

Batterieflüssigkeiten aus dem Computer, dafür steht ComputeChem

2010-10-12 13:01:19

(PA) Saal an der Donau, 12.10.2010. Stoffe lassen sich errechnen. Das neu gegründete Forschungs- und Entwicklungsbüro ComputeChem setzt dort an, wo die Chemische Industrie und auch Forschungseinrichtungen Arbeiten für Theoretische Chemiker "outsourcen".

Der Slogan "ComputeChem entwickelt Ihr neues Rasierwasser am Computer" beschreibt plakativ das Geschäftsmodell des Unternehmens ComputeChem.

Flüssigkeiten, Lösungen und Elektrolytlösungen werden von ComputeChem in Reihenuntersuchungen am Computer virtuell auf Struktur und Eigenschaften hin untersucht, bewertet und ausgewählt, bevor gezielt Labortests durchzuführen sind. Das spart Zeit und Geld bei der Entwicklung neuer Materialien.

Bei ComputeChem können Firmen und Forschungseinrichtungen die Anwendung von Methoden der Computerchemie als wissenschaftliche Dienstleistung projektbezogen einkaufen. Aktuelles Know-How der Computerchemie kann so für die Entwicklung von Flüssigkeiten, Lösungsmittel und Batterielösungen aber auch für die Abwasserbehandlung vergleichsweise preiswert genutzt werden, da zusätzliches Personal und eigenes Equipment entfallen. Eine wirtschaftlich interessante Perspektive, gerade auch für kleine und mittlere Chemieunternehmen.

Ausgehend von klassischen Wechselwirkungsmodellen führt die Firma ComputeChem mit Monte Carlo Simulationen, Molekulardynamik Simulationen und mit schnellen Integralgleichungsmethoden statistisch-mechanische Rechnungen für Vielteilchensysteme durch.

Die ermittelten Daten werden in Tabellen, Diagrammen und dreidimensionalen Struktur-Darstellungen, bei Bedarf auch in Form von Computer-Animationen auf DVD erfasst. Zu jeder Arbeit gehört jeweils eine Dokumentation, die die Ergebnisse bewertet und auf voraussichtliche Laborergebnisse vorblendet, dazu Vorschläge an den Auftraggeber für dessen weiteres Vorgehen in Forschung und Entwicklung.