

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/243868620>

# Pionier der modernen Quantenchemie: Hans Hellmann

Article in *Chemie in unserer Zeit* · December 2004

DOI: 10.1002/ciuz.200400325

CITATIONS

0

READS

228

5 authors, including:



**Wolfgang Ertmer**

Leibniz Universität Hannover

439 PUBLICATIONS 12,518 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)



**Manfred Heinemann**

Leibniz Universität Hannover

55 PUBLICATIONS 14 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)



**W H Eugen Schwarz**

Universität Siegen

255 PUBLICATIONS 6,336 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)

Some of the authors of this publication are also working on these related projects:



Magnesium Optical Lattice Clock [View project](#)



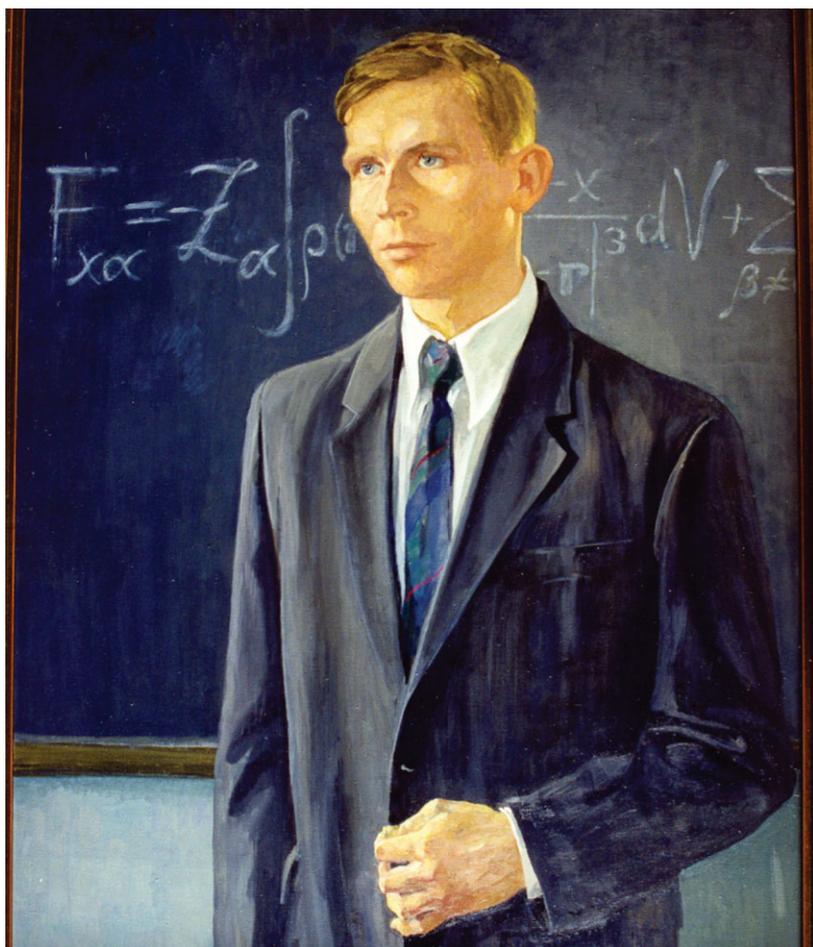
Parametric Amplification in Spinor Bose-Einstein condensates [View project](#)

Hans Hellmann

# Pionier der modernen Quantenchemie

KARL JUG | WOLFGANG ERTMER | JOACHIM HEIDBERG | MANFRED HEINEMANN | W. H. EUGEN SCHWARZ

*Der Name Hückel ist heute jedem Chemiker geläufig, dank der Hückel-Methode und der  $(4n+2)$ -Elektronenregel für Aromaten. Weniger kennen die Chemiker das Hellmann-Feynman-Theorem oder gar die Person Hans Hellmanns, der zeitgleich mit Erich Hückel in den dreißiger Jahren bahnbrechende Arbeiten in der sich damals gerade entwickelnden Quantenchemie publizierte. Es war ihm aber nur eine kurze Zeit vergönnt, ein wissenschaftliches Lebenswerk aufzubauen.*



## Stationen eines kurzen, bewegten Lebens

Hans Hellmann wurde am 14. Oktober 1903 in Wilhelmshaven geboren. Sein Vater kam noch während seiner Grundschulzeit bei einem Verkehrsunfall zu Tode. Nach dem Abitur im Jahre 1922 begann Hellmann im Wintersemester sofort mit dem Studium der Elektrotechnik an der TH Stuttgart. Aber schon im folgenden Sommersemester wechselte er zur Physik, durchaus mit Interessen für die Chemie. Im Sommer darauf studierte er in Kiel und hörte Vorlesungen bei Prof. Kossel, wahrscheinlich über die elektronische Theorie der chemischen Valenz. Daneben arbeitete er als studentische Hilfskraft experimentell über wässrige Salzlösungen. Es folgten weitere Semester in Stuttgart, seine Lehrer waren u.a. die Professoren Ewald, Regener und Fues. Nach einer kurzen Vorbereitungszeit bei Otto Hahn und Lise Meitner in Berlin diplomierte Hellmann 1927 in Stuttgart mit der Darstellung radioaktiver Präparate. Und schon 1929 promovierte er dort bei dem Experimentalphysiker Regener zum Dr.-Ing. mit einer Dissertation „Über das Auftreten von Ionen beim Zerfall von Ozon und die Ionisation der Stratosphäre“.

Im gastfreundlichen Haus der Regeners lernte er seine spätere Frau Viktoria Bernstein kennen, eine entfernte Verwandte von Frau Regener. Beide Frauen entstammten ukrainischen jüdischen Familien. Die Heirat fand kurz vor seiner Promotion statt.

1929 wechselte der Theoretische Physiker Fues von Stuttgart an die Technische Hochschule Hannover. Er bot Hellmann eine Assistentenstelle an, die dieser noch im gleichen Jahr annahm. Die damalige Zeit war geprägt von den aufregenden Erfolgen der Quantenmechanik in statu nascendi und deren Anwendung auf Moleküle und Kristalle. Das damals am stärksten vertretene Fach der allgemeinen Wissenschaften an der TH Hannover war die Chemie. Hellmann fand hier zu seinem Hauptthema, der quantenmechanischen Beschreibung und Deutung der chemischen Bindung, anregende Gesprächspartner, insbesondere den Physikochemiker Wilhelm Jost sowie die Anorganiker Biltz, Klemm und Fischer.

1933 entstanden Arbeiten zu Näherungsmethoden für die quantenchemische Berechnung von Bindungsenergien und zur Erklärung der chemischen Valenz. Es folgten grund-

legende Arbeiten zum molekularen Virial-Theorem und zum Hellmann-Feynman-Theorem. Parallel arbeitete er an einem Verfahren zur Messung frequenzabhängiger Dielektrizitätskonstanten gut leitender wässriger Salzlösungen. Diese Arbeiten, die er schon in Kiel bei Prof. Zahn begonnen hatte, zeichneten sich durch ein herausragend hohes Maß an Sorgfalt und eine ausgefeilte Methodik aus. Schon diese wenigen, aber bedeutenden Stationen seines Schaffens zeigen, ein wie breit interessierter, kreativer und gewissenhafter Naturwissenschaftler an der Nahtstelle von theoretischer Physik und empirischer Chemie Hellmann war.

