

Sigrid D. Peyerimhoff

* 12. 1. 1937 Rottweil (Württemberg)

Die Chemikerin Sigrid D. Peyerimhoff leistete wichtige Beiträge zur Weiterentwicklung der theoretischen Chemie und der Quantenchemie. Von 1991 bis 1996 war sie Mitglied des Vorstandsrats der GDNÄ.

Sigrid D. Peyerimhoff studierte zwischen 1956 und 1963 Physik an der Universität Gießen. Ihre Doktorarbeit in theoretischer Physik beschäftigte sich mit quantenchemischen Valence-Bond-Rechnungen am HF-Molekül (Fluorwasserstoff). Anschließend folgten Postdoktorandenjahre in Chicago – bei R. S. Mulliken und C. C. J. Roothaan, in Seattle, Princeton und an der Michigan State University. 1967 habilitierte sie sich in Gießen in theoretischer Physik. Nach weiteren Gastaufenthalten in den USA wurde sie 1970 wissenschaftliche Rätin und Professorin in Mainz und zwei Jahre später Professorin für Theoretische Chemie an der Universität Bonn. Über lange Zeit war sie die einzige Frau in Deutschland, die einen solchen Lehrstuhl innehatte. Außerdem war sie 1990-1996 Vizepräsidentin der Deutschen Forschungsgemeinschaft und wurde, nach ihrer Emeritierung 2002, vier Jahre später die erste deutsche Präsidentin der *International Academy of Quantum Molecular Science*.

In ihrer Forschungsarbeit beschäftigte sich Peyerimhoff mit der Entwicklung quantenchemischer Verfahren hoher Genauigkeit und deren Anwendung auf Probleme in der Chemie und Molekülphysik. Das MRD-CI-Verfahren ermöglicht dabei die zuverlässige Beschreibung der Elektronenstruktur von Molekülen. Es wurden nun auch die angeregten Zustände molekularer Systeme betrachtet, wodurch die Interpretation von Spektren im ultravioletten bis sichtbaren Bereich auf Ab-initio-Basis möglich wurde. Die Erweiterung der Methoden durch die Berücksichtigung oft vernachlässigter Wechselwirkungen wie z. B. Spin-Bahn-Kopplung und Hyperfeinwechselwirkung eröffnete neue Einsichten in Spektroskopie und Photochemie. Speziell die Untersuchung photochemischer Molekülreaktionen in der Atmosphäre, insbesondere auch des Ozons, führten zu einem besseren Verständnis umweltrelevanter Prozesse in der Erdatmosphäre.



Literatur

C. M. Marian: Theoretical Spectroscopy and its Impact on Experiment. In Honour of Sigrid D. Peyerimhoff. Amsterdam 2008.