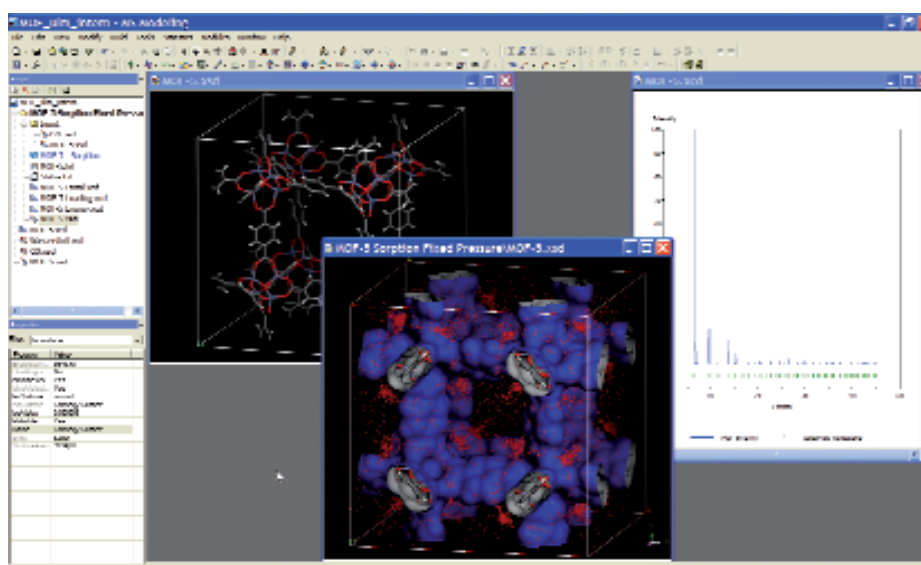


Accelrys Materials Studio: Neue Software zum Modellieren von Materialien

Die Barbara Mez-Starck-Stiftung hat durch eine großzügige Spende die Anschaffung des Programmpakets Materials Studio der Firma Accelrys für die Ausbildung der Ulmer Studenten in der computergestützten Modellierung und Simulation von Materialien ermöglicht. Diese Software wird zurzeit auf den Rechnern des neuen Linux Chemie-Computer-Labors installiert, dessen Einrichtung ebenfalls von der Barbara Mez-Starck-Stiftung unterstützt wird. Bei dem Programmpaket handelt es sich um die marktführende Software für die Modellierung von Materialien; damit lassen sich anwendungsorientierte Systeme modellieren, die für Forschungsschwerpunkte an der Uni Ulm unmittelbar relevant sind, zum Beispiel Festkörper, Grenzflächen, Oberflächen, Polymer-Blends, nanostrukturierte Systeme, poröse Materialien, Hybridmaterialien, Biomineralien oder Biomaterialien.

Eine besondere Stärke des Programmpaketes ist die Vorhersage von Materialeigenschaften, die der präparativ arbeitende Chemiker mit seinen experimentellen Daten direkt vergleichen kann, zum Beispiel mit spektroskopischen Daten (NMR-, IR- und Ramanspektroskopie) oder Daten aus Röntgen- und Neutronenbeugung. Studenten/-innen können lernen, wie mechanische und plastische, aber auch elektronische und optische Eigenschaften von Materialien berechnet werden. Damit ist die Software insbesondere auch für die Ausbildung in materialwissenschaftlich orientierten Studiengängen (Advanced Materials, Energy Science) von Interesse.

Das Software-Paket besteht aus einer Vielzahl von Modulen, die von einer gemeinsamen graphischen Benutzeroberfläche, dem Materials Visualizer, aufgerufen werden (Abbildung). Die Module umfassen zahlreiche Simulationsprogramme, die für verschiedene Anwendungen in der Chemie und den Materialwissenschaften äußerst hilfreich sind. Mit diesen Programmen lassen sich Moleküle, Festkörper, Polymere und amorphe Materialien auf verschiedenen theoretischen Niveaus berechnen, die von anspruchsvollen quantenchemischen Simulationen organischer Moleküle oder metallischer Nanocluster, bis hin zur Beschreibung komplexer makroskopischer Systeme, zum Beispiel Polymermischungen oder Hybridmaterialien reichen. Aufgrund der Tatsache, dass die Materials Studio-Programme Berechnungen sehr effizient durchführen, können Simulationsaufgaben im Rahmen von Praktika und Seminaren noch während einer Unterrichtsstunde gelöst werden, was ein intuitives Arbeiten erleichtert. Vielfältige Werkzeuge zur Analyse von Simulationser-



