

Dirk Andrae *Hrsg.*

# Hans Hellmann: Einführung in die Quantenchemie

Mit biografischen Notizen von  
Hans Hellmann jr.



Springer Spektrum

---

Hans Hellmann:  
Einführung in die Quantenchemie

---

Dirk Andrae  
Herausgeber

# Hans Hellmann: Einführung in die Quantenchemie

Mit biografischen Notizen  
von Hans Hellmann jr.

 Springer Spektrum

*Herausgeber*

Privatdozent Dr. Dirk Andrae  
Physikalische und Theoretische Chemie  
Institut für Chemie und Biochemie  
Freie Universität Berlin  
Berlin, Deutschland

ISBN 978-3-662-45966-9

ISBN 978-3-662-45967-6 (eBook)

DOI 10.1007/978-3-662-45967-6

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Springer Spektrum

Originaltext ursprünglich erschienen bei Franz Deuticke, 1937.

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2015

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsgesetz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlags. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Der Verlag, die Autoren und die Herausgeber gehen davon aus, dass die Angaben und Informationen in diesem Werk zum Zeitpunkt der Veröffentlichung vollständig und korrekt sind. Weder der Verlag noch die Autoren oder die Herausgeber übernehmen, ausdrücklich oder implizit, Gewähr für den Inhalt des Werkes, etwaige Fehler oder Äußerungen.

*Planung:* Rainer Münz

Gedruckt auf säurefreiem und chlorfrei gebleichtem Papier.

Springer-Verlag GmbH Berlin Heidelberg ist Teil der Fachverlagsgruppe Springer Science+Business Media ([www.springer.com](http://www.springer.com))

---

## Vorwort

Im Jahr 1937 erschienen die ersten Lehrbücher des damals noch sehr jungen Fachgebiets der Quantenchemie, zunächst eines in Russisch und danach eines in Deutsch, beide geschrieben von Hans Hellmann (1903–1938). Im Gegensatz zu anderen frühen Lehrbüchern zu diesem und nah verwandten Fachgebieten, wie jenen von Pauling & Wilson (Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry, McGraw-Hill, 1935) oder von Eyring, Walter & Kimball (Quantum Chemistry, Wiley, 1944), wurden Hellmanns Lehrbücher später weder nachgedruckt noch neu aufgelegt. Beachtet man seine bedeutenden wissenschaftlichen Leistungen – erwähnt seien hier die Aufklärung der Natur der kovalenten chemischen Bindung (1933), das molekulare Virialtheorem (1933), welches man auch Hellmann-Slater-Theorem nennen könnte, das quantenmechanische Krafttheorem (1933, 1936/1937), welches heute als Hellmann-Feynman-Theorem bekannt ist, die Pseudopotentialmethode (1934) und die später von Born und Huang erneut und weiter bearbeitete Theorie der diabatischen und adiabatischen Elementarreaktionen (1935) – so kann dieser Sachverhalt nur unzureichend durch Hellmanns tragisches Schicksal erklärt werden.

Eine Neuauflage der deutschen Fassung von Hellmanns Lehrbuch ist daher mehr als wünschenswert. Die hier vorgelegte Neuauflage ist weder ein fotomechanischer Nachdruck noch eine eingescannte Kopie der Erstauflage von 1937. Es handelt sich vielmehr um eine mit Computersatz sorgfältig neu erstellte und korrigierte Auflage. Vielleicht kann Hellmanns Werk, nun auf der Grundlage eines elektronischen Dokuments, längerfristig erhalten werden (die Erstauflage verschwindet leider zunehmend aus den Bibliotheken, selbst aus Universitätsbibliotheken). Das Erscheinungsbild der Erstauflage wurde, trotz Verwendung einer etwas anderen Schriftart, so weit wie möglich beibehalten. Unterschiede im Zeilen- und Seitenumbruch gegenüber der Erstauflage sind so gering, dass der Seitenumfang aller Abschnitte, aller Kapitel und schließlich des ganzen Buches unverändert blieb.

Mein herzlicher Dank geht an Herrn Dipl.-Ing. Hans Hellmann jr. für seinen biografischen Beitrag zu dieser Neuauflage. Dem Springer-Verlag, besonders Herrn Dr. Rainer Münz und Frau Barbara Lühker, danke ich sehr für die freundliche und stets hilfsbereite Betreuung dieses Projekts.

Oktober 2014

Dirk Andrae

---

# Inhaltsverzeichnis

## Teil I Biografische Notizen

<b>1</b>	<b>Lebenslauf von Hans Hellmann</b> .....	3
1.1	Vom Kaiserreich zur nationalsozialistischen Diktatur .....	3
1.2	Glück und Unglück in der sowjetischen Diktatur .....	9
1.3	Epilog .....	13

## Teil II Die „Einführung in die Quantenchemie“

<b>2</b>	<b>Einführung in die Quantenchemie</b> .....	19
----------	--	----

## Teil III Anhang

<b>3</b>	<b>Anmerkungen zur Neuauflage</b> .....	379
<b>4</b>	<b>Verzeichnis der Veröffentlichungen von Hans Hellmann</b> .....	383

---

**Teil I**  
**Biografische Notizen**

Hans Hellmann jr.

