

■ „Boltzmann wäre begeistert“

Seit 1975 vergibt die International Union of Pure and Applied Physics (IUPAP) alle drei Jahre die Boltzmann-Medaille. Diese höchste internationale Auszeichnung für Statistische Physik erhält im Juli mit Prof. Dr. Kurt Binder (63) von der Universität Mainz erstmals ein Deutscher.^{#)} Binder wird ausgezeichnet für seine grundlegenden Beiträge zur numerischen Statistischen Physik.

Sie haben maßgeblich dazu beigetragen, Computer-Simulationen in der Physik zu etablieren. Was glauben Sie, würde Boltzmann von Monte-Carlo-Simulationen halten?

Ich denke, Boltzmann wäre begeistert, denn die Idee seiner Statistischen Mechanik war ja, dass man die makroskopischen Gesetze der Thermodynamik aus statistischen Gesetzmäßigkeiten der Atome und Moleküle ableiten kann. Mit Boltzmanns Interpretation der Entropie lässt sich die Wechselwirkung zwischen den Atomen in Zusammenhang bringen mit den Eigenschaften der makroskopischen Materie. Die Monte-Carlo- und die Molekulardynamik-Simulationen ermöglichen es, diesen Zugang von Boltzmann wirklich mit Fleisch und Blut zu füllen.

Simulationen sind inzwischen neben Theorie und Experiment das dritte Standbein der Physik. War es schwer, die Physiker von deren Nutzen zu überzeugen?

Anfangs schon, denn diese Methoden wurden unmittelbar nach der Erfindung der Computer konzipiert, als diese extrem langsam und wenig leistungsfähig waren. Ende der 60er-Jahre, als ich mit solchen Simulationen begonnen habe, war es noch nicht sehr viel besser, und es bedurfte schon eines gewissen Optimismus' und Weitblicks, um das Potenzial dieser Methode zu erkennen. Außerdem waren viele davon überzeugt, dass die wirklich wichtigen Ergebnisse der Physik allein mit Papier, Bleistift und Nachdenken zu finden sind.

Ein guter Theoretiker rechnet analytisch.

Genau! Die Einstellung, dass man den Computer auch in der theoretischen Physik geschickt nutzen sollte, hat sich nur langsam durchgesetzt. Daher gab es die ersten Boltzmann-Medaillen durchweg für große analytische Leistungen.

Werden numerische Experimente „echte“ Experimente bald überflüssig machen?

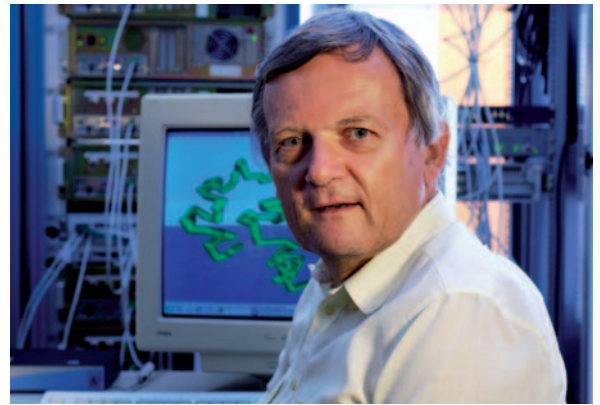
Experimente werden nie ganz überflüssig werden, denn jede Simulation ist immer in gewisser Weise gegenüber der Realität idealisiert, und diese Idealisierungen müssen durch Experimente überprüft werden. Außerdem ist z. B. eine Beschreibung thermodynamischer Vielteilchensysteme, die ohne jegliche Näherung auf der Quantenmechanik aufbaut, noch lange nicht möglich. Computersimulationen, Experimente und analytische Rechnungen benötigen sich in einem fortwährenden Kreislauf schon alle gegenseitig.

Nach den Fortschritten in den vergangenen Jahrzehnten könnte man den Eindruck erhalten, dass die Statistische Physik ihre besten Tage hinter sich hat.

Das sehe ich überhaupt nicht so. Die Statistische Physik ist die Grundlage für sehr breite Felder wie Materialforschung, Polymerphysik oder Quantenphysik. Daneben strahlt sie auf neue Gebiete aus, die inzwischen eine sehr wichtige Eigendynamik haben, z. B. Untersuchungen zur granularen Materie oder zu Aktienkursen, Simulationen von Verkehrsströmen. In diesen Vielteilchensystemen tritt generell komplexes Verhalten auf, das sich nicht allein aus dem Verhalten des einzelnen Teilchens verstehen lässt. Deswegen sind diese Methoden der Statistischen Physik so vielseitig und befruchten immer wieder neue Gebiete.

Sie haben einige aktuelle Themen genannt. Wo liegen spannende Fragen für die Zukunft?

Ein sehr wichtiges Thema wird natürlich das mehr quantitative Verständnis molekularer, biophysikalischer Probleme sein, zum



Kurt Binder

Beispiel die Wirkung von Enzymen, der Transport durch biologische Membranen. Um Makromoleküle mit ihrer gewaltigen Anzahl an inneren Freiheitsgraden zu verstehen, wird Statistische Physik benötigt.

Wo sehen Sie den größten Bedarf an neuen Methoden?

Sehr großer Bedarf besteht bei der Behandlung der Quantenmechanik. Zurzeit sind gute Simulationen von Supraleitern oder anderen korrelierten Quantenphänomenen bei sehr tiefen Temperaturen praktisch noch nicht möglich. Bei der Monte-Carlo-Simulation tritt zum Beispiel das sog. Minuszeichenproblem auf: Dadurch nehmen manche der statistischen Gewichte negative Werte an, und dann bricht die ganze Wahrscheinlichkeitsinterpretation zusammen. Letztendlich rührt dieses Problem aus der Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion in einem System vieler Fermionen her. Das ist grundsätzlicher Natur und sicher das größte Problem, dem sich die statistische Thermodynamik gegenüber sieht.

Sie erwähnten bereits Anwendungen in ganz anderen Gebieten wie Risikobewertung und Analyse von Aktienkursen. Profitiert davon auch die Physik?

Die Physik profitiert zunächst dadurch, dass Absolventen in theoretischer Physik mit Kenntnissen in Simulationen und statistischer Mechanik sehr gute Beschäftigungsmöglichkeiten bei Versicherungen und Banken finden, das ist ein ungebrochener Trend. Dass dies auch die Statistische Physik im eigentlichen Sinn befruchtet, kann ich bis jetzt allerdings noch nicht feststellen.

Mit Kurt Binder sprach Stefan Jorda

#) Binder erhält die Boltzmann-Medaille gemeinsam mit dem italienischen Physikprofessor Giovanni Gallavotti.

An dieser Stelle beleuchten wir regelmäßig die vielfältigen Tätigkeiten und Talente von DPG-Mitgliedern. (Die Redaktion)