

ANDREAS KARACHALIOS*

Le frontiere della chimica quantistica dal punto di vista di alcuni trattati tedeschi, 1930-1937

The frontiers of the new discipline of quantum chemistry from the perspective of some german textbooks, 1930-1937

Summary – During the 1930's, chemistry underwent a transformation that affected as well research fields as education. New subdisciplines as physical organic chemistry and quantum chemistry emerged, encouraging an influx of theoretical notions and experimental techniques from experimental and theoretical physics. On the one new Spectroscopic methods as Raman spectroscopy became indispensable for determining structures and other molecular chemical quantities of molecules, on the other such chemical concepts as valence and bond were refined within a new explanatory framework based on principles and methods of quantum physics. In conjunction with these changes, new introductory textbooks in Germany began to play a predominant role in the strategy of building a discourse for quantum chemistry, just as in other disciplines and research fields.

For these developments some textbooks played an important role of the making of the new discipline in Germany. The first of them was the *Lehrbuch der Chemischen Physik*, the book of the physical chemist Arnold Eucken (1884-1950) published in 1930, that reflected the tendency to impose a new discipline by establishing his methodological boundaries from the physical chemistry. The next textbook *Molekülspektren und ihre Anwendung auf chemische Probleme* is from Hertha Sponer (1895-1968), that explicitly addressed the question of the relationship between molecular spectroscopy and quantum chemistry. The third book is *Einführung in der Quantenchemie* from Hans Hellmann (1903-1938) that published in 1937. This was the first textbook on this subject in the German language that attempted to define the degree of autonomy of the new discipline with respect to physics, physical chemistry and chemistry.

In this paper I we shall address some issues which manifest the conceptual and the methodological particularity of quantum chemistry and the role of these textbooks in consolidating this discourse.

* AG Geschichte der Mathematik und der Naturwissenschaften, Fachbereich 08-Physik, Mathematik und Informatik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, D-55099 Mainz, e-mail: Kara@mathematik.uni-mainz.de

1. Introduzione

I trattati scientifici hanno svolto sempre un ruolo decisivo per la formazione di una nuova disciplina scientifica soprattutto nel primo periodo della sua nascita. Hanno contribuito in modo decisivo per la formazione dei nuovi principi e metodologie della neonata disciplina. Agli interessati hanno presentato la soluzione d'alcuni problemi fino allora irrisolti ed hanno esposto in modo chiaro i nuovi fondamenti concettuali. Inoltre i primi trattati di una nuova disciplina hanno contribuito in modo cospicuo sia per la sua legittimazione che per la sua istituzionalizzazione all'interno del campo delle discipline affini.¹

A partire dagli anni venti del secolo scorso la chimica classica si è sottoposta ad alcuni mutamenti radicali delle sue procedure conoscitive che hanno condotto alla nascita delle nuove linee di ricerca. Nacquero nuove discipline² come la chimica organica fisica³ e la chimica quantistica,⁴ che ebbero incoraggiato l'influsso di

¹ K. Gavroglu, A. Simoes, *One or many faces? The role of text-books in building the new discipline of quantum chemistry*, in: *Communicating Chemistry. Textbooks and their Audiences, 1789-1939*, edited by A. Lundgren and B. Bensaude-Vincent. USA: Science History Publications, 1998 pp. 415-449.

² E. Hiebert, *Discipline Identification in Chemistry and Physics*, in: *Science in Context* 9, 2 (1996) pp. 93-119; M.J. Nye: *Physics and Chemistry: Commensurate or Incommensurate Sciences?*, in: *The Invention of Physical Science, Intersections of Mathematics, Theology and Natural Philosophy Since the Seventeenth Century – Essays in Honor of Erwin N. Hiebert*. Kluwer Dordrecht: Academic Publishers, 1992; *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry: Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines, 1800-1950*. Berkeley: University of California Press, 1994; J.W. Servos, *Physical Chemistry from Ostwald to Pauling, the Making of a Science in America*. New Jersey: Princeton University Press, 1990; *Chemical Sciences in the 20th Century: Bridging Boundaries*, edited by Carsten Reinhardt. Weinheim: Wiley-VCH, 2001 (con ulteriori riferimenti bibliografici).

