

Mai
Ex
2014

28.08
Si
14

39.10
K
19

39.10
K
19

(210)
At
85

15.99
O
8

r
02/14



Die Chemie hinter

35
Br

eaking

56
Ba

d

Interview mit Prof. Hünenberger

mg Seit 2011 ist Philippe Hünenberger Professor für Computersimulation von molekularen Systemen. Seit letztem Semester hält er neu die Informatik-I-Vorlesung. Was bewegt einen Chemiestudenten dazu am Schluss auf Informatik umzusteigen? Dies und vieles mehr erfahrt ihr in diesem Interview.

Was war Ihr erster Computer und welches das erste Programm, das Sie geschrieben haben?

Der erste Computer den ich hatte, war ein ZX81 - nur 16 Kilobyte RAM (81 steht für das Jahr 1981).

Ein paar Jahre später bekam ich einen Apple II. Zum Beispiel habe ich damals ein Programm geschrieben, das mit einem Zufallsgenerator acht Münzen tausendmal „geworfen“ hat und dann für die Verteilungen von Kopf und Zahl eine Gausskurve generiert hat. Oder ein Programm, das fünf platonische Polyeder auf dem Bildschirm dargestellt und rotiert hat. Ich habe auch eigene Videospiele erfunden und programmiert – auf Basic, Pascal und später Assemblersprache.

.....
Wieso haben Sie sich für das Chemiestudium entschieden und nicht etwa für Informatik?

Informatik hat mich immer interessiert. Im Gymnasium war es dann eher Mathematik und Physik (und Philosophie). Chemie kannte ich von viel frü-

her. Mein Vater war Chemielehrer im Gymnasium und hat mir Material für Versuche nach Hause gebracht. Einmal habe ich einen Schmelztiegel voll geschmolzenem Schwefel umgekippt – es hat schön gebrannt und das ganze

Haus musste wegen dem Schwefeldioxid für eine Weile evakuiert werden.

«Das ganze Haus musste evakuiert werden.»

Eigentlich habe ich mich für das Chemiestudium entschieden, weil ich das Gefühl hatte, nach dem

Studium leichter eine Arbeit zu finden. Die Überlegung war wie folgt: Was wird jemand der Mathematik studiert? Mathematiklehrer. Was wird jemand, der Physik studiert? Physiklehrer. Aber Chemiker, die braucht man in der Schweiz und nur die finden einen echten Job. Rückblickend war das kein schlechter Entscheid, aber ein dummer Weg, sich zu entscheiden. Wenn ich noch einmal wählen müsste, würde ich mich für Physik entscheiden – kompetente und motivierte Leute finden immer einen passenden Job, egal auf welchem Gebiet. Am Ende des Chemiestudiums war ich dann jedoch sehr deprimiert. Chemie in

Textbüchern habe ich immer faszinierend gefunden - organische Synthese ist schlussendlich auf dem Papier wie ein Legospiel für Erwachsene - aber die Arbeit im Labor fand ich extrem frustrierend. Nach einer langen Runde in der Armee bin ich dann zum Entschluss gekommen, mein Interesse für Mathematik, Physik und Informatik mit meiner Ausbildung in der Chemie zu kombinieren - und computergestützte theoretische Chemie war die Antwort.

.....
 Sie haben uns einmal in einer Vorlesung Ihren Notenspiegel aus Ihrer Zeit an der Uni gezeigt. Sie hatten fast nur Bestnoten. Wie haben Sie das gemacht?

Das war zum einen eine Menge Arbeit, aber auch einfach die Freude am Lernen. Ich fühle mich glücklich, wenn ich etwas gründlich verstehe. Etwas, dass ich immer wieder erwähne ist „Knowledge Integration“. Man bekommt, wenn man etwas Neues an der Uni lernt, eine gewaltige Menge an Informationen. Es ist ein wichtiger Schritt, diese am richtigen Ort im Gehirn einzuordnen und die richtigen Verknüpfungen zu erstellen. Das



nimmt viel Zeit in Anspruch, bringt aber auch viele, kleine Aha-Erlebnisse. Die Frage ist auch, ob man die Motivation hat, in seinem Gebiet einer der Besten zu sein. Wenn man das will, dann muss man auch entsprechend viel Arbeit hineinstecken. Die Noten waren eigentlich nicht das Wesentliche für mich. Als Perfektionist macht es mir immer Freude etwas bis ans Ende zu verarbeiten.