## 1.1 Vom Kaiserreich zur nationalsozialistischen Diktatur

Mein Vater Hans Gustav Adolf Hellmann wurde am 14. Oktober 1903 in Wilhelmshaven geboren. Sein Vater Gustav Hellmann, Oberdeckoffizier der Kaiserlichen Marine, stammte aus einer Bauernfamilie. Diese hatte vier Söhne und eine Tochter. Meine Urgroßeltern besaßen ein kleines Haus in einem Dorf unweit von Iserlohn. Dort lebten sie vom Anbau und von der Verarbeitung von Flachs. Vaters Mutter, Hermine Hasse, stammte aus Friesland und war Hausfrau. Außer dem Sohn Hans, meinem Vater, hatten meine Großeltern noch eine zwei Jahre jüngere Tochter Greta (Abb. 1.1 bis 1.3). Im Jahr 1912 verunglückte mein Großvater bei einem Verkehrsunfall tödlich. Meine Großmutter blieb mit den beiden Kindern allein. Um ihre Witwenpension aufzubessern und ihren Kindern den weiteren Schulbesuch zu ermöglichen, musste sie nun Geld hinzuverdienen. Dazu eröffnete und betrieb sie mit viel persönlichem Einsatz eine kleine Mittagskantine. So konnte mein Vater dank seiner Mutter das Gymnasium absolvieren. Die Lehrer am Gymnasium schätzten seine Begabungen hoch ein, und lobten ihn für seinen Arbeitseifer und seine Wissbegierde. Als er im Jahr 1918 einen längeren Krankenhausaufenthalt hatte, schickt ihm sogar der Direktor des Gymnasiums eine Postkarte mit Genesungswünschen (Abb. 1.4). Mein Vater liebte seine Mutter sehr und war ihr lebenslang dankbar. Sie hatte es mit den zwei Kindern nicht leicht gehabt. Viel später, im Jahr 1937, als seine beiden Lehrbücher der Quanten-

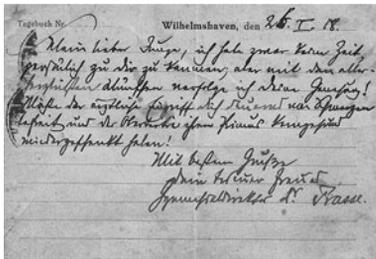
**Abb. 1.1** Familie Gustav Hellmann  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



**Abb. 1.2** Hans und Greta  
Hellmann (1911)  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



**Abb. 1.3** Greta und Hans  
Hellmann  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



Wilhelmshaven, den 26. I. 18

Mein lieber Junge, ich habe zwar keine Zeit, persönlich zu dir zu kommen; aber mit den allerherzlichsten Wünschen verfolge ich deine Genesung! Möchte der ärztliche Eingriff dich dauernd von Schmerzen befreit und der Obertertia ihren Primus kerngesund wiedergeschenkt haben!

Mit besten Grüßen  
dein treuer Freund  
Gymnasialdirektor Dr. Prasse

**Abb. 1.4** Postkarte an Hans Hellmann während eines Krankenhausaufenthalts (1918)  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]

chemie erschienen, waren diese mit der Widmung „Meiner lieben Mutter“ versehen. Mein Vater fand auch noch Zeit, sich etwas Taschengeld zu verdienen: Er führte Reisende durch die malerischen Orte des Sauerlands. Außerdem spielte er gerne Schach, trieb Sport (Ski-fahren) und fuhr später begeistert Motorrad. Eine kleine Narbe auf der Wange war ihm als Erinnerung an einen Motorradunfall geblieben.

**Abb. 1.5** Hans Hellmann als Student  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



Im Frühsommer 1922 legte mein Vater die Abiturprüfungen mit sehr gutem Ergebnis ab. Zum Wintersemester 1922/1923 wurde er dann Student (Abb. 1.5). an der Technischen Hochschule Stuttgart im Fach Elektrotechnik. Doch schon im nächsten Frühjahr, zum Sommersemester 1923, wechselte er zur Fachrichtung Technische Physik. Zwei Jahre später, im Sommersemester 1925, hörte er an der Universität Kiel in Vorlesungen von Professor Walther Kossel wohl erstmals von der Theorie der chemischen Valenz. Der eigentliche Zweck seines Aufenthalts in Kiel war aber die Mitarbeit als Hilfskraft im Labor des Experimentalphysikers Professor Hermann Zahn. Im Auftrag der Reichsmarine und mit finanzieller Unterstützung der „Notgemeinschaft der Deutschen Wissenschaft“ wurden frequenzabhängige Messungen der Dielektrizitätskonstanten verdünnter wässriger Salzlösungen durchgeführt. Bei diesen und allen späteren experimentellen Forschungen arbeitete mein Vater äußerst sorgfältig. Dadurch erhielt er nicht nur Messwerte vorzüglicher Qualität, sondern leistete auch wesentliche Beiträge zur Weiterentwicklung der Messtechnik. Die nächsten dreieinhalb Jahre studierte mein Vater dann wieder in Stuttgart. Zu seinen Professoren dort zählten Paul Peter Ewald, Erwin Fues und Erich Regener. In ihren Vorlesungen wurden auch die letzten Neuigkeiten und Erfolge der noch jungen Quantenmechanik behandelt. Diese Erfahrungen haben vermutlich später den jungen Wissenschaftler Hans Hellmann bei der Wahl seines Forschungsgebietes sehr beeinflusst. Doch zunächst legte mein Vater im Frühjahr 1927, nach einem kurzen Lehrgang bei den Professoren Otto Hahn und Lise Meitner in Berlin, die Physik-Diplomprüfung mit Auszeichnung ab. Dazu hatte er eine experimentelle Arbeit „Über die Darstellung radioaktiver Präparate für physikalische Untersuchungen“ angefertigt. Anschließend wurde er Assistent bei Professor Erich Regener, einem hervorragenden Experimentator. Im Jahr 1929

**Abb. 1.6** Viktoria Hellmann  
mit Sohn Hans jr. (1930)  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



schloss mein Vater seine Dissertation „Über das Auftreten von Ionen beim Zerfall von Ozon und die Ionisation der Stratosphäre“ ab und wurde promoviert. Auch diese Arbeit zeichnete sich wieder durch besondere Sorgfalt bei der Durchführung und Auswertung der Laborexperimente aus.

Im Haus der Familie Regener hat mein Vater auch Viktoria Bernstein, seine spätere Ehefrau und meine Mutter, kennengelernt. Sie war eine Nichte von Frau Regener (geborene Mintschina) und im Jahr 1922 als Waise zu ihrer Tante nach Stuttgart gekommen. Beide Frauen stammten aus einer jüdischen Familie aus der ukrainischen Stadt Jelisawetgrad (heute Kirowograd). Viktoria Bernstein war als Erzieherin ausgebildet und arbeitete in einem Kindergarten.

Meine Eltern heirateten Anfang 1929, kurz vor Vaters Promotion. Die tragischen Folgen dieser Eheschließung konnte man damals nicht vorhersehen.

