

Physikexperimente via Computer

Die Nano- und Materialwissenschaften setzen auf Hochleistungsprozessoren als wissenschaftliches Hilfsmittel.

Sonja Gerstl

Computergestützte Physik (Computational Physics) hat sich seit geraumer Zeit als eigenständige Disziplin innerhalb der Physik etabliert.

An der Universität Wien leitet Christoph Dellago, zugleich auch Dekan der Fakultät für Physik, die Gruppe Computational Physics. „Wir beschäftigen uns hier mit Fragestellungen der Nano- und Materialwissenschaften – und zwar ausschließlich mithilfe von Computersimulationen. Wir führen also keine realen Experimente durch, sondern nur virtuelle. Die realen Experimente überlassen wir anderen Arbeitsgruppen, mit denen wir kooperieren“, skizziert Dellago seinen wissenschaftlichen Einsatzbereich.

Als wichtigstes Forschungsmittel fungieren 240 zu einem Hochleistungsrechner verbundene Prozessoren, die Tag und

Nacht an Computersimulationen von physikalischen Phänomenen rechnen.

Um das Verhalten von weicher Materie oder Nanokristallen bei einer Veränderung der Außenbedingungen, also Temperatur oder Druck, zu simulieren, benötigt der institutseigene Computer-Cluster, der auf den klingenden Namen „klogW“ hört (Pate dafür stand Ludwig Boltzmanns Formel für Entropie), mehrere Monate. So lange dauert die Simulation von Phasenübergängen deshalb, weil sie in unzähligen kleinen Recheneinheiten erfolgen muss, damit man am Ende nicht gar den großen Moment verpasst, welcher sich innerhalb weniger Picosekunden ereignet.

Neuer Supercomputer

Demnächst wird „klogW“ all die Programme und Algorithmen nicht mehr im Alleingang ausführen müssen. Schützen-

hilfe winkt in Gestalt des Hochleistungsrechners VSC (Vienna Scientific Cluster). Dieser wird derzeit gerade installiert und soll künftig den Studierenden der Universität Wien, der Technischen Universität Wien und der Universität für Bodenkultur zur Verfügung stehen. Dellago erwartet sich durch VSC „neue Rechenwelten“, in die man bis dato aufgrund der begrenzten Kapazitäten von „klogW“ nicht vordringen konnte.

Der neue Supercomputer VSC mit etwa 424 Rechenknoten mit je zwei Quadcore-Prozessoren, in Summe zehn Tera-byte Hauptspeicher und einer geschätzten Gesamtrechenleistung von mehr als 30 Teraflops stellt für die computergestützte Physik hierzulande einen echten Quantensprung dar.

Zugang zu diesem Wunderwerk der Technik haben übrigens nur wissenschaftlich begutachtete Projekte.



240 Prozessoren sind in der Fakultät für Physik der Uni Wien zu einem Hochleistungsrechner verbunden. Foto: Fakultät für Physik

Unbekannte Wassermolekularwelten

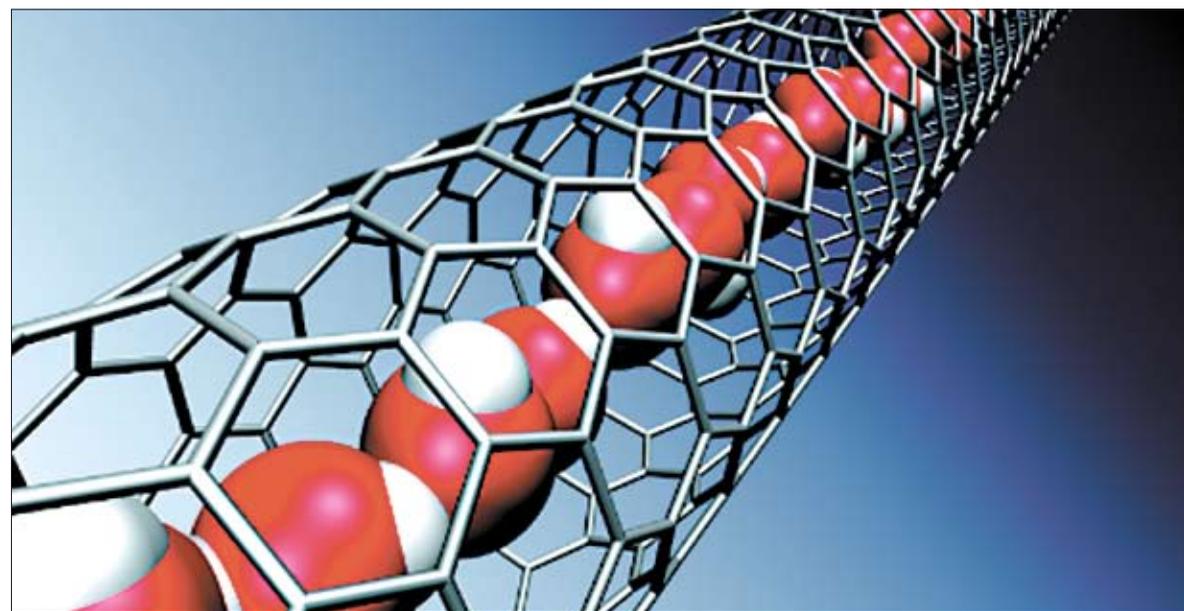
Via Computersimulation untersucht Wiener Physikerteam die Aggregatzustände von Wasser in Nanoröhren.

