

DIE ENTSTEHUNG UND ENTWICKLUNG DER QUANTENCHEMIE IN DEUTSCHLAND *

Andreas Karachalios, AG Geschichte der exakten Wissenschaften, Fachbereich
17-Mathematik, Universität Mainz, D-55099 Mainz
e-mail: kara@mat.mathematik.uni-mainz.de

Während der letzten Jahre hat sich das Interesse der Wissenschaftshistoriker an der Entstehung von wissenschaftlichen Disziplinen im Grenzbereich zwischen Physik und Chemie verstärkt (1). Dieses Interesse motiviert auch das hier vorgestellte Projekt einer Untersuchung der Entstehung und Entwicklung der Quantenchemie in Deutschland (2).

Unter diesem programmatischen Titel möchte ich die Entstehung und institutionelle Ansiedlung der Quantenchemie vor und nach dem Zweiten Weltkrieg in Deutschland verstehen. Ihre Etablierung als eigenständige Disziplin innerhalb der Chemie, besonders durch die in den sechziger Jahren auf bundesdeutschem Gebiet eingerichteten Professuren, ist ebenfalls Teil der Untersuchung.

Das historische Studium der Entwicklung der Quantenchemie führt in Bereiche der Chemie, der Quantenphysik und der Mathematik. Dieser interdisziplinäre Charakter der Quantenchemie (3) resultiert zunächst daraus, daß sie einerseits auf physikalischer Grundlage beruht, andererseits auf chemische Fragen zugeschnitten ist (4). Da die quantenchemische Forschung außerdem zunehmend die Anwendung mathematischer Methoden, numerischer Verfahren und leistungsfähiger Computer erforderte, begannen nach dem 2. Weltkrieg auch Mathematiker, sich mit ihr zu beschäftigen. Für die Entwicklung der Quantenchemie waren Deutschland und Kopenhagen wichtige Zentren, vor allem bedingt durch die dortigen Erfolge der Theoretischen Physik und die Formulierung der Quantenmechanik in den 20er und 30er Jahren. Außerdem gab es in diesen Jahren wissenschaftliche Kontakte zwischen Deutschland, den USA und England, die zu neuen theoretischen Beiträgen und Kontroversen zwischen den einzelnen Schulen des entstehenden Gebiets geführt haben.

* Nach einem Vortrag auf der Tagung der Fachgruppe Geschichte der Chemie der GDCh, Marburg, 13.-15. März 1997. Herrn Prof. Christoph Meinel möchte ich für die Einladung und die nachfolgende Diskussion meinen Dank ausdrücken. Prof. David Rowe und Dr. Moritz Eppe danke ich herzlich für die anregenden Diskussionen in dem Oberseminar und Dr. M. Eppe für seine Unterstützung bei der Korrektur des Textes.

Gerade in der vergleichenden Analyse der Verflechtungen mit der Entwicklung in England und den USA zeigen sich auch die Besonderheiten der Entwicklung der Quantenchemie in Deutschland.

Man kann eine grobe Orientierung über die Etablierung der Quantenchemie im Bundesgebiet (5) durch die Unterscheidung von drei Phasen gewinnen, die ich die Initialphase, die Konstituierungsphase, und die Etablierungsphase nennen möchte (6).

a) Initialphase (1927-1930): In dieser Phase ist vor allem die Entwicklung von verschiedenen Vorstellungen über das Wissenschaftsziel der neuen Disziplin zu studieren. Vor allem durch die Beiträge der Quantenphysiker bildete sich eine neue Orientierung der wissenschaftlichen Aktivitäten auf die jeweiligen Erkenntnisgegenstände heraus. In unserem Fall erfassten und verdeutlichten die Quantenphysiker neue, für die Chemie relevante Begriffe und Methoden, die im Erkenntnisgebiet der Quantenphysik verwurzelt waren.

In dieser Phase haben vor allem die Publikationen von Walter Heitler, Fritz London, Friedrich Hund sowie die zwei Hauptversammlungen der Deutschen Bunsen-Gesellschaft in den Jahren 1928 und 1930 mit den Hauptthemen "Die Arten chemischer Bindung und der Bau der Atome" bzw. "Spektroskopie und Molekelbau" reichlich zum Austausch von neuen Begriffen zwischen Physikern und Chemikern beigetragen. Dieser Austausch verlief allerdings nicht immer unproblematisch (7).

Weitere wichtige Bausteine der Initialphase waren Vorlesungen und Seminare zu quantenchemischen Themen. Im Wintersemester 1930 hielt Hund in Leipzig eine Spezialvorlesung über die "Theorie des Molekelbaus", die sich mit der Anwendung der Quantenmechanik auf Molekül-Probleme beschäftigte. 1928 hatte Debye die erste "Leipziger Woche" den Problemen der "Quantentheorie und Chemie" gewidmet; dort gab London einen zusammenfassenden Bericht über die "Quantenmechanische Deutung des homöopolaren Valenzbegriffes". An der Göttinger Universität schließlich hielt im Winter-Semester 1929/30 und 1930/31 Heitler eine Vorlesung unter dem Titel "Quantentheorie der Molekel- und Atom-Struktur".(8)

Wie bereits diese Hinweise zeigen, waren die meisten "Pioniere" der entstehenden Disziplin Physiker. Unter diesen ist besonders Erich Hückel hervorzuheben, dessen Rolle in der historischen Literatur bis jetzt kaum behandelt worden ist. Unter Anregungen von Niels Bohr und Peter Debye, später unter der wissenschaftlichen Unterstützung von Hund und Heisenberg in Leipzig wandte Hückel die Quantentheorie auf das alte Problem der chemischen Bindung in organischen Verbindungen an. Er wurde am 9. August 1896 in Charlottenburg als zweiter von drei Brüdern geboren. 1914 begann er kurz vor Ausbruch des ersten Weltkriegs in Göttingen Physik und Mathematik zu studieren. Nach Kriegsende wurde er das Studium in Göttingen fortgesetzt, wo am 6. Januar 1921 bei Peter Debye mit einer Dissertation über die Zerstreuung von Röntgenstrahlen an anisotropen Flüssigkeiten promovierte. Im Jahr 1921

