

Walter Kohn, Nobelpreis für Chemie 1998

Peter Weinberger und Peter Mohn

Die Königliche Schwedische Akademie der Wissenschaften verlieh den Nobelpreis für Chemie 1998 an Walter Kohn (University of California, Santa Barbara) und an John A. Pople (Northwestern University, Chicago). Mit der Verleihung des Nobelpreises ehrt die Schwedische Akademie Walter Kohn für die Entwicklung der Dichtefunktionaltheorie. Wenn man sich jedoch die wissenschaftlichen Werke Walter Kohns ansieht, so stellt man fest, daß eben diese Dichtefunktionaltheorie, bei all ihrer Wichtigkeit, auch nur ein Teil in dem an grundlegenden Beiträgen reichen wissenschaftlichen Leben war.

Walter Kohn wurde am 9. März 1923 in Wien-Mariahilf geboren. Er wuchs, gemeinsam mit seiner älteren Schwester Minna, in der aufgeklärten Atmosphäre einer typischen Familie des wiener jüdischen Bürgertums auf. Sein Vater betrieb in der Teinfaltstraße den Kunstpostkartenverlag Brüder Kohn Wien 1, der unter dem Kürzel BKW1 bereits in der Monarchie ein Begriff war. BKW1 verlegte unter anderem auch die Zeichnungen des Karikaturisten Fritz Schönpflug, der auch von Karl Kraus in den "Letzten Tagen der Menschheit" mehrmals zitiert wird. Walter Kohns Mutter war eine hochgebildete Frau, die den Wissensdurst ihres Sohnes zu befriedigen suchte und seine Ausbildung nach Kräften förderte. Nach dem Besuch der Volksschule in der Rahlgasse wurde Walter in das Akademische Gymnasium am Beethovenplatz geschickt. Dort erfuhr er, wie er selbst immer wieder betont, eine profunde Ausbildung in alten Sprachen samt der dazugehörigen Denkdisziplin.

Mit dem Anschluß Österreichs an das Großdeutsche Reich begann der Leidensweg der Familie. Die Wohnung der Familie Kohn in der Theobaldgasse wurde in der Reichskristallnacht verwüstet, und Walter wurde wie alle Schüler jüdischer Abstammung aus dem Akademischen Gymnasium ausgeschlossen und in das Chajes Gymnasium umgeschult. Erst hier wurde er mit den modernen Naturwissenschaften konfrontiert. Sein Physiklehrer Prof. Sabata, ein ehemaliger Mitarbeiter von Albert Einstein in Prag, weckte in ihm das Interesse an Physik, das für sein weiteres Leben bestimmend werden sollte. 1939 konnte Walter mit dem letzten Transport jüdischer Kinder nach England flüchten. Seine Eltern, denen die Ausreise verweigert wurde, wurden zuerst in das KZ Theresienstadt interniert und später in Auschwitz ermordet.

In England wurde er als feindlicher deutscher Bürger interniert und dann nach Kanada deportiert. 1942 in Kanada endlich freigelassen, begann er an der Universität Toronto zu studieren. Nochmals wurde seine Ausbildung unterbrochen, als er für ein Jahr in der kanadischen Armee als Freiwilliger diente.

Seine erste Publikation, ein Problem der Mechanik des Kreisels, schrieb er noch als Undergraduate (Quarterly of Applied Mathematics III/1 1945) bevor er 1945 den B.A. der University of Toronto erhielt. Darauf folgte 1946 der M.A. Mit sei-

nem abgeschlossenen Studium hatte Walter Kohn zwei Angebote, um an seiner Dissertation zu arbeiten: von Rudolf Peierls und von Julian Schwinger. Er entschied sich, auch auf Anraten von Peierls, für zweiteres und übersiedelte, ausgestattet mit einem Stipendium, an die Harvard Universität, wo er mit Julian Schwinger arbeitete und 1948 über Streutheorie promovierte.

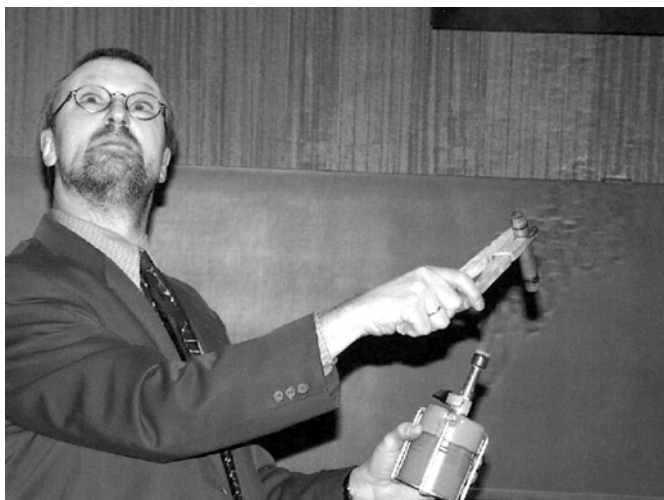
Von den mehr als 200 Arbeiten, die Walter Kohn bisher publiziert hat, seien nur einige stellvertretend erwähnt, die seinen wissenschaftlichen Werdegang am besten wiedergeben. Im Jahr 1954 entstand eine Arbeit über die "Lösung der Schrödinger Gleichung auf periodischen Gittern" zusammen mit N. Rostoker (Phys. Rev. 94 (1954) 1111) die die Grundlage der sogenannte KKR-Methode zur Berechnung der elektronischen Struktur von Festkörpern bildet. In den folgenden Jahren erscheint eine Serie von Arbeiten zusammen mit J.M. Luttinger über Halbleiterphysik und Transportphänomene. In diese Zeit fällt auch die intensive Beschäftigung mit den Eigenschaften von Fermiflächen, welche dann zur Postulierung der "Kohn-Anomalien" führt (Phys. Rev. Lett. 2 (1959) 393). Während eines Aufenthaltes in Paris entsteht, gemeinsam mit P. Hohenberg, die erste Arbeit zur Dichtefunktionaltheorie (Phys. Rev. 136 (1964) B864). Hier konnte gezeigt werden, daß der Grundzustand eines Systems wechselwirkender Elektronen durch seine Dichte eindeutig bestimmt ist. Aus diesem Hohenberg-Kohn Theorem leitete Walter Kohn zusammen mit L.J. Sham (Phys. Rev. 140 (1965) A1133) die berühmten Kohn-Sham Gleichungen ab. Diese Gleichungen erlauben die Reduktion eines Vielteilchen Problems (um einen Festkörper zu beschreiben muß man die Eigenschaften von über 10^{23} miteinander wechselwirkenden Elektronen berechnen) auf ein effektives Einteilchenproblem, also die Bewegung eines Elektrons in dem mittleren Feld aller anderen Elektronen. Die Dichtefunktionaltheorie und im speziellen ihre Anwendung auf die Beschreibung der Austausch-Korrelations-Wechselwirkung sind heute zu einer Standardmethode von "Computational Physics and Chemistry" geworden. Ihre Anwendung findet man bei der Berechnung von Molekülen und Festkörpern bis hin zur Physik des Atomkerns.

