

HANS HELLMANN: ŽIVOTNÍ PŘÍBĚH VĚDCE VE 20. STOLETÍ*

RUDOLF ZAHRADNÍK

Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského, Akademie
věd České republiky, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
Rudolf.Zahradnik@jh-inst.cas.cz

Došlo 20.8.03, přepracováno 25.8.03.

Věnováno prof. Helmutu Schwarzovi (Berlín), vel-
mistru chemie, k jeho šedesátým narozeninám.

V nedávno skončeném století se udál bezpočet dobrých
a povzbudivých příběhů, ale též hrozné množství příběhů,
jež představují monokrystaly hrůzy. Příběh Hellmannův
patří do druhé kategorie: fenomenální učenec byl zavražděn
ve svých 35 letech v rámci čehosi, co lze nazvat neformální
spoluprací nacismu a komunismu.

Pro přehlednost je toto sdělení rozděleno do tří částí.
Nejprve zmíním *Curriculum vitae* skutečného a velkého pio-
nýra kvantové chemie. Potom v obrysu popíši ty jeho bada-
telské výsledky, jichž si nejvíce cením. A konečně příběh fe-
nomenálnosti a tragedie začleněním do sevřeného obrázku
o osudu lidstva ve 20. století.

Nedávno, 14. října 2003, si kvantověchemická komu-
nita připomínala sté výročí jeho narození; narodil se v ně-
meckém Wilhelmshavenu v rodině vojáka z povolání. Stře-
doškolské vzdělání ukončil maturitou na gymnáziu v r.
1922 a pak následovalo sedm let studia fyziky; diplomu do-
sáhl v r. 1927 a doktorátu v r. 1929. Počátkem téhož roku se
v rodině svého učitele seznámil s půvabnou dívkou, Ukra-
jinkou Viktorií Bernsteinovou, jež pocházela ze židovské
rodiny. Záhy nato následoval sňatek a koncem téhož roku se
manželé stali rodiči chlapce, kterému dali jméno Hans.
Hellmann i jeho učitel byli na tom stejně, pokud šlo o pů-
vod jejich manželek: pro oba to mělo po nástupu nacistů
k moci zlé následky a Hellmanna to dokonce stálo život.

Po nástupu nacistů bylo Hellmannovi zřejmé, že s ro-
dinou zůstat v Německu nelze. Manželé uvažovali o více
možnostech emigrace, ale posléze zvítězilo přání paní Hell-
mannové vrátit se na Ukrajinu. Sovětské autority řekly ano,
ale Ukrajinu zamítly. Alternativa, kterou nabídly, nebyla
špatná: pozice vedoucího teoretické skupiny a profesora
Karpovova ústavu v Moskvě. Mimořádné kvality Hellman-
novy byly v odborném světě dobře známy. Nedlouho po
emigraci, v r. 1934, byla tato nabídka realizována. Hell-
mann se dal do práce s ohromným nasazením a horlivě pub-
likoval v Moskvě i v zahraničí. Cítil se dobře a v červnu r.
1936 dostal sovětské občanství. Učenci, přesněji řečeno vy-
braní učenci, se v Moskvě těšili vážnosti a přízni, a tak ži-
vot Hellmannových nebyl špatný. Na sklonku r. 1937 si

všiml, že atmosféra prostředí, kde už několik let žil a pra-
coval, se podivně změnila. Nepříznivá atmosféra se prohlu-
bovala a v březnu 1938 hrozivá historka zaznamenala pr-
vou kulminaci: Hans Hellmann byl zatčen. Když mu bylo
34 let 7 měsíců a 15 dní, dne 29. května 1938, byl NKVD
zavražděn. Když si šla vdova za dva týdny do ústavu pro
poslední plat, nedostala ho. Zato si na „stěngazetě“ přečetla
denunciaci o svém muži; zpráva byla podepsána dvěma
Hellmannovými kolegy, Dr. Zhukhovitským a Dr. Tjomki-
nem, kteří byli pokládáni za jeho udavače. Prvz z nich byl
sekretářem stranické organizace v ústavu. Vdova s devítile-
tým synem byla záhy vystěhována z bytu a zanedlouho za-
tčena. Hans Hellmann, Jr. se setkal se svou matkou za 15
let. To bylo v době, kdy už byl vystudovaným elektroinže-
nýrem. Jeho žádostem o vystěhování s rodinou vyhověly
úřady teprve jako dvašedesátiletému v r. 1991.