nahm Hückel dann Hilberts Angebot auf eine Hilfsassistentenstelle am mathematischen Institut der Universität Göttingen für ein Jahr an. In diesem Jahr hielt der einflußreiche Mathematiker Vorlesungen über die spezielle und allgemeine Relativitätstheorie. Hückels Tätigkeit bei Hilbert bestand hauptsächlich darin, diesem als Gesprächspartner zur Vorbereitung der Vorlesungen zur Verfügung zu stehen. Eine Vorlesung Hilberts im WS 1919/20 über "Denkmethoden der exakten Wissenschaften" für Hörer aller Fakultäten, in der Hilbert seine wissenschaftstheoretischen Vorstellungen erläuterte, hat Hückel stark beeinflußt. Mit einer weiteren Assistentenzeit erst bei Max. Born und dann von 1922 bis 1928 bei Debye in Zürich, mit welchem er die berühmten gewordenen Arbeiten über Elektrolyte schrieb, endet seine erste wissenschaftlich kreative Zeit (9). Über diese Zeit berichtet Hückel selbst in seiner Autobiographie (10). Die folgenden Jahre 1928 bis 1930 waren Wanderjahre - ein Rockefeller-Stipendium ermöglichte ihm, in London bei F. Donnan, in Cambridge bei Paul Dirac und in Kopenhagen bei Bohr zu arbeiten. 1929-1930 gab ihm ein Stipendium der Notgemeinschaft Gelegenheit, bei Heisenberg und Hund zu arbeiten und sich in Leipzig mit der Quantentheorie vertraut zu machen.

b) Konstituierungsphase (1930 - ca. 1960): Die Konstituierungsphase der Quantenchemie in Deutschland beginnt meines Erachtens mit der Dozentur Hückels an der TH Stuttgart als Lehrbeauftragter für "Chemische Physik". Im Jahr 1930 begannen zugleich auch die "fruchtbarsten Jahre" seiner wissenschaftlichen Arbeit. Über sein Fachgebiet und seine Dozentur in Stuttgart berichtete er 1975 in seiner Autobiographie (11):

Es gab die Physik, es gab die Chemie. Es gab auch die Physikalische Chemie. Aber was ich machte, paßte in keines von diesen Fächern. Auch die Physikalische Chemie, wie man sie damals betrieb, war etwas ganz anderes als das, was ich machte. Meine Beschäftigung war die Anwendung einer neuen Theorie der Physik, der "Quantenphysik", auf chemische Probleme. Um den Unterschied dieses neuen Grenzgebiets gegenüber der bisherigen Physikalischen Chemie zum Ausdruck zu bringen, sprach man (und spricht auch noch) von "Chemischer Physik", ein Ausdruck, den ich nicht für besonders glücklich gewählt halte, denn er sagt doch eigentlich, daß chemische Methoden auf die Physik angewendet werden, und das ist nicht der Fall. Deshalb ist wohl auch der Ausdruck "Quantenchemie" gebräuchlicher geworden. Hiermit kommt besser zum Ausdruck, daß Methoden der Physik, und zwar speziell der Quantentheorie, auf chemische Probleme angewendet werden. Diese Grenzwissenschaft war am Beginn ihrer Entwicklung. Infolgedessen gab es für sie noch keine Professorenstellen, und demgemäß auch keine für Dozenten und Assistenten.

Auf seiner Rede auf der Hauptversammlung der deutschen Chemiker 1936 in München (12) betonte Hückel auch die Notwendigkeit neuer Lehrstühle für diesen Bereich sowie die Notwendigkeit der Zusammenarbeit zwischen Chemie und Physik und einer gewissen physikalisch-mathematischen Schulung der Chemiker. Seine Absichten mußten jedoch mehr als dreißig Jahre warten, um Anerkennung unter den Chemikern in Deutschland zu finden.

Die Stuttgarter Dozentur Hückels kann als der erste Versuch zur Durchsetzung der Quantenchemie in Lehre und Forschung an den deutschen Universitäten angesehen werden. In der Tat betrachten ich Hückel und Hund als die Zentralfiguren dieser Entwicklung, da sie die mathematisch-physikalische Tradition Göttingens und Kopenhagens verkörperten. Im folgenden möchte ich einige weitere Bemerkungen über die Beiträge Hückels machen und danach kurz auf einige Überlegungen Hunds eingehen.

Das erste Problem, mit dem sich Hückel um 1930 beschäftigte, war die theoretische Interpretation der C-C-Doppelbindung. Das zweite verwandte Problem war eine Theorie der Bindung im Benzolring. Als Hückel die Theorie des Benzols in Angriff nahm, wurde er in quantentheoretischen Fragen von Hund und Heisenberg unterstützt. Bei der Behandlung von chemischen Fragen fand er Unterstützung von seinem Bruder, dem Organiker Walter Hückel. Aus der Zusammenarbeit der beiden Brüder entstand das zweibändige Werk "Theoretische Grundlagen der Organischen Chemie", das 1931 in der ersten Auflage erschien (13). Das Buch hatte interdisziplinären Charakter und wandte sich sowohl an Chemiker als auch an Physiker. Erich Hückel verfaßte nicht nur den Abschnitt über die Quantenmechanik, sondern er wirkte auch bei der Abfassung der physikalischen und organisch-chemischen Abschnitte mit (14). In diesem Werk wandten die Brüder Hückel physikalische Theorien und insbesondere die Quantenmechanik auf die Chemie an. Im Vorwort betonten sie (15):

Der Zweite Band vermittelt dann die Kenntnis des theoretischen Rüstzeugs, welches die neuere Entwicklung der Physik und Physikalischen Chemie für ein tieferes Eindringen in die Probleme liefert, welche die rein chemische Forschung nicht zu lösen vermochte.

Die Brüder Hückel vertraten ein reduktionistisches Forschungsprogramm, nach dem das chemische Geschehen auf physikalische Grundgesetze zurückgeführt werden sollte. In seinem Vortrag "Über die Bedeutung der neuen Quantentheorie für die Chemie" berichtete Erich Hückel auf der Hauptversammlung der deutschen Chemiker 1936 in München, daß "die Zurückführung aller chemischen Probleme auf diese physikalischen Grundgesetze heute keine prinzipiellen, sondern nur mehr methodische Schwierigkeiten bietet" (16). In erster Linie handelte es sich für Hückel darum, zu einem Verständnis aller Erscheinungen der organischen Chemie durch eine möglichst einheitliche Theorie aus ersten Prinzipien zu gelangen. Eine speziellere Gruppe von Problemen, an deren Lösung die organische Chemie ebenso wie die Physik interessiert war, bestand in der theoretischen Deutung der Zusammenhänge zwischen Konstitution und physikalischen Eigenschaften. Ein solches theoretisches Verständnis war unbedingt erforderlich, um Strukturfragen von Molekülen zu klären, die auf chemischem Wege nicht eindeutig entschieden werden konnten.

