

# Elizabeth Monroe

Die Mathematikerin und Chemikerin brachte in Cambridge die Computer in die Molekülphysik.

Patrick Charbonneau



The Papers of Sir John Edward Lennard-Jones, GBR/0014/LJO/13, Churchill Archives Centre, Churchill College, Cambridge

Elizabeth Monroe (sitzend) und andere Gruppenmitglieder (stehend) bei einem geselligen Tennistreffen im Garten von John Lennard-Jones (Mitte), um 1937. Monroe, die etwa 1,85 Meter groß war, ragte normalerweise über ihre Kollegen hinaus, was möglicherweise deren männliches Selbstbewusstsein kränkte.

Nach Abschluss ihrer Bachelorarbeit in Mathematik unter der Leitung von Emmy Noether am Bryn Mawr College, einem Frauen-College in der Nähe von Philadelphia in den USA, trat Elizabeth Monroe der Forschungsgruppe von John Lennard-Jones an der Universität Cambridge bei. Dort leistete sie Pionierarbeit bei der Anwendung von Computern in der Molekularphysik und baute und betrieb einen Differentialanalysator zur Lösung der quantenmechanischen Beschreibung einfacher Moleküle.

Elizabeth Monroe, geboren 1913, wuchs in einer wohlhabenden Familie außerhalb von New York City auf und besuchte renommierte Privatschulen [1]. Ihr Vater, ein ausgebildeter Chemieingenieur, förderte ihr Interesse an Naturwissenschaften und Technik, darunter auch ihr Basteln an elektrischen Schaltkreisen. Im College faszinierten sie die Anwendungsmöglichkeiten der neuen Quantenmechanik auf Moleküle, sodass sie zugleich Che-

mie und Mathematik studierte. Emmy Noether, die 1933 von Göttingen nach Bryn Mawr emigriert war, betreute ihre Abschlussarbeit über moderne Algebra. Als Jahrgangsbeste 1935 erhielt Elizabeth Monroe das European Fellowship ihres Colleges, das ihr den Weg nach Cambridge ermöglichte, wo ihre doppelte Qualifikation sie zur perfekten Kandidatin für das Forschungsprogramm von John Lennard-Jones machte, ein Programm, das seine Wurzeln nicht zuletzt in Göttingen hatte.

## Quantenphysikerinnen

Alle Beiträge dieser Serie finden sich online in einem Dossier unter folgendem Link: <https://pro-physik.de/dossiers/quantenphysikerinnen>.



Im Frühjahr und Sommer 1929 besuchte Lennard-Jones, damals Professor für theoretische Physik an der Universität Bristol, das Institut von Max Born in Göttingen. Da Born zu dieser Zeit häufig krank war, nahm der britische Physiker hauptsächlich Kontakt zu jüngeren Mitgliedern von Borns Gruppe auf, vor allem zu Walter Heitler, der zusammen mit Fritz London kurz zuvor eine Theorie der molekularen Bindung vorgeschlagen hatte. Die aufkeimenden Anwendungen der neuen Quantenmechanik auf Moleküle waren hochinteressant. Bei einer Faraday-Tagung im folgenden September in Bristol stellte Lennard-Jones ein Ergebnis seiner Göttinger Überlegungen vor: eine Grundlage für eine quantitative Molekülorbitaltheorie der Molekülbindung, die allgemeiner war als die von Heitler und London.

Diese Arbeit führte 1932 zu seiner Berufung nach Cambridge als erster Plummer-Professor für Theoretische Chemie. Die ersten Doktoranden, die er betreute, führten sein Programm fort. Charles Coulsons Dissertation beispielsweise stützte sich auf quantenmechanische Methoden, um „ziemlich genaue Kenntnisse über die einfachsten Moleküle zu erlangen, damit es möglich sein könnte, Eigenschaften anderer Moleküle abzuleiten, die mathematisch weniger gut zu behandeln sind“ [2]. Die rigorose Auseinandersetzung mit diesen komplexeren Systemen erforderte jedoch neue Ansätze.

Als Elizabeth Monroe zu seiner Gruppe stieß, hatte Lennard-Jones gerade ein neues Rechengerät gebaut, einen Differentialanalysator. Ein Physikstudent namens Maurice Wilkes wartete und betreute die neue Maschine, aber für die eigentliche quantenmechanische Untersuchung wurde ein außergewöhnlich begabter Student benötigt – dafür war Monroe genau die Richtige.

