

Zeitschrift: Horizonte : Schweizer Forschungsmagazin
Herausgeber: Schweizerischer Nationalfonds zur Förderung der Wissenschaftlichen Forschung
Band: - (1991)
Heft: 12

Artikel: Vom Baukasten zum Bildschirm
Autor: [s.n.]
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-967843>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 12.05.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Vom Baukasten zum Bildschirm

Jetzt hält der Computer auch in der Chemie Einzug. Mit seiner Hilfe können Chemiker nicht nur Strukturen und Eigenschaften von Millionen Molekülen durchrechnen, sondern die Moleküle auch dreidimensional darstellen. Schon ist die Simulierung chemischer Reaktionen ohne Reagenzglas denkbar.

Die Arbeit eines Chemikers ist der eines Architekten nicht unähnlich. Beide haben eine begrenzte Anzahl von Materialien – beim Chemiker sind es die Atome – zur Verfügung und bringen damit unendlich viele neue Strukturen hervor. Wie der Architekt so muss sich auch der Chemiker an gewisse Baupläne halten und die Dinge, die er schaffen will, zunächst im Modell darstellen: nur so, indem er ein neues Molekül in den Händen dreht und von allen Seiten betrachtet, kann er dessen Stabilität abschätzen und untersuchen, was passiert, wenn man das eine oder andere Atom austauscht oder das Molekül mit anderen Substanzen in Kontakt bringt. Zu diesem Zweck benutzen die Chemiker eine Art Baukasten, mit dem sich jedes beliebige Molekülmodell zusammenstecken lässt. Sehr erfolgreich sind zum Beispiel die «Dreiding-Kits» (so genannt nach dem schweizerischen Chemiker, der sie erfunden hat). Aber nachdem sie zwei Jahrzehnte lang in den Labors der ganzen Welt gute Dienste leisteten, sind diese Kits langsam überholt – durch den Computer.

Mit dem Baukasten ein Modell des menschlichen Hämoglobinmoleküls aus 37 000 Plastikugeln von Hand zusammenzubauen, war bislang eine Arbeit von einer Woche. Mit dem Computer wird dergleichen jetzt ganz leicht. Über das Telefonnetz ist der Rechner mit grossen Datenbanken wie «Chemical abstracts» (die über Informationen zu den zehn Millionen bis heute bekannten Stoffen verfügt) oder derjenigen von Brookhaven (die Pläne von Hunderten von Proteinen enthält) verbunden. Sobald er die entsprechenden Informationen eingeholt hat, startet der Chemiker ein Programm zur Modellerstellung und schon kann er auf dem Bildschirm, «dreidimensional», das Hämoglobin betrachten sowie nach Lust und Laune drehen, kippen oder auch verändern.

Ein gutes Beispiel für die Nutzenanwendung der

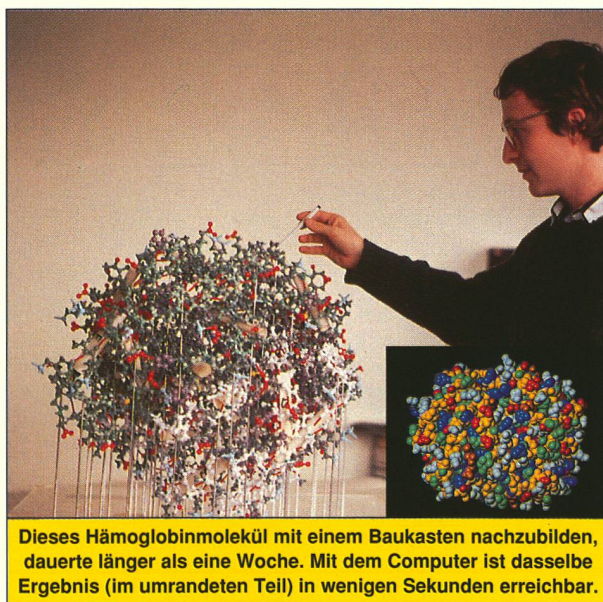
«computergestützten Chemie» ist das berühmte *Cyclosporin*, das bei Organverpflanzungen die Abstoßungsreaktion des Gewebes hemmt. Bevor diese Substanz synthetisiert wurde, hat man ihre Eigenschaften am Bildschirm simuliert.