Professor Erwin Fues, der inzwischen an die Technische Hochschule Hannover berufen worden war, bot meinem Vater eine Stelle als Assistent an. Eine solche Stelle eröffnete meinem Vater viele Möglichkeiten, seinem Interesse für die Anwendung der Quantenmechanik auf Probleme der Chemie nachzugehen. Also zogen meine Eltern von Stuttgart nach Hannover um, wo ich am 14. Oktober 1929 geboren wurde (Abb. 1.6). Der heute für Vaters neues Arbeitsgebiet weitverbreitete Begriff „Quantenchemie“ wurde wohl erstmals 1929 von dem in Wien lehrenden Physiker Arthur Haas verwendet, war aber sonst nicht allgemein gebräuchlich. Doch zunächst bearbeitete mein Vater zusammen mit Professor Fues das Problem der Anzahl der Freiheitsgrade freier Elektronen im Raum oder, anders formuliert, die Frage nach der Existenz polarisierter Elektronenwellen. Diese Aufgabe wurde mit der Bestätigung der Existenz solcher Elektronenwellen und mit der Angabe möglicher Verfahren zu ihrer Erzeugung erfolgreich gelöst. In den darauffolgen-

den Jahren, bis 1933, publizierte mein Vater keine eigenen quantenchemischen Arbeiten, er hielt diese für „noch nicht reif“. Die Entwicklung des jungen Fachgebiets Quantenchemie, wie sie insbesondere durch Wissenschaftler in Europa und Amerika vorangetrieben wurde, verfolgte er aber sehr genau. Zum 1. November 1931, mit 28 Jahren, erhielt mein Vater eine Stelle als Physik-Dozent an der Tierärztlichen Hochschule Hannover, obwohl seine Habilitation noch nicht abgeschlossen war. Sein Mentor, Professor Fues, hatte jedoch versichert, dass damit bald zu rechnen sei. Im März und im Juli des Jahres 1933 erschienen dann zwei wichtige Arbeiten meines Vaters in der *Zeitschrift für Physik*. In der ersten Arbeit stellte er eine Methode vor, mit welcher er quantitative Aussagen zur Energie mehratomiger Moleküle auf der Grundlage spektroskopischer Daten ihrer zweiatomigen Fragmente machen konnte. Die andere Arbeit beleuchtete die Rolle der kinetischen Energie der Elektronen bei der kovalenten Bindung und enthielt das Virialtheorem sowie das Theorem, das heute als Hellmann-Feynman-Theorem bekannt ist. Beide Arbeiten bildeten die Grundlage für Vaters Habilitationsschrift.

Doch die Habilitation wurde meinem Vater verwehrt. Nach der Ernennung von Adolf Hitler zum Reichskanzler am 30. Januar 1933 wurden neue Gesetze erlassen, die gegen politische Gegner und insbesondere gegen Juden gerichtet waren. Die ersten Gesetze, darunter das „Gesetz zur Wiederherstellung des Berufsbeamtentums“ vom 7. April 1933, trafen zunächst hauptsächlich jüdische Beamte. Der Pflicht, nun ihre „arische Abstammung“ nachzuweisen, konnten sie nicht genügen und verloren daraufhin ihre Stellen. Nur wenig später, mit dem Reichsbeamtengesetz vom 30. Juni 1933, waren dann aber auch sogenannte „Mischehen“ betroffen. Für meine Eltern kamen schwere Zeiten. Mit dem Habilitationsantrag sollte mein Vater auch über die „rassische Herkunft“ seiner Frau Auskunft geben, doch er verweigerte die geforderten Angaben. Mein Vater war nie Mitglied einer politischen Partei, aber er hat seine politischen Überzeugungen und seine ablehnende Haltung gegenüber dem Nationalsozialismus auch nicht verheimlicht. Dagegen begrüßten die meisten Studenten an der Tierärztlichen Hochschule die „neue Ordnung“ mit Begeisterung. Sie empfingen meinen Vater zu seinen Vorlesungen mit einem störenden und feindseligen Brummen und Summen. Meine Eltern hatten in ihrer Bibliothek auch einige damals verbotene Bücher und Zeitschriften: Werke von Heine, Zweig und Fallada sowie Zeitschriften mit Artikeln fortschrittlicher Autoren. Da dies gefährlich war, mussten sie diese vernichten. Wie mir meine Mutter erzählte, berichtete ich einmal im Kindergarten begeistert: „Meine Eltern haben gestern ganz viele rote Bücher verbrannt!“ (dabei handelte es sich um „Die Weltbühne“). Die Erzieherin erschrak und führte mich nach Hause. Dort bekam ich den ersten, aber leider nicht den letzten, politischen Unterricht in meinem Leben. Im Herbst 1933 untersagte dann das Preußische Kultusministerium der Tierärztlichen Hochschule die Habilitierung meines Vaters. Am 24. Dezember 1933 wurde ihm mitgeteilt, dass seine Dozentenstelle mit Wirkung zum 31. März 1934 gekündigt sei, da „wegen der nichtarischen Abstammung“ seiner Frau mit der Habilitation nicht mehr zu rechnen sei (sein Doktorvater Erich Regener wurde „erst“ 1938 von den Nazis entlassen).

**Abb. 1.7** Greta und Hans Hellmann im nachdenklichen Gespräch (um 1930)  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



Die Fortsetzung der wissenschaftlichen Zusammenarbeit mit Kollegen an der Technischen Hochschule Hannover wurde damit auch unmöglich. Dort hatte mein Vater mit Wilhelm Jost, Privatdozent für Physikalische Chemie, sehr intensiv das „Problem der Natur der chemischen Kräfte“ diskutiert. Das dabei auf der Grundlage der Quantenmechanik erarbeitete anschauliche Verständnis konnten sie zwar noch in zwei Arbeiten in der *Zeitschrift für Elektrochemie* (1934/1935) veröffentlichen, die zweite Arbeit nennt aber nur noch Wilhelm Jost als Autor. Später bildeten diese beiden Arbeiten die Grundlage für das jeweils erste Kapitel in Vaters beiden Lehrbüchern der Quantenchemie.