.....
 In den rechnergestützten Wissenschaften wird die meiste Arbeit ja vor dem Computer erledigt. Wann haben Sie das

letzte mal in einem Labor gearbeitet?

Das war im Studium. [sucht sein CV auf dem Computer] Was ich bis heute nicht gelernt habe, ist das Zehnfingersystem. Ich schreibe noch wie ein altmodischer Polizist - schnell genug, aber nur mit sechs Fingern.

Also, das war 1991. Meine Diplomarbeit. „total asymmetric synthesis of 3-amino-3-deoxy-L-talose and derivatives.“ Seitdem habe ich nie mehr in einem Labor gearbeitet und ich

vermisse es absolut gar nicht. Das war einfach nicht mein Ding. Ich bewundere aber gute Experimental-Chemiker. Experimentelle Intuition ist eine beeindruckende Kompetenz. Auch sie erreicht man nur langsam und mit grosser Mühe und Anstrengung – und es macht wahrscheinlich viel Spass, dort anzukommen. Vielleicht hatte ich einfach nicht genug Geduld, um mir diese Kompetenz anzueignen.

.....
Was macht man, wenn man einen Abschluss in Computational Chemistry hat?

Die meisten Abgänger bei uns als PhD haben hervorragende

Wissenschafts- und Computer-Kompetenzen. In der Industrie gibt es im Moment leider nur wenige Stellen. Akademische Forschung ist sehr kompetitiv und stellt hohe Anforderungen, insbesondere im Bezug auf z.B. Arbeitszeiten, geographische Mobilität und Familiengründung.

Die Wissenschaftler, die aus unserer Gruppe kommen, sind aber auch sehr gefragt bei Banken, Versicherungen, Finanzfirmen und Software-Unternehmen. Diese schätzen die Kombination aus logischem Denken, Hartnäckigkeit und Computerkompetenz.

«Reine Finanzspekulation ist meiner Meinung nach Diebstahl.»

Aber wo wir vorher gerade über den Sinn geredet haben: Es ärgert mich, dass unsere Gesellschaft die besten Köpfe für Handel und Finanzen verwendet, wenn meiner Meinung nach Denken, Kenntnis und Bildung schlussendlich viel wichtiger sind vom menschlichen Standpunkt her. Versteht mich nicht falsch: Banken und Versicherungen sind natürlich sehr nützlich. Aber reine Finanzspe-

kulation, die Geld aus „Nichts“ schafft ist meiner Meinung nach bloss (höchstkluger) Diebstahl.

.....
Wie sieht ein Arbeitstag bei Ihnen aus?

Ich fange um etwa sieben Uhr mit der Arbeit an – morgens ist meine Lieblingszeit - und verlasse das Labor dafür eher früh. Wenn man kreativ arbeiten will, ist zehn Prozent mehr Arbeit nicht unbedingt zehn Prozent mehr Output. Der Output ist bei Arbeit in meinem Bereich auch praktisch nicht messbar. Man misst zwar das Geld, das jemand mit seiner Forschung anzieht oder die Anzahl Publikationen. Jedoch: je mehr ich Forschungsgesuche und wissenschaftliche Artikel publiziere, desto weniger kann ich direkt an meiner Forschung

arbeiten und denken. Semesterevaluationen von Studenten sind auch eine Art Messung. Es ist mir aber wichtiger eine gewisse Ethik zu verfolgen, als bloss meine Popularität bei den Studenten zu optimieren – obwohl ich ihre Kommentare und Kritiken sehr ernst nehme.

Ich habe im letzten Herbstsemester viel Arbeit in meine neue Informatikvorlesung investiert. Es hat mir aber auch extrem viel Freude gemacht, die Empfänglichkeit der erstsemestrigen Chemiestudenten entgegenzunehmen, sowie selber mein eigenes Gebiet nochmals ein bisschen weiter zu vertiefen. Im Durchschnitt finde ich die ETH in der Hinsicht Qualität versus Menge eher vernünftig: Qualität wird hier als wichtiger betrachtet als Menge, und Menschen wichtiger als Regeln. Nicht immer, aber sehr oft.

Was machen Sie in Ihrer Freizeit?

