

# 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 Terabyte 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

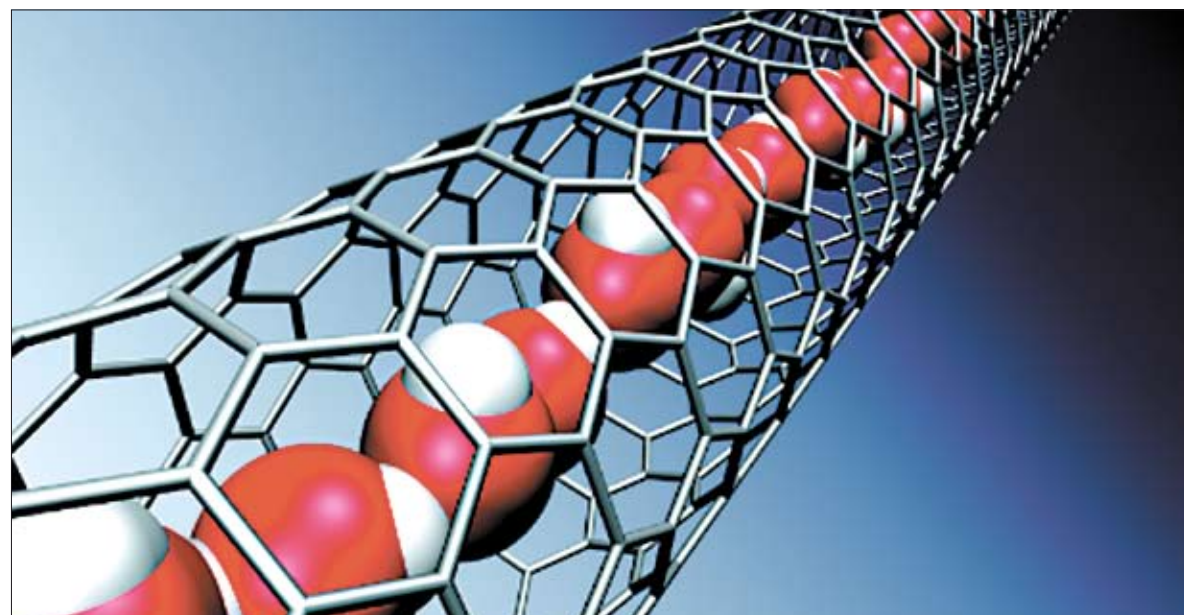
Via Computersimulation untersucht Wiener Physikerteam die Aggregatzustände von Wasser in Nanoröhren.

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 unbekannt 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](http://www.comp-phys.univie.ac.at/dellago)

## Special Wissenschaft & Forschung

**André Martinuzzi:** „Es ist eine politische Entscheidung, wie krisenfest wir unsere Marktwirtschaft gestalten.“

# Nachhaltiges Wirtschaften mit Augenmaß

**Sonja Gerstl**

Der Wirtschaftswissenschaftler André Martinuzzi hat (gemeinsam mit Michal Sedlako) im Auftrag des Ökosozialen Forums Österreich und gefördert vom Bundesministerium für Wissenschaft und Forschung die Studie *Bausteine einer krisenfesten Marktwirtschaft. Bestandsaufnahme und Abgrenzung des Forschungsbedarfs in den Wirtschaftswissenschaften* erstellt.

**economy:** Angesichts der Ereignisse der jüngsten Vergangenheit stellt sich die Frage: Kann es denn überhaupt eine krisenfeste Marktwirtschaft geben?

### Zur Person



André Martinuzzi leitet das Research Institute for Managing Sustainability der Wirtschaftsuniversität Wien.

Foto: privat

**André Martinuzzi:** Es ist eine politische Entscheidung, wie krisenfest wir unsere Marktwirtschaft gestalten. Wer jährliche Renditen von 15 Prozent oder mehr erzielen will, muss dafür ein gewisses Risiko in Kauf nehmen. Dieses Risiko ist umso höher, wenn die Renditen nicht aus realer Wertschöpfung, sondern aus Finanztransaktionen und Spekulationen stammen. Das haben private Anleger, Banken und Gemeinden in den letzten Monaten schmerzlich erfahren. Die aktuelle Finanz- und Wirtschaftskrise war daher kein „Betriebsunfall“, sondern ein systemischer Fehler, der künftig vermeidbar wäre. Dazu ist es jetzt dringend erforderlich, die Rahmenbedingungen anders zu gestalten.

**Welche Rahmenbedingungen beziehungsweise Kriterien müssen dazu erfüllt werden?**

Eine nachhaltige Wirtschaftsordnung muss individuelles Engagement fördern und gleichzeitig die Zukunfts- und Lebensfähigkeit von Umwelt, Gesellschaft und Wirtschaft sicherstellen. Ein Überwälzen von Risiken oder Kosten auf die Allgemeinheit oder auf künftige Generationen ist zu unterbinden, damit kein Wettbewerb „nach unten“ entsteht.