Was die Brüder Hückel (17) und auch Hund (18), vor allem aber Erich Hückel, in ihren Publikationen immer wieder betont haben, ist der **unanschauliche**

Charakter der neuen Quantenmechanik. Dieser Aspekt ist meines Erachtens von großem wissenschaftshistorischen Interesse, da er wesentlich zur Erklärung der prekären Stellung der Quantenchemie in der wissenschaftlichen Kultur der 30er Jahre beitragen kann. Die Entwicklung der Quantentheorie hatte bekanntlich vor allem in der sogenannten "Kopenhagener Deutung" zu der Auffassung geführt, daß es prinzipiell unmöglich ist, das atomare Geschehen mit Hilfe der alten anschaulichen mechanischen Modelle darzustellen. Die atomaren Vorgänge konnten nicht mehr durch Bewegungen von Teilchen oder Wellen im gewöhnlichen Raum beschrieben werden. Unter anderem war es erforderlich geworden, einen Raum von höherer Dimensionszahl, den sogenannten Konfigurationsraum, zur mathematischen Beschreibung des atomaren Geschehens heranzuziehen.

Hückel selbst stieß auf das Problem der Unanschaulichkeit der Quantenchemie, als er in seiner ersten Arbeit im Jahre 1931 versuchte, das Problem der Konstitution des Benzols theoretisch zu deuten (19). Zwei Jahre später erschien dann auch die erste Arbeit des Amerikaners L. Pauling zum selben Problem (20). Durch den Vergleich der Vorgehensweisen von Hückel und Pauling können wir einen guten Einblick in ihre unterschiedliche Auffassung von der Rolle der Theorie in der Chemie und dem methodologischen Status von empirischen Beobachtungen gewinnen.

Hückel übte eine scharfe Kritik an Paulings Realismus (21). Im Gegensatz zu der von Pauling zunächst vorgetragenen Auffassung entsprachen für Hückel sowohl die Kekulé- als auch die Dewar-Strukturen nicht der physikalischen Realität. "Bei der hier gegebenen Deutung der Elektronenkonfiguration des Benzols" schrieb Hückel, "verliert die Kekulé'sche Formulierung des Benzolringes mit abwechselnden Doppel- und Einfachbindungen ihren Sinn." (22). In einem späteren Aufsatz unter dem Titel "Zur Entwicklung der Denkmodelle in der Chemie" führte Hückel die Kritik an Pauling weiter aus (23):

Vielmehr besitzt das Benzol-Molekül eine und nur eine ganz bestimmte Konstitution. Seit Kekulé ist immer wieder sehr viel herumgerätselt worden, wie man diese Konstitution verstehen und darstellen soll.(...) Bei der Frage nach der *bildlichen Darstellung* handelt es sich um ein typisches *Scheinproblem*. Die Strukturformeln, welche die Vierwertigkeit des Kohlenstoffs sozusagen als Dogma voraussetzen, sind nur ein grobes Veranschaulichungsmittel. Es braucht nicht Wunder zu nehmen, wenn ein solches nicht allgemein verwendbar ist.(...) Etwas anderes ist es, wenn man die Frage stellt, ob sich die besondere Konstitution des Benzols auf Grund des Aufbaus der Kohlenstoffatome und der Wechselwirkungen zwischen diesen verstehen läßt.(...) 1931 versuchte ich, diese Frage auf Grund der Kenntnisse, die man durch die Atomtheorie und Quantenmechanik hat, zu beantworten. Hierzu benutzte ich zwei verschiedene Näherungsverfahren. 1933 brachte Pauling die mit einem dieser Verfahren durchgeführten Rechnungen in eine elegantere Form, die aber in ihrem mathematischen Inhalt und im Ergebnis den von mir seinerzeit durchgeführten Rechnungen völlig äquivalent ist. In jener Form wurden diese Rechnungen so gedeutet, daß hierbei die Konstitution des Benzols von fiktiven Zuständen aus angenähert wird, die den beiden oben erwähnten verschiedenen Strukturformeln entsprechen. Der wirkliche Zustand soll dann nach

Pauling durch eine - später als *Mesomerie* bezeichnete- Art von Überlagerung dieser fiktiven Zustände darstellbar sein. Dabei spricht er in etwas schiefer Analogie zu Resonanzerscheinungen in der Mechanik von einer "Resonanz" zwischen jenen fiktiven Zuständen. Diese soll es bedingen, daß das Benzol einen geringeren Energieinhalt hat, als ihm zukäme, wenn man diesen für nur einen, allein vorhandenen, fiktiven Zustand berechnete.(...) Diese Deutung ist aber philosophisch unhaltbar; denn es ist eine *contradictio in adjecto* durch Addition *fiktiver* Zustände und einer "Resonanz" zwischen diesen einen *wirklichen* Zustand erhalten zu wollen.(...) Dies besagt andererseits aber nicht, daß das angewandte Rechenverfahren zur Bestimmung des Energieinhalts des Benzols im Vergleich zu demjenigen anderer Verbindungen unzulässig sei.(...) Im übrigen treten bei dem zweiten von mir seinerzeit angewandten Näherungsverfahren jene fiktiven Zustände und ihnen zugeordneten Strukturformeln überhaupt nicht auf.

Die Strukturformen der klassischen organischen Chemie sind nach Hückel nicht reale Strukturen, sondern Konventionen, Vereinbarungen. Das Benzolmolekül wurde von Hückel als reine mathematische Abstraktion im Konfigurationsraum vorgestellt. Auch dies war zwar eine konventionelle Darstellung des chemischen Sachverhalts, jedoch, wie Hückel glaubte, eine durch die experimentellen Beobachtungen sehr viel besser gerechtfertigte als die des Valenzstrichschemas. In einem Brief von 29.11.31 an M. Born schrieb er (24):

Die Diskrepanz zwischen dem Valenzstrichschema und dem Valenzschema der Quantentheorie scheint mir eine schöne Illustration und Entscheidung zu Gunsten des quantentheoretischen Schemas durch die Verhältnisse bei den aromatischen Verbindungen zu erhalten. Beispielsweise lässt ja das Strichschema beim Benzol die beiden Möglichkeiten voraussehen.(...) In der Quantentheorie gibt es aber nur eine Möglichkeit. Für diese sind im Konfigurationsraum alle 6 Atome gleichberechtigt. Diese Gleichberechtigung lässt sich mit dem Strichschema überhaupt nicht erreichen. Sie ist aber nicht nur quantentheoretisch, sondern auch experimentell gefordert. Mithin liegt hier ein Fall vor, wo das Experiment zu Gunsten des quantentheoretischen gegen das Strichschema entscheidet.