Ich gehe ein paar mal pro Woche joggen, verbringe viel Zeit mit meinen Kindern, gehe mit meiner Frau wandern, Badminton spielen oder in Seilparks klettern, und lese auch sehr gerne. Ich treffe mich oft mit Freunden – wenige aber nahe Freunde. Ehrlich gesagt geht auch ein wesentlicher Anteil meiner „Freizeit“ in die „Arbeit“. Das ist aber meine bewusste Lebenswahl: Erkenntnis und Wissenschaft

machen mir einfach Spass.

Was war Ihre Lieblingsvorlesung an der Uni?

Ganz klar Mechanik. Wir hatten einen ausgezeichneten Professor in diesem Fach. Der hat mich total inspiriert. Er hat immer verrückt schnell an der Tafel geschrieben (sogar während der Pause!) und mit felsenfester Begeisterung für sein Gebiet unterrichtet. Ich habe gefunden, der Typ ist einfach genial – so möchte ich einmal sein. Nicht alle waren jedoch so begeistert von ihm, denn er stellte auch ausserordentlich hohe Anforderungen.

Können Sie uns erklären an was Sie forschen?

Ich mache Computersimulationen von (bio)chemischen Systemen. Man erstellt ein molekulares System, indem man den einzelnen Atomen Koordinaten und Geschwindigkeiten zuteilt. Wenn ich nun die Kräfte zwischen den Atomen anhand eines sogenannten Kraftfelds abschätzen kann, dann kann ich die Dynamik, das heisst die Zeitentwicklung des Systems berechnen. Um ein einfaches Beispiel – unter vielen anderen – zu nennen, haben wir einmal Essigsäure untersucht. Normalerweise nimmt die dielektrische Permittivität einer Flüssigkeit ab, wenn man die Temperatur erhöht. Bei

Essigsäure gilt aber genau das Gegenteil. Der Grund für diese Besonderheit wird aus den Simulationen klar: Essigsäure bildet bei tiefen Temperaturen Dimere, die sich bei hohen Temperaturen auflösen. Bei der rechnergestützten Chemie haben wir den Vorteil, dass wir uns die Atome und deren Bewegungen tatsächlich „ansehen“ können.

Ich forsche insbesondere viel an Kohlenhydraten. Sie sind extrem wichtig - nicht nur für gemütliche Holzfeuer, langsame Zucker und Süßigkeitengier Erfüllung - auch die Kommunikation zwischen Zellen hängt stark von den Wechselwirkungen zwischen Proteinen und Kohlenhydraten an den Zelloberflächen ab.

.....
Nach Ihrem PhD haben Sie ein Postdoc in den USA gemacht, was sind die Unterschiede zwischen UCSD und der ETH?

Obwohl ich normalerweise gegenüber Klischees eher misstrauisch bin, trifft das, was man oft über die Unterschiede zwischen der Wissenschaft in den USA und in Europa hört, recht gut zu. In Amerika habe ich gelernt, mich besser zu „verkaufen“, was für einen akademischen Wissenschaftler heutzutage nicht unwichtig ist. Als Europäer hat man eher die Tendenz bescheiden zu sein. Es gibt aber einen

guten Mittelweg. Selbstvertrauen und Begeisterung sind mit Ehrlichkeit und Bescheidenheit eigentlich gar nicht inkompatibel. Eine gewisse tendenzielle Oberflächlichkeit hat mich in den USA aber gestört.

.....
Wenn Sie uns Chemiestudenten einen Ratschlag geben können, was wäre der?

Das hängt ganz von Ihrem persönlichen Ziel ab. Es gibt keine universellen Ratschläge – oder vielleicht nur einen: „Erkenne dich selbst“ (γνώθι σεαυτόν). Am schlechtesten ist es, wenn man gar keine Ziele hat oder Ziele verfolgt, die nicht die eigenen sind und ein Bild von sich selbst verkauft, das nicht echt ist. Wenn man seine Ziele kennt, wenn man seine Stärken und Schwächen kennt, ermöglicht dies einem, seinen eigenen Weg zu finden. Insbesondere: welche von unseren Schwächen wollen wir bekämpfen und welche annehmen – was manchmal eine sehr vernünftige Lösung sein kann.

Ich brauche Stabilität, enge Familien- und Freundschaftsbeziehungen, eine Menge Einsamkeit und eine sinnvolle - wenn auch extrem anspruchsvolle - Arbeit. In diesem Sinn bin ich sehr zufrieden mit meinem Leben; Leute mit anderen Zielen würden das wohl ganz anders sehen. 