



Paul von Ragué Schleyer

### Paul von Ragué Schleyer (1930–2014)

Paul von Ragué Schleyer, Graham-Perdue-Professor an der University of Georgia ist am 21. November 2014 in seinem Haus in Ila (Georgia, USA) verstorben. Schleyer wurde am 27. Februar 1930 als Sohn von Charles und Betty Kamphausen Schleyer in Cleveland, Ohio, geboren. Er besuchte die Cleveland West Technical High School und verließ sie 1947 als bester Schüler des Jahrgangs („class valedictorian“). 1951 erwarb Schleyer an der Princeton University den A.B.-Abschluss mit magna cum laude, und 1957 promovierte er bei Paul D. Bartlett an der Harvard University.

Schleyer war ein herausragender und überaus produktiver Physiko-Organiker der zweiten Hälfte des 20. und des frühen 21. Jahrhunderts. Er hinterlässt unauslöschliche Spuren in dem sich mit Struktur und Theorie beschäftigenden Teil der Chemie, indem er die Computerchemie in die großen Bereiche physikalisch-organischer, -anorganischer, -metallorganischer und mechanistisch-chemischer Konzepte einführt. Sein Genie zeigte sich schon während seiner Promotion, als er unabhängig die erste Isomerisierungsmethode für die Synthese von Adamantan erkannte, was zu einer viel zitierten Einautorenzuschrift führte (*J. Am. Chem. Soc.* **1957**, 79, 3292). Sein Doktorvater Bartlett war offenbar nicht an der Chemie dieser diamantartigen Käfigverbindung interessiert und erlaubte ihm die Veröffentlichung unter der Adresse der Princeton University, an der Schleyer damals nebenbei schon als Dozent arbeitete.

Schleyers Vollzeit-Laufbahn in Princeton begann 1958; 1963 wurde er Associate Professor, 1965 Professor, und von 1969 bis 1976 hatte er den Eugene-Higgins-Lehrstuhl inne. Anfangs führte er Kinetikstudien an vielen säurekatalysierten Reaktionen durch, vorwiegend mithilfe von Solvolysemethoden sowie Molekülmechanik(MM)- und semiempirischen Berechnungen der Strukturen von Carbokation-Intermediaten. In den frühen 1960er Jahren lernte er die Arbeiten von einem von uns (G.A.O.) kennen, der damals bei Dow Chemicals arbeitete; das hatte eine intensive Zusammenarbeit bei der NMR-spektroskopischen Charakterisierung langlebiger Carbokationen, einschließlich des nichtklassischen 2-Norbornylkations, in Supersäuren zur Folge. An diesen gemeinsamen Anstrengungen war auch Martin Saunders von der Yale University beteiligt, und es entwickelte sich eine lebenslange Freundschaft. Schleyer war ein ausgezeichneter Redner und Gesprächspartner mit einer frappierenden Fähigkeit, interessante Probleme zu erkennen und Partner zu überreden, mit ihm daran zu arbeiten. Er baute auch eine enge Beziehung zum Nobelpreisträger Herbert C. Brown auf (der gegen die nichtklassische Carbokationstruktur