Man sieht daraus, daß das Valenzstrichschema von Kekulé auf einer tiefer liegenden Struktur beruht, und zwar auf der, die die Quantenmechanik beschreibt. Das Kekulé'sche Strichschema ist lediglich eine symbolische Vermittlung der quantenphysikalischen Kräfte, die zwischen den Kohlenstoffatomen wirken. Die experimentell bestätigte Gleichberechtigung der 6 Kohlenstoffatome wird dagegen nur durch die Beschreibung in dem abstrakten Konfigurationsraum erreicht. Wir haben hier ein schönes Beispiel für das, was Hilbert allgemein als "Tieferlegung der Fundamente" (25) bezeichnet hat, und zugleich ein Indiz für den Einfluß von Hilberts wissenschaftstheoretischen Ideen auf Erich Hückel.

Im Gegensatz zum "Pragmatismus" von Pauling, den Gavroglu und Simoes (26) treffend beschrieben haben, lieferte Hückel ein echtes quantentheoretisches Modell für das Benzol und verwandte Stoffe mit aromatischen Eigenschaften. Bei der Behandlung seines Modells in der Arbeit von 1931 hat sich Hückel zweier damals bekannter Näherungsverfahren bedient. Die zweite, welche heute nach Hückel die HMO-Theorie genannt wird, besteht aus heutiger Sicht aus

einem topologischen und einem energetischen Teil. "Topologisch" bedeutet dabei, daß in diesem Teil der Theorie nur Begriffe vorkommen, welche die Nachbarschaftsverhältnisse der C-Atome im Molekül betreffen (27).

Die theoretischen Ausführungen Hückels wurden von der Mehrheit der Chemiker vermutlich nicht verstanden. Ein wichtiger Grund dafür ist, daß unter deutschen Chemikern eine experimentelle und heuristische Denkweise vorherrschte (28). Ihre traditionelle Ausbildung hinderte sie daran, eine unanschauliche und rein mathematische Bearbeitung von chemischen Problemen mit ihren gewohnten Ideen in Verbindung zu bringen.

Auf geringere Schwierigkeiten stieß Hückel dagegen bei seinen Kollegen unter den Physikern. Beispielsweise führte Hund die Hückelschen Überlegungen zu Unanschaulichkeit des quantenchemischen Ansehens in Richtung einer größeren Differenzierung weiter aus. Um die chemische Bindung und die Prinzipien der organischen Chemie physikalisch zu verstehen, argumentierte Hund rückblickend in Jahre 1949, konnte man die unanschauliche Quantentheorie an verschiedenen Stellen der theoretischen Betrachtung einführen. Hund unterschied drei Stufen der Erklärung (29):

Auf einer *ersten Stufe* der Betrachtung wird man die Existenz von Atomen (den chemischen Elementen entsprechend) annehmen und Regeln für die Kräfte zwischen ihnen aus der Erfahrung entnehmen; einmal additiv zwischen je zwei Atomen wirkende Anziehungskräfte, dann auch gerichtete Kräfte, die abgesättigt werden, entsprechend den Valenzregeln(...). Auf der *zweiten Stufe* der Betrachtung setzte man Ergebnisse der Quantentheorie des Atoms voraus, nämlich die Bildungsenergien, Ladungen und Radien der Ionen. Daraus kann man auf anschaulichem Wege - ohne nochmalige Benutzung der Quantentheorie - die Eigenschaften der heteropolar gebauten Materie weitgehend ableiten(...). Diese Zweiteilung der Aufgabe: Die Benutzung der Quantentheorie nur beim einzelnen Atom und das anschaulich klassische Vorgehen bei den mehratomigen Gebilden, versagt bei der (homöopolaren) Valenzbindung und bei der metallischen Bindung. Diese Erscheinungen erforderten vielmehr eine *dritte Stufe*, nämlich die Behandlung der Molekel oder des Kristallgitters als quantentheoretisches System. Diese Aufgabe erfordert dann ein tieferes Eindringen in die Quantentheorie.(...) Ehe wir uns dazu entschließen, ist es gut, daß wir uns noch einmal deutlich vergegenwärtigen, wie der Zwang der Tatsachen zum Verzicht auf die anschauliche Beschreibung der atomaren Vorgänge und zum Einführung des Wirkungsquantums geführt hat.

Nach Hund leistete die Quantentheorie der Moleküle eine Verschärfung jener Begriffe, mit denen die Chemie ihr Erfahrungsmaterial geordnet hatte (30):

Bei dieser Verschärfung werden Valenzzahl, Valenzstrich, Mesomerie, aromatische Bindung usw. exakte Begriffe, bei denen auch genau klargestellt ist, wieweit sie im klassisch anschaulichen Sinne verwandt werden dürften.

Auch dies entsprach dem Hilbertschen Ideal von der "Tieferlegung der Fundamente".

Ein weiterer "Pionier" dieser Zeit, der für die Diskussion um die Anschaulichkeit

bzw. Unanschaulichkeit der Quantenchemie wichtig ist, war Hans Hellmann (31). Er wurde am 14. Oktober 1903 in Wilhelmshaven geboren. Nach dem Besuch verschiedener Grundschulen in Berlin, Hagen, Dortmund und Wilhelmshaven bezog er Ostern 1913 die Sexta des humanistischen Gymnasiums in Wilhelmshaven, das er Ostern 1922 mit dem Zeugnis der Reife verließ. Im WS 1922/23 begann er an der TH Stuttgart ein Studium der Elektrotechnik; Ostern 1923 vertauschte er diese Fachrichtung mit der der technischen Physik. Nach seiner Diplomprüfung im Jahr 1927 arbeitete er bei dem Experimentalphysiker Erich Regener als Doktorand. Im Jahr 1929, nach Abschluß der Promotion wurde Hellmann Assistent bei Erwin Fues an der Technischen Hochschule in Hannover; von 1931 bis 1934 arbeitete er als hauptamtlicher Dozent für Physik an der Tierärztlichen Hochschule Hannover. Nachdem im Herbst 1933 seine Habilitation an der TH Hannover wegen der jüdischen Herkunft seiner Ehefrau Viktoria (geb. Bernstein) abgelehnt wurde, wurde er an der Tierärztlichen Hochschule am 31. März 1934 aus dem Hochschuldienst entlassen. Nach seiner Entlassung emigrierte Hellmann mit seiner Familie in die Sowjetunion und nahm eine Professur am Karpow-Institut für physikalische Chemie in Moskau an. Im Jahr 1938 wurde Hellmann als angeblicher deutscher Spion in Moskau verhaftet und erschossen.

