

05.12.2011

Neuer Rechencluster ist zehn Mal schneller

Kategorie: Startseite

Photokatalytische Wasserspaltung besser modellierbar



Prof. Dr. Ralf Ludwig:
Wettbewerbsfähigkeit deutlich
gesteigert

Alle Rechenkraft voraus! Der Physikalischen und Theoretischen Chemie der Universität Rostock steht ab dem 06.12.2011 ein neuer leistungsstarker Rechencluster zur Verfügung. Auf fast 1.300 Prozessorkernen werden Moleküle und Katalysatoren zum Tanzen gebracht. „Damit wird die Wettbewerbsfähigkeit der Universität Rostock bei der Beteiligung an größeren Forschungsvorhaben deutlich gestärkt“, freut sich Prof. Dr. Ralf Ludwig, Experte für Physikalische und Theoretische Chemie. Der neue Rechencluster hat eine zehn Mal höhere Leistungsfähigkeit als seine Vorgänger und dient der Modellierung von molekularen und katalytischen Prozessen. Er verfügt über 1272 CPUs, 2080 GB Arbeitsspeicher und 60 TB Festplattenspeicherplatz sowie eine Rechenleistung von 2-8 TFLOPS. „Jetzt können wir Projekte in Angriff nehmen, die vorher nur auf dem Papier standen“, schwärmt Prof. Ludwig.

Im Fokus der Berechnungen und Simulationen steht das Verständnis von katalytischen Reaktionen, wie zum Beispiel der photokatalytischen Wasserspaltung. Durch die Endlichkeit der fossilen Energieträger und die mit ihrer Verbrennung verbundenen Umweltprobleme ist die regenerative Energieerzeugung durch die unendliche Energiequelle Sonne ins Zentrum der Energiedebatte gerückt. In den Projekten „Light2Hydrogen“ und „Nano4Hydrogen“ soll der Energieträger Wasserstoff aus der photokatalytischen Wasserspaltung gewonnen werden. Auch die Speicherung und Freisetzung von Wasserstoff zur gewünschten Zeit am richtigen Ort ist von großer Bedeutung. Für diese Prozesse benötigt man geeignete Katalysatoren. Wichtig für den Start der Reaktionen sind auch Photosensibilisatoren, die in Verbindung mit Nanoteilchen aus Metall die nötige Ladung bereitstellen. Um die Reaktionen besser verstehen zu können, helfen Theorie und Modellierung. „Mit der neuen Rechenmaschine ist die Berechnung von größeren Photosensibilisatoren und Katalysatoren kein Problem mehr“, erläutert Ludwig. Das gesamte Forschungsprojekt zählt zur Initiative Spitzenforschung & Innovation in den Neuen Bundesländern.

Der neue Rechencluster steht auch Projektpartnern aus der Physik der Universität Rostock und dem Leibniz-Institut für Katalyse zur Verfügung. Die Anschaffung und Betreuung des Rechenclusters wurden vom Bundesministerium für Bildung und Forschung und dem Land Mecklenburg-Vorpommern gefördert.

Kontakt:
Universität Rostock
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät
Institut für Chemie
Prof. Dr. Ralf Ludwig
Fon: +49 (0) 381 498 6517
E-Mail: [ralf.ludwig\(at\)uni-rostock.de](mailto:ralf.ludwig(at)uni-rostock.de)

Presse+Kommunikation
Dr. Ulrich Vetter
Fon: +49 (0) 381 498 1013
Fax: +49 (0) 381 498 1032
E-Mail: [ulrich.vetter\(at\)uni-rostock.de](mailto:ulrich.vetter(at)uni-rostock.de)

[<< zurück zu: Pressemeldungen](#)

RSS-Feed abonnieren: [Übersicht über alle angebotenen Feeds](#)

letzte Änderung: 27.06.2011

[Feedback](#)



[nach oben](#)