Simulation einer mikroporösen metallorganischen Gerüststruktur (»MOF-5«). Dargestellt ist die Elementarzelle der Verbindung (links oben), sowie das dazu berechnete Röntgenpulverdiffraktogramm (rechts oben). Die Abbildung in der Mitte zeigt eine Connolly-Oberfläche (blau), die roten Punkte markieren bevorzugte Adsorptionsstellen für ein Adsorbat (hier gasförmiges Kohlenmonoxid)

gebnissen erlauben einen direkten Vergleich mit dem chemischen Experiment. Die Erfahrung zeigt, dass eine derartige Verknüpfung von Theorie und Experiment in Ausbildung und Beruf immer wichtiger wird, und dass aussagekräftige Simulationsexperimente längst nicht mehr ausschließlich von Spezialisten durchgeführt werden.

Das Programmpaket ist didaktisch hervorragend aufgebaut und sehr bedienungsfreundlich, so dass die Benutzer dreidimensionale Strukturen leicht konstruieren können. Es gibt umfangreiche Visualisierungsmöglichkeiten und Werkzeuge, um Ergebnisse von Berechnungen darzustellen. Zum Beispiel lassen sich elektronische Ladungsverteilungen, die mit den im Materials Studio enthaltenen Elektronenstrukturprogrammen berechnet werden, auf vielfältige Weise abbilden. Dadurch werden grund-

gende Prinzipien der chemischen Bindung in Festkörpern leicht verständlich.

Die Abbildung demonstriert den Einsatz der Software an einem praxisorientierten Beispiel, der Simulation einer mikroporösen metallorganischen Gerüststruktur (»MOF-5«). Diese und ähnliche kristalline Koordinationsverbindungen werden seit einigen Jahren in der Grundlagenforschung intensiv untersucht. In jüngster Zeit haben bedeutende Industrieunternehmen das Anwendungspotenzial dieser Verbindungsklasse erkannt, u. a. werden deren Einsatzmöglichkeiten als mobile Speichermedien für Wasserstoff oder Methan untersucht. Auch an der Universität Ulm werden mikroporöse Verbindungen in verschiedenen Arbeitsgruppen untersucht, wobei Schwerpunkte in der Synthese, der Katalysatorforschung und der Energieumwandlung und -speicherung

liegen. Studenten stellen diese Verbindungen seit einiger Zeit auch im Rahmen der Praktikumsausbildung (AC-Fortgeschrittenen-Praktikum) her. Im Materials Studio lassen sich die kristallinen Verbindungen leicht simulieren.

So kann deren dreidimensionale Struktur im Visualizer leicht aus veröffentlichten kristallographischen Daten aufgebaut werden, wozu an der Universität Ulm Datenbanken wie die Cambridge Structural Database (CSD) zur Verfügung stehen. Eine besondere Stärke des Programms ist auch die Berechnung neuartiger MOF-Strukturen, zum Beispiel mit dem FORCITE-Modul.

Mit den REFLEX TOOLS lassen sich Röntgenbeugungsdiagramme der Verbindungen simulieren, die dann mit experimentellen Röntgenbeugungsdaten verglichen werden können.

Der Experimentator erhält dadurch direkte Hilfestellung bei der Auswertung seiner Ergebnisse, zum Beispiel ob die neu synthetisierte Verbindung einer bekannten oder eine neuartigen Struktur entspricht. Mit Hilfe quantenmechanischer Programme im Materials Studio, zum Beispiel DMOL, lassen sich spektroskopische Daten der MOF-Verbindungen vorhersagen oder realistische Ladungsverteilungen berechnen. Auf dieser

Basis lassen sich dann auch zum Beispiel Adsorptionsisothermen simulieren (SORPTION-Modul) oder bevorzugte Adsorptionsplätze in der Festkörperstruktur für verschiedene Molekülsorten vorhersagen. Daraus ergeben sich wiederum erste Anhaltspunkte für die Aktivierung von Molekülen in katalytischen Anwendungen und für reaktionsmechanistische Fragestellungen.

Materials Studio ist damit ein mächtiges Werkzeug bei der Entwicklung neuartiger Materialien, die in der industriellen Anwendung eine zunehmend wichtige Rolle spielen. Der Einsatz von Materials Studio in Forschung und Lehre wird die Ausbildung der Ulmer Studenten im Bereich der Chemie wesentlich bereichern und gegenüber anderen Universitäten stärken.