Neben strukturellen Phasenübergängen in Nanokristallen beschäftigt sich die Gruppe des Physikers Christoph Dellago vor allem mit dem Verhalten von Wasser im Inneren von Kohlenstoffnanoröhren.

Nanoröhren sind winzige Röhren aus Kohlenstoff-Atomen, die im konkreten Fall als atomare Reagenzgläser verwendet werden. Werden nun kleinste Mengen einer Substanz in diese Röhren eingeschlossen, so verhalten sich die Moleküle oftmals anders als in großen Mengen der gleichen Substanz. Im Fall von Wasser haben Wissenschaftler entdeckt, dass dieses in Nanoröhren bislang unbekannte Aggregatzustände besitzt.

Geordnetes System

Ein Team um Dellago entwickelte vor Kurzem ein Computermodell, um die Eigenschaften von Wassermolekülen in Nanoröhren genauer zu untersuchen. Dabei stellte sich heraus, dass die Wassermoleküle sehr lange ununterbrochene Ketten bilden,



In einer sogenannten Nanoröhre, die gleichsam als atomares Reagenzglas fungiert, bilden Wassermoleküle eine geordnete Kette. Foto: Fakultät für Physik

die vollständig geordnet sind – das heißt, jedes Molekül zeigt in dieselbe Richtung. Dellago über sein Projekt, das international große Beachtung fand: „Das Ergebnis war überraschend für uns, da sich für molekulare Ver-

hältnisse extrem lange Ketten von 0,1 Millimetern bildeten. Wenn man bedenkt, dass ein Wassermolekül circa 0,3 Nanometer groß ist, hängen in diesen Wasserketten bis zu einer Million Wassermoleküle aneinander

und sind geordnet ausgerichtet. Das ist erstaunlich.“ Diese Wasserkettenbildung ist für biologische Systeme, wo die Ketten in Membranporen vorkommen, sehr wichtig, da diese etwa den Wasserhaushalt regeln oder

auch als Protonenleiter fungieren. „Mit unseren Computersimulationen möchten wir bessere Einblicke in diese Vorgänge bekommen“, so Dellago. Obwohl die Wassermoleküle überraschend lange geordnete Ketten bilden, steht es fest, dass diese nie unendlich lang sein können. Dellago: „Irgendwann gewinnt das Chaos. Wenn die Kette etwa nur zehn Moleküle lang ist, gibt es auch nur zehn Stellen, an denen ein Defekt auftreten kann. Besteht sie aber aus mehreren Millionen Molekülen, existieren dementsprechend viele Möglichkeiten für Defektbildung.“ Auch hier gibt das Modell nähere Aufschlüsse, da es nicht nur die Defekte in der Kette aufzeigt, sondern auch Häufigkeit und Lebensdauer dieser Defekte liefert.

In weiteren „virtuellen“ Versuchen sollen nunmehr der Einfluss von elektrischen Feldern auf die Wasserketten in Nanoröhren untersucht werden. www.comp-phys.univie.ac.at/dellago