim Sauer gemeinsam mit weiteren Wissenschaftlern aus den Berliner Universitäten und Forschungseinrichtungen den Sonderforschungsbereich 546 „Struktur, Dynamik und Reaktivität von Übergangsmetalloxid-Aggregaten“ dessen Sprecher er von Beginn an war. Die Erfolge dieses Sonderforschungsbereichs waren entscheidend für den im Jahr 2007 erfolgreich beantragten Exzellenzcluster „Unifying Concepts in Catalysis“ – UniCat – zu dessen Gründungsmitgliedern Joachim Sauer gehörte. Gegenwärtig umfasst UniCat über 50 Arbeitsgruppen aus der Chemie, Physik, Biologie und den Ingenieurwissenschaften, die an der Erforschung und Entwicklung von Katalysatoren arbeiten. Joachim Sauer ist auch der Mittragsteller und Vizesprecher des neu eingerichteten Sonderforschungsbereichs 1109 „Molekulare Einblicke in Metalloxid/Wasser Systeme: Strukturelle Evolution, Grenzflächen und Auflösung“.

Das besondere Kennzeichen der Forschung von Joachim Sauer innerhalb dieser Projekte ist die enge Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment in der Aufklärung der Beziehungen, die zwischen den Strukturen, Eigenschaften und Reaktivität verschiedener Metalloxid-Aggregate bestehen, wie Gasphasencluster und ultradünne Schichten. Diese sogenannten

niederdimensionalen Materialien werden zum Beispiel als Modellsysteme für die Untersuchung elementarer Katalyseschritte eingesetzt. Ihre Untersuchung ist häufig eine sehr komplexe Aufgabe, da einerseits die strukturelle Information experimentell schwer zugänglich ist und zum anderen die Genauigkeit der anwendbaren theoretischen Methoden oft sehr begrenzt ist. Die Arbeiten von Joachim Sauer haben eindrucksvoll gezeigt, dass oft nur eine enge Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment die erfolgreiche Erforschung dieser Systeme ermöglicht. Zu den besonderen Erfolgen zählen beispielsweise die Strukturbestimmung und Untersuchung der Reaktivität zahlreicher Magnesium-, Aluminium-, Vanadium- und Ceriumoxid-Cluster. Durch Experimente in der Gasphase werden häufig Rückschlüsse auf die Eigenschaften von Metalloxidclustern gezogen, welche auf einem Substrat abgeschieden wurden. Jedoch wird in solchen Experimenten mit einer geladenen Spezies gearbeitet. In der Arbeitsgruppe von Joachim Sauer wurden in diesem Zusammenhang die Effekte von Struktur, Größe und Ladungszustand der Cluster auf deren Reaktivität untersucht und hierbei erhebliche Unterschiede festgestellt, aufgrund der nicht-abgeschlossenen Elektronenschalen und des geladenen Charakters der Cluster. Ultradünne, zweidimensionale Siliziumdioxidschichten konnten zwar experimentell erzeugt und charakterisiert werden, aber nur durch die Berechnungen der Gruppe um Joachim Sauer konnte ein überzeugendes Strukturmodell geliefert und etabliert werden. Diese Arbeiten haben schließlich zur Entdeckung eines metallgestützten, glasartigen, ultradünnen Silikafilms – des „dünnsten Glases der Welt“ – und wohldefinierten, zweidimensionalen Aluminosilicatfilmen – den „dünnsten Zeolithen der Welt“ – geführt.

Die beeindruckenden wissenschaftlichen Erfolge von Joachim Sauer sind in über 300 wissenschaftlichen Publikationen dokumentiert, ergänzt durch zahlreiche eingeladene Vorträge weltweit. Für sein wissenschaftliches Werk erhielt er viele Preise und Ehrungen. Schon 1991 erhielt er als einer der ersten Chemiker aus den neuen Bundesländern das Dozentenstipendium des Fonds der Chemischen Industrie sowie auch den Chemiepreis der Akademie der Wissenschaften zu Göttingen. Im Jahr 1998 folgte der Alexander-von-Humboldt-Preis des Belgischen Nationalfonds. Im Jahre 2009 erhielt er den angesehenen „Kolos Medal and Lecture Award“ der Universität Warschau und der Polnischen Chemischen Gesellschaft sowie im Jahre 2010 die Liebig-Denkmedaille der Gesellschaft Deutscher Chemiker. Im Jahr 2013 wurde ihm vom University College London in Anerkennung seiner Leistungen die Ehrendoktorwürde verliehen und im selben Jahr war er Visiting Miller Research Professor in Berkeley. Joachim Sauer ist Mitglied mehrerer Akademien – seit 1995 der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften, während mehrerer Jahre dort auch Sekretar, seit 2007 Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina und seit 2009 der Academia Europaea. Seit 2006 ist er auswärtiges wissenschaftliches Mitglied des Fritz-Haber-Instituts der Max-Planck-Gesellschaft. Seine akademische Tätigkeit zeichnet sich auch durch eine Vielzahl von Aktivitäten als Mitglied zahlreicher Gremien, Kuratorien und wissenschaftlicher Beiräte aus, unter anderem bei der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, dem Fonds der Chemischen Industrie und dem Alfred-Krupp-Wissenschaftskolleg Greifswald. Als besondere Verpflichtungen hat er die Gutachtertätigkeiten für

