

ANGEWANDTE CHEMIE

FORTSETZUNG DER ZEITSCHRIFT »DIE CHEMIE«
HERAUSGEGEBEN VON DER GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

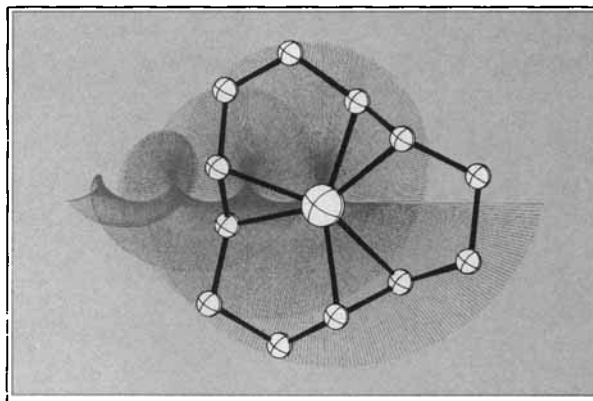
84. JAHRGANG 1972
HEFT 9
SEITE 369-446

Dieses Heft erscheint zur gemeinsamen Tagung des Vereins Österreichischer Chemiker und der Gesellschaft Deutscher Chemiker im Mai 1972 in Wien. Das Bild auf dem Titelblatt soll ein Auftakt zu den Beiträgen dieses Heftes sein, die sich mit der Anwendung des Computers in der chemischen Forschung befassen. Es zeigt im Hintergrund eine vom Computer sozusagen spielerisch produzierte Graphik und davor das (anhand einer vom Computer ernsteren Sinnes ausgegebenen Darstellung) gezeichnete Ergebnis der dreidimensionalen Röntgen-Strukturanalyse einer Komplexverbindung./Graphischer Entwurf: Weisbrod-Werbung, Weinheim.

Erstes Mai-Heft 1972

ANGEWANDTE CHEMIE

Zur gemeinsamen Tagung VÖCh – GDCh, Wien 1972



Verlag Chemie

Computer in der chemischen Forschung – ein Vorwort

Von Günther Wilke^[*]

Mit dem Erscheinen dieses Heftes der Angewandten Chemie könnte im Mülheimer Institut ein Jubiläum begangen werden: Vor 20 Jahren wurde das erste serienmäßig erhältliche IR-Spektrometer (Perkin Elmer) in Betrieb genommen. – Dieser Termin gilt vermutlich auch in einer ganzen Reihe anderer Forschungslaboratorien in Europa als Beginn einer neuen Ära, mit der eine Art Revolutionierung der chemischen Forschung einsetzte, die vor allem den Prozeß der Strukturermittlung entscheidend zu wandeln begann. – Der IR-Spektroskopie folgten sehr bald UV- und Raman-Spektroskopie, Massenspektrometrie und Gaschromatographie, NMR- und ESR-Spektroskopie und schließlich die Röntgen-Strukturanalyse. Als neueste Entwicklung ist die Photoelektronenspektroskopie zu nennen.

Unterteilt man die Problemstellungen im Rahmen der präparativen Chemie in die beiden Bereiche der Synthese und der Analyse, so wird deutlich, daß die genannten physikalischen Methoden vor allem den sekundären Bereich – die Analyse, d.h. insbesondere die Strukturermittlung – gefördert haben, so daß heute mit einer Schnelligkeit und Genauigkeit analysiert werden kann, die vor 20 Jahren unvorstellbar waren. Gleichzeitig erkennt man aber auch, daß sich im Vergleich hierzu die Methoden im primären Bereich der Synthese nur unwesentlich fortentwickelt haben. Der in die beiden Bereiche zu investierende Zeitaufwand hat sich durch diese Entwicklung vielfach umgekehrt, was sich leicht am Beispiel einer zu Gemischen führenden Olefinsynthese demonstrieren ließe. Ehemals erforderte die analytische Feinfraktionierung Tage, unter Umständen Wochen, d.h. unverhältnismäßig mehr Zeit als die Synthese, während heute die gaschromatographische Ermittlung der Zusammensetzung eine Frage von Minuten ist, wobei zusätzlich höchste Genauigkeit erzielt wird, die die Destillation nicht im entferntesten zu bieten vermochte.