1931 konnte Hans Hellmann die Physikdozentur an der Tierärztlichen Hochschule übernehmen, da nach Bestätigung seines Mentors Fues mit seiner baldigen Habilitation zu rechnen war. Im Jahre 1933 reichte er sein Habilitationsgesuch ein. Inzwischen war Hitler am 30. Januar 1933 zum Reichskanzler ernannt worden. Die Studenten – und nicht nur an der Tierärztlichen Hochschule – erlagen damals recht zahlreich der nationalsozialistischen Propaganda, und der politisch nicht angepasste Hellmann musste sich immer häufiger mit entsprechenden Pöbeleien abfinden. Laut Gesetz zur Wiederherstellung des Berufsbeamtentums vom 7. April 1933 wurde anfangs „nur“ die arische Abstammung Hellmanns überprüft. Diese erste Hürde hatte er noch überstanden. Als er dann aber auf Grund des Reichsgesetzes vom 30. Juni 1933 auch Angaben zur – wie es damals hieß – rassischen Herkunft seiner Frau machen sollte und dies verweigerte [4], untersagte das Preußische Kultusministerium im Herbst die Habilitation. Am 24. Dezember 1933 erhielt Hellmann von der Tierärztlichen Hochschule das Kündigungsschreiben mit Wirkung zum 31. März 1934, da wegen der nicht arischen Abstammung seiner Frau mit einer Habilitation nicht mehr zu rechnen sei. Unter Punkt 11 „Verschiedenes“ der Fakultätssitzung an der TH Hannover vom 17. Januar 1934 taucht als Unterpunkt die „Habilitation Dr. Hellmann“ auf. Im Protokoll steht unter 11c) lapidar ohne jeglichen Kommentar nur mit Häkchen „zur Kenntnis genommen“. Das war alles: damit war seine Habilitation gescheitert.

Wenn man die Originaldaten studiert, wird einem die ungeheuerliche Menschenverachtung des damals agierenden Machtapparates überdeutlich. Wenn Listen über den gesamten Lehrkörper der Hochschulen, klassifiziert nach Parteimitgliedern, Sympathisanten oder Gegnern des Regimes, in Kopie vor einem liegen [7], ist man fassungslos. Auf der Gegnerliste tauchte beispielsweise auch der Name Fues auf.

Wissenschaftlern wie Hellmann blieb damals nur die Emigration (Abbildung 1). Zu seinem Verhängnis entschied er sich für die Sowjetunion und nicht etwa für die USA. Aufgrund vielerlei Kontakten und Unterstützungen befreundeter Wissenschaftler konnte er am Karpov-Institut in Moskau, einem der führenden Zentren der Physikalischen Chemie in der Sowjetunion, die Leitung einer „Theoriegruppe“ übernehmen. Er etablierte sich dort in wenigen Jahren als erfolgreicher Wissenschaftler und fühlte sich sehr

## ÜBERBLICK

*Hans Hellmann veröffentlichte im Jahre 1937 die „Einführung in die Quantenchemie“ [1], die erste Monographie mit dem Titel „Quantenchemie“ [2]. Auf der Basis der neu erschaffenen Quantenmechanik gelangen ihm Durchbrüche bei der inhaltlichen Erklärung der chemischen Bindung und der chemischen Elementarreaktionen. Auch schuf er sehr früh wesentliche Grundlagen für die praktische Quantenchemie.*

*Die politischen Verwirrungen des vergangenen Jahrhunderts hatten aber diesem Wissenschaftspionier ein tragisches Schicksal und frühes Ende zugebracht und dieses für ein halbes Jahrhundert in Dunkel gehüllt [3-6].*

*Geblieben ist sein Werk. Die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie hat den Preis für jüngere Nachwuchswissenschaftler auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie nach ihm benannt.*

wohl. Dies änderte sich im Laufe des Jahres 1937. Es kam wieder verstärkt zu „Stalinistischen Säuberungen“, denen auch Hans Hellmann zum Opfer fiel. Unter dem Verdacht der Spionage für Deutschland wurde er am 29. Mai 1938 erschossen. 1957 konnten seine Frau und sein Sohn die vollständige Rehabilitierung erreichen. Die Wahrheit über seinen Tod wurde aber erst 1989 im Zuge der politischen Wende aufgeklärt.

## Zeitgeschichtlicher Rahmen

Es sollen drei Aspekte in der Biographie von Hans Hellmann hervorgehoben werden: (1) die Persönlichkeit des Wissenschaftlers, (2) seine Emigration in die Sowjetunion und (3) die Wechselwirkungen von Quantenmechanik und Zeitgeist.

## Die Persönlichkeit des Wissenschaftlers Hellmann

Hellmanns Vorfahren waren Kleinbauern, einfache Handwerker oder Manufakturarbeiter, die in der gegebenen Gesellschaftsstruktur des ausgehenden 19. Jahrhunderts Nordwestdeutschlands den Aufstieg durch Bildung und positiv bewertete Berufskarrieren anstrebten. Für Hellmanns Vater war dies der Aufstieg vom Matrosen zum „Oberdeckoffizier“ der Kaiserlichen Marine. Hellmann erhielt eine überdurchschnittlich gute Schulbildung. So kam Hellmann aus dem Milieu einer kaisertreuen, kleinbürgerlichen Welt des Vorkriegs-Deutschlands heraus. Während des Studiums und nach seiner Bekanntschaft mit einer Jüdin aus der Sowjetunion näherte er sich nachweislich über linke Literatur einem linken Milieu, ohne sich aber je politisch zu engagieren. Seine Ehefrau war 1923 elternlos in den Wirren nach der russischen Revolution zur Ausbildung als Kindergärtnerin nach Deutschland gekommen. Sie und die Familie Regener, die sie als Pflegekind aufgenommen hatte, dürften die Orientierung in Richtung Sowjetunion verstärkt haben. Leicht hätte Hellmann in seiner Zeit in Hannover Anschluss an linke Kreise finden können, etwa an die mit der sozialistischen Arbeiterjugend verbundenen Chemiker wie Sieg-

*Hellmanns Leben und Werk wurden in seinem 100. Geburtsjahr 2003 vielfältig gewürdigt: Im Frühjahr auf der 6. V. A. Fock School on Quantum and Computational Chemistry in Nowgorod/Russland, im Sommer bei einem Satelliten-Workshop des XI. International Congress of Quantum Chemistry in Bonn, im Frühherbst auf dem Symposium deutsch-jüdischer Beiträge zur Naturwissenschaft in Mühlhausen (Thüringen) und insbesondere am 17. Oktober bei einem Festkolloquium an der Universität Hannover.*



**Abb. 1 Hellmann mit Mutter und Schwester 1934 kurz vor der Ausreise nach Moskau.** [Foto-Provenienz: H. Hellmann jr. an K. Jug]

fried Knoke oder Fritz Strassmann [8] oder den später in Marienbad von den Nazis ermordeten Philosophen Theodor Lessing. Hellmann hielt sich bewußt von nationalsozialistischen Aktivitäten fern. Es sind aber auch keine Belege für linkssozialistische Aktivitäten bekannt.

Als wichtiger Punkt erscheint, dass Hellmann durch den frühen Tod seines Vaters zu den vaterlos aufgewachsenen Kindern gehörte, die ihr Studium als Werkstudenten verdienen. Dies mit der positiven Folge, dass er sich in einem wesentlich größeren Freiraum bewegen konnte, als es die äußeren Lebensverhältnisse einer Unteroffiziersfamilie vorgezeichnet hätten. An seiner Begabung gab es keinen Zweifel. Wissenschaft wurde sein orientierender Lebensmittelpunkt. Hellmann blieb ein bildungswilliger aufgeschlossener Naturwissenschaftler, ein Fachmann, der auf methodisch-wissenschaftliche Arbeitsweisen zielte, durchaus auf der Basis „handwerklicher Fähigkeiten“. Als eine Basiskompetenz von Hellmann sind ausgefeilte Messtechnik und die mit ihrer Entwicklung verbundene Wahrnehmung und Umsetzung theoretischer Einsichten in Versuche anzusehen. Elektrotechnik, Technische Chemie, Physikochemische Messtechnik und die daran entwickelte klare Analysierfähigkeit halfen den Weg zur Quantenmechanik und Quantenchemie zu bahnen. Hellmann war ein Mensch, der die Phänomene in Natur und Labor zu fassen suchte, und ein kritischer Analytiker von Daten, jemand der Phänomene in Theorien zu modellieren und umgekehrt aus Theorien Phänomene herzuleiten verstand.