Zur Zeit seiner Entlassung hatte Hellmann das Manuskript seines Buches "Einführung in die Quantenchemie" beendet. Dessen Inhalt trug er dann zuerst 1935/1936 in einer Vorlesung am Karpow-Institut vor. Das Buch erschien im Jahr 1937 in russischer Sprache; es ist das erste Handbuch der Quantenchemie überhaupt. Inzwischen versuchte W. Jost in Hannover, der 1933 gemeinsam mit Hellmann einige Kapitel des Buches ausgearbeitet hatte, vergeblich, einen Verlag für Hellmanns Buch zu finden (32). Schließlich erschien das Buch von Hellmann in verkürzter und teilweise umgearbeiteter Form unter dem Titel "Einführung in die Quantenchemie" in dem Wiener Verlag Franz Deuticke im Jahr 1937 (33). Bereits zuvor war im Jahr 1934 in der "*Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische*" Chemie ein Artikel von Hellmann und Jost mit dem Titel "Zum Verständnis der chemischen Kräfte nach der Quantenmechanik" erschienen(34). Ziel dieses Artikels war es, eine anschauliche Deutung der nicht klassischen Kräfte zwischen Atomen und Ionen zu geben. Hellmann und Jost legten ihrer Arbeit das Thomas-Fermische Atommodell zugrunde: ein der Fermi-Statistik gehorchendes Gas von Elektronen im Coulombschen Feld des Atomkerns. Obwohl dieses Modell als Ausgangspunkt für die quantitative Berechnung homöopolarer Bindungskräfte wenig geeignet war, führte es doch in sehr anschaulicher Weise zu einem qualitativen Verständnis des Zustandekommens der homöopolaren Bindung. Die auf statistischem Wege erhaltenen Resultate von Hellmann und Jost haben wegen ihrer "anschaulichen und leicht verwertbaren Vorstellung von der homöopolaren Valenz" (35) wurden zum Beispiel von Otto Schmidt aufgegriffen, der am Hauptlaboratorium der I. G. Farben in Ludwigshafen a. Rh tätig war und in dieser Zeit grundlegende Arbeiten zur Theorie der Doppelbindung verfaßte. Abgesehen von ihrer Aufnahme durch Schmidt fanden die Vorstellungen Hellmanns jedoch über lange Zeit keine Resonanz. Dabei ist zu berücksichtigen, daß allgemeine Betrachtungen über die Natur der chemischen

Bindung über viele Jahre in der Quantenchemie eine sekundäre Rolle spielten. Erst 1962 kam K. Ruedenberg zu neuen Erkenntnissen über den Mechanismus der chemischen Bindung (36). Seine Untersuchung bestätigte Hellmanns Auffassung, daß die Erniedrigung der kinetischen Energie die entscheidende Rolle bei der Entstehung der Bindung spielt (37).

Die Konstituierungsphase der Quantenchemie wird nach 1937 durch eine **Diskontinuität** bezeichnet. Die Gründe dafür sind einerseits in dem beschriebenen Traditionalismus der Chemiker, andererseits aber auch in institutionellen und ideologischen Faktoren zu suchen. Im Jahr 1937 mußte Hückel durch "Befehl" vom Berliner Kultusministerium Stuttgart verlassen, um das planmäßige Extraordinariat für Theoretische Physik an der Universität Marburg anzutreten (38). In dieser Zeit bedeuteten natürlich neben den ideologischen Belastungen durch die NS-Herrschaft auch die Emigration der jüdischen Wissenschaftler und die Kriegsjahre, eine große Erschwerung wissenschaftlichen Arbeitens (39).

Obwohl die neue Disziplin während der schwierigen Jahre in Deutschland nicht wesentlich weiter entwickelt wurde, zeigte sich nach dem Krieg, daß sie dennoch überwintern konnte. Die ersten deutsche Vorstöße für weitere Schritte in der Entwicklung der Quantenchemie kamen von zwei Zentren.

Das erste dieser Zentren war Frankfurt, wo während der 40er Jahre Hermann Hartmann wirkte (40). Nach seinem Chemie- und Physik-Studium während der 30er Jahre an der Technischen Hochschule bzw. Universität München unter Hans Fischer, Heinrich Wieland und Arnold Sommerfeld ist Hartmann nach Frankfurt übersiedelt. Dort entstanden im Jahr 1941 eine Promotion und im Jahr 1943 eine Habilitationsschrift, in der eine ganze Reihe von chemischen Phänomenen aus dem Bereich der konjugierten und aromatischen Verbindungen im Rahmen der Theorie von Hückel erklärt wurden. In der Zeit von der Wiedereröffnung der Frankfurter Universität im Jahr 1946 bis 1951 erarbeitete Hartmann dann mit der Unterstützung von Alfred Magnus sowohl theoretisch wie auch experimentell die Ligandenfeldtheorie. Diese Arbeiten vereinigten die klassische elektrostatische Theorie der Komplexverbindungen von Alfred Magnus (1922) und die quantenmechanische Kristallfeldtheorie von Hans Bethe (1929) (41). 1952 wurde Hartmann als Nachfolger von Magnus auf den Lehrstuhl für Physikalische Chemie der Frankfurter Universität berufen. Seine erste organisatorische Aufgabe war der Bau eines Physikalisch-Chemischen Instituts, wo sich seit Ende der 50er und Anfang der 60er Jahre mit besonderer Unterstützung der Deutschen Forschungsgemeinschaft eine kleine Theoretikergruppe gebildet hat.

Das zweite Zentrum für die Entwicklung der Quantenchemie nach dem Krieg war Anfang der 50er Jahre wiederum Göttingen und später München an dem dortigen Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik. Dort konnte Heinz Werner Preuß mit Unterstützung von W. Heisenberg und einer Gruppe von Mitarbeitern ausgehend von Methoden der Molekülphysik und ihren Anwendungsbereichen die Quantenchemie aus theoretischer und methodischer

Sicht weiter ausbauen. S. Peyerimhof berichtet Über die ersten Arbeiten von H. Preuß (42):

Diese Arbeiten entwickelten sich dann in eine Richtung, welche mit dem Namen <<quantenchemische Ab-initio-Rechnungen>> oder <<Numerische Quantenchemie>> später bedacht wurde. Da der Wissenschaftler Austausch mit dem Ausland in den frühen 50er Jahren noch sehr beschränkt war, wurden die entsprechenden Arbeiten im internationalen Concours leider nicht immer bekannt, so daß man hier bereits veröffentlichte Methoden mitunter zu einem späteren Zeitpunkt anderenorts neu entdeckte.