Man könnte aus dieser Umkehr schließen, daß der Chemiker damit einem erheblichen Druck ausgesetzt wird, in schnellerer Folge als bisher Ideen für neue Synthesen zu produzieren. Das ist bis zu einem gewissen Grad auch tatsächlich der Fall, doch steht ihm hierfür ein Teil jener Kapazität zur Verfügung, die früher dem sekundären Bereich zu widmen war. Darüber darf man allerdings nicht vergessen, daß die physikalischen Methoden nicht nur die gewünschten Informationen liefern, die ehemals nur auf langwierigen chemischen Wegen zu erhalten waren, sondern darüber hinaus eine Fülle von Detailkenntnissen vermitteln, die vom Chemiker zusätzlich verarbeitet werden müssen. Verstärkter Informationsdruck entsteht in jedem Fall, und dieser kann nur durch engste Zusammenarbeit aller Wissenschaftler aus beiden Bereichen aufgefangen werden.

Der nächste Schritt der Entwicklung wird in den folgenden sechs Fortschrittsberichten von den verschiedensten Gruppen des Mülheimer Instituts geschildert: Die Einbeziehung eines relativ großen Computers in die chemische Forschung^[**]. Aus der Struktur des Instituts heraus ist ein System entstanden, das verschiedentlich als „Mülheimer System“ apostrophiert wird. Einige Angaben über das Institut scheinen daher angebracht zu sein. Das Max-Planck-Institut für Kohlenforschung umfaßt zwei Teile, das sogenannte Stamminstitut (seit 1914) und die selbständige Abteilung für Strahlenchemie (seit 1958). Die Hauptarbeitsrichtungen betreffen ganz allgemein die Organometallchemie, die Elektrochemie, die Katalyse sowie die Strahlenchemie, die Photochemie und die theoretische Chemie. Insgesamt sind rund 120 Wissenschaftler (einschließlich Doktoranden) beschäftigt.

Den ersten Anstoß zur Diskussion über die Anschaffung eines Computers gab die Gruppe der Röntgen-Strukturanalyse, die Schwierigkeiten hatte, ausreichende Rechenmöglichkeiten in Rechenzentren zu bekommen. Zusammen mit allen weiteren Interessenten wurde eine Arbeitsgruppe gebildet, die alle an den Computer im „off-line“- und insbesondere „on-line“-Betrieb zu stellenden Anforderungen ermittelte, aufeinander abstimmte und schließlich mit einer beträchtlichen Zahl von Computerherstellern diskutierte. Dabei zeigte sich sehr bald, daß einer der Hersteller den speziellen Wünschen im Zusammenhang mit den Anforderungen des „on-line“-Betriebs – auch unter Berücksichtigung eines erschwinglichen Preises – am ehesten gerecht zu werden vermochte. Die Entscheidung wurde von den Mitgliedern der Arbeitsgruppe gefällt und die Anschaffung durch die Max-Planck-Gesellschaft und zusätzlich aus Mitteln des Instituts finanziert.

Die seit Dezember 1968 mit dem System gemachten Erfahrungen werden in den folgenden Fortschrittsberichten aus der Sicht verschiedener Gruppen geschildert, wobei der präparativ arbeitende Chemiker allgemein den endgültigen Nutzen aus dem System zieht, selbst aber am wenigsten unmittelbar engagiert ist. Wiederum wurde somit der oben definierte zweite Bereich weiterentwickelt. Es bestehen jedoch gute Aussichten, daß das neue System auch dem primären Bereich nicht nur indirekt, sondern auch direkt zugute kommen wird, wenn es gelingt, den Computer zusammen mit analytischen Systemen, z.B. einem Gaschromatographen, unmittelbar mit einem Reaktor zu verbinden und im Sinne einer Rückkopplung Reaktionsparameter zu steuern. Damit würde die Arbeitsmethodik am Labortisch in geeigneten Fällen ganz außerordentlich bereichert. Erste Versuche dieser Art sind im Mülheimer Institut bereits mit gutem Erfolg gelaufen.

[*] Prof. Dr. G. Wilke
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
433 Mülheim/Ruhr, Kaiser-Wilhelm-Platz 1

[**] Die Möglichkeit, mit einem Computer Synthesewege zu ermitteln, wird hier nicht diskutiert. E. G. Corey und W. Todd Wipke haben dieses Thema in einem interessanten Aufsatz behandelt (Science 166, 178 (1969)).

Für den Theoretiker dagegen ist der direkte Zugang zu einer Rechenanlage bereits selbstverständliche Voraussetzung für ein erfolgreiches Arbeiten geworden.

Den folgenden Fortschrittsberichten seien einige Bemerkungen vorangestellt:

Die Berichte sind keineswegs nur für den Fachmann geschrieben worden. Auch der mit der Datenverarbeitung nicht vertraute Chemiker sollte sich für diese Probleme interessieren; selbst wenn er Details überliest, wird ihm schnell klar werden, welche Möglichkeiten sich eröffnen. Gewisse Wiederholungen ließen sich nicht vermeiden. An die hauptsächlich aus dem Englischen stammende Computerterminologie muß man sich gewöhnen. Einige Fachausdrücke sind in einem Anhang erklärt.

