



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

## Pressedienst Chemie

06/22

5. April 2022

### Pionierin der Quantenchemie

#### Erich-Hückel-Preis geht an Sigrid Peyerimhoff

**Die Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) zeichnet Professorin Dr. Sigrid Peyerimhoff mit dem Erich-Hückel-Preis aus. Die Wissenschaftlerin erhält die mit 7500 Euro dotierte Auszeichnung für die grundlegende Entwicklung quantenchemischer Verfahren zur Berechnung molekularer Eigenschaften, zur Aufklärung chemischer Reaktionen und zur Analyse von Molekülspektren. Die Preisverleihung erfolgt im Rahmen des 58. Symposium on Theoretical Chemistry, das vom 18. bis 22. September 2022 in Heidelberg stattfindet.**

GDCh-Öffentlichkeitsarbeit  
Postfach 90 04 40  
D-60444 Frankfurt/Main  
Tel: 069/ 7917 493  
Fax: 069/ 79171493  
E-Mail: [pr@gdch.de](mailto:pr@gdch.de)

Sigrid Peyerimhoff zählt zu den wichtigsten und verdienstvollsten theoretischen Chemikerinnen und Chemikern und leistete quantenchemische Pionierarbeit, die nicht zuletzt zur weltweiten Spitzenpositionierung der deutschen Theoretischen Chemie führte. Neben der grundlegenden Entwicklung quantenchemischer Verfahren würdigt die GDCh insbesondere ihre Entwicklung des Multi-Referenz-Ansatzes im Konfigurationswechselwirkungsverfahren (MRD-CI) mit Selektion und Energieextrapolation unter Einschluss der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Dank dieses Verfahrens wurden wegweisende Untersuchungen von Molekülen und Ionen in der Atmosphärenchemie, im Bereich der Elektronen-Molekülstreuung und der Berechnung der Stabilität von atomaren und molekularen Clustern möglich.

Das MRDI-CI-Verfahren wurde zunächst auf sehr kleine Modell-Systeme angewandt. Als „Theoretisches Spektrometer“ übertraf es die experimentellen Genauigkeiten und trug damit zur Anerkennung und Etablierung der Theoretischen Chemie als unverzichtbares grundlegendes Fach der Chemie entscheidend bei.

Diesen Text können Sie im Internet abrufen unter <http://www.gdch.de>

Sigrid Peyerimhoff, geboren 1937 in Rottweil, studierte nach ihrem Abitur im Jahr 1956 Physik an der Justus-Liebig-Universität Gießen und schloss das Studium 1961 mit dem Diplom ab. Anschließend promovierte sie in Gießen in Theoretischer Physik zu quantenchemischen Berechnungen des Fluorwasserstoff-Moleküls. Nach Forschungsaufenthalten in den USA, unter anderem an der University of Chicago, an der University of Washington und an der Princeton University, wurde sie 1967 an der Universität Gießen in Theoretischer Physik habilitiert. Ab 1970 war sie Professorin für Theoretische Chemie an der Universität Mainz und ab 1972 an der Universität Bonn, wo sie das Institut für Physikalische und Theoretische Chemie leitete. Im Jahr 2002 wurde sie emeritiert.

Sigrid Peyerimhoff veröffentlichte insgesamt etwa 500 Studien in wissenschaftlichen Zeitschriften und Sammelbänden. Sie erhielt zahlreiche renommierte Preise und Auszeichnungen, wie unter anderem den Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft (1988), die Cothenius-Medaille der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina (2007), das Große Bundesverdienstkreuz (2008) und die Alexander-von-Humboldt-Medaille der Gesellschaft Deutscher Naturforscher und Ärzte (2018).

Neben ihrer akademischen Tätigkeit übernahm Peyerimhoff wichtige Aufgaben und Funktionen in wissenschaftlichen Gesellschaften und Gremien. So war sie 1987 Gründungsmitglied der Akademie der Wissenschaften zu Berlin und von 1990 bis 1996 Vizpräsidentin der Deutschen Forschungsgemeinschaft. 1999 wurde sie zum Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina ernannt. Peyerimhoff ist außerdem Mitglied der Deutschen Akademie der Technikwissenschaften, der Academia Europaea und der Nordrhein-Westfälischen Akademie der Wissenschaften und der Künste. Von 2006 bis 2009 war sie Präsidentin der International Academy of Quantum Molecular Science.

Seit 1973 ist Sigrid Peyerimhoff GDCh-Mitglied. Zu ihren Ehren zeichnet die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie seit 2021 herausragende Doktorarbeiten auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie mit dem Sigrid Peyerimhoff-Promotionspreis aus.

Weitere Informationen zur Preisträgerin finden sich in der aktuellen Ausgabe der GDCh-Mitgliederzeitschrift *Nachrichten aus der Chemie* im Beitrag [„Ausgezeichnet: Die Hückel-Preisträger Sigrid Peyerimhoff und Gernot Frenking“](#).

Die Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) gehört mit rund 30 000 Mitgliedern zu den größten chemiewissenschaftlichen Gesellschaften weltweit. Neben 27 Fachgruppen sind unter ihrem Dach sieben Arbeitsgemeinschaften angesiedelt, darunter die AG Theoretische Chemie, die gemeinsam von der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für physikalische Chemie und der Deutschen Physikalischen Gesellschaft getragen wird. Die AG Theoretische Chemie veranstaltet jährliche Symposien für Theoretische Chemie.

**Bildmaterial zum Download:**



Professorin Dr. Sigrid Peyerimhoff (Foto: privat)