### **Die Emigration in die Sowjetunion**

In den späten zwanziger und frühen dreißiger Jahren hatten die naturwissenschaftlichen Institute der Sowjetunion rege Westkontakte. Die Sowjetunion, die einen Weg gesucht hatte, aus proletarischer Herkunft einen „neuen Menschen“ für die Wissenschaft zu kreieren, lockerte diesen dogmati-

schen Weg nach und nach und nutzte – nachdem man noch zu Anfang der zwanziger Jahre Teile der eigenen Eliten ins Exil gezwungen hatte [9] – durch Importe die Kapazitäten der bourgeoisen Wissenschaft [10], wie es die Amerikaner immer wieder vorgemacht hatten. Die Sowjetunion suchte nun keine Propagandisten, von denen sie genug hatte, sondern Fachleute.

Die Verwandten von Frau Hellmann lebten in der Ukraine. Schon bald nach seiner Promotion hatte sich Hellmann durchaus erfolgreich um Stellen in der Ukraine wie in Russland bemüht. Er erhielt mit Unterstützung von Viktor Weißkopf, einem berühmten Physiker, Einladungen von Weisberg nach Charkov und von Finkelstein nach Dnepropetrovsk [11]. Allerdings erteilten die sowjetischen Behörden nicht jedem ein Einreisevisum. 1932 kam es in Berlin zu einem Gespräch mit Akademiemitglied Frumkin, dem stellvertretenden Direktor des Karpov-Instituts, das zu einer schließlich erfolgreichen Einladung durch Akademiemitglied Bach, den Direktor des Instituts, führte [9]. Anfang 1934 benötigte Hellmann auch dringend eine neue Broterwerbsstelle für seine Familie.

Dass Hellmann vor seiner Berufung mit dem stellvertretenden Direktor des Karpov-Instituts in Berlin eine Besprechung hatte, verdeutlicht dem Kenner des sowjetischen Systems, dass der Geheimdienst NKVD ihn sowohl auf seine fachliche wie auch politische Eignung hin geprüft hatte. Das Karpov-Institut arbeitete wie alle vergleichbaren Forschungsinstitute der Zeit sowohl in der Grundlagenforschung als auch für die Industrie und den Militär-Rüstungskomplex. Hellmann kam in der „Abteilung für Struktur der Materie“ unter. Neben seiner Gruppe gab es schon eine Theoriegruppe, die von Zhukhovitskij geleitet wurde. Hellmanns Weg in der Sowjetunion verlief zunächst unpolitisch und auf der Normalspur. 1933 waren seine Schriften in der russischen Physik bekannt. Ein Foto zeigt ihn bei einer internationalen Physikerkonferenz in Charkow 1934 neben Berühmtheiten wie Bohr und dem russischen Physiker Landau (Abbildung 2).

Mit dem späteren Parteimitglied Zhukhovitskij hatte Hellmann Kontakte. Sie hatten 1935 gemeinsam eine wichtige Arbeit zu chemischen Reaktionen veröffentlicht. Schon 1935 war Hellmann als Dr. sc. sozusagen habilitiert und Anfang 1937 zum „wirklichen Mitglied“ des Karpov-Instituts ernannt worden. Im Herbst wurde er „Leitender Wissenschaftler“. Hellmann stand auf dem Höhepunkt seiner wissenschaftlichen Karriere, als eine neue „Stalinistische Säuberungswelle“ begann. Da er die sowjetische Staatsbürgerschaft angenommen hatte, gab es für ihn und seine Familie keinen Ausweg. Als sowjetischer Bürger deutscher Nationalität mit häufigen beruflichen wie privaten Postkontakten ins Ausland gehörte er während des „Großen Terrors“ 1937/1938 zu den besonders Verdächtigen. Nach seiner Verhaftung durch den NKVD im März 1938 war Zhukhovitskij einer der Unterzeichner einer Wandzeitung im Institut mit einer Distanzierung von Hellmann. Damals war es parteipolitisch erwünscht und überlebenstaktisch ange-



Internationale Physikerkonferenz im Jahre 1934 im physikalisch-technischen Institut in Charkow; v.r.n.l.: Tamm, Fock, Gordon, Williams, Waller, Frankel, Plesset, Landau, Krauzer, Bohr, Gelman, Rumer, Rosenfield, Tissat, Iwanenko

**Abb. 2 Hellmann neben Bohr und Landau auf der internationalen Physikerkonferenz in Charkow (Ukraine) 1934.**  
[aus: A. Liwanowa, Lew Landau, MIR, Moskau & Teubner, Leipzig, 1982, S. 48b]. Durch die Rückübersetzung deutscher Namen aus dem russischen Original ins Deutsche wurden einige Schreibweisen verändert: Gelmann statt Hellmann, Frankel statt Frenkel, Rosenfeld statt Rosenfeld, Krauzer statt Kratzer.

zeigt, dass sich die Kollegen von geheimpolizeilich Verhafteten öffentlich distanzierten [3,6].

Die Untersuchungsakte der sowjetischen Geheimpolizei über Hans Hellmann wurde von Sabine Arnold im heutigen Archiv des Föderativen Inlandsgeheimdienstes (FSB) in Moskau eingesehen und übersetzt [11]; weitere Interviews und Sachverhaltsaufklärungen schlossen sich an [12]. Die Akte enthält einen Personalbogen, ein Vernehmungsprotokoll, eine „eigenhändige Aussage“ Hellmanns, die Anklageschrift, ein Dokument über die Erschießung von Hans Hellmann, eine Archivierungsbestätigung und Dokumente zu seiner Rehabilitierung. In der Akte wird der Eindruck erweckt, dass Hellmann Probleme mit der Ausreisegenehmigung aus Nazideutschland bekam, und zwar noch bevor er in Hannover seine Stelle verloren, aber schon Aussicht auf Einreise in die Sowjetunion hatte. Nazikollegen der TH Hannover hätten ihn unter Druck gesetzt, aus Moskau der deutschen Aufklärung zu berichten. In der Akte heißt es weiter, Hellmann habe, um seine in Deutschland verbliebenen Verwandten zu schützen, den Kontakt mit dem deutschen Geheimdienst in Moskau nicht verweigert. In der Akte wurde allerdings vermerkt, dass es außer der Aussage Hellmanns und den Vernehmungsprotokollen keine Beweisstücke gebe. Im Rehabilitierungsverfahren haben das Mitglied der Akademie der Wissenschaften Betrjanov und sein früherer Kollege Ljubarskij Hellmann als Menschen beschrieben, der der Sowjetunion loyal gegenüberstand und Antifaschist war [11].

### Quantenmechanik und Zeitgeist

Wiederholt sind Art und Ursache der so enormen Wissenschaftsentwicklung diskutiert worden, die in dem Wort Quantenphysik und Quantenchemie zusammengefasst sind

[13]. Die neue Theorie initiierte Messungen, die ganz neue Seiten der Realität aufdeckten (Stern-Gerlach-Versuch, Materiebeugung, Teilchen-Korrelationen). Ein neues Niveau und neue Formen der Mathematisierung der Natur wurden erreicht. Der mit den empirischen Daten inhaltlich und logisch konsistente Formalismus schien eine vorher undenkbar Dualität von Teilchen- und Wellenbegriff zu erzwingen. Physiker und Chemiker organisierten ihr neues, revolutionär erscheinendes Naturbild. Die Kopenhagener Interpretation der Quantenmechanik löste die Gewissheiten des Determinismus auf.

Zwischen Natur- und Geistes- und Sozial-Wissenschaften gab es wechselseitig außerordentlich kritische und erhellende erkenntnistheoretische Hinweise, die über innerdisziplinäre Beeinflussungen weit hinausgingen. Das von der Quantenmechanik prinzipiell aufgeworfene Problem der subjektunabhängigen Existenz der von der Theorie erfassten Objekte – wie passen solche umwälzenden Denkmuster zu dem oben beschriebenen Wissenschaftlertypus von Hellmann? Hellmann war Naturwissenschaftler und er tat genau dieses: Neue Empirie und neue Theorie von beiden Seiten aus zu verknüpfen. Das Wesen der Naturwissenschaft zeigt sich eben am besten in sorgfältiger Experimentierkunst, gepaart mit intelligenter theoretischer Methodik und mathematischer Datenanalyse.