Nach einem Zwischenspiel in den siebziger Jahren, wo sich Kohn der Anwendung der Dichtefunktionaltheorie auf Oberflächen und dem Problem der Chemisorption zugewandt hat, widmet er sich heute vorwiegend den Verallgemeinerungen seiner Theorie. Es entstanden Arbeiten über angeregte Zustände, Supraleitung und die Beschreibung von van-der-Waals Kräften im Rahmen der DFT. Mit seinen Überlegungen zur "short-sightedness of nature" (Bedeutung der nächsten Nachbarn, red.) liefert Walter Kohn heute auch Beiträge zur Entwicklung von "Order-N" Methoden für die Berechnung großer quantenmechanischer Systeme. Auch vor der Verleihung des Nobelpreises wurden Walter Kohn in Anerkennung seiner Leistungen viele Ehrungen zuteil. Darunter der Oliver Buckley Prize (1960), der Davisson-Germer Prize (1977) sowie die Feenberg Medal (1991).

Univ. Prof. Dr. Peter Weinberger, a. Univ. Prof. Dr. Peter Mohn, Center for Computational Materials Science, TU Wien

Walter Kohn ist Träger der Ehrendoktorate von 8 renomierten Universitäten, darunter auch der TU Wien (1996). Auch als Professor Emeritus (seit 1991) der University of California, Santa Barbara, ist Walter Kohn immer noch an vorderster Front der Wissenschaften tätig. Als großer Humanist ist es ihm auch immer Verpflichtung, sich zu politischen Themen zu Wort zu melden. Er war Mitbegründer des "Santa Barbara Institute of Global Conflict and Cooperation", dessen Aufgabe die Organisation öffentlicher Protestmaßnahmen gegen die US Verteidigungspolitik ist.

Rückblick auf die Fortbildungswoche 1999



*Viktor Obendrauf staunt über die Reichweite seiner Kanone
(bis auf die Galerie ging der Schuß)*

Zwei Monate sind schon wieder vergangen, wie sieht der Organisator die Fortbildungswoche im Rückblick?

Spannend war es bei der Planung, wird der §61 zuschlagen? Ein wenig doch, denn die Teilnehmerzahl sank auf jene des Jahres 1997 - und damals war sie so hoch wie nie davor. Verglichen zu 1998 war es allerdings ein Rückgang um 20%.

Über 360 Anmeldungen zu Exkursionen und Seminaren, 150 Anmeldungen zum Chemietag, das sind die dokumentierbaren Zahlen. Wofür sollten Anwesenheitslisten geführt werden, wenn der große Hörsaal selbst außerhalb der Experimentalvorträge mit 120 bis 150 Personen besetzt ist? Nach meiner Schätzung haben wieder etwa 600 Personen an Veranstaltungen der Fortbildungswoche 99 teilgenommen. Unsere Subventionsgeber - die beiden PIs in Wien leisten erfreulicherweise einen Beitrag, dem BMUKA ist für öS 25.000,- zu danken, können zufrieden sein. So viele "Kunden" werden selten mit so wenig Geld erreicht. Weiterhin kommt ein beträchtlicher Anteil der Kosten aus den Mitgliedsbeiträgen und der freiwilligen unbezahlten Arbeit einiger Aktivisten. Dank gebührt daher besonders ihnen, ganz besonders Dr. Ralf Becker, Mag. Theodor

Duenbostel, Werner Rentzsch, meinen Mitarbeitern am Institut, allen mitwirkenden Universitätsangehörigen und natürlich allen Vortragenden, deren Arbeitseinsatz durch keine (bescheidene) Vergütung abgegolten werden kann.

Jenen, die dabei waren, werden die Experimentalvorträge von Prof. Bürger und von Prof. Obendrauf unvergesslich sein, ein volles Haus dankte den Referenten - einige Bilder dazu verdanken wir Kollegen Grumet mit seiner Digitalkamera.

Wie immer gilt meine Bitte: Schreiben Sie uns Ihre Anregungen, Ideen, Angebote und Kritik für die nächste Fortbildungswoche im ominösen Jahr 2000.

Wichtig ist uns der Praxisbezug der Veranstaltungen, wobei dieses Wort etwas verfänglich ist. Gerade Hintergrundinformation ist für den gelungenen Unterricht die Würze.

Helmut Kühnelt



*Den Becher sollte man nicht fallen lassen.
(Photos: P. Grumet)*