

July 23, 1963

Miss Sigrid Peyerimhoff
Institut für Theoretische Physik
der Justus Liebig-Universität
Giessen, Germany

Dear Miss Peyerimhoff,

Thank you for your letter of July 12. I have discussed it with Professor Roothaan and we have agreed that we can find a place for you in the Laboratory. An official invitation from Professor Mark G. Inghram, Chairman of the Department of Physics, will be sent to you within a short time.

At what time would you expect to come? We would recommend that you get a room at the International House, and have asked that they send you the necessary application forms. They should also reach you very soon. I hope that this arrangement will meet with your approval.

With best wishes,

Sincerely,

RSM Mulliken
Robert S. Mulliken

RSM:asl

cc: Professor Mark G. Inghram
Professor G. O. J. Roothaan



Vorbemerkung 11

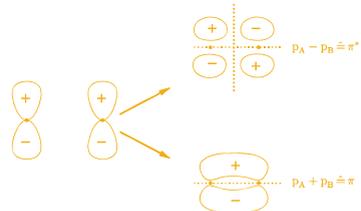
1 Von der Kindheit in Schwaben zum Studium nach Gießen 13

- 1.1 Vorfahren und Kindheit 15
- 1.2 Schulanfang und Kriegswirren 17
- 1.3 Gymnasium und Interesse an Naturwissenschaften 20
- 1.4 Studium der Physik 22
- 1.5 Wege zur Molekülphysik 26



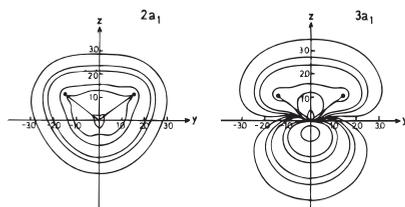
2 Als Postdoc auf dem Weg zur theoretischen Chemie 29

- 2.1 Chicago und Seattle: Hartree-Fock-Rechnungen mit Slater-Funktionen für zweiatomige Moleküle 31
- 2.2 Princeton: Hartree-Fock-Rechnungen mit Gauß-Lobe-Funktionen für mehratomige Moleküle 38



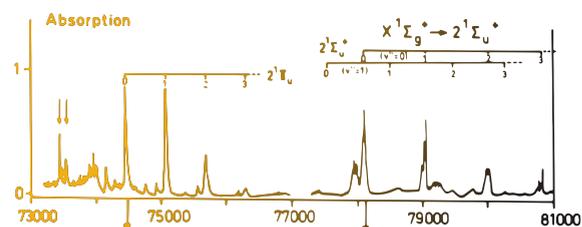
3 Habilitation und Professur 41

- 3.1 Habilitation und Aufbau einer Arbeitsgruppe in Gießen 43
- 3.2 Mainz: Rechnungen zur Interpretation der MO-Theorie, Woodward-Hoffmann-Regeln 44



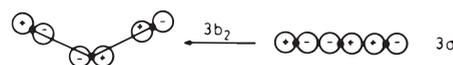
4 Elektronenstruktur, Molekülgeometrie und die Walsh-Regeln 47

- 4.1 AH₂- und AH₃-Moleküle 50
- 4.2 ABA- und ABAH_n-Moleküle 53



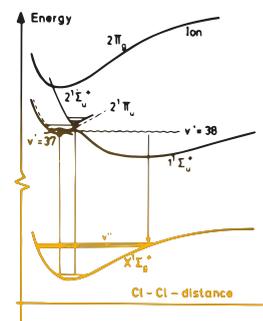
5 Aufbauarbeit in Bonn 57

Zu der
ÖFFENTLICHEN ANTRITTSVORLESUNG
im Rahmen des „Ges. dtsch. Chemiker“-Colloquiums
über
„Geometrie von Molekülen in der Sicht der M.O.-Theorie“
die
Frau Prof. Dr. Sigrid Peyerimhoff
anlässlich ihrer Berufung auf den Lehrstuhl für Theoretische Chemie
in die Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät
der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität zu Bonn
am Dienstag, dem 31. Oktober 1972 um 17 Uhr c.t.
im Hörsaal des Instituts für Physikalische Chemie, Bonn, Wegelerstr. 12
halten wir, lade ich Rektor und Senat, die Hochschullehrer, die wissenschaftlichen Mitarbeiter, die Studenten und alle Freunde und Förderer der Universität ein.
ROLF LEIS
Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät



6 Das Multi-Konfigurationswechselwirkungsverfahren MRD-CI 69

- 6.1 Multi-Referenz-MRD-CI-Methode 71
- 6.2 Molekülspektroskopie und Rydberg-Zustände 75
- 6.3 Erweiterung der Werkzeuge 80



7 Anerkennung der Arbeiten und weitere Aufgaben 85

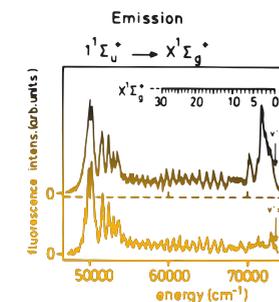
- 7.1 Gottfried-Wilhelm-Leibniz-Preis 89
- 7.2 SFB „Wechselwirkungen in Molekülen“ 91
- 7.3 Ausflüge der Arbeitsgruppe 93



- 7.4 Aufgaben in der Wissenschaftspolitik – DFG-Vizepräsidentin 96
- 7.5 Evaluierung und Beratung in der Wissenschaft 97
- 7.6 Mitgliedschaft in Akademien, IAQMS-Präsidentin 101

8 Emeritierung und den Ruhestand im Blick 105

- 8.1 NATO-Projekt 108
- 8.2 SFB „Template, vom Design chemischer Schablonen zur Reaktionssteuerung“ 110
- 8.3 XI. International Congress on Quantum Chemistry 111
- 8.4 Im Ruhestand 114



Anhang 119

- Vita 121
- Chemistree 122
- Handschriften 125
- Dokumente 131
- Interview 1974 132
- Faszination Quantenchemie, 1989 142
- History of QC in Germany, 2002 150
- Publikationen 174
- Links 196
- Bildquellen 199
- Personen 200