### Wissenschaftshistorisches Umfeld

Die neue naturwissenschaftliche Sichtweise entwickelte sich ab etwa 1900, initiiert durch Planck mit der physikalischen Idee des quantisierten Energieaustausches zwischen Materie und elektromagnetischem Strahlungsfeld. 1905 verschärfte Einstein diese Idee zu seinem heuristischen Konzept der Quantisierung des Strahlungsfeldes selbst. Die

nächsten Umwälzungen mit direkten Anwendungen auf chemische Probleme erfolgten ab 1913 durch die quantisierten klassischen Atommodelle von Bohr und Sommerfeld. Erstmals konnten das Periodensystem der chemischen Elemente und thermodynamische Parameter tiefgehend gedeutet werden. 1924 kam schließlich de Broglie der Gedanke, dass umgekehrt Materie auch kontinuierliche Welleneigenschaften hat.

Alle diese ad-hoc-Quantenkonzepte versagten aber bei vielen anderen Detailfragen. Schrödinger und Heisenberg legten 1925/1926 die Grundsteine zur Entwicklung der modernen Quantentheorie. Als fundamental für die qualitative physikalische Erklärung der Chemie wie für die chemische Grundausbildung erwiesen sich drei Konzepte: die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation (1927), der Elektronenspin und das Pauli-Prinzip (1925). Zunächst noch geleitet von empirischen Befunden sollten die Typen chemischer Bindungen und chemischer Reaktionen quantentheoretisch verstanden, erklärt und im Prinzip auch ab initio berechnet werden können.

Die Arbeiten von Heitler und London zur kovalenten Bindung im  $H_2$  (1927) werden als die Geburt der Quantenchemie angesehen. Ihre weiteren Pioniere konstruierten in den folgenden 10 Jahren Schlag auf Schlag viele grundlegende Konzepte der Molekül- und Festkörper-Wissenschaften: Das Molekülorbitalmodell ab 1927 (Hartree, Hund, Lennard-Jones, Mulliken, Slater), das Valenzbindungsmodell ab 1931 (Pauling, Slater, Hellmann),  $\pi$ -Bindungen ab 1931 (Hückel), Modelle für kondensierte Materie (Fermi, Bloch, Bethe, Peierls) und für chemische Elementarprozesse (Eyring, Polanyi, Hellmann). Damit war in den frühen dreißiger Jahren, noch vor den Rückschlägen durch den 2. Weltkrieg, ein Anfang auf dem Weg zu Diracs Forschungsprogramm von 1929 gemacht, chemische und biochemische Phänomene auf die Quantenmechanik zurückzuführen. Danach ist die gesamte Chemie im Prinzip durch die Grundgleichungen der Quantentheorie beschreibbar. Der quantitative Zugang konnte allerdings effizient erst nach dem 2. Weltkrieg geöffnet werden, mit fortgeschrittener Computerhardware und intelligenten Rechenalgorithmen.

Die eine Hälfte der oben genannten Forscher schuf die theoretischen Grundlagen der Quantenwissenschaft; fast alle wurden mit einem Physik-Nobelpreis geehrt. Die anderen, im Schnitt etwas jüngeren, arbeiteten dann die Theorie aus und wandten sie auf reale Materie an; auch einige von ihnen wurden mit dem Chemie-Nobelpreis ausgezeichnet. Dies beleuchtet die unterschiedliche Wertschätzung theoretisch-begrifflicher Durchdringung innerhalb von Physik und von Chemie.

Die Zersplitterung der Naturwissenschaften erschien durch die umfassende Wissenschaft der Mikroteilchen und ihrer komplexen Systeme überwindbar. Heisenberg spricht

von der „Einheit der Natur“. Bio- und Nano-Technik könnten die Erkenntnisse von chemischer Physik und Biophysik, von physikalischer Chemie und Biochemie, von Mikro- und Neurobiologie für Mensch und Gesellschaft zukünftig nutzbar machen.

### Höhepunkte im quantenchemischen Werk Hellmanns

Seine Zusammenarbeit mit Jost, der später einer der führenden Vertreter der Physikalischen Chemie wurde, würdigte Hellmann im Vorwort seines berühmten Buches so: „Einige Formulierungen in den ersten Kapiteln wurden seinerzeit (1933) gemeinsam mit Professor Dr. W. Jost (Hannover) ausgearbeitet.“ Weitere Kapitel entstanden am Karpov-Institut in Moskau. Drei jüngere russische Wissenschaftler übersetzten den deutschen Text ins Russische. Die umfangreichere russische Fassung erschien einige Monate vor der überarbeiteten deutschen, die glücklicherweise in Wien erscheinen konnte [1]. Das Buch stellt in seinem wissenschaftlichen Gehalt, seiner Didaktik und der Klarheit und Schärfe seiner Aussagen eine bewundernswerte Leistung dar.

Intensive Diskussionen zwischen Hellmann und Jost hatten 1934 zu einer gemeinsamen Arbeit „Zum Verständnis der chemischen Kräfte nach der Quantenmechanik“ [14] geführt. Diese Arbeit hatte sich an einen weiten Kreis von Chemikern gewandt,

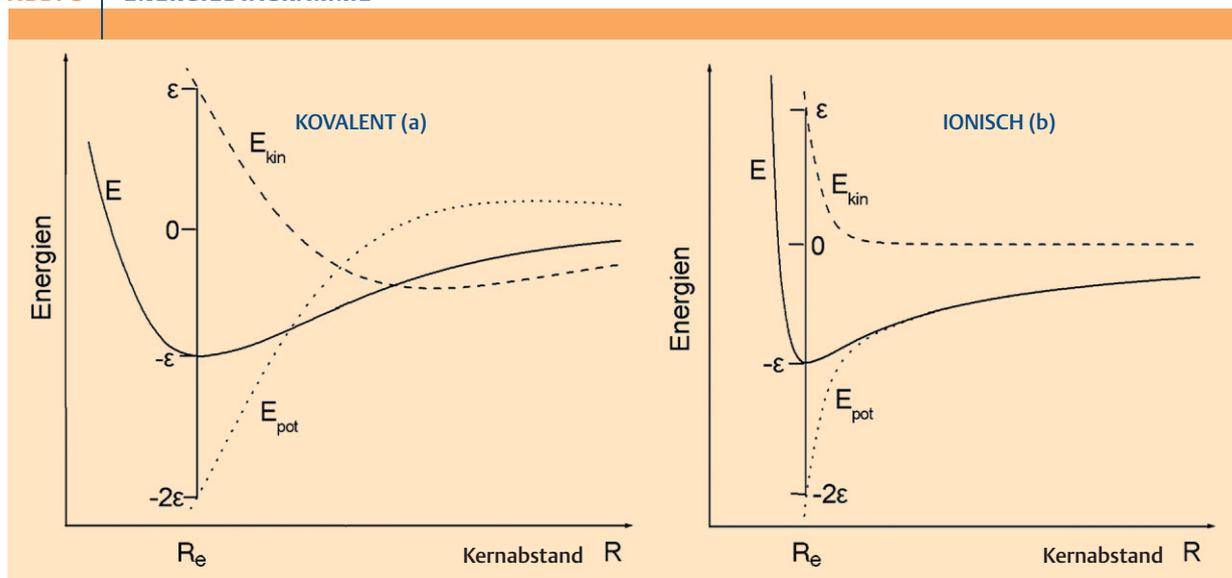
weshalb eine nicht mit Formeln überladene Darstellung gewählt worden war. Ergänzend zu seinen formal strengen, auf mathematische Vollständigkeit bedachten Untersuchungen bemühte sich Hellmann laut Jost „mit möglichst einfachen Mitteln ein anschauliches Verständnis der Theorie zu vermitteln.“ Hellmanns Intention war, die wichtigsten in der Schrödinger-Gleichung kodifizierten Grundeigenschaften der Materie unmittelbar anschaulich zu verstehen und aus ihnen die Gesetze des chemischen Aufbaus und der chemischen Reaktionen der Materie abzuleiten. Besonders bemüht war er um das Verständnis der chemischen Bindung. So war der Zweck der Untersuchung zur Rolle der kinetischen Elektronenergie, zu zeigen, wie man die damit zusammenhängenden nicht-klassischen Kräfte für das anschauliche Verständnis der homöopolaren Anziehung und Abstoßung heranziehen kann. Was meinte Hellmann mit „anschaulichem Verständnis“? Er verstand darunter die mit dem mathematischen Formalismus zu vereinbarenden Bilder physikalischer Objekte wie Partikel und Welle, die ihm heuristisch hilfreich waren und deren begrenzte Reichweite ihm stets bewusst war. Im Folgenden werden ein halbes Dutzend Glimmerlichter Hellmannscher Forschung beschrieben.

