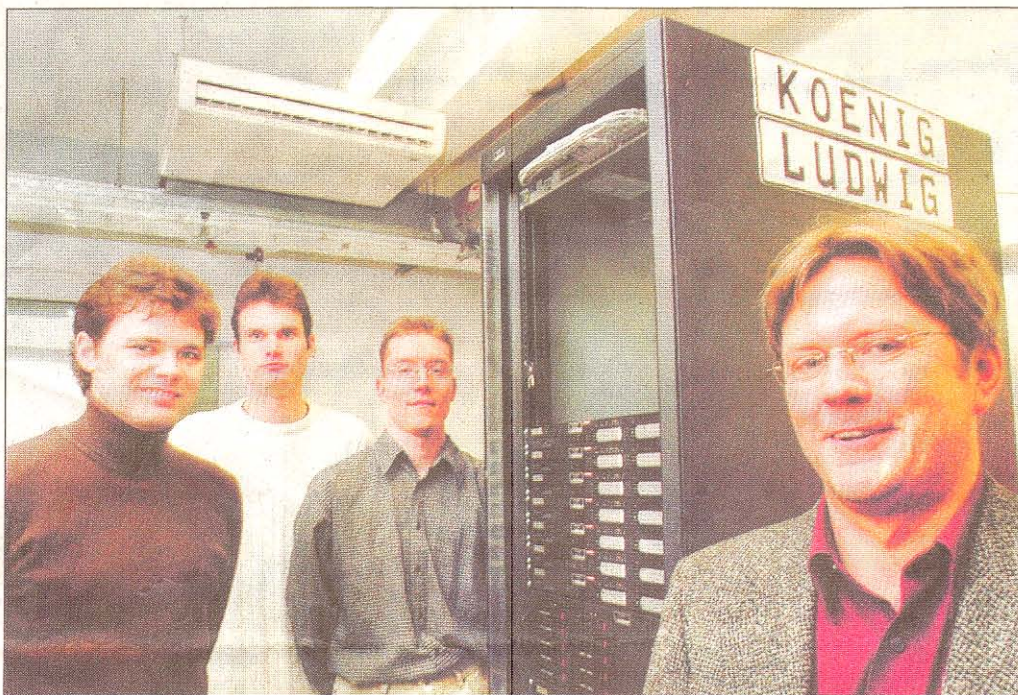


In Zusammenarbeit mit der Universität Rostock veröffentlichen die NNN eine Universitäts-Rubrik. Sie erscheint jeweils am Mittwoch und informiert über die Ergebnisse akademischer Lehre der unterschiedlichen Fakultäten und macht die Öffentlichkeit mit herausragenden Ergebnissen in der Forschung bekannt. Ergänzt werden die Uni-Informationen mit Personalien, Veranstaltungshinweisen, Terminen und Meldungen aus der studentischen Interessensvertretung.



Verantwortlich:
Thomas Niebuhr
Telefon 0381/491 16 10



Ralf Ludwig (r.) und seine Mitarbeiter Frank Schulte, Thorsten Köddermann und Alexander Wulf freuen sich über die Möglichkeiten, die „Koenig Ludwig“ bietet. Fotos: Scharnweber (2)

Chemie fast ganz ohne Reagenzglas

Neuer Rechencluster in der Physikalischen Chemie

Für die Physikalische Chemie ergeben sich nun ganz neue Möglichkeiten. Gestern wurde am Lehrstuhl von Prof. Ralf Ludwig ein neuer Computer offiziell in Betrieb genommen.

„Koenig Ludwig“ lässt sich auf dem schwarzen Gehäuse ablesen. „Das haben sich meine Mitarbeiter ausgedacht“, sagt Prof. Ralf Ludwig. Darin verbirgt sich der neue „High Performance Computing Cluster“ (HPCC). „Für die gleiche Leistung hätten wir 100 PC kaufen müssen.“ Für das gleiche Geld steht ihm nun die dreifache Leistung zur Verfügung, bis zu sechsmal so schnell.

Ludwigs Fachgebiet ist die Computer-Chemie, also Chemie fast ohne Reagenzglas. Mit seinen Mitarbeitern untersucht er beispielsweise molekulare Struk-

turen an Grenzflächen. Spezialgebiet Wasser. Dabei geht es um Eigenschaften wie Alterungsprozesse von Oberflächen oder den Lotus-Effekt, die in der Materialwissenschaft von Interesse sind. Aber auch „Faltungsprozesse von Proteinen in wässrigen Lösungen“ sollen untersucht werden. „Missfaltungen“, erläutert Ludwig, stehen auch in Zusammenhang mit Krankheiten wie Alzheimer.

Für seine Grundlagenforschung benötigt der Physikochemiker die entsprechende Rechnerleistung, und die neue Technik bietet ihm nun die Gelegenheit, alle Methoden der Computer-Chemie einzusetzen. Davon sollen auch andere Kollegen seines Faches, der Physik oder Biologie profitieren. „Wir wollen da zusammenarbeiten, wo wir die Werkzeuge aus unserer Toolbox beisteuern können“,

bietet Ralf Ludwig an. Ludwig, der im Frühjahr aus Dortmund kam, brachte seinen Part eines von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) geförderten Wasserprojekts nach Rostock mit. Von der DFG wurde daher auch der Rechner als „Leihgabe“ gestellt. Das sei die absolute Ausnahme, weil Derartiges eigentlich zur Grundausstattung gehört, die von der DFG nicht gefördert wird, so Ludwig. Die Universität sorgte die räumlichen Voraussetzungen, denn eine solche Anlage benötigt natürlich entsprechende Elektro- und klimatische Installationen.

Die Rechencluster bei den Computer-Chemikern sind übrigens nach Biermarken benannt. Der bisherige hieß „Flens“, der neue „Koenig“. Sollte ein weiterer dazu kommen, wird er garantiert „Rostocker“ heißen, kündigt Ralf Ludwig an. **Thomas Niebuhr**