Der Meister des virtuellen Labors

Autor(en): **Leiva, Leonid**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Horizonte : Schweizer Forschungsmagazin**

Band (Jahr): **24 (2012)**

Heft 94

PDF erstellt am: **29.03.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-967900

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.
Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.
Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Ein Dienst der *ETH-Bibliothek*
ETH Zürich, Rämistrasse 101, 8092 Zürich, Schweiz, www.library.ethz.ch

http://www.e-periodica.ch

Der Meister des virtuellen Labors

Michele Parrinello hat mit seinen Computersimulationen zuerst die Physik erneuert. Heute ist die Car-Parrinello-Methode in fast jedem Forschungsbereich anzutreffen. Sie dient auch der Herstellung neuer Medikamente. *Von Leonid Leiva*

Ein Porträt von Aneesur Rahman, dem Vater der computergestützten Physik, hängt schon seit fast drei Jahrzehnten an Michele Parrinellos Arbeitsplatz. Er hat das Bild des amerikanischen Physikers indischer Abstammung an jede neue Station seines Forscherlebens mitgenommen: von Messina über Triest, Zürich, Stuttgart und wieder Zürich bis nach Lugano. Rahman stand im Mittelpunkt von Parrinellos wichtigster Reise vor mehr als dreissig Jahren, die sein Schicksal als eines der besten Wissenschaftler auf dem Gebiet der Computersimulationen bestimmte.

1980 besuchte der junge Physiker Parrinello das Argonne National Laboratory in den Vereinigten Staaten. Geplant war ein dreimonatiger Aufenthalt, doch dann lernte er Rahman kennen – und blieb zwei Jahre. «Ich war damals ein traditioneller, mit Bleistift und Papier arbeitender theoretischer Physiker», erinnert sich Parrinello. «Rahman hat mich in die Vorzüge der computergestützten Berechnungen eingeweiht. Damit beeinflusste er meine Laufbahn entscheidend.» Rahman hatte schon seit den sechziger Jahren an Computersimulationen gearbeitet und eine Methode entwickelt, die man heute als Moleküldynamik bezeichnet. Damit konnten Vorgänge wie die Faltung von Proteinen Atom für Atom am Computer nachgebildet und studiert werden. Aber die Simulationstechnik hatte ein fundamentales Manko: Sie stellte chemische Bindungen zwischen Atomen als Sprungfedern dar, womit zwar die Schwingungen der Atome reproduziert werden konnten, aber keine chemischen Reaktionen. Bei diesen müssen nämlich die atomaren Bindungen aufgelöst und neu gebildet werden. Die modellhaften Federn in den ursprünglichen Simulationen können nicht ohne weiteres verschwinden und an einem anderen Ort wieder auftauchen. Für die Simulation musste man vielmehr die Verteilung der Elektronen um die Atomkerne beschreiben, welche die Stärke der Bindungen ausmacht.

Michele Parrinello

Geboren 1945 in Messina auf Sizilien, schloss Michele Parrinello sein Physikstudium in Bologna ab. Anfang der neunziger Jahre baute er am IBM-Forschungszentrum in Rüschlikon eine Forschungsgruppe für computergestützte Physik auf. Seit 2001 ist er Professor für computergestützte Wissenschaften an der ETH Zürich, seit 2011 auch an der Universität Lugano. Parrinello hat zahlreiche Ehrungen erhalten, darunter 2011 den Marcel-Benoist-Preis.

Durchbruch in Triest

Die Lösung fand Parrinello erst nach der Rückkehr an sein Heiminstitut in Triest. Dort begegnete er Roberto Car, der sich mit der Berechnung elektronischer Bewegungen befasste, der sogenannten Dichtefunktionaltheorie. Trotz den Unkenrufen vieler renommierter Physiker gelang Parrinello und Car durch die Kombination der Moleküldynamik und der Dichtefunktionaltheorie der Durchbruch. «Die Naivität war unsere grösste Stärke», sagt Parrinello. Die meisten Spezialisten waren damals überzeugt, dass der Einbezug der Elektronen die Simulationen über alle Massen verlangsamen würde, weil der Rechenaufwand drastisch stiege: Pro Rechenschritt für die Atomkerne mussten etwa tausend Schritte für die sich viel schneller bewegenden Elektronen hinzukommen. «Wir haben dieses Problem mit einer Reihe von

> «Die Naivität war unsere grösste Stärke.»

Rechentricks gelöst und so den Aufwand in Grenzen gehalten», sagt Parrinello. 1985 wurde ihre Arbeit in den «Physical Review Letters» publiziert, einem der bedeutendsten Physikjournale.

Der Erfolg der Publikation beruht auf der über die Disziplingrenzen der Physik hinaus reichenden Bedeutung der Car-Parrinello-Methode. Chemikerinnen, Biologen und Physiker wenden sie an, um schnelle und komplexe Prozesse besser zu verstehen. «Das ist der grosse Vorteil von Simulationen», sagt Parrinello: «Man kann Dinge am Computer ausprobieren, die im Labor zu aufwendig oder zu gefährlich wären. Oder man kann die Messdaten aus realen Experimenten interpretieren, weil man mit den Simulationen eine Art Zeitlupe und Mikroskop in einem zur Hand hat.» Kein Wunder, wird die Anwendung des Computers heute als dritte Säule der Naturwissenschaft betrachtet, neben Theorie und Experiment. «Für mich waren Computersimulationen das ideale Betätigungsfeld», sagt Parrinello. Er hat sich als Meister des sogenannten virtuellen Labors etabliert. Die Anwendungen der Car-Parrinello-Methode sind in fast jedem


Università della Svizzera italiana

Forschungsbereich anzutreffen. Sie reichen von der Entwicklung neuer pharmazeutischer Wirkstoffe oder Düngemittel über die Studie von technologisch wertvollen Materialien wie amorphem Silizium bis hin zum Verständnis der Umwandlung von Graphit zu Diamant.

Ein bescheidener Mann

Trotz zahlreichen Ehrungen, darunter dem Rahman-Preis, ist Parrinello ein bescheidener Mann geblieben, der seine Worte mit Bedacht wählt und massvoll urteilt. Er ist trotz verlockenden Angeboten nordamerikanischer Universitäten in Europa geblieben, wo er sich wohl fühle und genauso gut forschen könne. Seine Enttäuschung über den Zustand der Wissenschaften in Italien verbirgt er aber nicht. Hier habe leider die Grundlagenforschung für Politiker jeglicher Couleur keine Priorität. Er habe das Glück, in der Schweiz zu arbeiten, wo Wissenschaft als langfristige Investition in den allgemeinen Wohlstand angesehen werde. Dass dies so bleibe, dafür müsse man vor allem an den Mittelschulen sorgen. Die Abneigung vieler Jugendlicher gegen Mathematik etwa rühre von Mathematiklehrern her, die ihre Schüler mit monotonen Rechenaufgaben quälten. Man brauche bessere Lehrer.

Das sagt einer, der sich als Schüler kaum um Zahlen scherte: «Ich las viel in meiner Jugend, über den Schulkanon hinaus Werke von Dostojewski, Tolstoi und Tschechow. Zur Physik fand ich über eine Biographie des italienischen Physikers Enrico Fermi.» Allgemeinbildung schade nicht, aber heute sollten Schulen vor allem die Naturwissenschaften in den Vordergrund rücken. Der Mangel an naturwissenschaftlicher Bildung sei zuweilen eklatant. Für Politiker etwa seien fundierte Kenntnisse in Statistik unerlässlich. ■