





Claus Erik Schäffer

31. JANUAR 1930 – 25. OKTOBER 2016

AF JESPER BENDIX

Claus Erik Schäffer var gennem mere end 60 år en central figur inden for uorganisk kemi i Danmark, hvor hans primære bidrag omfattede elektronisk strukturteori for metalkomplekser. Han blev født i København i 1930 som søn af Erik og Ingeborg Charlotte Schäffer. Han blev student i 1948 og kemiingeniør fra Den Polytekniske Læreanstalt i 1953. Derefter var han i perioden 1953-1957 forskningsstipendiat i professor Jannik Bjerrums gruppe ved Polyteknisk Læreanstalt sideløbende med, at han aftjente sin værnepligt. Derefter fulgte ansættelse som amanuensis ved Polyteknisk Læreanstalt i årene 1957-1960. Da Bjerrum flyttede til Københavns Universitet i 1960, flyttede Claus Schäffer med, først som amanuensis indtil 1961, siden som lektor og afdelingsleder ved det uorganiske laboratorium (Kemisk Laboratorium 1) indtil 1981, og som professor i 1981-2000. I 1977 indvalgte han i Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab. Kemien slap han aldrig, og han fortsatte efter sin pensionering et aktivt virke som professor emeritus og vedblev med at publicere jævnligt.

Som student af og kollega til Claus igennem de sidste 32 år af hans virke som kemiker er det naturligvis den del af hans liv, som jeg mest objektivt kan redegøre for, men Claus var en meget udadvendt person, der generøst øste ud af anekdoter om sine oplevelser med kemien. Derfor vil det billede, som bliver tegnet i det følgende, også på mange måder - og på ganske uvidenskabelig vis - være farvet af Claus' eget syn på tingene.

Hvis man bed mærke i kronologien i den indledende opridsning, vil man have noteret, hvad der lignede en slagen vej fra fødsel til eksamen som kemiingeniør, men Claus kom ikke fra en familie med udprægede naturvidenskabelige traditioner. Så hvor kom interessen for kemien fra? Iflg. Claus' egen beskrivelse begyndte det med farens rent populærvidenskabelige fascination af den forståelse af Det Periodiske System, som Niels Bohrs atommodel og den afledte kvantemekanik havde tilvejebragt i årene op til Claus' fødsel. Den førte til, at Claus' far forestod en introduktion til såvel kemien som didaktikken, da han tidligt udstyrede poden med et Periodisk System og instruerede ham i ikke at komme ind i stuen igen, før det var lært udenad. Herved indså Claus tidligt vigtigheden af et fælles kemisk ordforråd baseret på fakta og som konsekvens heraf: nødvendigheden af udenadslære. Dette var en analyse, som han aldrig forkastede, og han yndede som førsteårsunderviser at chokere nye studerende ved at foregive en forventning om, at de tillærte sig Det Periodiske System inklusive atomvægte i løbet af rus-ugen.

I den tid, hvor Claus trådte sine barnesko, var kemi bestemt en eksperimentalvidenskab, og Claus var ikke fremmed for eksperimenter, hvilket en anekdote om brorens fødselsdag vidner om: Øverst på brorens ønskeseddel var "et spektakulært eksperiment". Et ønske, som Claus honorerede ved at indkøbe passende ingredienser og fremstille en mængde krudt, der måltes i kilogram, og som blev konverteret til en ildsøjle, der blev beundret af fødselaren og dennes venner fra skjul i havens buske. Ildsøjlen rakte på sit maksimum over taghøjden på familiens to-etagers hus. Den chokerede mor, der var kommet til syne i et af overetagens vinduer, blev beroliget af Claus, som vel at mærke ikke havde søgt skjul, men stod ved siden af ildsøjlen og ytrede: "Bare rolig – jeg har det hele under kontrol". Udsagnet kan forekomme lidet troværdigt, men de, der senere har oplevet Claus som underviser på det uorganiske syntesekursus, kan måske alligevel forfalde til at tro, at Claus overbeviste sin mor ved den lejlighed.