war) und verfasste mit ihm gemeinsam das Buch *The Nonclassical Ion Problem*. Sein frühes Interesse an der theoretischen Chemie kam zur vollen Blüte, als ihn 1969 John A. Pople (Nobelpreis 1998) als „NSF Center of Excellence Lecturer“ an die Carnegie-Mellon University einlud. Poples Ab-initio-Methoden zur Berechnung von Strukturen und Energien überzeugten Schleyer davon, dass die physikalisch-organische Chemie von theoretischen Methoden profitieren könnte. Die Vorhersagekraft der Computerchemie beeindruckte Schleyer enorm. Pople, der Mathematiker, und Schleyer, der Chemiker, ergänzten sich hervorragend. In seiner Autobiographie *From the Ivy League into the Honey Pot* (erschienen als Teil der von J. Seeman herausgegebenen Reihe *Profiles, Pathways and Dreams*) erinnert Schleyer daran, dass die Physiko-Organiker anfangs der Theorie ziemlich skeptisch gegenüberstanden. Schleyer überzeugte uns früh, theoretische Ansätze zu nutzen, und unser Forschungsprogramm hat davon enorm profitiert. Mitte der 1970er Jahre wollte die Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg Schleyer als Professor gewinnen. Zu der Zeit bekam Schleyer in Princeton nur zwei Stunden Computerzeit pro Woche, während Erlangen ihm einen Rund-um-die-Uhr-Zugang anbot. Schleyer ging 1976 nach Erlangen und schuf dort ein herausragendes Institut für Computerchemie. Zu Schleyers theoretischen Großtaten gehören die Untersuchung von ungewöhnlichen Polylithium-Kohlenstoff-Clustern, nichtklassischen Carbokationen und Borverbindungen, das Aufstellen eines Aromatizitätskriteriums mithilfe der Kern-induzierten chemischen Verschiebung (NICS), die Suche nach planar umgebenem Kohlenstoff und ungewöhnlichen Bindungsprinzipien sowie in neuerer Zeit einige ungewöhnliche mechanistische Aspekte der elektrophilen aromatischen Substitution. Die nichtklassischen Carbokationen haben ihn fast sein ganzes Forscherleben beschäftigt, und so verwundert es nicht, dass er, zusammen mit Karsten Meyer, Ingo Krossing et al., auch 2013 noch an einer grundlegenden Arbeit über die Kristallstruktur des langlebigen 2-Norbornylkations, in der die nichtklassische Struktur mit Drei-Zentren-zwei-Elektronen-Bindungen schlüssig belegt wurde, beteiligt war (*Science* **2013**, 341, 62–64).

Nach seiner Emeritierung in Erlangen 1998 kehrte er in die USA auf einen gut ausgestatteten Lehrstuhl an der University of Georgia zurück. Dort baute er gemeinsam mit Henry „Fritz“ Schaefer III ein führendes Zentrum der Computerchemie auf. Schleyer war sehr produktiv: Er schrieb mehr als 1200 Veröffentlichungen und gab 6 Buchreihen heraus. Er ist mit einem h-Index von 125 der dritthäufigst zitierte Chemiker! Im Laufe seines Lebens erhielt er eine Reihe von Auszeichnungen, darunter die Heisenberg-Medaille (Alex-

ander von Humboldt-Stiftung), den Arthur C. Cope Scholar Award und den James Flack Norris Award in Physical Organic Chemistry (American Chemical Society), den Arfvedson-Schlenk-Preis (Gesellschaft Deutscher Chemiker), das Verdienstkreuz am Bande der Bundesrepublik Deutschland, die C.-K.-Ingold-Medaille (Royal Society of Chemistry) und den IME-Boron-Preis. Schleyer war Präsident und ein Fellow der International Academy of Quantum Molecular Science, Präsident der World Association of Theoretical Chemists und Hauptherausgeber der *Encyclopedia of Computational Chemistry*. Des Weiteren gründete er (zusammen mit Norman L. Allinger) das *Journal of Computational Chemistry*. Bedenkt man seine brillanten Leistungen, war die Anerkennung, die er vor allem in den USA fand, bedauerlich gering.

Schleyer war einer der führenden Wissenschaftler an unserem Institut seit seiner Gründung, und unsere lange und produktive Zusammenarbeit führte zu vielen gemeinsamen Veröffentlichungen

und Büchern (*Carbenium Ions*, fünf Bände, Wiley, 1968–1977; *Stable Carbocation Chemistry*, Wiley, 1996). Schleyer hatte hohe Ansprüche an seine zahlreichen Doktoranden, Postdocs und Kollegen, wovon alle enorm auf ihrem späteren eigenen Weg profitiert haben.

Schleyer hinterlässt seine Frau Inge, mit der er 45 Jahre verheiratet war, und drei Töchter aus seiner ersten Ehe: Betti, Laura und Karen. Wir haben einen engen Freund verloren, die Chemiewelt einen großen Wissenschaftler, der auf vielen Gebieten Wegweisendes geleistet hat. Sein Vermächtnis als einer der wirklich großen Chemiker unserer Zeit wird in künftigen Wissenschaftsgerationen weiterleben.

George A. Olah, G. K. Surya Prakash  
Loker Hydrocarbon Research Institute  
University of Southern California

DOI: 10.1002/ange.201411952