Ihr Dissertationsprojekt bestand darin, mithilfe des Analysators die Schrödinger-Gleichung für die elektro-

nische Struktur von einfachen molekularen Ionen mit einem einzigen Elektron zu lösen. Das Ergebnis sollte als Näherung für komplexere Systeme dienen, ähnlich wie allgemeine, auf das Wasserstoffmolekül bezogene

Funktionen die quantenmechanische Untersuchung komplexerer Atome ermöglicht hatten. Obwohl „von dieser Untersuchung nichts Überraschendes zu erwarten war“ [3], wie Monroe selbst schrieb, gelang ihr eine wesentliche Weiterentwicklung der Werkzeuge und Methoden. Sie entwarf und baute nicht nur einen zusätzlichen Integrator für den Analysator, sondern demonstrierte auch das Potenzial von Computern zur Erweiterung des epistemischen Horizonts der Quantenmechanik.

Der erste Cambridge-Analysator verwendete Meccano-Baukastenelemente, um Räder und Scheiben miteinander zu verbinden und Differentialgleichungen durch Integration zu lösen (Abb. 1). Monroe nutzte ihn, um die verallgemeinerte sphärische Wellengleichung zu lösen, auf die sich die Schrödinger-

Wellengleichung für heteronukleare zweiatomige Ionen mit einem einzigen Elektron in der Born-Oppenheimer-Näherung reduziert (Abb. 2). Technisch gesehen handelt es sich bei diesem Problem um eine Verallgemeinerung der Mathieu-Gleichung, die zuvor Vannevar Bush mit dem Differentialanalysator des MIT untersucht hatte. Die sphärische Gleichung war jedoch mechanisch schwieriger zu berechnen.

Für Lennard-Jones war Monroes Forschung auch grundlegend für sein Vorhaben, die damaligen „Computer“ – also Personen, nicht selten Frauen, die Berechnungen durchführten – durch Maschinen zu ersetzen – also analoge Rechner –, die typischerweise wiederum von Frauen bedient wurden. Das führte im Jahr 1937 zur Gründung des Cambridge Mathematical Laboratory.



Elizabeth Monroe im Jahr 1928

Aus Ref. [3], Archiv des Boggs Center



**Abb. 1** Differentialanalysator nach dem Cambridge-Meccano-Modell mit den fünf integrierten Einheiten – einschließlich der von Monroe. Der Zeichentisch befindet sich oben rechts. Heute ist das Gerät im Museum of Transport and Technology im neuseeländischen Auckland ausgestellt.

## Umstrukturierungen während des Krieges

Als Monroe 1939 ihre Dissertation fertigstellte, nahmen nicht nur die Kriegsgerüchte immer mehr zu, auch die Rechenmaschinen gewannen zunehmend eine strategische Bedeutung. Anfang August wurden die Räumlichkeiten und Geräte des Mathematischen Labors an das britische Versorgungsministerium vermietet, und Lennard-Jones stellte ein Forschungsteam für den Bereich der Ballistik zusammen. Charles Coulson lehnte als Pazifist die Mitarbeit ab, und nachdem Wilkes zur Royal Air Force gegangen war, blieb allein Monroe als führende Expertin für den Analysator. Auf Vorschlag von Lennard-Jones schloss sie sich dem Team gern an.

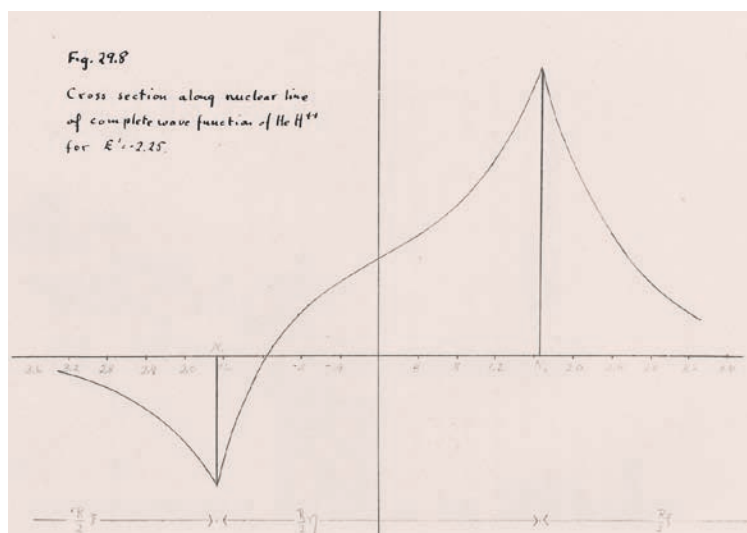
Doch war diese Mitarbeit nur von kurzer Dauer: Denn Ausländer waren von britischen Geheimdienstaufgaben generell ausgeschlossen, und für Elizabeth Monroe ließ sich keine Ausnahme durchsetzen. So kehrte sie im Dezember 1939 in die USA zurück und musste den Analysator und gewissermaßen auch die Quantenmechanik zurücklassen. Sie korrespondierte noch eine Weile mit Wilkes und Lennard-Jones über wissenschaftliche Themen, aber das Leben führte sie auf einen anderen Weg.

