

„eine exzellente Entscheidung zum richtigen Zeitpunkt“. Stachel, die selbst am Alice-Experiment des LHC forscht, zeigte sich erfreut, dass das Preiskomitee in seiner Begründung ausdrücklich die Entdeckung des Higgs-Bosons durch die ATLAS- und CMS-Experimente am CERN würdigte. Trotzdem stellte sich natürlich die schwierige Frage, ob die Verdienste der vielen tausend beteiligten Forscherinnen und Forscher nicht auch preiswürdig gewesen wären. Mats Larsson, Mit-

glied des Nobelpreis-Komitees, der direkt aus Stockholm nach Berlin geschaltet war, ließ durchblicken, dass die Entscheidung, den Nobelpreis auch an eine Organisation zu verleihen, von der Entscheidung der Akademie abhängt. Ob und wie das Komitee diese Frage diskutiert habe und was zur verspäteten Bekanntgabe geführt hatte, durfte Larsson nicht preisgeben. Diese internen Diskussionen unterliegen nämlich einer 50-jährigen Geheimhaltung. Fast ebenso lange hatte es

von der Theorie bis zur Entdeckung des Higgs-Bosons gedauert. „Es ist wirklich unglaublich, dass dies während meiner Lebenszeit geschehen ist“, sagte Peter Higgs am 4. Juli 2012. Von seinem Nobelpreis erfuhr er übrigens nicht per Telefon vom Preiskomitee, sondern von einer Autofahrerin in Edinburgh, welche die Nachricht im Radio gehört hatte und kurzerhand anhielt, um dem überraschten Higgs als erste zu gratulieren.

Alexander Pawlak

■ Hybride Rechnungen

Den Chemie-Nobelpreis 2013 erhalten Martin Karplus, Michael Levitt und Arieh Warshel für „die Entwicklung von mehrskaligen Modellen für komplexe chemische Systeme“.

Klassisch oder quantenmechanisch? Bevor die diesjährigen Chemie-Nobelpreisträger vor rund 40 Jahren ihre nun ausgezeichneten Arbeiten veröffentlichten, mussten Chemiker zunächst diese Frage beantworten, wenn sie Molekülrechnungen durchführen wollten. Denn sie standen vor dem Dilemma, dass es mit der klassischen Physik zwar möglich war, die Struktur sehr großer Moleküle zu berechnen, nicht aber dynamische Vorgänge wie chemische Reaktionen. Letztere sind die Domäne der Quantenphysik, entsprechende Rechnungen waren angesichts des hohen Aufwands aber nur für kleine Moleküle möglich. Die Preisträger haben gezeigt, wie sich die Vorteile beider Beschreibungen verbinden lassen, indem man quantenchemische Rechnungen nur für einen kleinen Ausschnitt eines Moleküls durchführt und diesen Ausschnitt mit dem klassisch modellierten Rest verknüpft.

Ende der 1960er-Jahre entwickelte Arieh Warshel während seiner Doktorarbeit am Weizmann-Institut in Rehovot, Israel, ein Computerprogramm, mit dem sich große Molekülstrukturen bis hin zu Proteinen klassisch berechnen ließen. Damit im Gepäck ging er 1970 für einen zweijährigen Forschungsaufenthalt nach Harvard zu Martin Karplus, einem Experten



Harvard University



Stanford University



Wikimedia Commons

Die drei Chemie-Nobelpreisträger haben ihre Wurzeln außerhalb der USA. Der 1930 in Wien geborene Martin Karplus (oben, links) floh 1938 in die USA und promovierte 1953 am Caltech bei Linus Pauling. Seit 1966 ist er Professor an der Harvard University und seit 1996 auch an der Universität de Strasbourg in Frankreich. Der 1947 in Pretoria in Südafrika geborene Michael Levitt (oben, rechts) studierte Physik in London und promovierte 1971 in Cambridge. Seit 1987 ist er Professor an der Stanford University School of Medicine. Arieh Warshel, geboren 1940 in Israel, promovierte 1969 am Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel. Er ist seit 1976 Professor an der University of Southern California in Los Angeles.

für quantenmechanische Simulationen von chemischen Reaktionen. Gemeinsam entwickelten sie ein erstes Programm, das klassische

mit quantenphysikalischen Rechnungen verknüpfte. Dieses war allerdings zunächst auf planare Moleküle wie spiegelsymmetrische

Kohlenwasserstoffe beschränkt. Dabei wurden die π -Elektronen quantenchemisch betrachtet und die σ -Elektronen gemeinsam mit den Atomkernen klassisch.