Claus' interesse for naturvidenskab generelt og kemien i særdeleshed førte ham til et kemiingeniørstudium ved Den Polytekniske Lærestanstalt, hvorfra han dimitterede som kemiingeniør i 1953; altså uden forsinkelser eller svinkeærinder. Det var ikke givet, at Claus skulle bevæge sig i retning af den uorganiske kemi under sit studieforløb. Da han skulle vælge et projekt, var biokemien højt på listen over præferencer, men hans forsøg på at blive tilknyttet Henrik Dams (Nobelpristager i 1943 for opdagelsen af K-vitaminet) gruppe kuldsejlede – efter Claus' udlægning vist primært pga. hans kromosomsammensætning. I stedet kom Claus til at lave projekt om fajancer. Det var et emne, som – at dømme ud fra hans senere omtaler – ikke var synderligt intellektuelt stimulerende.

Helt anderledes interessant var den kemi, der samtidigt foregik i Jannik Bjerrums gruppe. Her mødtes en stærk tradition for fysisk kemi og termodynamiske studier centreret omkring overgangsmetallernes koordinationsforbindelser med en fremblomstrende interesse for koordinationsforbindelsernes spektrale egenskaber og elektroniske struktur. Ca. 20 år tidligere havde fysikere med Bethe og van Vleck som de centrale aktører udviklet en model til at beskrive systemer med delvist fyldte d-orbitaler, den såkaldte kystalteori; men da krystalteorien viste sig at give helt ukemiske – og ufysiske – beskrivelser, var den ganske få skridt fra historiens mødding omkring 1950. Men netop i de år, hvor Claus befandt sig i sine sidste studieår, indså flere kemikere de underliggende fejltagelser i krystalteorien, og af asken opstod ligandteori. En af pionererne i denne udvikling var Leslie Orgel, som deltog i 2nd International Conference on Coordination Chemistry, der blev arrangeret af Jannik Bjerrum i København. Der er ingen tvivl om, at denne konference på mange måder kom til at påvirke den uorganiske kemi i Danmark i de følgende 20 år med meget betydende bidrag til ligandteori fra Claus Schäffer, Carl Ballhausen, og Christian Klixbüll Jørgensen. Sidstnævnte og Claus Schäffer mødtes i kredsen omkring Bjerrum og grundlagde et livslangt venskab.

Efter de afsluttede ingeniørstudier blev Claus ansat som forskningsstipendiat hos Jannik Bjerrum og havde parallelt hermed undervisningsstillinger ved Den Kongelige Veterinær- og Landbohøjskole, hvor han mødte sin første kone, Bente. Desuden aftjente han i denne periode sin værnepligt som sygepasser – det nærmeste, man kunne komme en civil værnepligt i de dage, når man ikke havde noget religionskort at spille. Det var en periode, som vist kun nærrede en allerede eksisterende mangel på autoritetstro hos Claus.

Videnskaben havde slået sin klo i Claus, og han blev i 1957 ansat hos Bjerrum som amanuensis, uagtet det ikke kunne betragtes som en karrierevej, da der absolut ingen faste stillinger var i syne. Især set med nutidens øjne er der ingen tvivl om, at Claus som amanuensis fik meget frie hænder. Der var ingen antydning af en centraliseret eller hierarkisk struktur, og det endte med, at Jannik Bjerrum og Claus Schäffer tilbragte mere end 30 år i samme afdeling på god og venskabelig fod uden at publicere en eneste artikel sammen; det blev kun til et enkelt fælles conferencebidrag. Det var dog ikke sådan, at Bjerrum ikke var interesseret i den kemi, som Claus bedrev. Eksempelvis var Bjerrum meget begejstret, da det lykkedes Claus at fremstille en flerkernet chromforbindelse, ”rhodoso”, som var beskrevet 60 år tidligere af den første Nobelpristager inden for koordinationskemi, schweizeren Alfred Werner, men hvis fremstilling siden havde været et enigmatisk projekt, som mange havde måttet opgive. I sin begejstring over Claus’ succes gik Bjerrum hele laboratoriet rundt og fortalte alle om resultatet. Han gik endog så vidt som at