c) Inhaltliche Gesichtspunkte und Auseinandersetzungen über Fragen wie z.B. die unvermeidliche Unanschaulichkeit der Quantenchemie haben die Konstituierungsphase der Quantenchemie wesentlich geprägt. Dagegen prägten die **Etablierungsphase (ab ca. 1960)** eher institutionelle Entwicklungen. Im Verlauf der 60er Jahre erreichte die neue Disziplin Anerkennung durch die neu eingerichteten Universitäts-Professuren für Theoretische Chemie (43). Die neuen Zentren waren Göttingen unter der Leitung von W. Bingel (ab 1964), die Freie Universität Berlin mit Ernst Ruch (ab 1966), Stuttgart mit Preuß (ab 1967), und München mit Ludwig Hofacker (ab 1968). Gleichzeitig wurde das Fach Theoretische Chemie in den Ausbildungsplan miteinbezogen. Außerdem hat die DFG damals mit ihrem Schwerpunktprogramm Theoretische Chemie die quantenchemischen Arbeiten sehr unterstützt und damit wesentlich zur Verbreitung des Faches beigetragen (44). In diesen Jahren weckte auch Bernhard Kockel in Gießen in einer kleinen Forschungsgruppe das Interesse für quantenchemische Rechnungen (45). Inzwischen faßte das Kuratorium der Universität Frankfurt im Jahr 1966 einen Beschluß, durch den die geschilderten Bemühungen Hartmanns anerkannt wurden: Es wurde ein "Zentrum für Theoretische Chemie" mit zwei Lehrstühlen und drei Assistentenstellen gegründet (46). Es entstand also in Frankfurt durch Initiative Hartmanns erst ein Institut und dann ein "Zentrum" für Theoretische Chemie. Hartmanns Einfluß war in verschiedenen Richtungen bedeutsam: Erstens war er gemessen an der Qualität und Zahl seiner Schüler im In- und Ausland, einer der einflußreichsten Hochschullehrer im Bereich der Theoretischen Chemie. Neunzehn ehemalige Doktoranden sind inzwischen als Professoren an Universitäten berufen worden. Sein dreisemestriger Vorlesungszyklus zur Einführung in die theoretische und physikalische Chemie war jahrzehntelang eine Anziehungskraft für Chemie- und Physikstudenten, die schließlich seinem Arbeitskreis zugeführt wurden (47). Zweitens profilierte sich Hartmann als Wissenschaftsorganisator für die Entwicklung der Quantenchemie, vor allem durch die Gründung der "THEORETICA CHIMICA ACTA", der ersten internationalen Zeitschrift für theoretische Chemie, im Jahr 1962. Schließlich steuerte Hartmann als Wissenschaftspolitiker den Ausbau des Frankfurter Instituts für theoretische Chemie zum "Zentrum für theoretische Chemie". Dieses Institut, profitierte von den Beziehungen zu Repräsentanten von Staat, Industrie und wissenschaftlichen Institutionen, welche Hartmann suchte und pflegte. Von Frankfurt aus wurden ab 1962 die "Konstanzer Internationalen Ferienkurse für Theoretische Chemie" vorbereitet und veranstaltet. Wissenschaftler des Zentrums hielten Gastvorlesungen an anderen deutschen Universitäten über

Themen der Theoretischen Chemie und im Jahr 1965 wurde in Frankfurt das erste Symposium über Theoretische Chemie im deutschsprachigen Bereich veranstaltet.

Mit dem neuen Hessischen Universitätsgesetz wurde Anfang der 70er Jahre das Frankfurter "Zentrum für Theoretische Chemie" aufgehoben. Daher suchte Hartmann Anlehnung an die Mainzer Akademie der Wissenschaften, die für ihn mit Mitteln der Stiftung Volkswagenwerk eine Arbeitsstelle in theoretischer Chemie einrichtete. Seit 1973 konnte Hartmann auf dieser Stelle und zusammen mit einer großen Arbeitsgruppe eine rege Forschungs- und Publikationstätigkeit entfalten. Unter seiner Leitung fand in Mainz in 1973 das 9. Symposium für Theoretische Chemie statt. Auch die "THEORETICA CHIMICA ACTA" wurden jahrelang unter der wissenschaftlichen Förderung der Mainzer Akademie herausgegeben. Das ist nur ein kleiner Ausschnitt der wissenschaftlichen Tätigkeit, die Hartmann mit der Unterstützung der Akademie entwickelt hat (48).

Ich möchte diese kurze Übersicht über die Ansiedlung der Quantenchemie in Deutschland mit einigen weiterführenden Bemerkungen abschließen. Meines Erachtens wird durch die vorgeschlagene Periodisierung in Initial-, Konstituierungs-, bzw. Etablierungsphase die Diskontinuität der historischen Entwicklung der Quantenchemie in Lehre und Forschung in Deutschland deutlich. Während die Stellung der Quantenchemie in der 20er und 30er Jahren wegen ihrer starken Verankerung in der neuen und unanschaulichen Quantenphysik lange prekär blieb, folgte in der Nachkriegszeit eine allmähliche institutionelle Anerkennung und ein entsprechender Aufschwung der Forschung. Allerdings sollte die Etablierung der Quantenchemie im Bundesgebiet nicht nur allein auf der Basis der Arbeiten der Wissenschaftler und der verschiedenen Schulen näher analysiert werden, sondern es sollten auch eine Reihe weiterer unterschiedlicher Komponenten und Faktoren sowohl interne als auch externe in Betracht gezogen werden. So erscheint es mir z. B. notwendig, die Beziehungen zwischen den beiden Hauptrichtungen, in die sich die Nachkriegs-Quantenchemie entwickelte, näher zu untersuchen, d. h. die Beziehungen zwischen der semiempirisch orientierten Modell-Quantenchemie und der Ab-initio-Quantenchemie (49). Außerdem zeigt die Entstehung der Quantenchemie auf eine sehr aufschlußreiche Weise die Veränderungen des wissenschaftlichen "Bildes", an dem sich die Theorien der chemischen Bindung im 20. Jahrhundert orientiert haben (50). Dies gilt insbesondere, wenn das chemiehistorische Material in einen breiteren kulturellen und sozialen Kontext gestellt wird, und z.B. auch die Rezeption quantentheoretischer Ideen unter experimentellen Chemikern geschildert wird, oder Beziehungen zu analogen Konstellationen zwischen quantentheoretischer und experimenteller Physik untersucht werden. Themen wie die Anschaulichkeit bzw. Unanschaulichkeit der quantenchemischen Modelle geben für eine solche Untersuchung einen interessanten Anknüpfungspunkt.

Summary: Quantum chemistry emerged at the end of the 1920's as a subdiscipline of theoretical chemistry. A historical investigation of the process of discipline formation brings out conceptual, cognitive and inter-disciplinary peculiarities. The inter-disciplinary character of quantum chemistry resulted from the fact that it rested on the fundamental principles of the new science of quantum mechanics, while it was directed at chemical problems. The unintuitive features of the 'Copenhagen interpretation' of quantum mechanics have contributed to give a new and controversial solution to the riddles of homeopolar valence bonds and the foundations of organic chemistry, based on physics. Thus, the emergence of quantum chemistry illustrates in a telling way the changes of the 'image of science' which guided theories of chemical bonding during the 20th century. - In Germany the new discipline was given a broader institutional basis only in the 1950's. The main lines of the institutionalisation are briefly reviewed.