Wie viele andere Wissenschaftler, insbesondere auch aus Göttingen, einem Zentrum der Entwicklung der Quantenmechanik, musste mein Vater mit seiner Familie emigrieren. Doch wohin? Es wurde die fatale Entscheidung getroffen, in die Sowjetunion zu gehen. Warum? Entscheidend waren wahrscheinlich zwei Gründe. Erstens hatte mein Vater eine gewisse Sympathie für die sozialistischen Ideen, und zweitens stammte meine Mutter von dort (sie war nicht ausgebürgert) und hatte dort auch Verwandte. Später erfuhr ich von ihr, dass mein Vater auch andere Einladungen hatte, auch aus Amerika. Bereits seit etwa 1930 hatte er sich nach einer Stelle in der Sowjetunion umgesehen. Vielleicht hat er darüber zu jener Zeit auch schon mit seiner Schwester gesprochen (Abb. 1.7). Durch Vermittlung von Victor Weisskopf, der damals noch in Göttingen war, bekam er zwei Einladungen. Die erste vom ukrainischen Physikalisch-Technischen Institut in Charkow (heute Charkiw), wo damals mehrere bekannte Physiker arbeiteten (unter anderem Alexander Weissberg und Lew Schubnikow, wenige Jahre später auch Lew Landau), und die zweite vom Physikalischen Institut der Universität Dnjepropetrowsk, wo sich Boris Finkelstein sehr für Fragen der Quantenchemie interessierte. Aber beidesmal verweigerten die sowjetischen Behörden die notwendigen Einreisedokumente. Dann kam 1932, wiederum mit Hilfe von Göttinger Kollegen, ein Kontakt zum Moskauer Karpow-Institut zustande, einem damals führenden Zentrum physikalisch-chemischer Forschung in der Sowjetunion. Nach einem Treffen in Berlin mit Akademiemitglied Alexander Frumkin, dem stellvertretenden Direktor des Karpow-Instituts, erhielt mein Vater eine offizielle Einladung nach Moskau und ein attraktives Stellenangebot. Im März 1934 bekamen wir dann die notwendigen Ein- und Ausreisepapiere. Wir nahmen Abschied von lieben Verwandten (Abb. 1.8) und ver-

**Abb. 1.8** Hans Hellmann mit Mutter und Schwester kurz vor der Ausreise nach Moskau (1934)

[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



ließen Deutschland. Mit dem Zug ging es über Berlin nach Moskau, wo wir am 31. April 1934 ankamen. Eine Tante meiner Mutter, Maria Mintschina, holte uns am Weissrussisch-Baltischen Bahnhof ab. Ihre ersten Worte waren: „Wie könnt ihr hierher kommen! Ihr seid verrückt!“

---

## 1.2 Glück und Unglück in der sowjetischen Diktatur

Das Karpow-Institut in Moskau wurde damals vom Staat sehr gut finanziert. Die dort durchgeführten Forschungsarbeiten waren wichtig sowohl für die Wirtschaft wie auch für militärische Zwecke. Die Direktoren des Instituts waren die beiden Akademiemitglieder Alexej Bach, Biochemiker, und Alexander Frumkin, Physiker. In der „Abteilung für Struktur der Materie“ unter der Leitung von Jakow Syrkin wurde mein Vater als „Leiter der Theoriegruppe“ angestellt. Er wurde im Institut freundlich aufgenommen und konnte nun, was für ihn besonders wichtig war, seine Kenntnisse und seine Arbeitskraft ganz der Wissenschaft widmen. Ausländische Wissenschaftler hatten damals in der Sowjetunion einige Privilegien. Selbstverständlich wurde dafür im Gegenzug vollkommene Loyalität verlangt. So war mein Vater berechtigt, seinen Arbeitstag selbst zu planen, und er konnte auch viel zu Hause arbeiten. In den Briefen an seine inzwischen in Hamburg lebende Mutter beschreibt er die Verhältnisse am Institut und die dortigen Arbeitsbedingungen begeistert positiv. Kein Wort von der kleinen Zwei-Zimmer-Wohnung oder vom Mangel an manchen Lebensmitteln. Er berichtet über seine Arbeit und über seine Kontakte zu ausländischen Kollegen, zum Beispiel bei einer internationalen Tagung in Charkow im Jahr 1934 (Abb. 1.9). Nach den zahlreichen Beleidigungen und Erniedrigungen in Hannover während des ersten Jahres der nationalsozialistischen Herrschaft war er mit seinem neuen Leben in Moskau ganz zufrieden, und also war es die ganze Familie meistens auch (Abb. 1.10 und 1.11). Im Sommer 1935 besuchte meine Großmutter uns in der Sowjetuni-



**Abb. 1.9** Hans Hellmann, links hinter Niels Bohr, bei einer internationalen Konferenz in Charkow (1934; durch Rückübertragung vom Russischen ins Deutsche wurden einige Namen verfälscht, so steht Gelman statt Hellmann) [Bildquelle: A. Liwanowa, *Lew Landau*, Mir, Moskau, und Teubner, Leipzig, 1982]

on, zum ersten und einzigen Mal. Mit ihrem Sohn verbrachte sie während dieses Besuches einen kurzen Urlaub auf der Krim (Abb. 1.12).

Anfang 1935 war meinem Vater der Dokortitel verliehen worden, der in Russland der Habilitation entspricht. Er veröffentlichte ungefähr alle zwei Monate eine wissenschaftliche Arbeit. Bei einer Tagung in Dnjepropetrowsk wurde er in das Organisationskomitee einer Quantenchemie-Tagung für 1936 gewählt. Mehrfach wurde er für seine Forschungsarbeiten und die dabei erhaltenen Ergebnisse mit Geldprämien ausgezeichnet. Im Juni 1936 nahm mein Vater die sowjetische Staatsbürgerschaft an, im November wurde sein Anfangsgehalt von 700 Rubel auf 1200 Rubel erhöht, und im Dezember wurde er zu einem Vortrag an die Akademie der Wissenschaften eingeladen. Kurz darauf, am 1. Januar 1937, wurde er zum „Wirklichen Mitglied des Karpow-Instituts“ ernannt (dieser Titel entspricht dem eines Professors an einer Universität), und im Herbst 1937 dann zum „Leitenden Wissenschaftler“. In den zu diesem Zeitpunkt etwa dreieinhalb Jahren seines Wirkens in Moskau hatte mein Vater bereits eine ganze Reihe junger Doktoranden bzw. Habilitanden betreut und gefördert: W. Kassatotschkin, K. Majewski, M. Mamotenko, S. Pscheschetschikij, N. Sokolow und M. Kowner.

