

Theoretische Chemie

Virtuelles Chemielabor ermöglicht wichtige mikroskopische Einblicke

Aufgrund der enormen Steigerung der Leistungsfähigkeit moderner Computer und der Verbesserung von Computeralgorithmen können heutzutage viele chemische Reaktionen auf Rechnern simuliert werden. Solche Computerexperimente in einem virtuellen Chemielabor werden zwar in nächster Zukunft das Experiment nicht ersetzen, sie liefern aber wichtige mikroskopische Einblicke in den Ablauf von chemischen Reaktionen und können damit die Anzahl der nötigen Experimente drastisch reduzieren. In der Abteilung Theoretische Chemie der Universität Ulm ist nun Mitte Februar ein virtuelles Chemielabor mit einem Kurzkolloquium des neuberufenen Abteilungsleiters Professor Axel Groß feierlich eröffnet worden. Es besteht aus einem Computercluster, bei dem 260 gewöhnliche Personal Computer (PCs) zusammengeschaltet worden sind.



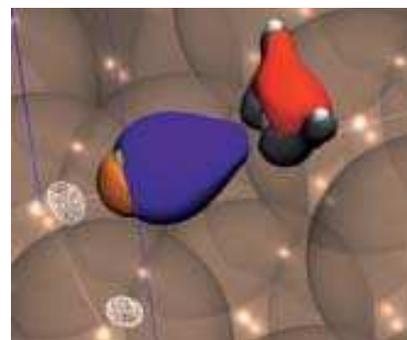
Der neue Computercluster der Abteilung Theoretische Chemie

Obwohl alle Komponenten dieses Computerclusters aus handelsüblichen Einzelteilen bestehen, ist ein derartiger Rechner nicht »von der Stange« zu kaufen. Die Vorbereitungen zur Installation dieses Rechners dauerten mehrere Monate. In dieser Zeit haben Christian Mosch und Christian Carbogno, Doktoranden in der Abteilung Theoretische Chemie, mit Unterstützung des Kommunikations- und Informationszentrums der Universität Ulm (kiz) die Struktur des Clusters festgelegt, Hardwarekomponenten getestet und Software zum Betrieb des Clusters neu geschrieben. Zusätzlich waren umfangreiche Bauarbeiten unter der Leitung von Frank Fischer (Vermögen und Bau Baden Württemberg, Amt Ulm) erforderlich, um ein ehemaliges Chemielabor für den Betrieb des Computerclusters vorzubereiten. Dies betraf vor allem die Bereitstellung der nötigen Stromversorgung und die Installation einer effizienten Kühlung.

Jeweils 44 der einzelnen Rechnerknoten, die aus PCs mit 2 Gigabyte Hauptspeicher bestehen, sind durch so genannte »Switches« verbunden. Sie ermöglichen, diese Rechner so zusammenzuschalten, dass Programme parallel auf ihnen ablaufen können. Dadurch kann die Rechenzeit für komplexe Probleme drastisch reduziert werden. Der

Rechencluster, der mit dem Betriebssystem Linux läuft, gehört zwar nicht ganz zur Klasse der Top 500 der schnellsten Rechner der Welt, seine Leistungszahlen bringen ihn aber nahe an diese Klasse heran. Auf jeden Fall kann die Abteilung Theoretische Chemie der Universität damit lokal auf eine Rechenleistung zugreifen, wie sie nur wenige wissenschaftliche Arbeitsgruppen in Deutschland besitzen.

In diesem virtuellen Chemielabor werden hauptsächlich Rechnungen zur geometrischen und elektronischen Struktur von Oberflächen und zu chemischen Reaktionen auf Oberflächen durchgeführt. Dabei werden modernste quantenchemische Elektronenstrukturmethoden benutzt. Solche Untersuchungen, die in enger Zusammenarbeit mit experimentellen Arbeitsgruppen durchgeführt werden, dienen zur Vertiefung des fundamentalen Verständnisses von Prozessen an Oberflächen. Andererseits haben sie auch eine hohe technologische Bedeu-



Berechnete partielle elektronische Ladungsdichte eines auf Kupfer adsorbierten Formaldehydmoleküls (CH_2O). Mit Hilfe dieser Darstellung können chemische Bindungen analysiert werden

tung, da sie zur Verbesserung von Katalysatoren oder zur Entwicklung neuartiger Bauelemente beitragen können. Dabei kann nicht nur die geometrische Anordnung, die Energie, die Dynamik und die Kinetik von Prozessen an Oberflächen berechnet, sondern auch die elektronische Struktur bestimmt werden, die der chemischen Reaktivität zugrunde liegt. Abbildung 2 zeigt zum Beispiel die berechnete elektronische Ladungsdichte eines Formaldehydmoleküls (CH_2O) auf einer Kuperoberfläche, wie sie bei der Synthese von Methanol vorkommt. Solche Rechnungen sind unter anderem im Zusammenhang mit der Brennstoffzellentechnologie interessant. Durch die Analyse der Ladungsdichte kann die Natur der chemischen Wechselwirkung ergründet und allgemeine Prinzipien für Reaktionsabläufe abgeleitet werden. Mit weiteren Computerexperimenten im neuen leistungsstarken virtuellen Chemielabor wird die Abteilung Theoretische Chemie in Zukunft zum besseren Verständnis von Prozessen an Oberflächen beitragen. ■

Professor Axel Groß