Zwei Jahre lang war sie wissenschaftliche Mitarbeiterin in John Kirkwoods chemisch-physikalischer Forschungsgruppe an der Cornell University, wo sie eine Theorie der Kristallisation harter Kugeln [4] entwickelte und schließlich einen Kollegen aus ihrer Forschungsgruppe, Fitzhugh Boggs, heiratete. Danach arbeitete sie im Explosives Research Laboratory außerhalb von Pittsburgh. Dort leitete sie *de facto*, wenn auch nicht *de jure*, eine Forschungsgruppe und entwickelte im Rahmen des Manhattan-Projekts das explosive Linsenverfahren für Kernwaffen.

## Wendepunkte nach dem Krieg

Wie viele ihrer Kollegen plante Elizabeth Monroe (oder besser gesagt Dr. Boggs), nach dem Krieg eine Stelle in der industriellen Forschung anzunehmen, und angesichts der Fülle solcher Möglichkeiten für US-Forscher war ihr eine solche Stelle so gut wie sicher. Die Ereignisse im August 1945 änderten jedoch ihre Pläne. Ihr in diesem Monat geborener Sohn zeigte zunehmend Anzeichen einer Entwicklungsstörung, was sie dazu veranlasste, sich von der physikalischen Forschung abzuwenden und der Interessenvertretung entwicklungsbeeinträchtigter Kinder zuzuwenden. Dazu übernahm sie eine führende Rolle in der neu gegründeten Elternorganisation Association for Retarded Children (heute „The ARC“). Ihre Fähigkeit, mit medizinischen Forschern leicht und kompetent in Kontakt zu treten, wurde für die Organisation besonders wertvoll. Einige Jahre später übernahm sie den Vorsitz des Gremiums für geistige Behinderung unter Präsident John F. Kennedy.

Heute würdigt das Boggs Center on Developmental Disabilities der Robert Wood Johnson Medical School in New Jersey das Vermächtnis von Elizabeth Monroe. Wissenschaftlich geriet sie hingegen immer stärker in Vergessenheit. Rasante technologische, geopolitische und auch persönliche Veränderungen hatten mit dazu beige-



**Abb. 2** Wellenfunktion für einen angeregten elektronischen Zustand des  $\text{HeH}^{2+}$ -Ions, berechnet entlang seiner axialen Richtung unter Verwendung des Differentialanalysators nach dem Cambridge-Meccano-Modell. Solche Querschnitte waren mit standardmäßigen numerischen Methoden nur schwer zu erhalten, weshalb sie in der Literatur aus der Vorkriegszeit relativ selten sind.

tragen, ihre wissenschaftlichen Beiträge unsichtbar werden zu lassen. Man kann sich nur fragen, welchen Stellenwert sie erreicht hätte, wenn sie die Forschung nicht so plötzlich verlassen hätte. Der Verlust für die Wissenschaft war freilich ein Gewinn für die Bürgerrechte benachteiligter Menschen.

## Literatur

- [1] Dieser Artikel stützt sich auf eine ausführlichere Darstellung in: P. Charbonneau et al. (Hrsg.), *Women in the History of Quantum Physics: Beyond Knabenphysik*, Cambridge University Press, Cambridge 2025
- [2] *Abstracts of Dissertations Approved for the Ph.D., M.Sc. and M.Litt. Degrees in the University of Cambridge During the Academic Year 1936–37*, Cambridge University Press, Cambridge 1937
- [3] E. Monroe, *The Generalized Spheroidal Wave Equations and Their Application [to] Some Problems in Quantum Mechanics with Special Reference to the Two Center Problem*, Dissertation, Cambridge University (1939)
- [4] J. G. Kirkwood und E. Monroe, On the Theory of Fusion, *J. Chem. Phys.* 8, 845 (1940)

## Der Autor



**Patrick Charbonneau** ist Professor für Physik an der Duke University. Er erforscht glasartige Materialien und andere frustrierte Systeme und leistet durch Projekte in den Bereichen Quantenphysik, statistische Physik und Lebensmittelgeschichte einen Beitrag zur Wissenschaftsgeschichte.

**Prof. Dr. Patrick Charbonneau**, Fachbereich Physik, Duke University, Durham, North Carolina 27708, USA