Spätestens seit 1933 hatte mein Vater beabsichtigt, eine Monografie über sein Fachgebiet, die Quantenchemie, zu schreiben. Die oben erwähnten, mit Wilhelm Jost in Hannover gemeinsam durchgeführten Arbeiten sollten einen Teil dieser Monografie bilden. Die erste Fassung eines Buchmanuskripts war vor der Emigration fertig geworden, verblieb

**Abb. 1.10** Vater und Sohn  
(1935)  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



**Abb. 1.11** Mutter und Sohn  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



aber bei Jost, der sich vergeblich bemühte, einen Verleger in Deutschland zu finden. Auf der Grundlage des inzwischen ins Russische übersetzten Manuskripts hielt mein Vater 1935/1936 einen Vorlesungskurs am Karpow-Institut ab, der auch von jungen Mitarbeitern anderer Moskauer Institute besucht wurde. Da mein Vater nicht perfekt Russisch konnte, mussten ihm seine Doktoranden manchmal helfen, um passende Begriffe für Ausdrücke zu finden, die auch in der deutschen Sprache neu waren. Die sehr interessierten russi-

**Abb. 1.12** Hans Hellmann mit seiner Mutter auf der Krim (links die Russalka von Mischor, Sommer 1935)  
[Bildquelle: H. Hellmann jr.]



schen Hörer äußerten sich auch mit Kritik und Korrekturvorschlägen, wofür sich mein Vater im Vorwort der dann Anfang 1937 erschienenen „Quantenchemie“ („Kwantowaja Chimija“, Band 1 in der Reihe „Physik in Monographien“, ONTI, Moskau und Leningrad, 546 S.) ausdrücklich bedankt. Ganz speziell schließt dieser Dank seinen Freund und Kollegen Jurij Rumer ein. Bereits vor Abschluss der Arbeiten an der russischen Fassung hatte mein Vater mit der Überarbeitung und Straffung des Manuskripts für die deutsche Fassung begonnen. Diese trug den Titel „Einführung in die Quantenchemie“ (Deuticke, Leipzig und Wien, 350 S.) und erschien Ende 1937. Während die russische Fassung einen weitgehend unvorbereiteten Leser ansprechen soll, setzt die kürzere deutsche Fassung, bei etwa gleichem Inhalt, deutlich höhere Ansprüche an dessen Vorkenntnisse. Aber während sich das russische Buch gut verkaufte und bald vergriffen war, fand das deutsche Buch weit weniger Käufer. Als Gründe kann man einerseits die zeitgeschichtlichen Umstände und andererseits die nach Erscheinen der Bücher eingetretenen Ereignisse ansehen (s. unten).

Im Jahr 1937 begannen in der Sowjetunion massenhafte Verhaftungen der sogenannten „Feinde des Volkes“. Unter den Verhafteten waren unter anderem Deutsche und Russen, Schriftsteller und Bauern, Ingenieure und Künstler, Offiziere und Soldaten. Niemand konnte mehr ruhig schlafen. Die Gesamtzahl der unschuldigen Opfer in diesen Jahren beträgt mehr als zwanzig Millionen. In den Briefen an seine Mutter aus dem Dezember 1937 schrieb mein Vater, dass „die gegenwärtige internationale Lage kompliziert geworden sei“ und dass er sich scheue häufiger zu schreiben. In der Nacht vom 9. zum 10. März 1938 wurde auch mein Vater verhaftet. Ich war damals achteinhalb Jahre alt und kann mich noch gut an dieses Ereignis erinnern. Man weckte mich und suchte in meinem Bett nach antisowjetischen Schriften und nach Beweisen einer Spionagetätigkeit.

Vaters Doktorand M. Kowner, der uns zu Hause oft besuchte, kam einige Tage darauf aus Woronesch nach Moskau. Er wollte uns besuchen, doch ein Nachbar warnte ihn und erzählte von Vaters Verhaftung. Daraufhin musste er sofort verschwinden. Später hat M. Kowner zwei Publikationen über seinen lieben Lehrer veröffentlicht.

Nach Vaters Verhaftung versuchte meine Mutter mehrmals, beim Volkskommissariat für innere Angelegenheiten (NKWD), dem Vorgänger des KGB, Auskunft über sein Schicksal zu bekommen, aber vergeblich. Sie wurde durch Drohungen der dortigen Beamten gezwungen, ihre Anfragen dort zu beenden. Wir mussten Moskau verlassen. Meine Mutter fand an einer Mittelschule in einem Dorf 120 km westlich von Moskau (unweit

von Wolokolamsk) eine Stelle als Lehrerin der deutschen Sprache. Über Vaters Schicksal wussten wir nichts. Ehemalige Freunde verschwanden ebenfalls oder zogen sich zurück. Nur wenige hielten weiter freundlichen Kontakt zu uns: Dies waren die Familie Liwtschitz (Verwandte meiner Mutter) und die Übersetzerin Nadeschda Wolpina.