Hellmann byl učenec skutečně nevšední: byl nejen vy-
nikajícím teoretickým fyzikem, ale též velice zdatným ex-
perimentátorem a navíc přírodovědcem s hlubokým poro-
zuměním chemii. Zbývá dodat, že byl učenecem, který měl
jedinečnou způsobilost vystihnout témata, jež budou hrát za
pár let či desetiletí klíčovou roli v rozvoji teorie v chemii.
To vše bych chtěl doložit pomocí výběru Hellmannových
objevů a děl, které, po složení v koláž, by byly působivou
dekorací pro (virtuální) síň slávy. Nepůjde o pouhé vyjme-
nování objevů, jež (jistě nejen já) pokládám za díla klíčové
důležitosti, ale též o uvedení, k čemu dnes slouží a kdo při-
spěl významně k jejich využívání.

Domnívám se, že kdyby Hellmann žil ve šťastnější
době, byl by vynikajícím kandidátem na Nobelovu cenu. Ve
skutečnosti mě udivuje, že jeho dílo je zmíněno snad jen ve
40 % učebnic kvantové chemie. Samozřejmě v zemi, která
mu poskytla azyl a pak ho připravila o život, neměla ofici-
ální místa zájem připomínat jeho dílo. A v jeho rodné zemi
začali usilovat o nápravu teprve v 90. letech, o čemž se
krátce zmíním v závěru tohoto článku.

Onu zmíněnou virtuální koláž vytvořím ze šestice vý-
razných výsledků; prvz z nich nese v označení jeho jméno.
Jde o Hellmannův-Feynmanův teorém. Přispěl k tomu, že
aplikovaná kvantová chemie prodělala v 70. letech ohrom-
nou proměnu. Dnes je už obecně známo, že ze Schrödinge-
rovy rovnice plyne předpis pro výpočet celkové energie, E ,
systému popsaneého vlnovou funkcí Ψ a hamiltoniáem H :

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad (1)$$

Tento výraz dovoval už ve 30. letech pomocí trpěli-
vého měnění vazebných délek a úhlů dospět u dvou- a tří-
atomových molekul ke struktuře, jež odpovídala minimu
energie. Avšak nutno dodat, že pátrání po optimální struk-
tuře u pouhé čtyřatomové molekuly je velice pracné a u vět-
ších molekul prakticky neproveditelné. A tak celá oblast

* Zkrácená verze přednášky proslouvené na Hellmannově workshopu v rámci 11. Mezinárodního kongresu kvantové chemie v Bonnu, dne 26.7.2003.

studia hyperploch potenciální energie stagnovala. Ke dramatické změně došlo až v 70. letech, kdy se pro optimalizaci geometrie molekul začalo používat vedle výpočtu energie také výpočtu gradientů energie¹⁻³, tedy derivací celkové energie podle vnitřních souřadnic molekuly x_i . Hellmann ukázal, že platí⁴

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} = \left\langle \psi \left| \frac{\partial H}{\partial x_i} \right| \psi \right\rangle \quad (2)$$

což znamená, že hodnoty změny energie se změnou (zvětšením či zmenšením) souřadnice vypočítáme ze Schrödingery rovnice, v níž hamiltonián je nahrazen jeho derivací podle souřadnice. Optimalizace geometrie molekul pomocí energie a gradientu energie způsobila – spolu s kvalitními počítačovými programy – ohromný rozmach teorie v chemii. Ve většině laboratoří se kvantová chemie stala neodmyslitelnou složkou experimentální práce. Sluší se ještě poznamenat, že derivace energie podle souřadnice má srozumitelný fyzikální význam. Udává totiž velikost a směr síly, jež působí na jádra jednotlivých atomů v molekule, a tudíž představuje pokyn, o kolik a v jakém směru změnit polohu toho kterého jádra, abychom se přiblížili k optimální struktuře, tedy k té, již přísluší nejnižší energie. Rozumí se samo sebou, že v této struktuře jsou všechny dílčí hodnoty gradientu energie rovny nule.