beordre Claus til at indstille sit laboratoriearbejde, fordi han havde en spændende nyhed at dele med ham ... Uanset at Bjerrum opmuntrede til de tidlige studier over overgangsmetallernes elektronstruktur og indså vigtigheden af ligandfeltteorien, er det også klart, at det aldrig blev et område, som Bjerrum selv dyrkede, og trods Claus' titel af amanuensis gik hans samarbejder derfor i andre retninger. I begyndelsen var det især samarbejdet med Christian Klixbüll Jørgensen, der var frugtbar. Året efter ansættelsen som amanuensis kom de første bidrag, som i dag har lærebogsstatus. Det drejede sig om den kovalente (elektron-delende) karakter af bindingerne mellem overgangsmetallerne og omgivende atomgrupper. Disse arbejder førte til definitionen af begrebet nephelauxetisme (skyudvidelse), som refererer til den universelle regel, at elektron-elektron-frastødningen altid er mindre i kemiske forbindelser end i de atomer eller ioner, som de formelt kan ses som opbygget af. Claus Schäffer og Christian Klixbüll Jørgensen var overordentligt gode venner med en udtalt gensidig faglig anerkendelse, men også på nogle punkter meget forskellige som videnskabsmænd. Claus har beskrevet vennens arbejdsmetode som noget, der i Jules-Verne'ske termer bedst kunne betegnes som et velanvendt minimum af omhyggelighed. Sådan kunne Claus ikke arbejde. Tværtimod kunne han, som jeg vil komme ind på senere, nogle gange udvise en næsten Poirot'sk omhyggelighed og detaljefiksering.

I 1960 flytter Jannik Bjerrum – og Claus Schäffer med ham – til Københavns Universitets Kemiske Centralinstitut, der på dette tidspunkt står over for en udflytning fra Sølvgade til det nyopførte H.C. Ørsted Institut i Universitetsparken. I den forbindelse kom Claus' analytiske evner og metodiske arbejdsform ham til skade, da han sammen med én organisk-kemisk kollega (B. Nygaard) blev sat til at organisere hele indflytningen inklusive indretningen af de nye bygninger. Det var et stort arbejde, som satte det videnskabelige arbejde i stå, og som Claus siden ikke omtalte i særligt varme termer. Samtidig kommer der dog en uventet åbning, idet samfundskonjunkturerne generelt og i særdeleshed væksten i antallet af universitetsstuderende medfører en åbning for faste stillinger, og Claus bliver i 1961 ansat som lektor ved Københavns Universitets Kemiske Laboratorium 1.

I de følgende år udkommer en række artikler, der omhandler forskellige modifikationer af ligandfeltteorien. Der er dels tale om enearbejder, dels om samarbejder med C.K. Jørgensen samt H. Yamatera (Nagoya). Det næste hovedarbejde fra Claus er eneartiklen og citationsklassikeren "A perturbation treatment of Weak Covalent Bonding", som blev offentliggjort i *Structure and Bonding* i 1968. Heri får Den Angulære Overlap Model (AOM) sin endelige og polerede form. Det er karakteristisk, at arbejdet er publiceret i en monografiserie, hvor der var mulighed for at give den detaljerede og fuldstændige fremstilling, som Claus

altid søgte. Ingen fragmentering kunne komme på tale. Det bør tilføjes, at Den Angulære Overlap Model er den til dato mest succesrige variant af ligandfeltteori og væsentligt medvirkende til, at ligandfeltteori stadig er et vigtigt element i pensum i uorganisk kemi. I de næste fem år følger en række mere specialiserede arbejder omkring ligandfeltteori, både enearbejder og samarbejder med nye kolleger, især S.E. Harnung, J. Glerup, T. Damhus og O. Mønsted. Disse arbejder repræsenterer i flere tilfælde en høj grad af abstraktion. Dette fik mange til at opfatte Claus som en meget deduktiv og matematiserende kemiker. Det er dog efter min mening ikke retvisende: Claus var meget intuitiv og induktiv i sin tilgang, og han brugte mange, nogle gange eksorbitant mange, numeriske eksempler til at generalisere ud fra, førend han med væsentlige anstrengelser bragte disse generaliseringer på en analytisk og deduktiv form. Ikke fordi det var finere eller lettere at publicere – tværtimod – men fordi han mente, at det gav den klareste, og for andre nyttigste, fremstilling.

