



Der Web-Browser als Werkzeug für die Quantenchemie

Quantenchemische Programme haben ihre Tücken und ihre Eingabedateien sind oft kryptisch. Man muss nicht nur die Akronyme im Überblick haben, sondern kämpft in der Regel auch mit der allgemeinen Befehlssyntax: „Kommt da jetzt ein Komma oder ein Gleichheitszeichen hin?“ Das Resultat ist immer das gleiche: Programmabstürze, vergeudete Rechenzeit und so weiter.

WebMO will diesem Dilemma ein Ende bereiten. Auf der Basis von Netscape & Co. wurde ein graphisches Front-End entwickelt, das dem Anwender das Leben leichter machen soll. Das Molekül kann einfach mit der Maus gezeichnet werden, dann wird die quantenchemische Software ausgewählt (bisher werden Mopac, Gaussian und Gamess unterstützt) und anschließend wird der Input mit Hilfe von Pulldown-Menüs

generiert. Einfach anklicken und fertig. Man kann sogar die Rechnungen über den Browser abschicken und verwalten. Ist die Rechnung schließlich fertig, werden die wichtigsten Ergebnisse aus den Outputs extrahiert und dem Anwender auf dem Tablett serviert. Molekülenschwingungen können graphisch anschaulich gemacht werden und mit dem kommerziellen WebMO lassen sich auch noch die Orbitale, das elektrostatische Potential usw. schön bunt auf dem Bildschirm darstellen (Abbildung 1). Was will man mehr?

Aber für welche Klientel ist dieses Produkt eigentlich gedacht? Als ich auf die Idee kam, Pyridin-N-oxid zu berechnen – fürwahr nicht das exotischste aller Moleküle – erlebte ich so manche Überraschung. So bietet der Moleküleditor die sinnvolle Möglichkeit, die gezeichneten Strukturparameter für die Eingabegeometrie auf vernünftige Startwerte zu setzen. Wie das gemacht wird, ist leider nicht erkennbar. Und warum das Stickstoffatom als sp^3 -hybridisiert angenommen wird, bleibt mir auch ein Rätsel. Also kam ich auf die Idee, eine voroptimierte Struktur als xyz-Datei zu importieren. Das Programm meldet zwar „Molecule successfully imported“ aber finden kann ich meine Struktur nirgendwo. Wie komme ich also zu einer vernünftigen Startgeometrie? Gar nicht, ich lasse meine gezeichnete Struktur einfach so wie sie ist und mache weiter. Um nun eine optimierte Struktur zu erhalten, will ich eine B3LYP/cc-pVDZ Strukturoptimierung mit Gamess durchführen. Also: „Gamess“ und „Geometry

Optimization“ auswählen. Aber wo wähle ich mein Dichtefunktional aus? Wahrscheinlich unter „Theory / other“ – das geht auch nicht und ich dachte, dass ich ein Standardverfahren gewählt hätte. Als nächstes ist der Basissatz dran. Auch cc-pVDZ steht nicht im Pulldown-Menü, dafür finde ich da Einträge wie „Basic: 3-21G“ und „Routine: 6-31G(d)“. Nun ja, 6-31G(d) wird immer noch viel verwendet, aber ein Eintrag „Basic“

6-31G(d)“ wäre wohl angemessener gewesen. Wie komme ich jetzt also zu meiner cc-pVDZ Basis? Nicht einmal über „Basis set / Other“, da cc-pVDZ nicht in der Basissatz-Bibliothek von Gamess enthalten ist. Hat WebMO denn nicht einmal eine eigene Basissatz-Bibliothek?

Nun gut, dann gebe ich eben 6-31G(d,p) ein und verwende sphärische d-Funktionen. Das Akronym dafür suche ich aus dem Gamess-Manual heraus. Moment mal, sollte mir das nicht gerade durch das Front-End erspart bleiben? Und wie komme ich letztendlich zu meiner DFT-Rechnung? Zum Glück gibt es den Knopf „Preview Input File“, da kann ich nun endlich die Eingabedatei so editieren, wie ich möchte und auch mein B3LYP eintragen. Aber wo für brauche ich dann noch WebMO, wenn ich letztendlich doch wieder meine Inputs per Hand schreibe? So könnte ich fortfahren und über diverse Unzulänglichkeiten bei der Aufarbeitung des Outputs lamentieren, über Probleme beim Abschicken der Rechnungen und anderes berichten. Als Default-Methode ist RHF/3-21G beim besten Willen nicht mehr zeitgemäß. Die Visualisierung der Orbitale und elektrostatischen Potentiale ist ansprechend, aber das leisten viele Public-Domain-Programme auch. Und unter Netscape 6.2 läuft WebMO nicht einmal stabil.

Fazit: Die Idee ist zweifelsohne gut, wenn auch nicht neu, und ein leistungsfähiges Front-End ist für viele Anwender sicherlich sehr hilfreich. Wenn aber eine Front-End-Software nicht einmal in der Lage ist, Standardrechnungen zu handhaben – für die man eigentlich kein Front-End bräuchte – dann bleibt die Frage offen, wofür man als akademischer Nutzer US\$ 995 zahlen soll. Ich zumindest kaufe mir von dem Geld lieber einen neuen Rechner und schreibe meine Inputs weiter per Hand.

Guntram Rauhut
Universität Stuttgart

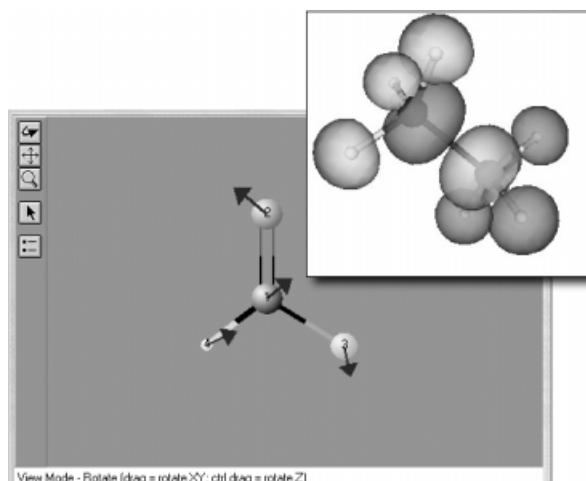


Abbildung 1. Veranschaulichung von Schwingungen und Molekülorbitalen durch WebMO.

Für weitere Informationen besuchen Sie:

<http://www.webmo.net>

oder nehmen Sie Kontakt auf mit

polik@webmo.net