Da das Programmpaket sehr kostspielig ist, können sich bisher nur wenige Universitäten eine Campus-Lizenz leisten. Im industriellen Umfeld wird die Software in den Forschungs- und Entwicklungsabteilungen vieler Unternehmen der chemischen und pharmazeutischen Industrie eingesetzt. Mit der Verfügbarkeit des Programmpaketes erhalten Studenten der Universität Ulm nun die Möglichkeit, sich vor dem Berufsstart mit dem Programm vertraut zu machen. ■

Professor Axel Groß/Professor Dirk Vollmer

Fragen zum Studium:

Information beugt Abbruch vor

»Studien- und Berufswahl sind keine einfache Sache«, weiß nicht nur die Studienberaterin der Universität Ulm, Christiane Westhauser. Die Folge: »Viele können sich nach dem Abitur und selbst nach Wehr- oder Zivildienst, Sozialem Jahr oder einem Au-pair-Aufenthalt nicht richtig entscheiden.« Aus Not oder Unsicherheit nehmen deshalb Westhauser zufolge nicht wenige junge Leute ein Verlegenheitsstudium auf. »Falsche Vorstellungen vom Studiengang führen zu Frust und Unzufriedenheit, dann folgt ein Fachwechsel oder gar der Abbruch des Studiums«, so ihre Erfahrung. Das aber kostet Zeit und mitunter auch viel Geld, nicht nur der Studiengebühren wegen, sondern vor allem durch den späteren Berufseintritt.

»Das ließe sich vielfach vermeiden«, ist die Studienberaterin überzeugt, »vor allem durch rechtzeitige und gründliche Informationen«. Westhauser weiter: »Mit fachspezifischen Informationsveranstaltungen wollen wir Interessierten jetzt bei ihren Entscheidungen für das richtige Studium helfen.« Vorgesehen seien in den kommenden Monaten jeweils zwei Termine, bei denen die einzelnen Fächer Inhalte und Ziele ihrer Studiengänge sowie die möglichen Berufsfelder vorstellen sollen. Die Veranstaltungen beginnen jeweils um 15 Uhr. Zur Teilnahme ist eine Anmeldung erforderlich.

Weiteres unter www.uni-ulm.de/home/studieninteressierte.html ■

wb

41. Jahrestag:

Prof. Mlynek hält Festvortrag

Ihren 41. Jahrestag wird die Universität Ulm am Freitag, 11. Juli, feiern. Für den Festvortrag konnte Professor Jürgen Mlynek, der Präsident der Helmholtz-Gesellschaft gewonnen werden. Weitere Einzelheiten stehen noch nicht fest. ■

wb

Foto: Baur



Kristin Mühlhäuser und Patrick Eustermann leiten seit geraumer Zeit gemeinsam mit drei weiteren Vorstandsmitgliedern die vor rund zwei Jahren gegründete AIESEC-Gruppe an der Universität Ulm. Eustermann, 22 und im 6. Semester Wirtschaftswissenschaften, fungiert als Präsident des Lokalkomitees, seine gleichaltrige Kommilitonin Mühlhäuser ist als Vizepräsidentin für Firmenkontakte und Öffentlichkeitsarbeit zuständig. Weitere Vizepräsidenten sind Katrin Schnurrbusch (Finanzen), Martin Kies (Praktikantenaustausch) und Sabrina Streippert (Internes Teammanagement). Allesamt haben sie noch im Vorjahr turnusmäßig die Führung übernommen, die in der Regel jeweils für ein Jahr gewählt wird. Unverändert im Mittelpunkt ihrer Arbeit steht der internationale Praktikantenaustausch und in diesem Zusammenhang die Akquise weiterer Firmen, die zur Aufnahme ausländischer Praktikanten bereit sind. Ein Ziel ist aber auch die Vorbereitung eigener Praktikanten auf Auslandsaufenthalte. Voran gekommen ist die Gruppe im Hinblick auf den eigenen Status: »Wir sind jetzt nicht mehr Außenstelle von München, aber noch nicht selbständig«, berichtet Patrick Eustermann. Für eine weitere Aufstufung sei unter anderem die Vermittlung von mehr Praktikantenplätzen erforderlich. Ausbauen wollen die derzeit 15 aktiven Studentinnen und Studenten deshalb nicht zuletzt den eigenen Mitgliederbestand. Zuwachs erwarten sie insbesondere durch die beiden Informationsabende am 22. und 24. April. Mit rund 20 000 Mitgliedern in 90 Ländern gilt AIESEC als größte Studentenorganisation der Welt. ■ wb

Weiteres unter www.aiesec.de/ulm