I disse år mister Claus sin første kone Bente og tager derpå på jordomrejse med deres tre sønner, Lauge, Chresten (Kritte) og Hemming. Undervejs genopliver Claus forbindelsen til australske kolleger, især professor Alan M. Sargeson (Australian National University), og han indleder efter sin tilbagevenden en periode med mere fokus på præparativ kemi og spektroskopiske studier af optisk aktive koordinationsforbindelser. Det sker i samarbejde med bl.a. S.E. Harnung, J. Josephsen, K. Michelsen, F. Galsbøl, E. Larsen, J. Glerup og E. Pedersen. I 1982 publicerer Claus sammen med sin daværende licentiatstuderende Michael Brorson strukturen af molybden(III)-aquaionen og bidrager til at rationalisere vandkompleksers geometriske struktur. Dette er også arbejder, som udgør en naturlig del af det grundlæggende uorganiske pensum, og molybden(III)-aquaionen er til dato det nyeste vandkompleks af overgangsmetallerne, der er beskrevet. I forlængelse heraf fik han en bevilling fra Carlsbergfondet til at undersøge muligheden for at fremstille vandkomplekser af osmium-systemer, som stadig er ukendte. Men da Claus i løbet af det følgende år indså, at han ikke havde mulighed for at forfølge projektet som planlagt pga. et tilstudende længere ophold i Japan, returnerede han bevillingen med et "tak for velviljen".

Herefter vendte Claus delvist tilbage til sine rødder i elektronstrukturteorien ved at studere elektron-elektron repulsion i større detalje, end det nogensinde før var gjort med ligandfeltbeskrivelser. Disse studier var, som pacifisten Claus yndede at fremhæve, baseret på Ronald Reagans stjernekrigsprogram, der betød en renaissance for atomspektroskopien og et overflødhedshorn af både nye og mere præcise data. Resultaterne af disse undersøgelser var blandt andet de mest omfattende og konsistente bestemmelser af repulsions- og

spinbanekoblingsparametre, der er gennemført til dato, og de resulterende arbejder bliver vedholdende citeret med stort set konstant frekvens. Mens Claus barslede med nye spin-banekoblingsparametre, så barslede Claus' anden kone og nuværende enke Susan med Claus' barn nummer fire, datteren Turi.

I slutningen af sin karriere, efter den formelle pensionering, tog Claus fat på et helt nyt område: tæthedsfunktionalteori. Det er en beregningsmetode, der omkring årtusindskiftet opnåede meget stor popularitet, og som af mange blev set som afløseren for ligandfeltteori. I et samarbejde med Christian Anton og undertegnede blev det undersøgt, i hvor høj grad tæthedsfunktionalteori og ligandfeltteori kunne bringes i gensidig overensstemmelse, og om tæthedsfunktionalteori kunne anvendes til at generere nogle af de data, som ligandfeltteorien behøvede, men som var vanskeligt tilgængelige eksperimentelt. Konklusionerne var interessante og overraskende i den forstand, at de ud over at føre til optimale måder at projicere de to modeller på hinanden også klargjorde svagheder ved tæthedsfunktionalteori, som kunne afhjælpes delvist ved at blive projiceret over på ligandfeltteori. De udviklede metoder er siden blevet implementeret i et af de mest udbredte kvantemekaniske beregningsprogrammer.

Ud over de videnskabelige arbejder omfatter Claus' faglige arv også hans engagerede undervisning gennem mere end en menneskealder. Han underviste i mange fag, praktiske såvel som teoretiske, og på alle niveauer. Altid med det mantra, at de bedste studerende skulle udfordres og have muligheden for at tage noget med sig fra hver forelæsning eller øvelsesgang. Ved altid at gå til pensums grænser – og lidt derudover – fik Claus udfordret og ansporet mange af os, der kom til faget med en følelse af at være velforberedte. I de sidste år som underviser oplevede han et skred i det faglige niveau hos de nye studerende, som optog og rystede ham en del, særligt efter at et hold havde forsøgt sig med en demokratisk afstemning om rigtigheden af de algebraiske manipulationer, han demonstrerede for dem. Fascinationen af teoridannelse og interessen i undervisning fik også Claus til at deltage i didaktiske kurser og workshops, længe før det blev almindeligt udbredt i miljøet. Han var dog ikke altid lige begejstret over, hvad han ”lærte” ved at deltage i den slags arrangementer. Eksempelvis besluttede han ved en lejlighed at afkorte sin deltagelse i et didaktisk kursus til ca. 10 minutter, da han blev gjort bekendt med, at de metoder og den teoridannelse, der ville blive anvendt, forudsatte, at der var tale om undervisning af en fagligt homogen studenterpopulation. For Claus kunne praktik og teori ikke være så indbyrdes vinkelrette. Gennem sit virke som underviser satte Claus sit uudviskelige aftryk på en generation af uorganiske kemikere i Danmark, og hans projekt- og kandidatstuderende har gennem ansættelser ved Danmarks Tekniske Universitet, Den Kongelige Veterinær- og