---

### 1.3 Epilog

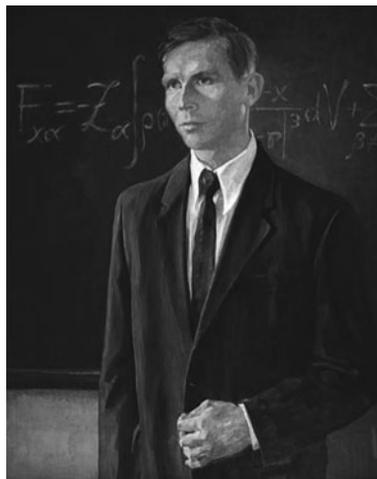
Mehrere Monate nach Beginn des Russlandfeldzugs der deutschen Wehrmacht, am 9. September 1941, als sich deutsche Truppen schon auf dem Vormarsch nach Moskau befanden, wurde auch meine Mutter verhaftet. Wir fanden erst nach Kriegsende wieder zueinander. Ihr war „antisowjetische Propaganda“ vorgeworfen worden, und es war behauptet worden, sie, eine Jüdin, die aus Nazideutschland geflohen war, habe auf die deutschen Truppen gewartet, um für diese als Übersetzerin tätig zu werden. Nach einigen Monaten Haft in Moskau war sie in das Gebiet Semipalatinsk in Kasachstan verbannt worden.

Erst nach Stalins Tod, als in der Politik das sogenannte „Tauwetter“ einsetzte, wurde meine Mutter „vollständig rehabilitiert“. Sie beantragte daraufhin, Informationen über ihren Mann zu bekommen. Zuerst erhielt sie eine Bescheinigung (die sich später als falsch herausstellte), dass er im Gefängnis an einer Krankheit (Peritonitis) gestorben sei. Anschließend beantragte meine Mutter eine Rehabilitationsbescheinigung für meinen Vater. Diese hat sie 1957 auch erhalten. Damit war nun auch mein Vater „vollständig rehabilitiert“. Traurigerweise geschah dies erst nach seinem Tod. Erst im Jahr 1989, während der „Perestrojka“, erhielten wir die echte Sterbeurkunde. Die Dokumente belegten, dass mein Vater wegen „Hochverrats“ und wegen „Spionage zu Gunsten Deutschlands“ nach § 58 des Strafgesetzes verurteilt und am 29. Mai 1938 erschossen worden war.

Bereits im Mai 1937, kurz nach Beginn der Massenverhaftungen, hatte sich Albert Einstein mit einem Brief an Stalin gewandt, um ihm seine große Sorge um das Schicksal zahlreicher bekannter Wissenschaftler mitzuteilen. Einen ähnlichen Brief schickten die drei Nobelpreisträger Irène Joliot-Curie, Frédéric Joliot-Curie und Jean-Baptiste Perrin im Juni 1937 an Stalin. Aber diese Stimmen wurden nicht gehört. Als Wilhelm Jost im Jahr 1938 bemerkte, dass der Name „Hellmann“ gar nicht mehr unter den Autoren in der Zeitschrift *Acta Physicochimica URSS* erschien (dort hatte mein Vater bis Oktober 1937 regelmäßig Arbeiten veröffentlicht), bat er seinen britischen Kollegen John Lennard-Jones um Hilfe. Dieser sandte eine Bitte um Sonderdrucke an Vaters Adresse am Karpow-Institut, doch es kam keine Antwort mehr.

Wegen der geschichtlich-politischen Umstände und des durch diese wesentlich mitbedingten tragischen Schicksals verschwand Vaters Name für Jahrzehnte nahezu vollständig aus der Wissenschaft. Zwar erschien sein Buch „Einführung in die Quantenchemie“ im Jahr 1944 in den USA als Kriegsbeutenachdruck, doch insgesamt fanden seine Bücher kaum die größere Verbreitung, die sie wohl verdient hätten. Der Name „Hellmann“ blieb hauptsächlich durch den Begriff „Hellmann-Feynman-Theorem“ in Erinnerung. Wie bereits erwähnt, hatte mein Vater dieses Theorem schon im Jahr 1933 hergeleitet.

**Abb. 1.13** Portrait von Hans Hellmann im Karpow-Institut für Physikalische Chemie, Moskau (geschaffen von Tatjana Liwschitz, Moskau, 1999) [Bildquelle: Fotografie von W. H. E. Schwarz, Siegen; mit freundlicher Genehmigung von W. H. E. Schwarz]



Der Slawistin und Journalistin Sabine Arnold gelang es in den frühen 1990er Jahren, während eines Forschungsaufenthaltes in Moskau, in der Zentrale des ehemaligen KGB Kopien der NKWD-Akten meiner Eltern anzufertigen. Erst durch diese Dokumente wurden viele Informationen über meinen Vater, die zuvor nur Vermutungen waren, sicher belegbar. Eine gewisse Wende brachte schließlich das Jahr 1999. In den zwei ersten Nummern des ersten Jahrgangs des Bunsen-Magazins erschien eine ausführliche Biografie meines Vaters<sup>1</sup>, in welcher seine wegweisenden wissenschaftlichen Arbeiten erstmals umfassend dargestellt und gewürdigt wurden.

Am 29. November 1999 fand am Karpow-Institut in Moskau ein gemeinsames Festkolloquium deutscher und russischer Wissenschaftler zum Gedenken an den 95. Jahrestag von Vaters Geburtstag statt. Dabei wurde dem Karpow-Institut ein Portrait meines Vaters übergeben, welches meine Kusine, die Kunstmalerin Tatjana Liwschitz, nach einer Fotografie von 1933 angefertigt hat (Abb. 1.13). Die fotografische Vorlage zeigt meinen Vater während einer Vorlesung in Hannover. Tatjana Liwschitz hat als junges Mädchen meinen Vater in Moskau kennengelernt. Für die Finanzierung der Arbeit an dem Portrait gilt mein Dank der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie.

Ebenfalls seit 1999 verleiht die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie den „Hans G. A. Hellmann-Preis“ an jüngere Nachwuchswissenschaftler ihres Fachgebiets, und an der Tierärztlichen Hochschule Hannover wird der „Hans Hellmann-Gedächtnispreis“ für eine grundlagenorientierte experimentelle Dissertation vergeben.

Im Jahr 2000 veröffentlichte Professor M. Kowner einen Artikel über seine Erinnerungen an meinen Vater in der russischen Zeitschrift *Chemie und Leben* („Chimija i Schisn“). Aus Anlass des 100. Jahrestages von Vaters Geburtstag fanden im Jahr 2003 mehrere wissenschaftliche Tagungen statt. Darunter ein Symposium am 26. Juli in Bonn und ein

<sup>1</sup> W. H. E. Schwarz et al., *Bunsen-Magazin* 1 (1999) (1) 10–21, (2) 60–70.

