

## Pressemitteilung

Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

Johannes Seiler

24.01.2013

<http://idw-online.de/de/news516297>

Personalia, Wettbewerbe / Auszeichnungen  
Chemie  
überregional



## Hohe Auszeichnung für Theoretischen Chemiker

**Dr. Stefan Grimme, Professor für Theoretische Chemie an der Universität Bonn, erhält für seine Arbeiten auf dem Gebiet der Quantenchemie für große Moleküle die Schrödinger Medaille 2013. Die „World Association of Theoretical and Computational Chemists“ (WATOC) übergibt den Preis auf dem nächsten internationalen Kongress der Vereinigung im Jahr 2014 in Santiago de Chile.**

In seinen Arbeiten beschäftigt sich Grimme mit der Entwicklung und Anwendungen von theoretischen Modellen und Computer-Programmen. Sie können die räumliche Struktur von Molekülen, deren Bindungsverhältnisse und die Verteilung der Elektronen genau berechnen. „Aufgrund der Komplexität der zugrunde liegenden mathematischen Gleichungen ist man hier besonders bei großen - zum Beispiel biologisch wichtigen Molekülen - auf geschickte numerische Näherungsverfahren angewiesen, um den notwendigen Rechenaufwand in Grenzen zu halten“, sagt Prof. Grimme.

Der Forscher hat auf diesem Gebiet in den vergangenen zehn Jahren wesentliche Fortschritte erzielt, die in Standard-Computerprogrammen umgesetzt wurden und mittlerweile weltweit Chemikern bei der Analyse chemischer Reaktionen helfen. „Die theoretischen Methoden erlauben routinemäßig die Berechnung einer Vielzahl von Stoffeigenschaften und ermöglichen ressourcen-schonend die Entwicklung neuartiger und verbesserter Substanzen – etwa pharmakologisch und medizinisch relevante Moleküle“, erläutert der Wissenschaftler.

Die Medaille ist nach dem österreichischen Physiker und Nobelpreisträger Erwin Schrödinger als Mitbegründer der Quantenmechanik benannt. Die WATOC-Auszeichnung wird jährlich an einen theoretischen oder auf Computermodellierung spezialisierten Chemiker verliehen. WATOC-Mitglieder können Vorschläge für Kandidaten einreichen. In Form einer elektronischen Umfrage wird dann der Preisträger ermittelt.

Kontakt:

Prof. Dr. Stefan Grimme  
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie  
Mulliken Center for Theoretical Chemistry  
Tel. 0228/732351  
E-Mail: [grimme@thch.uni-bonn.de](mailto:grimme@thch.uni-bonn.de)



Prof. Dr. Stefan Grimme vergleicht am Computer ein berechnetes mit einem gemessenen Spektrum - der "Fingerabdruck" des Moleküls.

(c) Foto: Jens Meikelburger/Uni Bonn