³ L. Cerruti, *Free Electrons: Lo sviluppo della chimica organica fisica, 1900-1940*, in: *Atti dell'VIII Convegno Nazionale di Storia e Fondamenti della Chimica* (a cura di Ferdinando Abbri e Marco Ciardi) Arezzo, 28-30 Ottobre 1999, pp. 207-263 (con ulteriori riferimenti bibliografici); *Bella e Potente, La chimica del Novecento fra scienza e società*, Roma: Editori Riuniti, 2003.

⁴ K. Gavroglu, and A. Simoes, *The Americans, the Germans and the Beginnings of Quantum Chemistry: The Confluence of Diverging Traditions*, in: *Historical Studies in the Physical and Biological Sciences* 25 (1994), pp. 47-110; A. Simoes, *Converging Trajectories, Diverging Traditions: Chemical Bond, Valence, Quantum Mechanics and Chemistry, 1927-1937*, Ph. D. Thesis, University of Maryland, College Park, 1993; K. Gavroglu, and A. Simoes, *Different Legacies and Common Aims: Robert Mulliken, Linus Pauling and the Origins of Quantum Chemistry*, in: *Conceptual Perspectives in Quantum Chemistry*, edited by J.L. Calais, and E.S. Kryachko, Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1997; *Quantum Chemistry in Great Britain: Developing a Mathematical Framework for Quantum Chemistry*, in: *Studies in the History and Philosophy of Modern Physics*, 31B (2000), pp. 511-548; *Issues in the History of Theoretical and Quantum Chemistry, 1927-1960*, in: *Chemical Sciences in the 20th Century: Bridging Boundaries*, edited by Carsten Reinhardt. Wiley-VCH, Weinheim 2001, pp. 51-74; E. 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 Heinrich Parthey und Klaus Scheiber. Berlin: Akademie-Verlag, 1983, pp. 151-175;

nozioni teorici e tecniche sperimentali dalla fisica. Nuovi metodi spettroscopici come la spettroscopia Raman fu indispensabile per la determinazione della struttura molecolare ed altri parametri chimici. Alcuni concetti chimici fondamentali come la valenza fu ridefinita tramite la nuova impalcatura concettuale e metodologica della fisica quantistica.

In seguito prenderò in considerazione alcuni aspetti fondamentali che rendono evidenti le particolarità concettuali e metodologiche della chimica quantistica ed il ruolo che svolsero tra tutti i trattati che apparvero dal 1927 fino al 1945 in modo particolare tre in lingua tedesca per il consolidamento della nuova disciplina all'interno della comunità scientifica. Inoltre tali trattati tentarono di definire in modo esplicito il suo grado d'autonomia rispetto alla chimica fisica ed in modo particolare alla fisica.

2. *Il trattato delle nuove frontiere*

Il primo trattato fu il *Lehrbuch der Chemischen Physik*, (Tratatto di fisica chimica) del chimico fisico tedesco Arnold Eucken (1884-1950).⁵ In questo libro, che fu pubblicato nel 1930, si riflette la tendenza di chiarire le frontiere metodologiche che separano la nuova disciplina dalla chimica fisica in generale. Era destinato sia per gli studenti che per i professionisti indicando in modo sistematico le nuove vie d'indagine teorica e sperimentale. Il trattato di Eucken riflette la tendenza di impostare le frontiere della nuova disciplina tramite la fondazione di un nuovo linguaggio e di una pratica sperimentale in concomitanza con le metodologie chimico fisiche tradizionali.

Eucken ha posto l'accento sul fatto che nell'ambito della chimica fisica classica vennero cambiamenti radicali a livello concettuale e metodologico dal momento in

Quantenchemie – eine interdisziplinäre Entwicklung, in: *Wissenschaft und Fortschritt* 34 (1984) 11, pp. 282-285; A. Simoes, *Chemical Physics and Quantum Chemistry in the Twentieth-Century*, in: *Cambridge History of Science* (8 Vols.), Volume 5, *Modern Physical and Mathematical Sciences*, edited by Mary Jo Nye. Cambridge: Cambridge University Press, 2003, pp. 394-412; A. Karachalios, *On the Making of Quantum Chemistry in Germany*, in: *Studies in the History and Philosophy of Modern Physics*, 31B (2000), pp. 493-510; *Giovanni Battista Bonino and the Making of Quantum Chemistry in Italy in the 1930s*, in: *Chemical Sciences in the 20th Century. Bridging Boundaries*, edited by Carsten Reinhardt. Weinheim: Wiley-VCH, 2001, pp. 75-104; M.J. Nye, *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry. Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines, 1800-1950*. Berkeley: University of California Press, 1993, Cap. 9 Quantum Chemistry and Chemical Physics, 1920-1950, pp. 227-261; B. S. Park, *Computations and Interpretations: The Growth of Quantum Chemistry, 1927-1967*, Dissertation, Baltimore, Maryland, May, 1999 (UMI Microfilm 9927141); H. 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. Vorrei ringraziare Helge Kragh di avermi messo a disposizione il suo manoscritto.

