



Mathub.com: Modellieren in der Materialforschung

Seit Anfang des letzten Jahres gibt es die Seite mathub.com, die sich selbst als den „Brennpunkt für computergestützte Materialforschung“ sieht und ein Tor zu wissenschaftlichen Informationen über Modellierung und Informatik bieten möchte. Der Inhalt der Seiten ist kostenlos abrufbar, aber man muss sich unter Angabe des Namens, der Institution und spezieller Forschungsinteressen registrieren. Wie die Endung .com signalisiert, hat Mathub einen kommerziellen Hintergrund und wird von MSI Inc. betrieben, einem der Hauptproduzenten von Software für die Modellierung in den Bereichen Life Science und Materialwissenschaften. Allerdings gibt es kaum direkte Hinweise darauf. Mathub versucht sich als unabhängige, nichtkommerzielle Plattform darzustellen, und die Verbindung zu MSI wird nur indirekt anhand der großen Menge an Informationen über MSI deutlich. Man fragt sich jedoch wie in ähnlichen Fällen, was MSI wohl mit den gesammelten Daten der z. Zt. rund 1500 Registrierten vor hat.

Eduardo Gómez'."/>

Abbildung 1. Industrie-Themen in www.mathub.com

Mathub.com ist in einen Magazin- und einen Referenzteil gegliedert. Unter „Reference“ findet man eine große Menge nützlicher Informationen: Seiten, die die Modellierung von Materialien beschreiben sowie Links zu ausgewählten Anwendungsfeldern und expliziten Beispielen für die Anwendung computergestützter Methoden in der Materialforschung. Viele der Links verweisen auf Seiten außerhalb von Mathub. Etliche Seiten sind der molekularen Modellierung in der Lehre gewidmet, u. a. gibt es eine Liste ausgewählter Universitäten, die Kurse in „Computational Chemistry“ anbieten, und eine Zusammenstellung einiger Online-Kurse zu diesem Thema.

Auf vielen Seiten wird im Referenzteil die Geschichte der Modellierung behandelt. Man findet hier nicht nur einen interessanten historischen Überblick über die Entwicklung diverser Rechenmethoden in der Chemie, sondern auch über die Chemie im Allgemeinen. Weiterhin wird kurz die Geschichte der Rechenmaschinen vorgestellt. Besonders interessant ist der Überblick über die kommerziellen Anbieter von Modellierungsprogrammen, deren Fusionen und Allianzen in den letzten rund 20 Jahren. Weiter findet man auch einen Bericht über die „Molecular Modelling Community“ mit Referenzen zu den relevanten Gruppierungen der American Chemical Society und der Royal Society of Chemistry. Ein Link zur Fachgruppe Chemie-Information-Computer der GDCh fehlt leider ebenso wie das Journal of Computational Chemistry in der Liste der wichtigsten Fachzeitschriften.

Ein weiterer Abschnitt beschäftigt sich mit theoretischen Grundlagen der Rechenmethoden. Zwar gibt es Einträge

für viele relevante Stichworte von „Molekülgrafik“ bis „Mesoskopische Modellierung“, aber die angebotenen Informationen sind mit Ausnahme der Einträge über die Dichtefunktionaltheorie und andere quantenchemische Ansätze nur knapp und oberflächlich. Der Abschnitt wird durch ein Glossar vervollständigt. Ein nützlicher Ansatz, aber die angegebenen Definitionen sind mitunter zu vereinfachend.

Schließlich enthält der Referenzteil ein Softwareverzeichnis mit einer ausführlichen Sammlung von Links zu freien und kommerziellen Programmen diverser Hersteller für viele Anwendungsbereiche und einen Abschnitt über wichtige Chemie-Zeitschriften inklusive einer Datenbank mit über 1500 Literaturstellen aus dem Bereich der computergestützten Materialwissenschaft.

Der Magazin-Teil enthält – wie der Name nahelegt – Beiträge über verschiedene Themen, die für die Computerchemie im Allgemeinen und die „Community“ der Materialforscher im Besonderen von Interesse sind. Als dieser Beitrag geschrieben wurde, fanden sich hier ein aus der Financial Times adaptierter Artikel über die wachsende Bedeutung der Computerchemie in der chemischen Industrie und ein Feature über COSMOlogic, ein kleines Start-up-Unternehmen aus der Computerchemie. Weiterhin findet man Rezensionen von Büchern und Web-Sites sowie Tagungen, Stellenangebote und andere wichtige und nicht ganz so wichtige, aber unterhaltsame Informationen aus der Materialforschung und der molekularen Modellierung.

Mathub.com ist ein interessanter und offenbar gut gepflegter Einstiegspunkt für WWW-Ressourcen, nicht nur für das spezielle Gebiet der computergestützten Materialforschung, sondern auch für Computerchemie und Molekülmodellierung im Allgemeinen. Das Niveau ist unterhalb der Expertenebene angesiedelt, aber auch der Spezialist wird interessante Links und Referenzen finden. Ob Mathub tatsächlich sein anspruchsvolles Ziel erreichen kann, das Hauptportal für computergestützte Materialwissenschaften zu werden, bleibt abzuwarten. Ob sich der Zwang zur Registrierung, der nicht intuitive Name und die Verbindung zu MSI negativ auswirken, ist schwer vorhersehbar. Für diejenigen, die sich für computergestützte Chemie interessieren, ist die Site einen Besuch wert.

Wolfram Koch
*Gesellschaft Deutscher Chemiker,
Frankfurt a. M.*

Für weitere Informationen besuchen Sie:

www.mathub.com

oder nehmen Sie Kontakt auf mit:
info@mathub.com