Während in den letzten Jahren die Regulierungsmöglich-



**Die Entwicklung einer krisenfesten Marktwirtschaft erfordert Grundlagenwissen, Gestaltungswillen und einen umfassenden politischen Diskurs.** Foto: Photos.com

keiten nationaler Regierungen abgebaut wurden, haben internationale Institutionen diese Funktionen nicht übernommen. Die weltweite Finanzkrise und ihre weitreichenden Folgen für die Realwirtschaft zeigen, dass ein Aufbau beziehungsweise Ausbau derartiger Institutionen dringend erforderlich ist.

**Wie sieht es in puncto Kompetenzverteilung aus? Also, wer hat welche Aufgaben zu übernehmen?**

Wenn wir Gewinne privatisieren und Verluste als Allgemeinheit tragen, gefährden wir den sozialen Zusammen-

halt und höhlen unsere sozialen Errungenschaften aus. So geht es also nicht. Gleichzeitig müssen wir die Illusion einfacher Steuerbarkeit hinterfragen und Prozesse der Selbstorganisation ins Blickfeld nehmen. Die Wirtschaftswissenschaften können in diesem Bereich von neuesten Erkenntnissen der angewandten Ethik, der Sozialpsychologie und der Systemtheorien profitieren, die der Komplexität sozialer Systeme gerecht werden.

**Ihre Studie versteht sich als Basis für ein zu installierendes Forschungsprogramm. Wie liegt Österreich im Vergleich**

**zu anderen Ländern? Welchen praktischen Nutzen würde die Politik daraus ziehen?**

Wir haben in Österreich sehr gute Forschungsprogramme zum nachhaltigen Wirtschaften auf betrieblicher und regionaler Ebene. Zu volkswirtschaftlichen Fragen gibt es bisher keine vergleichbaren Programme. Hier laufen wir Gefahr, den Anschluss an internationale Entwicklungen zu verlieren und in der politischen Debatte keine fundierten Positionen vertreten zu können. Das von uns konzipierte Forschungsprogramm soll Forschung mit Handlungsorientierung kombinieren, interdisziplinär angelegt sein und Impulse setzen, die Österreich im Blickpunkt haben, aber auch zur Erarbeitung europäischer und globaler Strategien beitragen. Ziel ist es, der österreichischen Politik wissenschaftlich fundierte, konkrete Handlungsempfehlungen zur Verfügung zu stellen, um künftige Krisen zu vermeiden und die gesellschaftliche Akzeptanz der Marktwirtschaft sicherzustellen.

## Fragen, die die Welt bewegen

Die weltweite Finanz- und Wirtschaftskrise hat zu einer Diskussion von nationalen und globalen Rahmenbedingungen und Kontrollmechanismen geführt.

Das derzeit verfügbare ökonomische Wissen und die darauf aufbauenden Instrumente der Wirtschaftspolitik sind weder für effektive Prävention noch für den erfolgreichen Umgang mit Krisen dieser Größenordnung ausgelegt. Daher sind Forschungsarbeiten erforderlich, um künftige Krisen zu minimieren oder zu vermeiden.

Im Projekt „Bausteine einer krisenfesten Marktwirtschaft“ wurde eine Bestandsaufnahme

wirtschaftswissenschaftlicher Theorien und Ansätze für eine krisenfeste Marktwirtschaft durchgeführt und daraus offene Forschungsfragen abgeleitet.

Die im Rahmen von Workshops und Interviews mit internationalen Experten erarbeiteten Forschungsfragen legen ein besonderes Augenmerk auf Praxisorientierung und politische Relevanz und sind in drei Themenfelder geteilt:

1. Verbesserung der Wirtschaftsrahmenordnung: Welche Mechanismen und institutionellen Voraussetzungen braucht das Weltfinanzsystem, um Umwelt- und Sozialwirkungen zu berücksichtigen?

Welche innovativen sozialen Sicherungsinstrumente weisen ausreichende Krisenfestigkeit auf? Wie kann Stabilität, Robustheit beziehungsweise Krisenfestigkeit von Wirtschaftssystemen abgeschätzt werden, um Aussagen über Trends und Effekte von Interventionen zu ermöglichen?

2. Dauerhafte Sicherung wirtschaftlicher, ökologischer und sozialer Ressourcen: Wie könnte eine an Beständen orientierte Volkswirtschaft (stheorie) aussehen, die auch Natur- und Sozialkapital berücksichtigt? Welche Ursachen und welche Folgen hat die dem aktuellen Wirtschaftssystem immanente Wachstumsdynamik?

In welchen Bereichen ist Versorgungssicherheit wichtiger als freier Handel und Economies of Scale?

3. Intelligenter Umgang mit komplexen sozialen Systemen: Wie können Systemtheorien, konstruktivistische Ansätze und verhaltensökonomische Ansätze als sozialwissenschaftliche Interventionstheorien genutzt werden? Wie sind die gesellschaftlichen Austauschprozesse zu gestalten? Welche Instrumente und Stimuli sind zu welchem Zeitpunkt in der Entwicklung und Verbreitung technischer und sozialer Innovationen sinnvoll oder erforderlich?

[www.sustainability.eu](http://www.sustainability.eu)

Special Wissenschaft und Forschung erscheint mit finanzieller Unterstützung durch das Bundesministerium für Wissenschaft und Forschung.

### Teil 53

Die inhaltliche Verantwortung liegt bei *economy*. Redaktion: Sonja Gerstl