⁵ A. Eucken, *Lehrbuch der Chemischen Physik*, Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft, 1930.

cui apparvero la meccanica statistica, la teoria cinetica ed in modo particolare la nuova meccanica quantistica. Così tra la chimica fisica e la fisica quantistica fu creata una nuova saldatura d'idee e concetti che con l'apparizione di nuove apparecchiature sperimentali approdarono ai laboratori chimici.

A questo punto bisogna rilevare che il neologismo “Chimica Quantistica” per la nuova disciplina non era ancora completamente diffuso e adottato all'interno della comunità scientifica internazionale. Tra i primi neologismi che furono adottati dai pionieri della nuova disciplina, sono da annotare le seguenti: “Valenzchemie” da parte di Fritz London, “Chemische Physik” da Eucken così come “Chemical Physics” da John Slater. “Sub-atomic theoretical chemistry” da Linus Pauling e “Mathematische Chemie” da Arnold Sommerfeld. Il nuovo costrutto “Quantenchemie”, fu coniato, a mio parere,⁶ dal fisico austriaco Arthur Haas. Lui ha riunito alcune conferenze che ha tenuto nella primavera del 1929 presso la società di chimica fisica di Vienna (Wiener Chemisch-Physikalischen Gesellschaft) in un libro sotto il titolo “Die Grundlagen der Quantenchemie” (I fondamenti della chimica quantistica).⁷

3. La spettroscopia molecolare e le sue applicazioni alla chimica

Cinque anni dopo l'apparizione del libro di Eucken fu pubblicato nel 1935 il trattato di Hertha Sponer (1895-1968) *Molekülspektren und ihre Anwendung auf chemische Probleme* (Gli Spettri molecolari e la loro applicazione ai problemi chimici).⁸ Sponer tedesca d'origine ebrea, assistente del fisico sperimentale e di formazione chimica James Franck, nel suo manuale aveva chiaramente esposto la questione della relazione a livello concettuale e di tecniche sperimentali tra spettroscopia molecolare e chimica quantistica. Lei ha reso evidente l'importanza dell'impiego dei risultati spettroscopici per il trattamento d'alcuni problemi chimici, fotochimici e della cinetica chimica. Il suo trattato era destinato sia per i fisici sperimentali che per i chimico fisici che si interessavano delle nuove tecniche spettroscopiche disponibili e le loro possibili applicazioni connesse con la teoria della valenza chimica, lo studio della struttura delle molecole, ed il loro comportamento chimico.

Sponer nel suo manuale ha tentato di individuare le relazioni tra i fenomeni studiati sia a livello sperimentale che teorico da due differenti campi di ricerca vale a dire tra la spettroscopia molecolare e la chimica, rendendo contemporaneamente evidente il contenuto interdisciplinare e le basi sperimentali della nuova disciplina

⁶ A. Karachalios, *Die Entstehung und Entwicklung der Quantenchemie in Deutschland*, in: *Mitteilungen der Gesellschaft Deutscher Chemiker, Fachgruppe Geschichte der Chemie*, 13 (1997) pp. 493-510.

⁷ A. Haas, *Die Grundlagen der Quantenchemie*, Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft, 1929.

⁸ H. Sponer, *Molekülspektren und ihre Anwendung auf chemische Probleme*, Berlin: Verlag von Julius Springer, 1936.

della chimica quantistica. In tal modo Sponer ha stabilito un'identità oppure una relazione tra un'entità caratterizzata fisicamente e sperimentalmente in un campo e un'entità caratterizzata funzionalmente nel campo chimico. In altre parole ha individuato in un campo la causa di un effetto constatato in un altro. Una caratteristica peculiare del trattato di Sponer è che ha tentato di definire un certo grado d'autonomia dello stato sperimentale e concettuale della chimica quantistica gettando un ponte tra due discipline autonome, la spettroscopia molecolare e la chimica. Ciò riflette ancora il fatto che l'interesse di Sponer non era affatto a mostrare in quale modo si possa derivare una teoria da un'altra, ma solo alle connessioni tra i fenomeni nei due campi.