Zurück in Israel ging Warshell gemeinsam mit Michael Levitt daran, diese Einschränkung aufzuheben. Bereits 1976 veröffentlichten sie die erste Rechnung einer enzymatischen Reaktion in Lysozym, einem Bestandteil des Immunsystems zur Bakterienabwehr. Sie konnten zeigen, dass es ausreicht, nur einige Elektronen des für die Reaktion relevanten Teils

rein quantenchemisch zu beschreiben, während sich ganze Bereiche von Atomen ausklammern und in starre Einheiten gruppieren lassen, die klassisch beschrieben werden. Dabei stellten sie Kopplungsterme auf, die die Wechselwirkung zwischen dem klassischen System und dem Quantensystem beschreiben. Zudem gelang es ihnen, die Faltung eines Proteins zu simulieren.

Die von den Preisträgern entwickelten und inzwischen verfeinerten hybriden Methoden erlauben es heute beispielsweise zu verstehen, wie sich bei der Photosynthese

aus Wasser Sauerstoff entwickelt oder wie die Reaktionen in einem Autokatalysator ablaufen. Bei der Entwicklung von Arzneimitteln lässt sich untersuchen, wie ein Medikament an das Zielprotein im Körper koppelt: Dabei werden quantentheoretische Rechnungen nur an den Atomen des Proteins durchgeführt, die direkt mit dem Medikament wechselwirken, der Rest des Proteins wird hingegen klassisch berechnet.

Katja Paff

■ Physikgeschichte mit Auszeichnung

Die Europäische Physikalische Gesellschaft zeichnet die PTB mit ihrem Institut Berlin als „EPS Historic Site“ aus.

Nicht nur Menschen, sondern auch Orte und Institutionen prägten und prägen die Geschichte der Physik. Um mehr Bewusstsein für physikgeschichtlich bedeutsame Orte zu schaffen, hatte die Amerikanische Physikalische Gesellschaft im Oktober 2004 die „Historic Sites Initiative“ Mission ins Leben gerufen.¹⁾ Seitdem haben über dreißig Orte eine Plakette erhalten, um auf Stätten, an denen sich in den USA wichtige und interessante Ereignisse der Physikgeschichte ereignet haben, aufmerksam zu machen. Die Europäische Physikalische Gesellschaft (EPS) folgte 2011 dem Beispiel der APS mit einer eigenen Initiative für Europa.²⁾ Die Auszeichnung zur „EPS Historic Site“ erhielten bislang acht Orte, darunter das Vereinigte Institut für Kernforschung JINR in Dubna, an dem eine ganze Reihe schwerer und exotischer Kerne erzeugt wurden, und der Hügel von Arcetri in der Toskana, wo unter anderem Galileo Galilei in seinen letzten Lebensjahren den „Dialog über die zwei Weltsysteme“ vollendete.

Als erste Institution in Deutschland hat die Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) und mit ihr ihre Vorgängerin, die Physikalisch-Technische Reichsanstalt, das Attribut „EPS Historic Site“ erhalten. Im Rahmen einer



PTB

Nach dem Anbringen der Plakette, welche die Physikalisch-Technische Bundesanstalt als „EPS Historic Site“ ausweist: (v.l.) EPS-Präsident John Dudley, DPG-Präsidentin Johanna Stachel, PTB-Präsident Joachim Ullrich, Physik-Nobelpreisträger Wolfgang Ketterle und der Direktor des Berliner PTB-Instituts, Hans Koch.

Festveranstaltung am 8. Oktober übergab EPS-Präsident John Dudley gemeinsam mit DPG-Präsidentin Johanna Stachel die zugehörige Plakette an den PTB-Präsidenten Joachim Ullrich.

Hans Koch, Leiter des Instituts Berlin der PTB, erläuterte in seinem Vortrag die enge Beziehung zwischen Grundlagenphysik und Metrologie anhand der Präzisionsmessungen der Schwarzkörper-

strahlung, die zu Plancks Quantenhypothese führten und damit den Grundstein für die Quantenmechanik legten. An der PTR, deren Gründung der gemeinsamen Initiative des Industriellen Werner von Siemens und des Physikers Hermann von Helmholtz zu verdanken ist, wurden weitere grundlegende physikalische Gesetze und Effekte entdeckt, darunter das Wiensche Strahlungsgesetz,

1) APS Historic Sites Initiative: www.aps.org/programs/outreach/history/historicsites

2) EPS Historic Sites: www.eps.org/?page=historic_sites