



Die Welt der Moleküle

Virtuelle Experimente der Studenten mit Molekülen und ihren Wechselwirkungen am Rechner

Molekulardynamik-Simulationen stellen ein computergestütztes numerisches Verfahren zum Studium der Bewegung einzelner Atome in einem Molekül dar. Moderne Molekulardynamik-Softwarepakete sollen durch die Entwicklung einer studentenfreundlichen Nutzeroberfläche für die Ausbildung zugänglich gemacht werden. Über die interaktive Arbeit am Rechner gelangen die Studierenden zu hervorragenden Einsichten zur Molekülstruktur, zur Flexibilität dieser Strukturen und zum zeitlichen und räumlichen Ablauf von intermolekularen Wechselwirkungen.

Molekulardynamik(MD)-Simulationen basieren auf der Vorstellung, dass die quantenmechanisch zu beschreibende komplexe Wechselwirkung zwischen Atomen, die insbesondere zur Bildung von Molekülen führt, durch einfache Kräfte ersetzt werden kann, und dass die Bewegung der Atome nach den Gesetzen der klassischen (Newtonschen) Mechanik erfolgt. Bedingt durch die rasante Entwicklung der Rechentechnik haben MD-Simulationen in der Forschung Routinecharakter erlangt und sind in hervorragender Weise in der Studentenausbildung einsetzbar.

- Das erforderliche Hintergrundwissen muss nicht zwingend umfängliche Kenntnisse in der Quantenmechanik beinhalten.
- MD-Simulationen ermöglichen in einer didaktisch einmaligen Weise die Bildung von Molekülen aus Atomen und die vielfältigen intermolekularen Wechselwirkungen zu visualisieren.
- Bei geeignetem Zugang zu MD-Simulationen können die Studenten sich durch eigene Computereperimente ein intensives Bild molekularer Strukturen und ihrer Flexibilität in Raum und Zeit machen.

Die praktische Ausführung von MD-Simulationen ist für den Studenten jedoch nicht einfach. So erfordert die Durchführung einer Simulation die Bereitstellung einer ganzen Reihe von Eingabedaten. Auch die Notwendigkeit, die Simulation mitsamt allen Parametern als Konfigurationsdatei für das jeweilige MD-Simulationsprogramm zu formulieren und letzteres über die Kommandozeile aufzurufen, erfordert einen nicht unbeträchtlichen Aufwand. Nach erfolgreicher Simulation liegen die Ergebnisse in einer Reihe von Output-Files vor, deren Bedeutung sich erst nach Lektüre der Programm-Dokumentation erschließt.

Um Studenten die Möglichkeit zu geben, befreit von diesen technischen Hindernissen, Erfahrungen mit MD-Simulationen zu machen, wird zur Zeit eine grafische Benutzeroberfläche (graphical user interface, GUI) zur Durchführung und Auswertung von MD-Simulationen entwickelt. Zielgruppe des Projektes sind Studierende, die zwar über grundlegende Vorstellungen von MD-Simulationen verfügen, aber dazu keinerlei praktische Erfahrungen besitzen. Die Nutzer sollen die Möglichkeit erhalten, mit Hilfe des GUI Moleküle auszuwählen, die Simulationsparameter anzupassen, Simulationen durchzuführen und die Ergebnisse zu betrachten bzw. auszuwerten, ohne sich während dieses Prozesses mit Konfigurationsdateien, Dateitypen und Programmaufrufen beschäftigen zu müssen.

Außerdem soll das Programm den unerfahrenen Anwender davor schützen, mit einer unüberschaubaren Menge von frei zu wählenden Parametern konfrontiert zu werden.

Zielplattform des Projektes ist Debian GNU/Linux (und andere unixartige Betriebssysteme). Es wird vollständig in Python (interpretierte objektorientierte Programmiersprache) implementiert. Für die GUI verwenden wir eine Programmiersprache zur Erzeugung grafischer Benutzeroberflächen namens pygtk/gtk2.0. Zur eigentlichen MD-Simulation sowie der grafischen Aufbereitung der Ergebnisse wird bereits existierende Software genutzt (freie Software NAMD der University of Illinois, kombiniert mit dem Molekülvisualisierungs-Programm VMD). Wesentlich ist dabei die Flexibilität und Unabhängigkeit des Projektes, d.h. dass jede verwendete Software mit vertretbarem Aufwand gegen andere Programme ausgetauscht werden kann oder dem Nutzer interaktiv die Wahl überlassen wird.

Mögliche zukünftige Benutzeroberfläche des Programms (hier mit englischer Spracheinstellung). Über die diversen Bedienelemente lassen sich die Parameter der Simulation festlegen und die Simulation starten.

HU | Institut für Physik |

PD. Dr. habil. Volkhard May | may@physik.hu-berlin.de |

Holger Stephan | hstephan@physik.hu-berlin.de |

http://www-pbp.physik.hu-berlin.de/AG_May/

 **multimedia projekt**
HUMBOLDT-UNIVERSITÄT ZU BERLIN