4. *Il primo trattato di chimica quantistica*

Il terzo trattato sotto il titolo *Einführung in der Quantenchemie* del fisico tedesco Hans Hellmann (1903-1938), fu pubblicato nel 1937 sia in Russo che in tedesco.⁹ L'autore provò a tracciare l'autonomia della nuova disciplina nei confronti della fisica, chimica fisica e chimica, così come la sua non riducibilità alla fisica.

Hellmann nell'autunno del 1934 a causa delle sue idee socialiste e l'origine ebraica di sua moglie Viktoria Bernstein fu costretto ad emigrare dalla Germania nazista all'Unione sovietica, dove lavorò come direttore dell'istituto di chimica fisica presso l'istituto Karpow di Mosca. Nel 1938 durante le purghe del periodo Staliniano Hellmann fu arrestato e con la supposizione infondata di essere spia tedesca fu assassinato.

Il libro di Hellmann nato dalle sue lezioni sia al politecnico di Hannover che all'istituto Karpow, fu il primo trattato ufficiale di chimica quantistica in cui furono esposti in modo chiaro i principi concettuali e metodologici della nuova disciplina. Hellmann tentò di riformare tutta l'impalcatura concettuale e metodologica della chimica quantistica tramite un originale contributo sulla natura del legame chimico e l'elaborazione di un nuovo metodo degli orbitali molecolari noto come il metodo dello Pseudopotenziale. Il suo obiettivo fu di chiarire a livello teorico questioni inerenti alla reattività di sistemi chimici e la loro struttura molecolare.¹⁰ La nuova immagine della chimica quantistica che emerge dai contributi di Hellmann era il frutto delle sue applicazioni della nuova statistica quantica di Fermi, per chiarire la natura del legame chimico rendendo evidente non soltanto il contributo dell'energia potenziale ma anche dell'energia cinetica degli elettroni di valenza.

⁹ H. Hellmann, *Einführung in die Quantenchemie*, Leipzig und Wien: Franz Deuticke, 1937.

¹⁰ Per un approfondimento veda W.H. Schwarz, A. Karachalios u.a., *Hans G.A. Hellmann (1903-1938) I. Ein Pionier der Quantenchemie*, "Bunsen-Magazin" 1(1999), pp. 10-21; *II. Ein deutscher Pionier der Quantenchemie in Moskau*, "Bunsen-Magazin" 2 (1999,) pp 60-70.

Riassunto – A partire dagli anni 1920 la chimica classica si è sottoposta ad alcuni mutamenti radicali delle sue procedure conoscitive che hanno condotto alla nascita delle nuove linee di ricerca. Nacquero nuove discipline come la chimica organica fisica e la chimica quantistica, che ebbero incoraggiato l'influsso di nozioni teorici e tecniche sperimentali dalla fisica. Nuovi metodi spettroscopici come la spettroscopia Raman fu indispensabile per la determinazione della struttura molecolare ed altri parametri chimici. Alcuni concetti chimici fondamentali come la valenza fu ridefinita tramite la nuova impalcatura concettuale e metodologica della fisica quantistica. In congiunzione con questi mutamenti alcuni trattati in lingua tedesca svolsero un ruolo cospicuo per la formazione e il consolidamento della nuova disciplina della chimica quantistica.

Per questi sviluppi tre trattati svolsero un ruolo decisivo per la formazione della nuova disciplina in Germania. Il primo fu il *Lehrbuch der Chemischen Physik*, del chimico fisico Arnold Eucken (1884-1950). In questo libro, che fu pubblicato nel 1930, si riflette la tendenza di chiarire le frontiere metodologiche che separano la chimica quantistica dalla chimica fisica in generale. Nel 1935 fu pubblicato il trattato di Hertha Sponer (1895-1968) *Molekülspektren und ihre Anwendung auf chemische Probleme*, in cui aveva chiaramente esposto la questione della relazione a livello concettuale tra spettroscopia molecolare e chimica quantistica. Il terzo trattato sotto il titolo *Einführung in der Quantenchemie* di Hans Hellmann (1903-1938), che fu pubblicato nel 1937, l'autore provò a tracciare l'autonomia della nuova disciplina nei confronti della fisica, chimica fisica e chimica.