Abschließend ist eine Warnung angebracht. Die uns heute zur Verfügung stehenden Methoden der experimentellen Analytik können sehr leicht dazu verleiten, mit riesigem Aufwand Probleme bearbeiten und lösen zu wollen, die den Aufwand im Hinblick auf den tatsächlichen Erkenntniswert in keiner Weise rechtfertigen. Schnell kann es zu Überlastungen des analytischen Apparates kommen, ohne daß wirklich Neues erarbeitet wird. Mehr denn je ist eine kritische Beurteilung und Auswahl der mit diesen großartigen Hilfsmitteln zu bearbeitenden Probleme vonnöten. In der Begeisterung über unsere heutigen Möglichkeiten sollten wir schließlich denen unsere Reverenz erweisen, die ohne dieses Potential, d.h. vor 1952, hervorragende Leistungen erbracht haben.

Eingegangen am 18. November 1971 [A 865]

Computersysteme für die chemische Forschung

Von Engelbert Ziegler, Dieter Henneberg und Gerhard Schomburg^[*]

1. Einleitung

Wie in nahezu alle Bereiche unseres Alltags sind elektronische Digitalrechner auch in den Bereich der chemischen Forschung eingedrungen. Denkt man an die ersten Erfolge von *Corey* und *Wipke*^[1], die ein Computersystem zur Aufindung und Optimierung von Synthesewegen in der präparativen Chemie einsetzen, oder an die Entwicklung von Dokumentationssystemen für die chemische Literatur oder für Molekülspektren, so läßt sich erahnen, welche neuen Möglichkeiten dem Chemiker durch den verstärkten Einsatz von Computern in der Zukunft noch geboten werden und welche Auswirkungen auf den chemischen Arbeitsstil möglich sind.

Im folgenden soll jedoch weniger ein Bild der zukünftigen Entwicklung gezeichnet als vielmehr eine kurze Übersicht über die derzeitigen Einsatzbereiche von Digitalrechnern in der chemischen Forschung und über die dabei verwendeten Computersysteme gegeben werden. Sodann wird das am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim/Ruhr aufgebaute System beschrieben.

2. Einsatzbereiche in der chemischen Forschung

Die derzeit in der chemischen Forschung üblichen Anwendungen von Digitalrechnern lassen sich in zwei Einsatzbereiche unterteilen:

1. Rechenaufgaben („Off-line“-Betrieb) und

2. Kopplung von analytischen Meßgeräten mit einem Rechnersystem („On-line“-Betrieb).

2.1. Off-line-Anwendungen

Im Off-line-Betrieb werden Rechenprobleme aus der theoretischen Chemie, meist solche, die bei den verschiedensten Verfahren der MO-Theorie auftreten, sowie Probleme aus der Reaktionskinetik gelöst. Ferner fallen in diesen Bereich auch Rechnungen nach Programmen aller Art aus dem umfangreichen Gebiet der Spektroskopie und der Analytik sowie der Literatur- und Spektrendokumentation.

Viele dieser Rechenprogramme stellen hohe Ansprüche an die Leistungsfähigkeit und Kapazität eines Rechners. Als typische Anforderung kann eine Kernspeicherkapazität von 32 K Worten zu 36 (oder mindestens 32) Bits gelten. Außerdem ist der hohe Rechenzeitbedarf charakteristisch für derartige Off-line-Programme. Rechenzeiten von einer Stunde und mehr (bezogen auf den „Standard“ IBM 7094) sind durchaus keine Seltenheit. (Besonders rechenintensiv sind z.B. Auswertprogramme für die Röntgen-Strukturanalyse.) Ein weiteres Charakteristikum der meisten dieser Programme (Ausnahme: Dokumentationssysteme) ist der relativ geringe Anteil von Ein- und Ausgabeoperationen.

Sofern die Programme ausgetestet sind und Wartezeiten („turnaround“-Zeiten) von mehreren Stunden bis zu einigen Tagen in Kauf genommen werden können, eignen sie sich für den konventionellen „Batch“-Betrieb, in dem die Programme nacheinander abgearbeitet werden.

Für kleinere Hilfsrechnungen aller Art, wie sie in der täglichen Laborroutine anfallen können, ist jedoch ein schneller Zugang zum Rechner und eine ebenso schnelle Ergeb-

[*] Dr. E. Ziegler, Dr. D. Henneberg und Dr. G. Schomburg
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
433 Mülheim/Ruhr, Kaiser-Wilhelm-Platz 1