

Angehende indische Metallurgin setzt Simulationen als virtuelles Mikroskop ein

Frau Uma Gupta kommt vom Indian Institute of Technology aus der Millionenstadt Bombay und studiert dort im dritten Jahr Metallurgie; für zwei Monate und 18 Tage, wie sie exakt berichtet, war sie im Juni und Juli am Institut für Theoretische Physik als IAESTE-Praktikantin zu Gast und arbeitete dort unter der Obhut von Prof. Peter Blöchl und Dr. Jürgen Noffke an einem gemeinsamen Projekt mit Prof. Albrecht Wolter und PD Dr. Gerhard Heide vom Institut für Nichtmetallische Werkstoffe, einer Simulation eines der ältesten handwerklich-technischen Prozesse der Menschheit: „Was geschieht beim Kalklöschchen?“

Das Kalklöschchen gehörte bis in die jüngere Vergangenheit zum täglichen Handwerk beim Hausbau: Gebrannter Kalk wird mit Wasser angerührt und wandelt sich zu gelöschtem Kalk („Kalkhydrat“) um. Heute geschieht das nur noch industriell in geschlossenen Anlagen. Unter definierten Bedingungen erhält man ein normgerechtes Produkt, aber nicht immer in der gewünschten Konstanz. Ohne eine verfeinerte Modellvorstellung, wie die Reaktion mikrochemisch abläuft, kann hier kein Fortschritt erzielt werden. Dies ist nicht nur eine interessante wissenschaftliche Aufgabe, sondern auch regional bedeutsam, da mit der Fels-Gruppe Deutschlands zweitgrößter Kalkproduzent im Harz ansässig ist.

In der Simulation berechnen die Physiker, wie der Angriff des Wassers auf das Kristallgitter des Calciumoxids von statten gehen könnte. „Unser Ziel ist, die chemischen Vorgänge so realitätsnah in der Simulation nachzubilden, dass aus ihr sogar die Veränderung der Mikrostruktur des Materials erklärbar wird“, sagt Professor Blöchl.

Daher nutzte Frau Gupta einen schnellen Rechner als virtuelles Mikroskop: „Das Programm rechnet aus, wie sich aufgrund der Anziehungs- und Abstoßungskräfte Elektronenwolken und Atomkerne bewegen und neue Verbindungen eingehen. Und weil letztlich die Natur immer zum Energieminimum strebt, müssen wir unsere Rechnungen so lange laufen lassen, bis ein energetisches Minimum erreicht ist, dann ist die Verbindung stabil“, erklärt sie. Ihr täglicher Ansprechpartner in allen wissenschaftlichen Fragen ist Dr. Jürgen Noffke, der sie mit dem theoretischen Hintergrund der Software vertraut



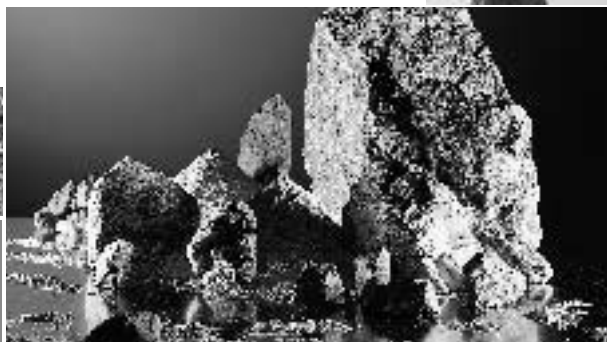
(v.l.n.r.) Prof. Dr. Peter Blöchl, Frau Uma Gupta, PD Dr. Gerhard Heide, Dr. Jürgen Noffke, Prof. Dr. Albrecht Wolter.

machte. „Frau Gupta hat ein sehr schnelles Auffassungsvermögen. Es ist eine Freude, mit ihr zusammen zu arbeiten“, sagt der Wissenschaftler.

Und wie gefällt es Frau Gupta in Clausthal? Bei ihrer Abreise herrschten in Bombay vierzig Grad Celsius, da war der freundlich kühle Oberharz ein kleiner Schock für sie. Großes Glück, berichtet Frau Gupta, hat sie mit ihrem Domizil, der Akademischen Vereinigung Kristall - einem bunt gemischten Völkchen weit gereister deutscher Studentinnen und Studenten sowie vieler ausländischer Gäste auf dem Haus - Russen, Georgier, Thailänder. Und reiselustig ist sie selbst - wenn sie denn schon einmal den weiten Flug in einen anderen Kontinent antrat: Spontan war sie mit einigen neu gefundenen Freunden für ein Wochenende in Venedig. ■



Einzigartig in Europa.



Fels-Werke GmbH
Verkauf und Anwendungstechnik Fels Kalkprodukte
Geheimrat-Ebert-Straße 12 | D-38640 Goslar
Tel. (0 53 21) 703-400/401 | Fax (0 53 21) 703-424 | www.fels.de

■ Der devonische Kalkstein der Fels-Werke ist von besonderer Qualität. Die Kombination von chemischer Reinheit, Homogenität und Mächtigkeit machen unseren Rohstoff so einzigartig.

■ Die unterschiedlichsten Branchen setzen auf unsere hochwertige Qualität. Hierzu zählen insbesondere der Umweltschutz mit der Trinkwasseraufbereitung, Abwasser- und Rauchgasreinigung, die Stahl- und Baustoffindustrie, die chemische Industrie sowie die Glas- und Lebensmittelindustrie.

■ Unsere Anwendungstechniker beraten Kunden nicht nur bei der Auswahl und Anwendung der Kalkprodukte, sondern führen auch Betriebsversuche mit Labor- und Großgeräten durch. Sprechen Sie mit uns.

Fels
Kalk fürs Leben