Další políčko v naší koláži je spjato s tím, co se dnes nejčastěji nazývá pseudopotenciál. Název to není nejpodarenější, idea je to však velice užitečná. Mnoho pokusných i teoretických studií je spjato se systémy, obsahujícími atomy 1. a 2. řady periodického systému. Přechod k teoretickému popisu těžších atomů je svízelný proto, že s rostoucím počtem elektronů se stává výpočet na kvalitní úrovni pro velký rozsah nezvládnutelný i v případě velmi výkonného počítače. Hellmann navrhl už v r. 1934, jak překonat tuto svízeľ⁵. Doporučil uvažovat ve výpočtu explicitě pouze elektrony vnější slupky, tedy elektrony valenční. Elektrony vnitřních slupek (kterých je u těžších atomů velká většina), zvané též elektrony „core“, vytvářejí spolu s jádrem atomu útvar, který se zpracovává jako celek. Tento postup umožňuje kvalitní popis systémů obsahujících těžké atomy. Sluší se dodat, že tutéž ideu popsal téměř současně Gombas⁶. V minulých desetiletích byly navrženy pseudopotenciály pro všechny těžké atomy, pseudopotenciály, které berou náležitě v úvahu potřebu respektovat relativistické efekty, jež se pronikavě uplatňují u elektronů těchto atomů ve slupkách, situovaných nejbližší atomovému jádru⁷⁻⁹. Je tedy zřejmé, že dnes už v periodickém systému neexistují výpočtově nedostupná zátíží. Je však pravdou, že mezi těžkými atomy existují takové, jejichž zpracování není snadné, ale to je už případ přesahující zaměření tohoto článku.

Další bod je (a bude!) perlou v naší koláži. Týká se van der Waalových (zkráceně vdW) interakcí, které se v literatuře označují též jako slabé či nekovalentní. Jde o interakce mezi permanentními, indukovanými a časově proměnnými elektrickými multipóly, jež jsou spjaty s interagujícími molekulami; interakce dipól-dipól často představuje největší stabi-

zační příspěvek. Sluší se dodat, že časově proměnné dipóly se uplatňují např. u atomů vzácných plynů; jsou způsobeny tím, že těžká atomová jádra nestačí sledovat velmi rychlý pohyb elektronových oblaků. Tyto interakce mají zásadní význam pro chemii v kondenzované fázi a jsou naprosto nezastupitelné v celé oblasti biodisciplín. K jejich náležitému docenění nepochybně dojde v nedaleké budoucnosti.

Ultrapiónem v této oblasti byl pět let před Hellmannem Fritz London¹⁰, ale Hellmannův příspěvek¹¹ je originální a velice přínosný. Je nejvyšší čas, aby mladí adeпти biodisciplín (chemici ovšem též) věnovali náležitou pozornost popisu a interpretaci těchto interakcí; bez toho by neměli možnost porozumět průběhu fungování elementárních procesů v živé hmotě. Soustavné poučení o těchto interakcích lze nalézt na více místech v literatuře, např. v pracích¹²⁻¹⁴.

Jen krátce se mohu zmínit o viriálovém teorému, který ukazuje, že mezi potenciální (V), kinetickou (T) a celkovou (E) energií u atomů a molekul existuje podivuhodně jednoduchý vztah:

$$T = -\frac{V}{2} = -E \quad (3)$$

Tento vztah přesně platí v případě, že máme k dispozici přesnou vlnovou funkci^{4,15}. U výpočtů s funkcemi přibližnými lze podle míry nesplnění vztahu (3) usuzovat na kvalitu použité přibližné vlnové funkce. Zbývá dodat, že ke vztahu (3) dospěli nezávisle Hellmann⁴ a Slater¹⁵, a proto bývá označován jako Hellmannův-Slaterův teorém. Jednoduchost vztahu (3) může svádět k domněnce, že pozadí tohoto vztahu je stejně prosté. Avšak není tomu tak; ve skutečnosti i v literatuře nepochybně dobré kvality bývá sepětí potenciální, kinetické a celkové energie interpretováno zmateně a ne zcela korektně. Jasně lze získat např. trpělivým prostudováním prací Ruedenberga¹⁶ a Kutzelnigga¹⁷.

Páté místo v naší koláži právem náleží Hellmannovým experimentálním pracím. I v tomto směru byl skutečným mistrem, jakým byl v oblasti teorie. Pro ilustraci lze uvést měření frekvenčně závislých dielektrických konstant¹⁸, jež bylo součástí jeho dizertace, jakož i dnes vskutku aktuální téma, týkající se rozkladu ozonu ve stratosféře¹⁹. Jeho studie chemické reaktivity²⁰ předběhla dobu. Ve všech svých pracích vždy kladl důraz na zkoumání toho, jak nepřesnosti jednotlivých proměnných ovlivňují přesnost stanovené veličiny. S politováním lze dodat, že tomu trvale významnému bodu se dnes věnuje jen malá pozornost.

