

---

---

Sonderdruck aus dem Almanach der Österreichischen Akademie  
der Wissenschaften, 166. Jahrgang (2016)

---

---

WALTER KOHN

Nachruf  
von

KARLHEINZ SCHWARZ

WIEN 2017

## NACHRUFE AUF VERSTORBENE MITGLIEDER

### EHRENMITGLIED DER GESAMTAKADEMIE

#### WALTER KOHN

Walter Kohn, Ehrenmitglied der Österreichischen Akademie der Wissenschaften und seit 1991 emeritierter Universitätsprofessor der University of California, Santa Barbara, ist am 19. April 2016 im 93. Lebensjahr in Santa Barbara verstorben.

Walter Kohn wurde am 9. März 1923 in Wien als Sohn einer jüdischen Familie geboren. Er besuchte fünf Jahre lang das Wiener Akademische Gymnasium mit Latein als seinem Lieblingsgegenstand und hegte zunächst wenig Interesse für Mathematik oder Physik. Mit der Machterringung der Nationalsozialisten ändert sich, wie für so viele, auch für ihn alles. Er wurde 1938 ins jüdische Chajes-Gymnasium „umgeschult“. Dort weckten zwei Lehrer seine Leidenschaft für Physik und Mathematik, wofür er zeit lebens dankbar war. 1939 gelang ihm und seiner Schwester mit einem der letzten Kindertransporte die Flucht nach England, von wo er als „Enemy Alien“ nach Kanada gebracht wurde. Seine Eltern schafften die Flucht nicht und kamen später

im Konzentrationslager Auschwitz ums Leben.

Kohns wissenschaftliche Karriere startete an der Universität Toronto. Da er aus Sicherheitsgründen nicht zum Chemiestudium zugelassen wurde, studierte er Mathematik, die er 1946 mit einem Master abschloss. Danach wechselte er zur Physik an die Harvard University in Cambridge, Massachusetts. Wie er später berichtete, fragte ihn damals der Department Chairman, der berühmte Physiker John Hasbrouck Van Vleck, ob er über Bandtheorie von Festkörpern dissertieren wolle, aber er lehnte ab und wechselte zu Julian Schwinger, einem herausragenden Experten für Variationsmethoden. Bei ihm schrieb Kohn seine Dissertation und promovierte 1948 in Theoretischer Physik. Wenig später bat ihn Van Vleck, seine Vorlesung über Festkörperphysik zu halten, da er ein Sabbatical vor sich hatte. Damit stieg Kohn in die Lehrtätigkeit ein, wo sich einer seiner späteren Forschungsschwerpunkte entwickelte.



1950 wechselte er an die Carnegie Mellon University, Pittsburgh, wo er mit J. M. Luttinger forschte.<sup>1</sup> Er arbeitete zudem bei Bell Laboratories in jener Gruppe, die den Transistor entwickelte, und als Postdoktorand am Niels-Bohr-Institut in Kopenhagen. In seiner wissenschaftlichen Karriere wirkte er in weiterer Folge an vielen Universitäten, so in Pennsylvania, Michigan, Seattle, Paris, Kopenhagen, am Imperial College (London) und an der ETH Zürich. 1957 erhielt Kohn die US-amerikanische Staatsbürgerschaft. Im Jahr 1960 wurde er Professor an der University of California, San Diego, wo er auch drei Jahre lang Chairman des Department of Physics war. Im Jahr 1979 gründete Kohn das weltweit einmalige Kavli Institute for Theoretical Physics an der University of California, Santa Barbara. Er war dort bis 1984 Direktor und blieb der Einrichtung ab 1991 auch als Emeritus treu. Ein Höhepunkt in Walter Kohns Karriere war die Verleihung des Nobelpreises für Chemie für die Entwicklung der Dichtefunktionaltheorie (DFT) im Jahr 1998. Es ist nützlich, sich an einige historische Details zu erinnern. 1963 war Kohn für ein

Sabbatical-Semester an der École normale supérieure in Paris, wo er Pierre Hohenberg kennenlernte. Aus dieser Zusammenarbeit entstand das Hohenberg-Kohn-Theorem,<sup>2</sup> das die erste Basis für die DFT lieferte. Schrödinger hatte 1926 die Wellenmechanik für die quantenmechanische Beschreibung von elektronischen Systemen entwickelt und damit die Physik revolutioniert. In den folgenden Dekaden hatte sich aber gezeigt, dass es extrem schwierig werden würde, die Schrödinger-Gleichung für Vielelektronensysteme zu lösen. Nun war es an der Zeit, eine neue Idee zu entwickeln, nämlich von der Mehrelektronenwellenfunktion, die von extrem vielen Koordinaten (drei für jedes Elektron) abhängt, auf eine Beschreibung zu wechseln, in der die Elektronendichte die zentrale Größe ist, die nur von drei Koordinaten abhängt – unabhängig von der Zahl der zugrundeliegenden Elektronen. Dies ist eine enorme Vereinfachung. Im Hohenberg-Kohn-Theorem wurde mathematisch bewiesen, dass die Grundzustandsenergie eines Systems wechselwirkender Elektronen ein universelles Funktional der Elektronendichte ist. Allerdings handelt es sich um ein Funktional und nicht

<sup>1</sup> J. M. Luttinger, W. Kohn: Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. In: *Physical Review* 97 (1955), 869.