Landbohøjskole, Syddansk Universitet, Roskilde Universitet og Københavns Universitet videreført faglige miljøer med fokus på koordinationskemi og elektroniske strukturmodeller.

På sin vis var Claus elitær, selvom han næppe selv ville have vedgået sig den karakteristik. Det var dog tydeligt i både forsknings- og undervisningssammenhænge, at intellektuel dovenskab provokerede ham, og han havde svært ved at acceptere, når fagligheden ikke var ledestjerne. Dette gjorde også Claus til en udpræget dårlig politiker. Hans manglende finfølelse omkring irrationalitet og hans positivistiske grundfilosofi var en næsten sikker garanti for, at han trak sig ud af universitetspolitiske slagsmål som taber. Men knytte faglige bånd – det kunne han. Familiens sommerhus i Tibirke har gennem årene været lige så velbesøgt som en middelstor konference, med næsten alle verdensdele og flere Nobelpristagere repræsenteret. Claus havde mange faglige bånd til USA, Polen, Tyskland, Schweiz og Australien, men særligt forbindelserne til Japan spillede en stor rolle igennem Claus' karriere fra midt i 1960'erne. Som beskrevet ovenfor skete udviklingen af Den Angulære Overlap Model, som var et af Claus' faglige hovedbidrag, i konkurrence med japanske kolleger, specielt Hideo Yamatera fra Nagoya. Det emnemæssige fællesskab førte, trods konkurrencen, til en stærk interesse for at knytte bånd til det japanske koordinationskemiker-miljø, og Claus var meget aktiv i at få etableret samarbejds- og udvekslingsaftaler med flere japanske universiteter, heriblandt Nagoya Universitet, Okayama Universitet og Tohoku Universitet. Udvekslingsaftalerne blev benyttet i begge retninger, og igennem flere år var der fast japansk repræsentation på Kemisk Laboratorium 1. Claus tilbragte også selv sammenlagt mere end 9 måneder på forskningsophold i Japan.

Faglige samarbejder med Claus kunne godt være lidt af en udfordring. Han var en omhyggelig systemtiker og sprogrøtter med strengt fokus på faglig konsistens og helt uden lyst til at opdele projekter. For unge akademikere in spe var han således efter moderne målestok en gennemført elendig rollemodel. Et af hans råd lød, at når manuskriptet var færdigt, så skulle det gemmes og glemmes i en skuffe længe nok til, at man var i stand til at genlæse det med friske og kritiske øjne. Dette kunne gerne være et års tid. Sammenholdt med hans uvilje mod at fragmentere projekter førte det ofte til meget lange publikationstider, men også til meget langtidsholdbare arbejder. Sukkende beskrev Claus engang kollegers omgang med et emneområde som ”horder, der har raseret et blomsterbed og efterladt det til os at rydde op i det”, hvilket sikkert har hensat mere end én af hans studerende i drømme om at være en del af horderne.

Claus' bidrag til videnskaben lever videre blandt hans samarbejdspartnere og hans studerende, men også i lærebøgerne, hvor de vil forblive i en rum tid fremover. Grunden til deres langtidsholdbarhed kan måske findes i en afsluttende anekdote om, hvilke værdier der er givet videre: Da en af sønnerne i en ung alder blev afkrævet et fødselsdagsønske var svaret: "Et stykke chokolade – men af god kvalitet". Denne kompromisløse insisteren på kvalitet var måske det mest karakteristiske træk ved Claus Schäffer.

Æret være hans minde.