Jako poslední bod do koláže z Hellmannova díla vybírám jeho monografii, která vyšla v r. 1937 v Moskvě pod názvem „Kvantovaja chimija“²¹. To bylo prvé dílo tohoto druhu, tedy počín průkopnický. Je ovšem pravda, že už v r. 1935 vyšlo známé dílo Paulinga a Wilsona nadepsané „Introduction to Quantum Mechanics“ s podtitulem „With Application to Chemistry“. To, co je na Hellmannově díle zvláště oceněníhodné, je to, že po téměř 70 letech je pořád svěží a použitelné jako učebnice! Ostatně totéž platí o díle o sedm let mladším, o „Quantum Chemistry“ Eyringa, Waltera a Kimballa, které má už mnoho desetiletí charakter ja-

kési „bible“ pro začínající kvantové chemiky. Pokud jde o Hellmannovu monografii, nutno dodat, že v r. 1937 neměla naději na vydání v nacistickém Německu. Německou verzi se však podařilo uplatnit ve Vídni²² v té době ještě neobsazené.

Dříve než umístíme celou koláž do virtuální síně slávy, je na místě pokus o zařazení Hellmannova příběhu do kontextu 20. století. Od doby osvícenství v 18. století lze sledovat cestu rozmachu k politickým, hospodářským a sociálním rysům demokracie 20. století. Všichni ovšem víme, že na odvrácené straně tohoto století jsou dvě války, války hrůzné rozsahem a brutalitou. A letitá válka studená. A dvě surové a bestiální diktatury, jež své metazločiny páchaly v rámci hnědé a rudé verze socialismu: dohromady to stálo život okolo 80 miliónů lidí. Vynikající učenec Hans Hellmann byl jedním z oněch 80 milionů. Bylo to navíc také století emigrací a emigrantů.

Ve 20. století došlo také k dříve netušenému rozmachu vědy a vyspělého průmyslu. Došlo k objevům, jež změnily náš pohled na vesmír a na svět, v němž žijeme. Role fyziky, chemie, biologie (v širokém slova smyslu) a lékařství byla převratná. Pokud bych směl zmínit jen jeden jediný z těch velkých objevů, tak bych uvedl kvantovou mechaniku; je to nejen pro mne jeden z největších triumfů lidského ducha²³ s důsledky pro fundamentální teorii fyziky (hluboký průnik do světa elementárních částic a současné úsilí o spojení s obecnou teorií relativity) a pro vznik molekulových věd (je jejich společným teoretickým jmenovatelem). Konečně myslím, že by bylo škoda neupozornit na vliv kvantové teorie na výtvarné umění 20. století²⁴.

Před uzavřením svého krátkého příspěvku rád konstatuji, že v posledních letech vzrostl pronikavě v odborných kruzích zájem o Hellmannovo dílo i o jeho osud jak v Německu, tak v Rusku. V Německu je v čele těchto snah prof. W. H. Eugen Schwarz na univerzitě v Siegen. On také významně přispěl ke vzniku dvou vynikajících příspěvků o H. Hellmannovi^{25,26}.

Svým dílem si Hellmann vytvořil pomník, kterému nehrozí zvětrávání a koroze. Mysle na velkého učence, jednoho z 80 milionů lidí, jejichž životy byly zmařeny, přeji si, aby mladá generace nebyla lhostejná k minulosti a historii vůbec, nejen k historii vědy. Pokud by tomu tak nebylo, hrozila by totiž recidiva. Na to nás už před lety upozornil americký filozof španělského původu, George Santayana (1863–1952): „Who does not remember the past, is condemned to repeat it“. Na nás seniorech je, abychom na to taktně, avšak houževnatě upozorňovali mladší generace.

LITERATURA

1. Pulay P.: *Mol. Phys.* 18, 473 (1970).
2. McIver J. W., Jr., Komornicki A.: *Chem. Phys. Lett.* 10, 303 (1971).
3. Pancíř J.: *Theor. Chim. Acta* 29, 21 (1973).
4. Hellmann H.: *Z. Phys.* 85, 180 (1933).
5. Hellmann H.: *Acta Physicochim. U.S.S.R.* 1, 913 (1934/1935); 4, 225 (1936).