1. Erwin Hiebert, "Discipline Identification in Chemistry and Physics", *Science in Context* 9, 2 (1996), 93-119; Mary Jo Nye, *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry: Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines, 1800-1950*, Berkeley: University of California Press, 1994 (Mit umfassender Bibliographie). Von älteren Arbeiten ist zu erwähnen: *Der Ursprung der modernen Wissenschaften: Studien zur Entstehung wissenschaftlicher Disziplinen*, hrsg. von Martin Guntau und Hubert Laitko, Akademie-Verlag Berlin, 1987.
2. Zu den früher verwendeten Neologismen-u. a. "Valenzchemie" (F. London), "Atomchemie" (H. G. Grimm), "Chemische Physik" (A. Eucken), "Sub-atomic theoretical chemistry" (L. Pauling), und "Mathematische Chemie" (A. Sommerfeld) kam um 1929 die Wortbildung "Quantenchemie". Geprägt wurde sie meines Wissens von dem Physiker Arthur Haas. Er vereinigte einige Vorträge, die er im Frühjahr 1929 in der Wiener Chemisch-Physikalischen Gesellschaft gehalten hatte, in einem Buch unter dem Titel "*Die Grundlagen der Quantenchemie*". Das Buch erschien in Leipzig bei der Akademischen Verlagsgesellschaft.
3. Helge Kragh, "Quantum Interdisciplinarity: Friedrich Hund and Early Quantum Chemistry", unpublished paper delivered at the Georg-August Universität in Göttingen, 6 February 1996, in honour of the 100th birthday of Friedrich Hund. Ich danke Herrn Prof. Helge Kragh für die Übersendung des Manuskriptes.

4. Erhard Gey, "Der Zusammenhang von interdisziplinären Forschungssituationen und Kooperationsverhalten bei der Bildung und Entwicklung neuer Spezialgebiete, dargestellt am Beispiel der Quantenchemie", in *Interdisziplinarität in der Forschung: Analysen und Fallstudien*, hrsg. von Heirich Parthey und Klaus Scheiber, Akademie-Verlag, Berlin, 1983; Erhard Gey, "Quantenchemie-eine interdisziplinäre Entwicklung", *wissenschaft und fortschritt* 34 (1984) 11, 282-285.
5. Meine Untersuchung bezieht den Bereich der früheren DDR nicht ein.
6. Unsere Periodisierung beruht im Gegensatz zu der anderer Autoren mehr auf den institutionellen Aspekten der neuen Disziplin. Vgl. dazu: Gey, loc. cit. 4, S. 152., 161; Kutzelnigg, loc. cit. 36, Bd. 2, 2 Auflage S. 2.
7. Die Publikation von Walter Heitler und Fritz London, "Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik", (*Zeitschrift für Physik*, 44 (1927), 455-472, wird oft als Geburtsdatum der Quantenchemie angesehen. Für weitere Informationen über Heitler und London verweisen wir auf die historischen Studien von Kostas Gavroglu, *Fritz London: a scientific biography*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995; Ana Isabel Simoes *Converging trajectories, diverging traditions: chemical bond, valence, quantum mechanics and chemistry 1927-1937*, PhD dissertation, University of Maryland, 1993; Kostas Gavroglu & Ana Simoes, The Americans, the Germans and the beginning of quantum chemistry: the confluence of diverging traditions, *Historical Studies in the Physical Sciences*, 25 (1994), 1-63. Zu Hunds Beiträgen vgl. z. B. *Hundert Jahre Friedrich Hund, Ein Rückblick auf das Wirken eines bedeutenden Physikers*, hrsg. von Manfred Schroeder, Nachrichten der Akademie der Wissenschaften in Göttingen, mathematisch-physikalische Klasse, Vandenhoeck & Ruprecht in Göttingen, 1996; Werner Kutzelnigg, "Friedrich Hund und die Chemie", *Angewandte Chemie*, 108 (1996), 629-643.
8. Vorlesungsverzeichnis der Universität Leipzig, WS 1929/30; Leipziger Vorträge 1928, *Quantentheorie und Chemie* hrsg. von H. Falkenhagen, Hirzel Verlag, Leipzig, 1928.
9. Helge Kragh, "The Young Erich Hückel: His Scientific Work Until 1925", unpublished paper delivered at the Philipps-Universität in Marburg on 28 October 1996, in honour of the 100th birthday of Erich Hückel. Auch dieses Manuskript hat mir Herr Prof. Helge Kragh freundlicherweise zur Verfügung gestellt.
10. Erich Hückel, *Ein Gelehrtenleben - Ernst und Satire*, Verlag Chemie, Weinheim, 1975.
11. Hückel, loc. cit. 10, S.136-137.

12. Erich Hückel, "Die Bedeutung der neuen Quantentheorie für die Chemie", *Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie*, 9 (1936), 657-720.
13. Walter Hückel, *Theoretische Grundlagen der Organischen Chemie*, Erste Auflage, Band I, II Akademische Verlagsgesellschaft M.B.H., Leipzig, 1931
14. Hückel, loc. cit. 13, S. VIII.
15. Hückel, loc. cit. 13.
16. Hückel, loc. cit. 12, S. 659.
17. Hückel. Loc. cit. 13, Band II, S. 66-75.
18. Friedrich Hund, *Wirkungsquantum und Naturbeschreibung*, Akademie Verlag, Berlin, 1949.
19. Erich. Hückel, Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem. I "Die Elektronenkonfiguration des Benzols und verwandter Verbindungen", *Zeitschrift für Physik*, 70 (1931), 204-286; II "Quantentheorie der induzierten Polaritäten, ibid. 72 (1931), 310-337; III "Quantentheoretische Beiträge zum Problem der aromatischen und ungesättigten Verbindungen, ibid. 76 (1932), 628-648.
20. Linus Pauling, G. Wheland, "The Nature of the Chemical Bond. V. The Quantum Mechanical Calculation of the Resonance Energy of Benzene and Naphthalene and the Hydrocarbon Free Radicals", *Journal of Chemical Physics*, 1 (1933), 362-374; L. Pauling, J. Sherman, "The Nature of the Chemical Bond. VI. The Calculation from Thermochemical Data of the Energies of Resonance of Molecules Among Several Electronic Structures", ibid. 1 (1933), 606-617; "The Nature of the Chemical Bond. VII. The Calculation of Resonance Energy in Conjugated Systems", ibid. 1 (1933), 679-686.
21. Erich Hückel, "Grundzüge der Theorie ungesättigter und aromatischer Verbindungen", *Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie*, 43 (1937), 758-760, 762-764; "Zur modernen Theorie ungesättigter und aromatischer Verbindungen", ibid. 61 (1957), 871-873.
22. Hückel loc. cit. 19, I, Seite 256.