Festkolloquium am 17. Oktober in Hannover. Zum Symposium in Bonn erschien der Text der ausführlichen Biografie von 1999 auch in Englisch (an der Übersetzung war Mark Smith, B. Sc., ein Enkel von Vaters Schwester Greta, beteiligt).

Eine Neuauflage der russischen „Quantenchemie“ erschien im Jahr 2012, herausgegeben von Professor Andrej Tchougréeff (Moskau, Aachen). Nun liegt hier auch die „Einführung in die Quantenchemie“ in einer Neuauflage vor. Mein besonderer Dank gilt dem Herausgeber, Herrn Privatdozent Dr. Dirk Andrae (Berlin), für die sorgfältige Vorbereitung und für die wissenschaftliche Beratung bei meiner Arbeit an diesem Bericht über das Leben meines Vaters. Nach nun fast 80 Jahren wird sein Werk wieder verfügbar, von dem es in der Biografie von 1999 hieß: „Es nimmt daher nicht Wunder, wenn man auch heute noch zuweilen in diesem vor über 60 Jahren geschriebenen Werk erstaunliche Entdeckungen machen kann.“

---

**Teil II**

**Die „Einführung in die Quantenchemie“**

EINFÜHRUNG IN DIE  
QUANTENCHEMIE

VON

**DR. HANS HELLMANN**

PROFESSOR AM KARPOW-INSTITUT FÜR PHYSIKALISCHE CHEMIE, MOSKAU

MIT 43 ABBILDUNGEN UND 35 TABELLEN IM TEXT

LEIPZIG UND WIEN  
FRANZ DEUTICKE  
1937

(Titel der 1. Auflage)



Meiner lieben Mutter gewidmet.



## Vorwort.

Das vorliegende Buch versucht, eine wirkliche Lücke in der Literatur auszufüllen. Dadurch ergibt sich zugleich eine Beschränkung. So wurden viele Gebiete nur gestreift oder ganz gestrichen, die im weiteren Sinne zur Quantenchemie gehören, wie z. B. die Theorie der Molekülspektren und anderer physikalischen Methoden zur Erforschung der Moleküle, die Theorie der Metalle, die Kernchemie. Andere Teilgebiete, die auch im engeren Sinne zur Quantenchemie gehören, wie die Theorie der Ionenbindung oder die Theorie des Ortho-Parawasserstoffs sowie des schweren Wassers haben ebenfalls schon ausführliche zusammenfassende Darstellungen in der Literatur gefunden und wurden deshalb nur soweit berührt, als nötig war, um sie in den Zusammenhang der Quantenchemie einzuordnen.

Die Quantenchemie ist eine junge Wissenschaft, die erst ein Jahrzehnt existiert. Dennoch ist das bei der genannten Begrenzung übrig bleibende Material immer noch so groß, daß im Stoff eine gewisse Beschränkung notwendig war, um den Umfang des Buches nicht zu sehr anwachsen zu lassen. Es wurde eine in sich möglichst abgeschlossene, lehrbuchartige Darstellung angestrebt, bei der alles was über eine allgemeine Kenntnis der Differentialrechnung hinausgeht, im Buche selbst gegeben wird. Das Buch dürfte deshalb schon dem chemischen Studenten mittlerer Semester, erst recht dem jungen Physiker keine grundsätzlichen Schwierigkeiten bieten. Aus diesem Bestreben heraus ist mit Formeln und Zwischenrechnungen nicht gespart worden; zugunsten einer größeren Ausführlichkeit der Zwischenrechnungen mag der Text an manchen Stellen etwas gedrängt erscheinen. Auf mathematische Eleganz, selbst auf formale mathematische Vollständigkeit wurde stets da kein Wert gelegt, wo diese auf Kosten der elementaren Zugänglichkeit gegangen wäre. Die anschauliche physikalische Vorstellung steht überall bewußt im Vordergrund.

Der behandelte Stoff reicht bis in die Front der gegenwärtigen Forschung. Denjenigen, der selbst auf dem Gebiet der Quantenchemie arbeitet, soll der Formelanhang und besonders das ausführliche Literaturverzeichnis mit stichwortartigen Inhaltsangaben am Schluss der Kapitel über den Rahmen des Buches hinausführen. Dagegen will dies Verzeichnis, genau wie das ganze Buch, keine lückenlose historische Würdigung der Beiträge der verschiedenen Forscher geben. Es sind gelegentlich ältere Arbeiten fortgelassen, wenn sie durch neuere fortgesetzt und überholt sind. Der Text selbst konnte nicht frei bleiben von subjektiven Urteilen, nirgends ist ohne Stellungnahme einfach referiert über widersprechende Ansätze und Methoden. Die Einheitlichkeit der Darstellung erforderte oft eine völlige Umarbeitung der in den Originalarbeiten gegebenen Formulierungen.

Durch viele Verweise auf vorhergehende und nachfolgende Paragraphen sowie das Sachregister soll die Benutzung des Buches auch für den erleichtert werden, der es als Nachschlagebuch zur Orientierung über die eine oder die andere Frage zuziehen will.

Das vorliegende Buch stellt eine verkürzte und dabei teils umgearbeitete Ausgabe meiner in russischer Sprache erschienenen „Kwantowaja chimija“ (ONTI, Moskau 1937) dar.

Sein Inhalt wurde 1935/1936 als Vorlesung am hiesigen Karpow-Institut für physikalische Chemie vorgetragen. Ich möchte bei dieser Gelegenheit allen Kollegen herzlich danken, die mir im Verlaufe der Vorlesung und außerhalb derselben durch Kritik und Ratschläge geholfen haben.

Einige Formulierungen in den ersten Kapiteln wurden seinerzeit (1933) gemeinsam mit Professor Dr. W. J o s t (Hannover) ausgearbeitet. Ich bin Herrn J o s t sehr zu Dank verpflichtet für seine Einwilligung, Teile der gemeinsamen Ausarbeitung unverändert benutzen zu dürfen.

