

Richard Bader (1931–2012)

Richard Bader, der den oft als „Bader-Analyse“ bezeichneten quantentheoretischen Ansatz „Atome in Molekülen“ entwickelt hat, ist am 15. Januar 2012 im Alter von 80 Jahren in Burlington, Ontario (Kanada), verstorben.

Moleküle sind aus Atomen aufgebaut, und die Eigenschaften eines Moleküls werden von der Art dieser Atome und ihrer Anordnung im Molekül bestimmt. Dieser chemische Lehrsatz spiegelt sich im Periodensystem der Elemente wider. Die Allgegenwart des Periodensystems in den Forschungs- und Lehrstätten der Chemie und in den Denkweisen der Chemiker bestätigt seine Nützlichkeit. Dieser Standpunkt wurde jedoch mit dem Aufkommen der Quantenmechanik infrage gestellt. In der quantenmechanischen Behandlung eines Moleküls treten eine molekulare Schrödinger-Gleichung, ein molekularer Hamilton-Operator und molekulare Wellenfunktionen auf. Vor Richard Baders Ansatz mussten Chemiker zwischen einer präzisen mathematischen, auf der Physik basierenden Beschreibung eines Moleküls und einer qualitativen, mit traditionellen Denkweisen in der Chemie verbundenen Behandlung wählen. Der Einsatz von Physik und Mathematik ermöglichte es ihm, Moleküle in atomare Bereiche zu zerlegen, was zur „Quantentheorie von Atomen in Molekülen“ (QTAIM) führte.

Selten ist eine moderne wissenschaftliche Methode, noch weniger eine Theorie, ausschließlich mit einem großen Denker verbunden. Aber Richard Bader war nicht nur der Schöpfer der QTAIM, sondern auch mehr als vierzig Jahre lang die treibende Kraft hinter dieser Theorie. Sein Büro war „das geistige Zentrum“ der QTAIM, und nahezu jeder wichtige Beitrag kam aus seiner Forschungsgruppe. Richard Bader konzipierte und definierte die QTAIM, untermauerte sie physikalisch und mathematisch und verfolgte vehement ihre Weiterentwicklung und Verfeinerung. Wie sehr Bader mit dieser Theorie in Verbindung gebracht wird, zeigt sich auch darin, dass die QTAIM oft einfach nur „Bader-Analyse“ genannt wird. Diese Bezeichnung mochte er allerdings gar nicht, denn seiner Meinung nach konnte damit der Eindruck entstehen, die Theorie, die ja eine allgemeine physikalische Methode für die Beschreibung von offenen Quantensubsystemen wie Atomen und funktionellen Gruppen in Molekülen ist, sei nur seine persönliche Philosophie der Chemie. Sein Tod ist das traurige Ende einer Epoche der QTAIM.

Richard Baders wichtigste Erkenntnis war, dass Chemiker sich Moleküle und Atome in einem dreidimensionalen Raum und nicht den mehrdimensionalen Raum der Elektronenkonfigurationen vorstellen.

Deshalb ist es naheliegender, Moleküle auf der Basis einer dreidimensionalen Funktion in Atome zu zerlegen, die die Elektronenwolke und die Elektronendichte und nicht die mehrdimensionale elektronische Wellenfunktion oder ihre unvollkommene Darstellung mithilfe komplexwertiger, delokalisierten Molekülorbitale quantifiziert. Ausgehend von den bekannten Konturliniendiagrammen der Elektronendichte scheint die Idee, Moleküle in atomare Bereiche zu zerlegen, so wie umgebende Flüsse eine Landfläche zuordnen, äußerst elegant. Richard gab sich damit aber nicht zufrieden. Er eignete sich das notwendige mathematische und physikalische Wissen an und entwickelte seine quantitative Theorie, ein wichtiges Hilfsmittel für alle, die aus Rechnungen Verständnis ableiten und nicht nur Zahlen erhalten wollen. Die Resultate seiner Erkenntnisse sind in die moderne theoretische Chemie eingeflossen. Aus seinem leidenschaftlichen Engagement für die Berechnung atomarer Eigenschaften entwickelte er neue Ansätze, Methoden und Sichtweisen, die als Pionierarbeiten anerkannt sind.

Über der Tür zu Richards Büro war zu lesen: „If you cannot measure it or define it using physics, I do not want to discuss it.“ Jedem Verstoß gegen diesen strengen Maßstab trat er energisch entgegen, was zu vielen kontroversen Diskussionen führte. Niemand, der jemals mit ihm gestritten hat, wird diese Erfahrung vergessen. Richard sah sich als Verteidiger der physikalisch begründeten Wahrheit gegen den Sumpf der heuristischen und schlecht definierten Bindungsmodelle der Chemie, die er nicht als stimulierende Konzepte, sondern als Irrglauben und konfuse Denken verursachende „Opiate“ betrachtete. Er reagierte mit starker Ablehnung, wenn seine Sichtweise und sein Denkansatz als eine Ergänzung und nicht als Ersatz für die heuristischen Modelle der klassischen Chemie betrachtet wurden. Er veröffentlichte viele beißende Kritiken zu Arbeiten, die seinem Maßstab nicht entsprachen. Ein Gegner musste schon viel Rückgrat besitzen, um Richards Attacken zu widerstehen. Aber diese Angriffe waren wie ein Feuer, das die Unzulänglichkeiten in der eigenen Argumentation aufdeckte — ein reinigendes Fegfeuer für ziemlich viele Betroffene, aber nicht die Hölle. Eine spontane Äußerung eines von uns (G. Frenking) nach dem Bekanntwerden von Richards Tod war: „Er war ein wundervoller Gegner. Nun hat Gott jemanden, mit dem er sich streiten kann.“