den Europäischen Forschungsrat (European Research Council, ERC) und die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) wahrgenommen und gehörte acht Jahre als gewählter Gutachter dem Fachforum Chemie an. Er gehört auch dem Redaktionsbeirat von „ChemCatChem“ und dem Editorial Board von „Catalysis Letters“ sowie „Topics in Catalysis“ an. Seit 1991 ist er Mitglied der Bunsen-Gesellschaft, war von 1992 bis 1993 Mitglied der Unterrichtskommission sowie von 1996 bis 2000 Mitglied des Ständigen Ausschusses der DBG. In all diesen Funktionen hat er der Gemeinschaft der Wissenschaft stets nachhaltig und in herausragender Weise gedient.

Ein Bild von Joachim Sauer wäre unvollständig ohne einige Federstriche zu seinem Leben jenseits der Wissenschaft, das eigentlich privat, in seinem Fall umständehalber teils nur „halbprivat“ ist. Sehr jung hat er mit 20 Jahren eine Schulfreundin geheiratet, mit der er zwei Söhne Daniel und Adrian hat, aber jung wird diese Ehe auch geschieden. Seit Jahrzehnten verbindet ihn in der Folge eine wissenschaftliche und private Partnerschaft mit Angela Merkel, einer um 5 Jahre jüngeren Physikerin und Quantenchemikerin, die er kurz nach den Weihnachtsferien am Tag vor Silvester 1998 heiratet. Es ist für beide die zweite Ehe. Wer die beiden aus der Zeit vor 1989 kannte, war nicht nur durch ihre herausragenden wissenschaftlichen Leistungen in einem sehr schwierigen Umfeld beeindruckt, sondern auch durch ihr offenes Wesen und ihre aufrechte Art, kritisch und geradeheraus. Diese Eigenschaft ist ihm auch bis heute in einem ganz anderen Umfeld verblieben. Joachim Sauer gehörte in der wissenschaftlich wie politisch schwierigen Zeit in der DDR zu der Minderheit aktiver und international sichtbarer Wissenschaftler, die nicht SED-Mitglied waren, was ihm manche Nachteile eintrug – erst 1988, ein Jahr vor dem Mauerfall, durfte er erstmals in den Westen reisen. Er hat es auch in den schwierigsten Zeiten des SED-Regimes verstanden, seine geistige Unabhängigkeit zu bewahren. Joachim hat diese Phase seines Lebens selbst einmal so beschrieben: „Die Kunst war es, morgens noch in den Spiegel schauen zu können“. Er konnte das, was ihm den Sprung in die freiheitlich demokratisch organisierte Welt ebnet hat. Auch als „Ehemann der Kanzlerin“ nimmt er seine Aufgaben sehr zurückhaltend und schnörkellos wahr. Er bleibt in erster Linie Wissenschaftler, auch wenn er gelegentliche Auftritte gemeinsam mit Angela Merkel hat, wie etwa den jährlichen Besuch bei den Bayreuther Festspielen, was die Musik als eine seiner Liebhabereien aufzeigt. Erholung finden Joachim und Angela beim Langlaufskifahren in den Winterferien, wohl fast jedes Jahr in Pontresina, beim Wandern im Sommer in Südtirol oder das ganze Jahr über in der ländlichen Umgebung ihres kleinen Hauses in der Uckermark. Joachim Sauer's sportliche Statur beeindruckt nicht nur seine weniger Nahrungsdisziplin zeigenden Kollegen.

So hoffen wir, dass ihm noch viele erfolgreiche und fruchtbare Jahre der Tätigkeit in der Wissenschaft bei guter Gesundheit verbleiben, als Lehrer, Gesprächspartner, Kollege und Freund, und wünschen ihm im Namen der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie alles Gute zum 65. Geburtstag – ad multos annos!

Marek Sierka
Martin Quack