Dem Verlag Franz Deuticke gebührt mein aufrichtiger Dank für sein bereitwilliges Eingehen auf alle meine Wünsche.

Moskau, März 1937.

H . H e l l m a n n

## Inhaltsverzeichnis.

	Seite
Kapitel I. Die statistische Theorie .....	1
1. Orientierendes über die Natur der chemischen Kräfte .....	1
2. Die Grundgleichungen der statistischen Theorie .....	7
3. Das Atom nach Thomas und Fermi .....	10
4. Verbesserte Ansätze für die potentielle Energie im Thomas-Fermi-Atom .....	18
5. Das Ritzsche Verfahren zur Lösung des Variationsproblems .....	23
6. Störungsrechnung .....	27
7. Korrekturen an der kinetischen Energie der Thomas-Fermischen Theorie .....	31
8. Die Valenzelektronen in der statistischen Theorie .....	34
9. Die Theorie der metallischen Bindung .....	40
Literatur zu Kapitel I .....	45
Kapitel II. Der mathematische Apparat der Quantenmechanik .....	47
10. Aufstellung der Schrödingergleichung .....	47
11. Die allgemeine Schrödingergleichung. Erwartungswerte. Eigenwerte .....	54
12. Orthogonalsysteme von Eigenfunktionen .....	62
13. Störungsrechnung 1. Näherung .....	66
14. Störungsrechnung höherer Näherung .....	70
15. Störungsrechnung mit zeitveränderlichen Amplituden .....	75
Literatur zu Kapitel II .....	81
Kapitel III. Die freien Atome .....	82
16. Das wasserstoffähnliche Atom .....	82
17. Das periodische System .....	89
18. Die Hartree-Methode .....	94
19. Antisymmetrisierung von Eigenfunktionen .....	96
20. Der Austausch bei ebenen Wellen .....	100
21. Das Atomproblem mit Austausch .....	104
22. Die Methode von Hylleraas .....	108
23. Das kombinierte Näherungsverfahren im Vielelektronenproblem ..	111
Literatur zu Kapitel III .....	115
Kapitel IV. Das Valenzschema der Chemie .....	117
24. Das $H_2^+$ -Ion .....	117
25. Das $H_2$ -Molekül .....	124
26. Höhere zweiatomige Moleküle .....	134
27. Die Valenzbetätigung zwischen zwei Atomen als Einelektronenproblem .....	138
28. Valenzschema für homöopolare gebundene zweiatomige Moleküle ..	142
29. Mehratomige Moleküle .....	147
30. Das Valenzschema der organischen Chemie .....	153
31. Das Problem der freien Drehbarkeit .....	158
32. Resonanz von Valenzbildern .....	162
Literatur zu Kapitel IV .....	167
Kapitel V. Die van der Waals'schen Kräfte .....	170
33. Die Polarisierbarkeit des H-Atoms .....	170
34. Die Polarisierbarkeit eines beliebigen Moleküls .....	178
35. Die Dispersionskräfte zwischen zwei H-Atomen .....	183
36. Die van der Waals'schen Kräfte in einem beliebigen System von Molekülen .....	188

## Inhaltsverzeichnis.

	Seite
§ 37. Die van der Waals'schen Kräfte in Gasen und Flüssigkeiten .....	194
§ 38. Die van der Waals'schen Kräfte bei festen Körpern .....	197
Literatur zu Kapitel V .....	202
 Kapitel VI. Die Grundlagen der Störungstheorie von Systemen aus viel Elek- tronen .....	 204
§ 39. Spinfunktionen und Spinamplituden .....	204
§ 40. Antisymmetrisierung mit Spinamplituden und Spininvarianten ...	208
§ 41. Die Störungsrechnung mit Spininvarianten .....	213
§ 42. Der Spezialfall nur einfach besetzter Eigenfunktionen .....	216
§ 43. Der Einfluß der Atomrümpfe auf die Bindung .....	219
§ 44. Lösung des 4-Elektronenproblems .....	223
§ 45. Lösung des 6-Elektronenproblems .....	226
§ 46. Lokalisierung der Valenzen bei fester zwischenatomarer Spinkopp- lung .....	 229
§ 47. Der Grenzfall fester inneratomarer Spinkopplung .....	233
Literatur zu Kapitel VI .....	238
 Kapitel VII. Die Theorie der chemischen Valenz als Vielelektronenproblem ..	 240
§ 48. Beispiele zum 6-Elektronenproblem (NH <sub>3</sub> , NH, Benzol) .....	240
§ 49. Berechnung der „Normal-Valenzzustände“ der Atome .....	245
§ 50. Die wirklichen Valenzzustände der <i>q</i> -Valenz .....	255
§ 51. Quantitative Behandlung lokalisierter <i>p</i> -Valenzen .....	262
§ 52. Quantitative Behandlung lokalisierter <i>q</i> -Valenzen .....	268
§ 53. Systematische Störungsrechnung mit Bahnentartungen .....	275
Literatur zu Kapitel VII .....	283
 Kapitel VIII. Die Wechselwirkung von bewegten Atomen und Molekülen ...	 285
§ 54. Die Grundgleichungen bei adiabatischem Verlauf der Kernbewe- gung .....	 285
§ 55. Der anharmonische Oszillator .....	290
§ 56. Laufende Wellen in Potentialfeldern .....	301
§ 57. Theorie der Aktivierungsenergie .....	307
§ 58. Absolutwerte der Geschwindigkeitskonstanten von Reaktionen bei klassischer Behandlung der Kernbewegung .....	 313
§ 59. Systematische Störungsrechnung für beliebige Kernbewegung ...	320
Literatur zu Kapitel VIII .....	328
 Mathematischer Anhang .....	 331
§ 60. Koordinatensysteme .....	331
§ 61. Die grundlegenden Integrale mit der Exponentialfunktion .....	333
§ 62. Integrale im Einzentrenproblem .....	335
§ 63. Zwei-Zentrenintegrale bei einem Elektron .....	337
§ 64. Wechselwirkung zwischen 2 Ladungen im 2-Zentrenproblem .....	340
Literatur zum mathematischen Anhang .....	344
 Sachverzeichnis .....	 346