### Der Spin

Haben *freie* Elektronen einen Spin? Durch eingehende Diskussion der Dirac-Gleichung konnten Fues und Hellmann

**DIE GESAMTE CHEMIE  
LÄSST SICH MIT DEN GRUND-  
GLEICHUNGEN DER QUANTEN-  
THEORIE BESCHREIBEN**

ABB. 3 | ENERGIEDIAGRAMME



**Kinetische Energie der Elektronen ( $E_{kin}$ ), potentielle Coulomb-Energie von Elektronen und Kernen ( $E_{pot}$ ) und Gesamtenergie ( $E$ ) für zwei kovalent (a) beziehungsweise ionisch (b) gebundene Atome A, B als Funktion des Kernabstands  $R$ .**

diese damals sehr kontrovers diskutierte Frage endgültig bejahen. Hellmann ging zunächst von dem Satz von Bohr aus: Der Spin als Eigenschaft der Elektronenpartikel, genauer gesagt eines Punktelektrons, ist durch einen Stern-Gerlach-Versuch mit Elektronen nicht direkt nachweisbar. Auch Pauli lehnte zuerst die Hypothese vom Elektronenspin ab. Dabei hatte Pauli gewusst, dass das äußere Elektron der Alkali-Atome Sitz eines Drehimpulses und auch der magnetischen Anomalie ist infolge einer „eigentümlichen, klassisch nicht beschreibbaren Art von Zweideutigkeit der Eigenschaften des Leuchtelektrons“. Schließlich erkannte Pauli den Spin an und konzipierte 1927 die Spin-Matrizen.

Später fand man heraus, dass auch viele Atomkerne einen Spin haben. Heute ist der Spin z.B. in der Strukturforschung oder bei der Kernspin-Tomographie in der medizinischen Diagnostik nicht mehr wegzudenken. Dies gilt insbesondere bei der Untersuchung des Gehirns und anderer Organe. Pathologische Veränderungen lassen sich ohne Nebenwirkungen beobachten und lokalisieren.

Die neueste Anwendung des Spins dürfte die Verwirklichung des Quantencomputers sein, der bei speziellen Aufgaben erheblich weniger Rechenschritte als ein klassischer Computer benötigt, z.B. bei Faktorzerlegung und Suchalgorithmen. Als Quantenrechner benutzt wurden etwa die Kernspins von  $^{13}\text{C}$  und  $^1\text{H}$  in Chloroformmolekülen, die mit Hilfe der kernmagnetischen Resonanz gehandhabt wurden.

### Molekulares Virial-Theorem für Energien

Bei der Diskussion von quantenchemischen Methoden und von Bindungsenergien stieß Hellmann auf zwei allgemeingültige Theoreme. Die Energie  $E(R)$  eines Moleküls aus zwei Atomen A und B mit dem Kernabstand  $R$  setzt sich aus zwei Beiträgen zusammen,

$$E(R) = E_{kin}(R) + E_{pot}(R). \quad (1)$$

$E_{kin}$  ist die positive kinetische Energie der Elektronen mit Masse  $m$ ,  $E_{pot}$  ist die potentielle Energie von Coulomb-Abstoßungen (positiv) und Coulomb-Anziehungen (negativ) zwischen allen Elektronen und Kernen.  $E_{kin} = m \cdot v^2/2$  variiert quadratisch mit der Geschwindigkeit  $v$ . Die elektrischen Coulomb-Kräfte sind wie die Gravitationskräfte umgekehrt proportional zum Quadrat des Abstands ( $1/r^2$ ). Die Coulomb-Potential-Energien (Energie = Kraft · Weg) sind also umgekehrt proportional zum Abstand ( $1/r$ ), d.h.  $\sim r^n$  mit  $n=-1$ . Ein anderes wichtiges Beispiel sind die Hookeschen Federkräfte. Sie sind proportional zur Auslenkung ( $\sim r$ ); die potentielle Energie ist dann proportional  $r^n$  mit  $n=+2$ .

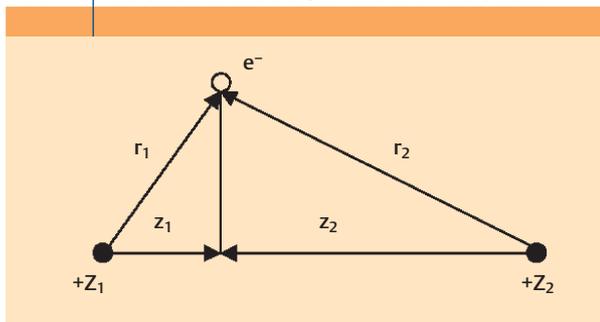
Hellmann untersuchte, wie sich die Energien verändern, wenn man alle Abstände um den Faktor  $(1+\delta)$  vergrößert. 1933 fand er kurz vor Slater das *molekulare* Virial-Theorem der Quantentheorie:

$$\begin{aligned} E_{kin} &= n/(n+2) \cdot E - R \cdot (dE/dR), \\ E_{pot} &= 2/(n+2) \cdot E + R \cdot (dE/dR). \end{aligned} \quad (2)$$

Es gilt in der nichtrelativistischen Näherung der Quantenmechanik genauso wie in der Näherung der klassischen Newtonschen Mechanik. Der Name Virial wurde im Zusammenhang mit Kräften und Potentialen durch einen der Begründer der statistischen Thermodynamik, Clausius, geprägt, der 1865 auch den Begriff Entropie einführte.

Chemische Bindungen kommen durch das Wechselspiel zwischen den 'nichtklassischen Kräften' (Änderung der kinetischen Elektronenenergie) und den klassischen Coulomb-Kräften ( $n=-1$ ) zustande. Typische molekulare Energiekurven für kovalente und ionische Bindungen sind in Abbildung 3 gezeigt. Die Referenzenergie  $E = 0$  ist die Energie der getrennten Atome für  $R \rightarrow \infty$ . Aufgetragen sind also die Energieänderungen gegenüber den getrennten Atomen. Im kovalenten Fall sinkt die immer positive kinetische

ABB. 4 | KOORDINATEN ZUM KRAFT-THEOREM



Energie mit abnehmendem Kernabstand zunächst ab und steigt dann wieder an. Bei der potentiellen Energie ist es genau umgekehrt. Am Gleichgewichtsabstand (Bindungsabstand  $R_e$ ), für den  $dE/dR = 0$  gilt, ergibt sich für die beiden Beiträge zur thermodynamisch negativ definierten Bindungsenergie  $E$

$$E_{\text{kin}} = -1 \cdot E > 0, E_{\text{pot}} = +2 \cdot E < 0. \quad (2a)$$

Bei jedem Bindungstyp liefern also die Coulomb-Kräfte die doppelte Bindungsenergie, was durch kinetische Energie-Änderungen der Elektronen zur Hälfte kompensiert wird. Auch nach 70 Jahren wird dies in den Lehrbüchern nicht immer korrekt dargestellt, obwohl die beiden Energiebeiträge unschwer nach Gleichung (2) aus der molekularen Energiekurve  $E(R)$  erhältlich sind. Mit dieser Gleichung kann auch die Güte genäherter elektronischer Wellenfunktionen überprüft werden.