Wie sehr die neue Technologie im Kommen ist, zeigt schon die Zahl der auf dem Markt erhältlichen Computerprogramme zur Molekülkonstruktion. Doch nur die wenigsten davon sind in der Lage, auch die Stabilität einer neuen Substanz und ihre Reaktionsbereitschaft im Kontakt mit anderen Stoffen anzuzeigen. Es gibt bloss allererste Anwendungen für die Organische Chemie, die Disziplin, die für die Analyse und Synthese von Medikamenten, Textilien, Kunststoffen, Aromen, Duftstoffen und Schmiermitteln zuständig ist.

Zu den Forschergruppen, die an der Entwicklung solcher Computerprogramme arbeiten, gehört auch diejenige von Prof. Jacques Weber an der Universität Genf. Er hat sich auf das vielversprechende Gebiet der *organometallischen Chemie* – die sogenannte «sanfte Chemie» – spezialisiert.

Allgemein gesagt, geht es darum, dass man gewissen organischen Substanzen ein Metallatom hinzufügt, wodurch sich ihre Eigenschaften manchmal radikal verändern. Auf diese Weise wird es möglich, neue Stoffe bei niedrigeren Temperaturen

und Druckverhältnissen zu erzeugen und erst noch weniger Abfälle zu produzieren. Nach der Synthese kann man das Metall sogar wieder rezyklieren. Durch die Verbindung eines Metallatoms mit einem organischen Molekül (das hauptsächlich aus Kohlenstoff, Wasserstoff, Sauerstoff und Stickstoff besteht) ändern drastisch die Energie und die räumliche Verteilung der Elektronen. Aber: Wo genau und in welchem Zustand befinden sie sich? Dieses Wissen ist für den Chemiker unerlässlich, da jegliche chemische Verbindung eine räumliche und energetische Modifikation



Dieses Hämoglobinmolekül mit einem Baukasten nachzubilden, dauerte länger als eine Woche. Mit dem Computer ist dasselbe Ergebnis (im umrandeten Teil) in wenigen Sekunden erreichbar.

der Elektronen voraussetzt. Wenn man mit Computerhilfe voraussagen kann, wie sich die Elektronenwolke einer organischen Substanz bei der Verbindung mit einem Metall verhält, lassen sich tagelange Labortests einsparen. Die Tatsache, dass es speziell hierfür noch so gut wie keine Software gibt, zeigt allerdings an, wie schwierig sich das Problem gestaltet. Zum Beispiel benötigt man für derlei Aufgaben enorm leistungsstarke Rechner und zwar für beträchtliche Rechenzeiten: so muss der Supercomputer Cray-2 der ETH Lausanne oft Hilfe leisten.

Der Genfer Gruppe, die mit den von Claude Daul geleiteten Chemikern an der Universität Freiburg zusammenarbeitet, ist es bereits gelungen, zwei der bei organo-

metallischen Substanzen häufigsten Reaktionen (elektrophile und nukleophile Additions- oder Substitutionsreaktionen) mit dem Computer zu simulieren. Die Ergebnisse sind in das leistungsstarke Programm MOLCAD eingeflossen.

Diese Software ist in der akademischen Welt ein wahrer Renner. Geschaffen an der Universität Darmstadt (Deutschland), wurde sie im Zuge des Fortschritts auf dem Gebiet der Informationstechnologie und Theorie von Jahr zu Jahr perfektioniert. Möglicherweise gelangt man mit Hilfe eines solchen Instruments bald dahin, die Form eines neuen Moleküls, seine Eigenschaften, Reaktionen und den Weg, wie es synthetisiert wird, genau zu beschreiben. 