6. Gombas P.: *Z. Phys.* 94, 473 (1935).
7. Presuß H.: *Z. Naturforsch. A10*, 365 (1965).
8. Kutzelnigg W., Koch R., Bingel W. A.: *Chem. Phys. Lett.* 2, 197 (1968).
9. Frenking G. et al.: *Rev. Comput. Chem.* 8, 63 (1996).
10. London F.: *Z. Phys. Chem. B11*, 222 (1930).
11. Hellmann H.: *Acta Physicochim. U.S.S.R.* 2, 273 (1935).
12. Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. B.: *Molecular Theory of Gases and Liquids*. Wiley, New York 1954.
13. Hobza P., Zahradník R.: *Weak Intermolecular Interaction*. Elsevier, Amsterdam 1980.
14. Hobza P., Zahradník R.: *Chem. Rev.* 88, 871 (1988).
15. Slater J. C.: *Phys. Rev.* 1, 687, 1933.
16. Ruedenberg K.: *Rev. Mod. Phys.* 39, 326 (1962).
17. Kutzelnigg W.: *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 12, 546 (1972).
18. Hellmann H., Zahn H.: *Phys. Z.* 26, 680 (1925).
19. Hellmann H.: *Ann. Phys. (Leipzig)* 2, 707 (1929).
20. Hellmann H., Syrkin J. K.: *Acta Physicochim. U.S.S.R.* 2, 433 (1935).
21. Hellmann H.: *Kvantovaja chimija*. ONTI, Moskva 1937.
22. Hellmann H.: *Einführung in die Quantenchemie*. F. Deuticke, Leipzig 1937.
23. Weinberg S.: *Fascing Up (Science and Its Cultural Adversaries)*. Harvard University Press, Cambridge, London 2001.
24. Waddington C. H.: *Behind Appearance (A Study of the relations between painting and the natural sciences in this century)*. MIT Press, Cambridge, London 1968.
25. Schwarz W. H. E., Andrae D., Arnold S. R., Heidberg J., Hellmann H. jr., Hinze J., Karachalios A., Kovner M. A., Schmidt P. C., Zülicke L.: *Bunsen-Magazin* 1999 (1), 10.
26. Schwarz W. H. E., Karachalios A., Arnold S. R., Zülicke L., Schmidt P. C., Kovner M. A., Hinze H., Hellmann H. jr., Heidberg J., Andrae D.: *Bunsen-Magazin* 1999 (2), 60.

R. Zahradník (*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague*): **Hans Hellmann: Life Story of a Scientist in the 20th Century**

This communication consists of three parts: (i) biography of Hans Hellmann, a real pioneer in quantum chemistry, (ii) Hellmann's achievements, and (iii) reflections on the mankind destiny in the 20th century. When the Nazis seized power in Germany in 1933, Hellmann realized that emigration became a necessity for his family. In 1934–1937 he worked at the Karpov Institute in Moscow; he was imprisoned in 1938 and a few weeks later executed by the Soviet secret service.

Hans Hellmann (1903–1938) was not only a brilliant theoretical physicist but also a man who was able to perfectly define experiments and carry them out, a physicist with real and deep feeling for chemistry and, particularly,

a man with a remarkable vision. Hellmann's notable achievements are briefly reviewed and their impact on contemporary chemistry is emphasized. Attempt has been made to create a collage on the basis of six Hellmann's scientific masterpieces which could be suitable for inclusion in a Hall of Fame. The first deals with the Hellmann-Feynman theorem that has played a prominent role in molecular geometry gradient optimization. The next one is associated with pseudopotentials, which have made possible the entry of quantum chemical treatment into the area of heavier atoms. The third achievement concerns non-covalent bonds, which assume a key position in the description of condensed matter and are essential in the whole realm of biodisciplines. The virial theorem, the fourth success, has played a great role in understanding the nature of the chemical bond. Hellmann's experimental abilities have been docu-

mented by his measurements of frequency-dependent dielectric permittivity, ozone decomposition in stratosphere, and chemical reactivity. The last achievement is his extensive work Quantum Chemistry (in Russian), published in 1937, which is still an impressive textbook.

In the final section, the transitions of the mankind from the Age of Reason to democracies and also extremely brutal dictatorships of the 20th century are briefly outlined; this is a good frame of the Hellmann's life story. Another feature of that century is unparalleled expansion and development of science and technology, quantum mechanics being the greatest scientific achievement of that century. The paper is closed by a quotation from G. Santayana: „Who does not remember the past, is condemned to repeat it“. The author believes that it is the moral obligation of seniors in science to regularly remind junior scientists of this sage observation.