Richards Prinzipien beeinflussten und inspirierten Wissenschaftler, Methoden zu entwickeln, die zum Verständnis der Eigenschaften und der Reaktivität von Molekülen beitrugen. Er ist mehr als jeder andere dafür verantwortlich, dass dabei die Grundsätze der Physik und Mathematik exakt beachtet werden und die Vorhersage und Beschreibung experimentell beobachtbarer Phäno-



R. Bader

mene im Mittelpunkt stehen. In der Nachfolge von Richards Arbeiten zur QTAIM wurde von Arbeiten, in denen Konzepte für die Interpretation von quantenchemischen Rechnungen vorgestellt wurden, erwartet und auch gefordert, dass sie eine mathematische Ableitung von Grundprinzipien der Physik enthalten. Obwohl Richards leidenschaftliche Verfechtung der Physik als der einzig akzeptierbaren Quelle für Einsichten in die Chemie manchmal als Starrsinn empfunden wurde, führte diese Anschauung zu neuen Maßstäben und bereicherte die Diskussionen in der Chemie. In den zahlreichen E-Mails, die theoretische Chemiker nach der Bekanntgabe von Baders Tod austauschten, haben auch solche, die mit seiner unbeugsamen Meinung nie übereinstimmten, zugegeben, dass seine Konsequenz sie dazu anhielt, ihre Argumente und ihr Verständnis zu vervollkommen. Zudem wurde gewürdigt, dass er die Akzeptanz der Dichtefunktionaltheorie als wichtiges Verfahren der theoretischen Chemie in Kanada gefördert hat, indem er die molekulare Elektronendichte als Eckpfeiler des theoretisch-chemischen Denkens hervorhob.

Richard Bader wurde 1931 in Kitchener, Ontario, geboren. Seinen BSc- und MSc-Grad erhielt er von der McMaster University in Hamilton, Ontario. Anschließend promovierte er am Massachusetts Institute of Technology (MIT) bei C. Gardner Swain in physikalisch-organischer Chemie. Richard erinnerte seine Kollegen aus der theoretischen Chemie — von denen die meisten im Labor eine Gefahr für sich und für andere wären — gerne daran, dass er „ein in der Praxis erfahrener Organiker“ sei. Diese Einstellung behielt er während seiner gesamten Karriere bei. Viele seiner wichtigsten Entdeckungen gehen auf Versuche zurück, die physikalische Basis für empirische, in der chemischen Synthese aber sehr nützliche Regeln wie Eigenschafts-Additivitäts-Beziehungen und Valenzschalenelektronenpaarabstoßung (VSEPR) zu finden. Nach seinem Aufenthalt am MIT ging er als Postdoktorand zu H. Christopher Longuet-Higgins an die University of Cambridge. 1959 kehrte er nach Kanada zurück, zunächst als Professor an der University of Ottawa. 1963 wechselte er an die McMaster University in Hamilton. Richard hat die Beiträge anderer — nicht nur die seiner Kollegen, sondern auch die seiner Studenten und Postdok-

toranden — zu seiner Forschung immer anerkannt. Besonders zu Beginn seiner Karriere wurden seine Forschungen über die Elektronendichte durch die Zusammenarbeit mit Robert Mulliken und Clemens Roothaan gefördert. Während eines Treffens mit den theoretischen Chemikern der ETH Zürich im Jahr 1968 wurde seine Aufmerksamkeit auf den Laplace-Operator der Elektronendichte gelenkt. Sein Interesse an der topologischen Analyse und den Elektronenverteilungsfunktionen höherer Ordnung wurde geweckt, als er 1972 Raymond Daudel in Paris besuchte. Eine intensive, fruchtbare und langdauernde Zusammenarbeit bestand auch mit seinen experimentell arbeitenden Kollegen an der McMaster University, besonders mit Ron Gillespie und Nick Werstiuk. Zu seiner aktiven Zeit an der McMaster University war er auch Mentor und Lehrer von P. W. Ayers (einem der Autoren). Dieser kann sich unter anderem gut daran erinnern, dass Bader ihn immer wieder anhielt, frei von mathematischem „Hokuspokus“ zu argumentieren und mit beiden Füßen auf dem Boden zu bleiben, auch wenn sein Kopf in den Wolken sei.

Und genau so lebte und forschte Richard: Er war zwar verwurzelt in den Problemen und in der Sprache des experimentellen Chemikers, aber seine Denkwelt war vom Reich der reinen Physik geprägt. Sein Verlangen nach Genauigkeit und Stringenz; seine Leidenschaft für die Chemie und das Leben; seine Leidenschaft beim Lehren und Betreuen junger Wissenschaftler; seine Achtung vor dem Experiment; sein Glaube, dass experimentelle Beobachtungen die ultimative Quelle für ein weit reichendes Verständnis sind; seine Hartnäckigkeit hinsichtlich der Definition chemischer Konzepte mit der Sprache der Physik: Diese Wesenszüge zeichneten Richard Bader aus und spiegeln sich in seiner Quantentheorie von Atomen in Molekülen wider.

Paul W. Ayers

McMaster University, Hamilton (Kanada)

Gernot Frenking

Universität Marburg (Deutschland)

DOI: 10.1002/ange.201201794