Die Schwingungen der Kerne im Molekül lassen sich mit Hookeschen Kräften modellieren. Gemäß Gleichung (2) gilt dann im Mittel für  $n=2$

$$E_{\text{kin}}(\text{Kerne}) = E_{\text{pot}}(\text{Kerne}) = E/2(\text{Molekülschwingung}). \quad (2b)$$

Dementsprechend tragen Schwingungen doppelt zur spezifischen Wärme bei, nach dem Gleichverteilungssatz durch  $E_{\text{kin}}$  und noch einmal so viel durch  $E_{\text{pot}}$ .

### Hellmann-Feynman-Theorem für molekulare Kräfte

Erst 1937 publizierte Hellmann das 1939 auch von Feynman gefundene Theorem für die Kraft  $K$  zwischen zwei Atomen. Im Gleichgewicht ist  $K = 0$ , nicht aber während einer Reaktion oder Schwingung. Für Kernladungen  $Z_1, Z_2$  und Elektronendichte  $\varrho(r_i)$  mit Ortsvektor  $r_i$  bezüglich Kern  $i$  ( $i=1$  oder  $2$ ;  $z_i =$  Komponente längs der Kernverbindungsline;  $z_1 - z_2 = R$ ), siehe Abbildung 4, gilt

$$K = -dE(R)/dR = Z_1 Z_2 / R^2 - \int dr_i \cdot \varrho(r_i) \cdot Z_i \cdot z_i / r_i^3. \quad (3)$$

In der Wissenschaftler-Galerie des Karpov-Instituts zeigt ein Gemälde Hellmann mit diesem Theorem (Abbildung 5).

Wenn man die Elektronendichte, etwa aus einer genauen quantenmechanischen Rechnung, kennt, kann man die Kraft rein klassisch aus der Coulomb-Abstoßung zwischen den beiden Kernen und der Coulomb-Anziehung eines der beiden Kerne auf die Elektronenverteilung erhalten. Die Anziehung durch den anderen Kern wie die Kraft-Beiträge der so wichtigen kinetischen Energie der Elektronen und der zwischenelektronischen Abstoßung (Elektronenkorrelation) tauchen in der exakten Formel (3) nicht explizit auf. Das bedeutet natürlich nicht, dass für Bindungskräfte nur ein Kern eine Rolle spielt, auch nicht dass Elektronenabstoßung oder die kinetische Elektronenenergie keine Rolle spielen, wie manchmal suggeriert wird.

Schon Hellmann wies explizit auf die beiden molekularen Kraftanteile hin: den „klassisch verständlichen“ elektrostatischen Anteil und den „typisch quantenmechanischen“ kinetischen Anteil, der mit der Heisenbergschen Unbestimmtheit zusammenhängt:

$$K = -dE_{\text{pot}}/dR - dE_{\text{kin}}/dR = K_{\text{klass-pot}} + K_{\text{quant-kin}}. \quad (4)$$

Am Gleichgewichtsabstand  $R_e$  heben sich beide genau auf:

$$K(R_e) = 0, K_{\text{klass-pot}} = -k \cdot R_e, K_{\text{quant-kin}} = +k \cdot R_e, \quad (4a)$$

wobei  $k = d^2E/dR^2$  die Hookesche Bindungskraftkonstante ist. Man erhält sie experimentell etwa aus Schwingungsspektren oder theoretisch aus der Krümmung der Energiekurve am Gleichgewichtsabstand. Offensichtlich ist eine Bindung unzureichend als rein elektrostatische Anziehung einer Bindungsladung zwischen den Kernen beschrieben.

### Die Natur der chemischen Bindung

Mit diesen Einsichten und einfachen anschaulichen Vorstellungen konnte Hellmann 1933 das physikalische Prinzip der kovalenten Bindung aufhellen. Er berücksichtigte konsequent die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation und das Pauliprinzip, ohne auf den Wellencharakter der Elektronen im Detail einzugehen. Wenn sich zwei Atome nähern, beginnen die Bereiche der Kernanziehung zu überlappen. Dann können die Valenzelektronen des einen Atoms in den Anziehungsbereich des anderen gelangen.

Wenn ein Elektron „an zwei Atomen anteilig“ wird, vergrößert sich sein Aufenthaltsbereich  $\Delta r$ . Nach der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation gilt für den  $n$ 'ten Zustand (Hauptquantenzahl  $n$ )

$$\Delta r \cdot \Delta(mv) \approx n \cdot \hbar. \quad (5)$$

Also wird die Breite  $\Delta v$  der Geschwindigkeitsverteilung des Elektrons geringer. Im energetisch günstigsten Falle, d.h. für  $n = 1$ , gilt:

$$\Delta v \approx (\hbar/m)/\Delta r. \quad (5a)$$



Abb. 5 Portrait-Gemälde Hellmanns (nach einem Foto) mit Hellmann-Feynman-Theorem, in der Wissenschaftlergalerie des Karpov-Instituts in Moskau [Foto: W. H. E. Schwarz, im Hellmann-Archiv]

Das heißt, ein Elektron hat im Molekül mit größerem  $\Delta r$  eine niedrigere kinetische Mindestenergie als im Atom:

$$E_{\text{kin}}(\text{Min}) = m \cdot (\Delta v)^2/2 \approx (\hbar^2/2m)/(\Delta r)^2. \quad (6)$$

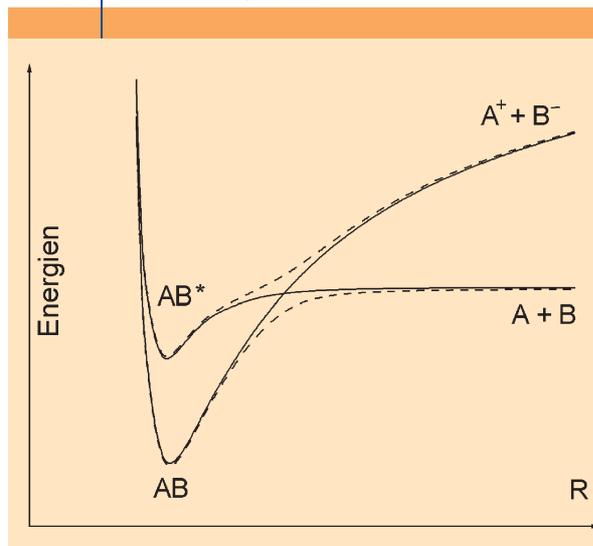
Logisch zwingend folgt das Absinken der kinetischen Elektronenenergie für mittlere und größere Kernabstände auch aus dem molekularen Virialsatz (Abbildung 3). Die Absenkung der kinetischen Energie als treibender Kraft bringt die Atomrümpfe so nahe zusammen, dass die Valenzelektronen schließlich eine merklich höhere effektive Kernanziehung im Molekül als in den einzelnen Atomen verspüren. Beim Gleichgewichtsabstand  $R_c$  der Kerne werden die Elektronen im Molekül stärker an die Atomrümpfe herangezogen als im freien Atom. Die Atomorbitale im Molekül sind geschrumpft. Gemäß dem Virialsatz (Gl.2a) wird dabei die potentielle Coulomb-Anziehungsenergie stark negativ, während die kinetische Energie wieder ansteigt. Hellmann hatte damit erstmalig das Bindungskonzept der Kovalenz von Lewis durch Quantenmechanik inhaltlich begründet. Die Weiterentwicklung dieser Ideen findet neuerdings auch Eingang in die Lehrbücher.

### Die Pseudopotentialmethode

Das Periodensystem der Elemente ist das wohl wichtigste Ordnungsprinzip zur qualitativen Klassifizierung von Substanzgruppen in der Chemie. Die vertikalen Familien sind durch eine gleiche Anzahl relativ locker gebundener Valenzelektronen in ähnlichen Atomorbitalen charakterisiert. Wie kann sich dieser wesentliche Befund der empirischen Chemie in einer quantenchemischen Methode widerspiegeln?