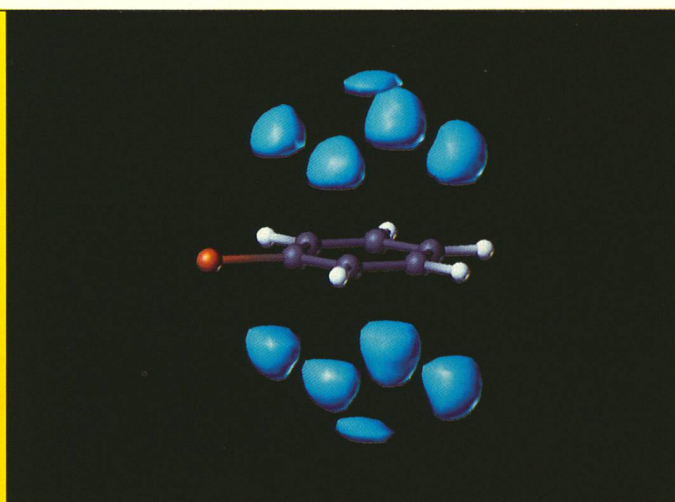
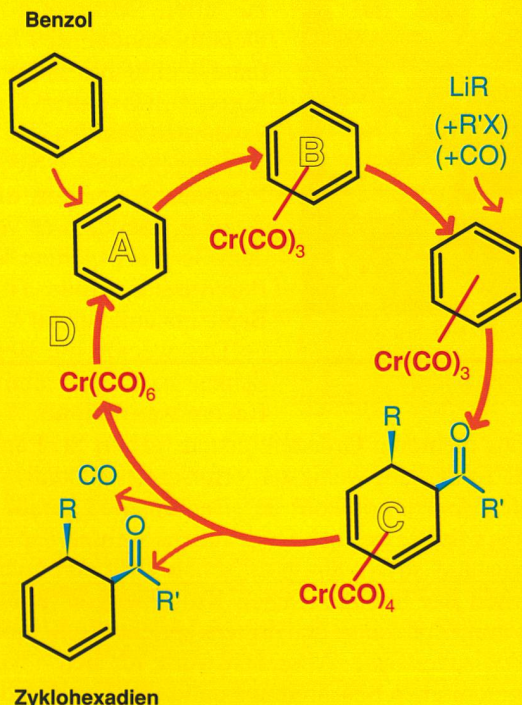
Sanfte Synthese

Die gegenwärtig sehr gefragte organometallische Chemie ermöglicht es, Substanzen bei niedrigeren Temperaturen und Druckverhältnissen als sonst zu synthetisieren. Das bringt Energie- und Abfallsparungen und verringert die Umweltbelastung.

Das untenstehende Beispiel, eine Entdeckung aus dem Labor von Prof. Peter Kündig (Universität Genf), betrifft die Umwandlung von Benzol in Zyklohexadien, das als Ausgangssubstanz bei der Herstellung vieler organischer Verbindungen Verwendung findet.

Normalerweise reagiert Benzol (A) nicht mit Substanzen, die Lithium (Li-R) enthalten. Doch wenn eine chromhaltige Verbindung $[\text{Cr}(\text{CO})_3]$ hinzutritt, wird das Benzol sehr reaktionsfreudig (B) und verbindet sich leicht mit der Lithiumgruppe (C). Danach lässt sich das Chrommolekül abspalten und übrig bleibt das Zyklohexadien.

Anschliessend kann dieselbe Chromgruppe das nächste Benzolmolekül bearbeiten.



Oben: Computerdarstellung eines Chlorbenzolmoleküls. Die kleinen blauen Wolken zeigen die gegenüber einer elektronenreichen Substanz reaktiven Zonen an.

Unten: Dem Chlorbenzol wurde eine chromhaltige Metallverbindung $[\text{Cr}(\text{CO})_3]$ hinzugefügt. Die Reaktivitätszone hat sich deutlich vergrössert. Je stärker die Wolke ins Orangefarbene geht, desto besser fällt die Reaktion aus. Durch die Analyse solcher Darstellungen kann ein Chemiker langwierige Laborversuche und damit wertvolle Zeit sparen.