23. (kursiv im Original) Erich Hückel, "Zur Entwicklung der Denkmodelle in der Chemie", *Naturwissenschaftliche Rundschau*, 3 (1956), 92-98.
24. Erich Hückel, *Nachlaß*, Kasten 6, 5.21, Brief an M. Born 29. 11. 31.
25. David Hilbert, "Axiomatisches Denken", *Mathematische Annalen*, 78 (1918), 405-415; "Naturerkennen und Logik", *Naturwissenschaften*, 1930, 959-963.
26. Hückel loc. cit. 7.
27. Hermann Hartmann, "Die Benzolformel, Eine kurze Problemgeschichte", *Angewandte Chemie*, 77 (1965), 750-752. Bemerkenswerterweise wurde auch das Valenzstrichschema in Umkreis des Edinburger Chemikers Alexander Crum Brown als eine topologische Darstellung der Bindungsverhältnisse im Atom angesehen. Vgl. z. B. P. G. Tait, "Listing's Topologie", *Philosophical Magazine*, January, 1884.
28. Gernot Frenking, "100. Geburtstag von Erich Hückel", *Chemie in unserer Zeit*, 31(1977), 27-31; Jerome Berson, "Erich Hückel-Pionier der Organischen Quantenchemie: Leben, Wirken und späte Anerkennung", *Angewandte Chemie*, 108 (1996), 2922-2937.
29. (kursiv im Original) *Das Molekül und der Aufbau der Materie*, Vorträge von W. Kossel, F. Hund, E. Justi, O. Kratky und P. A. Thiessen, hrsg. von K. W. Wagner, Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1949, S. 127.
30. Hund loc. cit. 29, S. 180.
31. Ich danke Herrn Michael Schimanski für die Übersendung einschlägigen Materials über den Lebenslauf von H. Hellmann. M. Schimanski beschäftigt sich im Rahmen seiner veterinärmedizinhistorischen Dissertation mit der politisch motivierten Entlassung von H. Hellmann.
32. W. Jost, "The first years of Physikal Chemistry in Germany", *Annual Review of Physikal Chemistry*, 17 (1966), 1-14.
33. Hans Hellmann, *Einführung in die Quantenchemie*, Franz Deuticke, Leipzig und Wien, 1937.
34. Hans Hellmann, W. Jost, "Zum Verständnis der "Chemischen Kräfte" nach der Quantenmechanik", *Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie*, 40 (1934), 806-814.
35. Otto Schmidt, "Beiträge zur Theorie der Homopolaren Valenz: Die Deutung der Spaltungsregeln für Olefine und Radikale", *Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie*, 42 (1936), 175-184.

36. Klaus Ruedenberg, "The Physical Nature of the Chemical Bond", *Review of Modern Physics* 34(1962), 326-376; Werner Kutzelnigg, Was ist Chemische Bindung, *Angewandte Chemie*, 85 (1973), 551-594; *Einführung in die Theoretische Chemie*, Bd. 2, VCH, Weinheim, New York, Cambridge, Basel, Tokyo, 2. Auflage, 1994.
37. Hans Hellmann, "Zur Rolle der kinetischen Elektronenenergie für die zwischenatomaren Kräfte", *Zeitschrift für Physik*, 54 (1933), 180-191.
38. Hückel loc. cit. 10, S. 144-146.
39. Alan Beyerchen, *Scientists under Hitler: Politics and the Physics Community in the Third Reich*, Yale University Press, London, 1977; *Naturwissenschaft, Technik und NS-Ideologie, Beiträge zur Wissenschaftsgeschichte des Dritten Reiches*, hrsg. von Herbert Mehrtens und Steffen Richter, Suhrkamp, Frankfurt am Main, 1980; *Medizin, Naturwissenschaft, Technik und Nationalsozialismus, Kontinuitäten und Diskontinuitäten*, hrsg. von Christoph Meinel und Peter Voswinkel, GNT-Verlag, Berlin, 1994.
40. Hermann Hartmann, *Curriculum vitae*, bis 1967, publiziert in: LEOPOLDINA, Mitteilungen, Reihe 3 Jahrgang 13 (1967).
41. Claudio Furlani, "Sviluppo storico dei modelli interpretativi nella chimica di coordinazione", *Rendiconti Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL, Serie 5, volume 14, tomo 2* (1990), 493-508.
42. Sigrid Peyerimhoff, "Die Faszination der Quantenchemie" in *Wie die Zukunft Wurzeln schlug, Aus der Forschung der BRD*, hrsg. von Robert Gerwin, Springer Verlag, Berlin, 1989; Gespräch des Autors mit Heizwerner Preuß, am 10.10.1994 in Stuttgart.
43. Was ist Theoretische Chemie?, Interview mit Prof. H. Hartmann, Interviewer: Dr. W. Schaffernicht, *Umschau* 24 (1968), 751-753.
44. Sigrid Peyerimhoff, "Theoretische Chemie: Quantenchemie" in *Forschung in der Bundesrepublik* hrsg. von Christoph Schneider, Verlag Chemie, Weinheim, 1983.
45. Peyerimhoff, loc. cit. 42.
46. Hermann Hartmann, *Theoretische Chemie-Förderung einer modernen Wissenschaft in Frankfurt*, Sonderdruck, Vittorio Klostermann, Frankfurt am Main 1968. Vortrag, gehalten am 10. juni 1966, anlässlich der Mitglieder versammlung der Vereinigung von Freunden und Förderern der J. W. Goethe-Universität.

47. Aus Personalakte Akademie der Wissenschaften und Literatur Mainz 1979, HERMANN HARTMANN zum 65. Geburtstag von Prof. H. Sillescu.
48. Archivalien der Maizer Akademie der Wissenschaften und der Literatur: Kommission für Biochemie und Macromolekulare Chemie. Vorhaben Prof. H. Hartmann "Arbeitsgruppe Theoretische Chemie". Ich danke ganz besonders den Generalsekretär der Mainzer Akademie, Herrn Dr. Wulf Thommel, der mir das Archivmaterial der Akademie zur Verfügung gestellt hat.
49. Ich hoffe, zu einen späteren Zeitpunkt eine Analyse dieser Debatten vorlegen zu können.
50. Yehuda. Elkana, *The Discovery of the Conservation of Energy*, Hutchinson Educational, 1974, Introduction; *Anthropologie der Erkenntnis, Die Entwicklung des Wissens als episches Theater einer listigen Vernunft*, übers. von Ruth Achtama, Suhrkamp, Frankfurt am Main, 1986, 530 S.