Hellmann entwickelte 1934 die geniale Idee, nur die Valenzelektronen quantenmechanisch zu behandeln, und zwar in den effektiven Feldern der Atomrümpfe. Der wichtige, von Hellmann klar erkannte Punkt dabei ist, dass die Atomkerne mit ihren Rumpfschalen nicht nur durch die elektrostatischen Coulomb-Potentiale anziehend wirken. Wegen des Pauliprinzips werden die Valenzelektronen mehr oder weniger stark aus dem anziehenden Bereich der besetzten Atomrumpfschalen herausgehalten. Der Effekt des Paulischen Besetzungsverbots kann durch ein abstoßendes Potential simuliert werden. Die Summe beider Anteile wird heute Pseudo-Potential oder effektives Rumpfpotential genannt. Die meisten quantenchemischen Rechnungen an Molekülen, Clustern und Kristallen mit mittelschweren oder schweren Atomen werden mit solchen Pseudopotentialen durchgeführt. Dadurch werden erhebliche Computer-Ressourcen eingespart. Auch können damit die bei schwereren Atomen so wichtigen relativistischen Effekte recht einfach mitberücksichtigt werden. Rechnungen an Verbindungen einer ganzen Familie des Periodensystems verlaufen gleichartig. Der mehr oder weniger unregelmäßige Gang der Eigenschaften lässt sich auf die Unterschiede in den atomaren Pseudopotentialen zurückführen. Das chemisch so bedeutsame Konzept der homologen Reihe war damit in die

ABB. 6 | ENERGIEKURVEN



**Energiekurven  $E(R)$  für ein ,chemisch reagierendes' System ( $AB, AB^* \leftrightarrow A+B, A^+B^-$ ): — ,diabatisch' für ,unendlich schnelle' Kernbewegung; - - - ,adiabatisch' für ,unendlich langsame' Kernbewegung**

Quantenphysik integriert. Populär wurde die Pseudopotential-Methode aber erst eine Generation später, als sie in besonders einfacher Form im angelsächsischen Bereich propagiert wurde.

### Diabatisches und adiabatisches Bild chemischer Reaktionen

Die chemischen Elementarreaktionen werden in der Theorie meist in zwei Näherungsschritten beschrieben. Zunächst definiert man elektronische Zustände des reagierenden Systems. Wenn sich die Atomkerne bewegen, passen sich die elektronischen Zustände an die Kernbewegung an. Hellmann entwickelte eine allgemeine Theorie dafür. Er führte zwei hypothetische Grenzfälle ein. Im adiabatischen Grenzfall bewegen sich die Kerne unendlich langsam im Feld der „schnellen“ Elektronen. Bei fixierten Kernabständen  $R$  ergibt sich die Born-Oppenheimer-Energie. Für verschiedene  $R$  erhält man die Potentialenergiekurven  $E(R)$  (bei nur einer Kernabstands-Koordinate  $R$ , bzw. Potentialenergiehyperflächen bei vielen Kernkoordinaten in mehratomigen Molekülen). Für  $E(R)$  gilt das Virialtheorem. Die Potentialkurve  $E(R)$  für die Kernbewegung enthält auch die kinetische Energie der Elektronen. Auf diesen sich nicht kreuzenden Kurven (Abbildung 6) spüren die Kerne die Hellmann-Feynman-Kräfte. Bei realistisch schnellen Kernbewegungen können die Moleküle unter Ausnutzung der Kernimpulse zwischen den adiabatischen Potentialkurven „hüpfen“. Es kommt zu nichtadiabatischen elektronischen Übergängen im Bereich der „vermiedenen Kreuzungen“, wo sich die adiabatischen Kurven nahe kommen. Könnte man ionische Moleküle  $A^+B^-$ , z.B. NaCl in der Gasphase, ganz langsam auseinanderziehen, würde man adiabatisch

längs der unteren durchgezogenen Kurve nur die neutralen Atome A, B erhalten.

Bei sehr schneller Dissoziationsbewegung bleibt aber die Polarität teilweise erhalten, als Dissoziationsprodukte treten auch die atomaren Ionen  $A^+$  und  $B^-$  auf. In solchen Fällen kann es geschickter sein, elektronische Zustände zu definieren, die ihren ionischen Charakter mit den Kernabständen nur minimal verändern, d.h. mit den schnell fliegenden Kernen 'mitfliegen'. Diese von Hellmann diabatisch genannten Zustände entsprechen den sich kreuzenden gestrichelten Potentialkurven. Bei 'endlich' schneller Kernbewegung gibt es auch elektronische Übergänge zwischen den diabatischen Zuständen. Die Wirklichkeit liegt irgendwo zwischen den beiden Grenzfällen. Die Thematik ist z.B. für symmetrieverbotene Reaktionen, für die Photochemie und für strahlungslose Prozesse wichtig.

Nach Hellmanns Liquidierung wurden diese Ideen vergessen. Die Theorie der atomaren Stöße und molekularen Elementar-Reaktionen, der in den letzten Jahrzehnten chemierelevante Durchbrüche gelang, wurde nach dem zweiten Weltkrieg ohne Bezug auf Hellmann ganz neu erfunden.

### Zusammenfassung

*Leben und Werk Hans Hellmanns wurden gewürdigt. Hellmann überschritt die Grenzen von der Physik zur Chemie. Er entwickelte dabei neuartige Theoreme und Methoden zur Beschreibung der chemischen Bindungen und Reaktionen, die auch heute noch Bestand haben. Seine wissenschaftliche Klarheit und sein persönliches Schicksal sollten uns leiten und mahnen.*

### Summary

*Life and work of Hans Hellmann were honored. Hellmann crossed the border between physics and chemistry. He developed new theorems for the description of chemical bonding and reactions, which are still valid and of importance today. His pioneering vision and his personal fate should guide and remind us.*

### Schlagworte

Hans Hellmann, Quantenchemie, Hellmann-Feynman-Theorem, Virial-Theorem, chemische Bindung, Wissenschafts-emigration

### Danksagung

Wir danken allen Kollegen, die zum Hannoveraner Festkolloquium aktiv beigetragen haben: Prof. M. V. Basilevsky (Karpov-Institut, Moskau), J. Klein (Präsident der Braunschweigischen Wissenschaftlichen Gesellschaft), Prof. W. Klopper (Universität Karlsruhe, erster Hellmann-Preisträger), Prof. H.-G. Wagner (Universität Göttingen und Akademie der Wissenschaften in Göttingen). Wir danken ebenfalls den Gutachtern und zahlreichen Kollegen für nützliche Hinweise zum Thema dieses Artikels, insbesondere Dr. S. Ar-

nold (München), Dipl.Ing. H. Hellmann (Siegen), Prof. Dr. S. Peyerimhoff (Bonn) und Prof. P. Ziesche (Dresden).