<sup>2</sup> P. Hohenberg, W. Kohn: Inhomogeneous electron gas. In: *Physical Review* 136 (1964), B864.

um eine Funktion, die leider nicht explizit bekannt ist. Nach der Rückkehr nach San Diego machte Kohn den nächsten entscheidenden Schritt in Zusammenarbeit mit seinem Postdoktoranden Lu J. Sham. Sie entwickelten die Kohn-Sham-(KS-) Gleichungen,<sup>3</sup> die ermöglichen, die DFT nach dem Variationsprinzip praktisch zu lösen. Dabei wird das reale System durch ein System nicht-wechselwirkender Teilchen ersetzt, das aber die gleiche Elektronendichte wie das reale System besitzt. Die Elektronendichte kann berechnet werden, indem man die Beiträge aller Kohn-Sham-Orbitale, die besetzt sind, summiert. In diesen KS-Gleichungen tritt ein Funktional auf, das alle quantenmechanischen Aspekte (wie Austausch und Korrelation) berücksichtigen muss. In der Praxis sind dafür Näherungen erforderlich, über die auch heute noch aktiv geforscht wird. Trotzdem war dies ein fundamentaler Durchbruch, denn damit wurde es möglich, Systeme (Moleküle oder Festkörper) mit sehr vielen Atomen (und Elektronen) zu berechnen, was auch für die Chemie völlig neue Möglichkeiten eröffnete. Die beiden Arbeiten

werden inzwischen einige tausend Mal pro Jahr zitiert, so zum Beispiel durchschnittlich in jeder zweiten Quantenchemiepublikation. Es sei noch erwähnt, dass in der Originalarbeit von Hohenberg und Kohn folgender Satz zu finden ist: "We do not expect an accurate description of chemical binding". Gerade diese Arbeit war aber die Grundlage für den Nobelpreis für Chemie. Erst kürzlich ist eine Arbeit in *Science* erschienen,<sup>4</sup> in der die Dichtefunktionaltheorie, die in vierzig weltweit verwendeten Computerprogrammen für Festkörperrechnungen implementiert ist, auf ihre Genauigkeit überprüft wurde. Diese vierzig Methoden lösen die Kohn-Sham-Gleichungen auf unterschiedliche Art, sollten aber (für ein gegebenes Funktional) jeweils das gleiche Ergebnis liefern – was die genauesten (im Sinne der Reproduzierbarkeit) auch sehr gut erfüllen. Dies illustriert die hohe Bedeutung der Arbeiten von Walter Kohn.

1997, ein Jahr vor dem Nobelpreis, hielt Kohn den Eröffnungsvortrag bei der DFT-Tagung in Wien. Er war auch bei den weiteren DFT-Konferenzen, die alle zwei Jahre an einem anderen Ort stattfinden, als Haupt-

<sup>3</sup> W. Kohn, L. S. Sham: Self-consistent equations including exchange and correlation effects. In: *Physical Review* 140 (1965), A1133.

<sup>4</sup> K. Lejaeghere, G. Bihlmayer, T. Björkman u. a.: Reproducibility in density-functional theory calculations of solids. In: *Science* 351 (25.3.2016), doi: 10.1126/science.aad3000.

sprecher tätig. Zuletzt war dies vor fünf Jahren in Athen der Fall, wo er trotz seines Alters von 88 Jahren – kulturaffin, wie er war – auch beim Ausflug auf die Akropolis mit dabei war. Er hielt auch bei vielen anderen wissenschaftlichen Tagungen beeindruckende Vorträge.

Eine lange Reihe von Universitäten bedachte Kohn mit der Ehrendoktorwürde: Universität Toronto (1967), Universität Paris-Süd (1980), Hebräische Universität Jerusalem (1981), Brandeis University (1981), Queen's University (1986), ETH Zürich (1994), Julius-Maximilians-Universität Würzburg (1995), Technische Universität Wien (1966), Weizmann-Institut für Wissenschaften (1997), Universität Tel Aviv (1999), Carnegie Mellon University (1999), Rutgers University (2001), Universität Oxford (2001), Universität Sherbrooke (2002), Technische Universität Dresden (2002), Freie Universität Berlin (2003), Universität Wien (2012).