### Literatur

- [1] Hans Hellmann, Einführung in die Quantenchemie, Franz Deuticke, Leipzig-Wien 1937, gestraffte Version von: Gans Gel'man, Kvantovaya Khimiya, ONTI, Moskau-Leningrad 1937.
- [2] Nach unserer Kenntnis wurde der Terminus „Quantenchemie“ erstmals von A. Haas in allgemeinwissenschaftlichen Vorträgen gebraucht, siehe: Die Grundlagen der Quantenchemie. Eine Einleitung in vier Vorträgen, Akademische Verlagsgesellschaft Leipzig 1929.
- [3a] W. H. E. Schwarz, D. Andrae, S. R. Arnold, J. Heidberg, H. Hellmann jr., J. Hinze, A. Karachalios, M. A. Kovner, P. C. Schmidt, L. Zülicke, BUNSENMAGAZIN, 1999, 1, 10.
- [3b] W. H. E. Schwarz, A. Karachalios, S. R. Arnold, L. Zülicke, P. C. Schmidt, M. A. Kovner, J. Hinze, H. Hellmann jr., J. Heidberg, D. Andrae, BUNSENMAGAZIN, 1999, 1, 60.
- [4] M. Schimanski, Die Tierärztliche Hochschule Hannover im Nationalsozialismus, Dissertation, Tierärztliche Hochschule Hannover 1997, S. 130-135. Herr Schimanski übergab eine Reihe von Dokumentkopien an S. R. Arnold, die ausgewertet werden konnten.
- [5] K. Jug, G. Wunsch, in: G. Wunsch, Red. Leitung, Die Geschichte der Chemie an der Technischen Hochschule und Universität Hannover, „Nicht im Handel. Bezug durch: Fachbereich Chemie der Universität Hannover“, Hannover 1999, S. 68.
- [6] M. A. Kovner, Gans Gustavovich GEL'MAN, 136 pp., Nauka, Moskau 2002.
- [7] Hauptstaatsarchiv Hannover, Hann30IV Nr. 27 (Bestand NSTB Hannover) F.1, 27-30.
- [8] M. Heinemann, Gespräch mit Siegfried Knoke und Nachlaß Knoke, ZZBW, Universität Hannover.
- [9a] G. Gorelik, Russische Physiker unter Stalin, Vieweg, Braunschweig 1995
- [9b] N. Werth, Ein Staat gegen sein Volk, in: S. Courtois et al., Hrsg., Das Schwarzbuch des Kommunismus, Piper, München-Zürich 1998.
- [10] M. Heinemann, E. Kolchinski, Hrsg., ZA „zelesnym zanaveresom“: mify i realii sovetsko nauki / Rossijskaja Akademija Nauk, Institut Istorii Estestvoznaniija i Techniki, Sankt-Petersburgskij Filial. Pod red. M. Chajnemanna. – S.-Petersburg: Dmitrij Bulanin 2002.
- [11] NKVD-Akte (Untersuchungsakte 2929), Hans Hellmann, 9.3.-29.5.1938, mit zusätzlichen Dokumenten vom 27.11.1956 und 6.4.1957, deutsche Übersetzung nach vorliegenden Kopien von S. R. Arnold, im Hellmann-Archiv Siegen.
- [12] Den Geheimdienstakten diktatorischer Staaten gegenüber ist mit gebotener Vorsicht zu begegnen. Sie bedürfen einer besonderen Methodik bei der Auswertung.
- [13] K. von Meyenn, Hrsg., Quantenmechanik und Weimarer Republik, Vieweg, Braunschweig 1994.
- [14] H. Hellmann, W. Jost, Zeitschr. Elektrochem. 1934, 40, 806.

## Die Autoren



Karl Jug, geb. 1939, studierte Physik in Frankfurt, wo er 1964 sein Diplom in Physik und 1965 seine Promotion in Physikalischer Chemie bei Hermann Hartmann abschloss. Von 1965-67 war er wissenschaftlicher Mitarbeiter und Redaktionsleiter bei *Theoretica Chimica Acta*, danach zwei Jahre Postdoc am IIT in Chicago. Er wurde 1969 Assistant Professor an der Saint Louis University und 1971 Associate Professor. Er kehrte 1975 nach Deutschland zurück, wo er an der Universität Hannover Professor für Theoretische Chemie ist, mit dem Schwerpunkt auf Festkörper und Oberflächen. Er ist derzeit Vorsitzender des Ortsverbandes Hannover der GDCh.

### Korrespondenzadresse:

Prof. Dr. K. Jug, Theoretische Chemie, Universität Hannover, Am Kleinen Felde 30, 30167 Hannover, E-Mail: jugthc@mbx.theochem.uni-hannover.de



Wolfgang Ertmer, geb. 1949, studierte Physik in Bonn, wo er 1975 sein Diplom in Physik und 1978 seine Promotion bei Prof. Penselin abschloss. In den Jahren 1982 bis 1985 war er als visiting scientist am Joint Institute for Laboratory Astrophysics in Boulder, Colorado. Nach seiner Rückkehr habilitierte er in Bonn und übernahm dort eine Professur in Experimentalphysik und Angewandter Physik. 1994 nahm er den Ruf auf eine Professur am Institut für Quantenoptik an der Universität Hannover an. Neben seiner Tätigkeit am Institut für Quantenoptik ist er seit 1997 Sprecher des Sonderforschungsbereiches 407 „Quantenlimitierte Messprozesse mit Atomen, Molekülen und Photonen“. Im Mai 2002 wurde er zum Mitglied des Vorstandes des Laser-Zentrums Hannover berufen. Seit Oktober 2002 ist er Vizepräsident für Forschung der Universität Hannover.

### Korrespondenzadresse:

Prof. Dr. W. Ertmer, Institut für Quantenoptik, Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover, E-Mail: ertmer@iqo.uni-hannover.de



Joachim Heidberg, geb. 1933, studierte Chemie in Erlangen und Frankfurt und promovierte 1962 bei Hermann Hartmann. 1962-1964 war er Resident Research Associate am Argonne National Laboratory, University of Chicago. Nach der Habilitation wurde er 1972 Professor an der Universität Frankfurt, 1973 Professor an der Universität Erlangen-Nürnberg, 1978 gleichzeitig Gastprofessor an der Universität Bayreuth, 1981 Direktor des Instituts für Physikalische Chemie und Elektrochemie der Universität Hannover. Seit 1995 ist er Mitglied der Braunschweig. Wissensch. Gesellschaft, Klasse f. Math. u. Naturwiss., seit 2001 Vorsitzender. Arbeitsgebiete: Laserinduzierte resonante Desorption und Verdampfung, Herstellung, Thermodynamik, Struktur geordneter Grenzschichten an Salzen und Kohlenstoffen, Polarisationspektroskopie, Orientierungsphasenübergänge, elektrostatische Salztrennung.

### Korrespondenzadresse:

Prof. Dr. J. Heidberg, Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie, Universität Hannover, Callinstr. 3A, 30167 Hannover, Fax 0511/4818277



Manfred Heinemann, geb. 1943, studierte an den Universitäten Münster, Hamburg und Bochum und erlangte 1971 den Dr. phil. an der Abteilung für Geschichtswissenschaft der Ruhr-Universität Bochum. Dort war er bis 1979 Wiss. Assistent in der Sektion für Sozialpsychologie und Sozialanthropologie der Abteilung Sozialwissenschaft. 1979 wurde er zum Professor für Allgemeine Erziehungswissenschaften an der Universität Hannover ernannt. 1982 ist er Leiter des „Zentrums für Zeitgeschichte von Bildung und Wissenschaft“ (ZZBW) der Universität Hannover. Publikationen: siehe [www.zzbw.uni-hannover.de](http://www.zzbw.uni-hannover.de)

### Korrespondenzadresse:

Prof. Dr. M. Heinemann, Zentrum für Zeitgeschichte von Bildung und Wissenschaft, Universität Hannover, Wunstorfer Str. 14, 30453 Hannover, E-Mail: m.heinemann@zzbw.uni-hannover.de



W. H. Eugen Schwarz, geb. 1937, studierte in Freiburg, Hamburg (experimentelles Chemie-Diplom) und Frankfurt Chemie sowie Physik, Mathematik, Philosophie, Psychologie (Dr. phil.nat.). Er habilitierte in Bonn und war dort als Universitätsdozent und apl. Prof. tätig. Seit 1976 ist er Professor für Theoretische Chemie an der Universität Siegen, seit 2002 auch an der Shanghai Jiao Tong Universität. Er erhielt Gastprofessuren in USA, Holland, Polen, Taiwan und Japan. Arbeitsgebiete: relativistische Effekte in der Chemie, Elektrendichte und chemische Bindung. Er initiierte die Hellmann-Biographie und den Hellmann-Preis für Theoretische Chemie, er betreut zusammen mit Dr. A. Karachalios das Hellmann-Archiv.

### Korrespondenzadresse:

Prof. Dr. W.H.E. Schwarz, Theoretische Chemie, Universität Siegen, 57068 Siegen, E-Mail: schwarz@chemie.uni-siegen.de