Die Liste der herausragenden Preise, die Kohn erhielt, zeigt seine Vielseitigkeit. So erhielt er den Oliver E. Buckley Condensed Matter Prize (Solid State Physics, 1960), den Davison-Germer-Preis (Surface Physics, 1977), die National Medal of Science, USA (1988), die Feenberg-Me-

daille (Many Body Physics, 1991), die UNESCO Niels Bohr Medal (1991), die Harvard Centennial Medal (2001), den Prix des trois physiciens der École normale supérieure (2003) sowie den Richard E. Prange Prize (2010). Nach der Nobelpreisvergabe wurde Kohn auch in Österreich mit zahlreichen Ehrungen bedacht. 1999 wurde er etwa mit dem Österreichischen Ehrenzeichen für Wissenschaft und Kunst und 2009 mit dem Großen Silbernen Ehrenzeichen um die Republik Österreich ausgezeichnet. 2011 wurde er Ehrenmitglied der Österreichischen Akademie der Wissenschaften.

Walter Kohn hat viele grundlegende Arbeiten verfasst und auf den verschiedensten Gebieten bahnbrechende Beiträge geliefert, wie für Metalle, Halbleiter, Supraleiter, Oberflächenphysik oder Katalyse. Mit seinem Namen sind wichtige Methoden verbunden wie die Kohn-Anomalie (Fermi-Fläche im Phononenspektrum) oder die Korringa-Kohn-Rostocker-(KKR-)Methode für Bandstrukturberechnungen, die er mit N. Rostocker entwickelte,<sup>5</sup> ähnlich wie dies J. Korringa tat. Er fühlte sich mehr als mathematischer Physiker, entwickelte aber enorm Wichtiges für die Chemie. Im Rahmen seiner Arbeiten

<sup>5</sup> W. Kohn, N. Rostocker: Solution of Schrödinger equation in periodic lattices with an application to metallic Li. In: Physical Review 94 (1954), 1111.

mit unterschiedlichen weltbekannten Forschern verfasste er über 200 Publikationen, von denen einige als wirklich fundamental zu erachten sind. In letzter Zeit widmete er sich auch der Solarenergie und brachte gemeinsam mit dem Nobelpreisträger Alan Heeger die Dokumentation *The power of the sun* heraus. Auch zu Themen wie erneuerbarer Energie oder Erderwärmung äußerte er sich. Durch seine ungewöhnliche Karriere schaffte er es, als Brückenbauer zwischen den Welten der Physik, Chemie, Mathematik und Materialwissenschaft aufzutreten. In einem seiner Vorträge illustrierte er dies mit seinem Thema „Nearsightedness of electronic matter“.<sup>6</sup> In der Chemie formuliert man diesen Aspekt so, dass ein Atom besonders mit den nächsten Nachbarn wechselwirkt. In der Physik bedeutet dies, dass sich diese Wechselwirkung mit benachbarten Atomen in der Hamilton-Matrix zeigt, in der die Terme mit benachbarten Atomen groß sind (d.h. nahe der Diagonale), während sie für alle Atome, die weiter weg sind, stark abfallen. In der Mathematik kann man näherungsweise die kleinen Wechselwirkungsterme vernachlässigen (d.h. gleich null setzen) und erhält dadurch statt der vollen Matrix eine Bandmatrix, die leichter zu diagonalisieren ist. In solchen

Fällen skaliert der Rechenaufwand linear mit der Systemgröße (Zahl der Atome), was man heute „order  $N^2$ -Methoden“ nennt. Die volle Diagonalisierung würde etwa mit der dritten Potenz  $N^3$  skalieren. Die Möglichkeit, komplexe Systeme (mit sehr vielen Elektronen) mit genügender Genauigkeit berechnen zu können, hat die Forschung der elektronischen Strukturen in verschiedensten Systemen enorm gestärkt, wobei der Dichtefunktionaltheorie besonders viel zu verdanken ist und nicht nur der oft zitierten erhöhten Computerleistung. Walter Kohn war nicht nur ein brillanter Naturwissenschaftler, Physiker, Mathematiker, Chemiker, sondern konnte mit dem gleichen Enthusiasmus über bildende und darstellende Kunst, Literatur oder Geschichte sprechen. Er hielt auch Vorträge über das Zusammenwirken von Wissenschaft und Religion. Zu Österreich hatte er bis zuletzt ein ambivalentes Verhältnis. Aber er betonte immer wieder, dass er trotz des Schicksals seiner Familie den Glauben an die Menschheit nicht verloren habe – sein tief verwurzelter Humanismus bot die Voraussetzung dafür. Die Österreichische Akademie der Wissenschaften wird ihm ein immerwährendes Andenken bewahren.

Karlheinz Schwarz

<sup>6</sup> W. Kohn: Density functional and density matrix method scaling linearly with the number of atoms. In: Physical Review Letters 76 (1996), 3168.

Druck & Bindung: Ferdinand Berger & Söhne GmbH, Horn