

Theoretische Chemie: Struktur von Nanoteilchen und Simulation molekularer Dynamik

Struktur von Nanoteilchen

Einzelmoleküle und Festkörper (> 1000 Moleküle) verstehen wir gut, aber Aggregate aus 10-100 Molekülen (Cluster) zeigen völlig andere Strukturen und Eigenschaften.

Ein besseres Verständnis ist von fundamentaler Bedeutung für

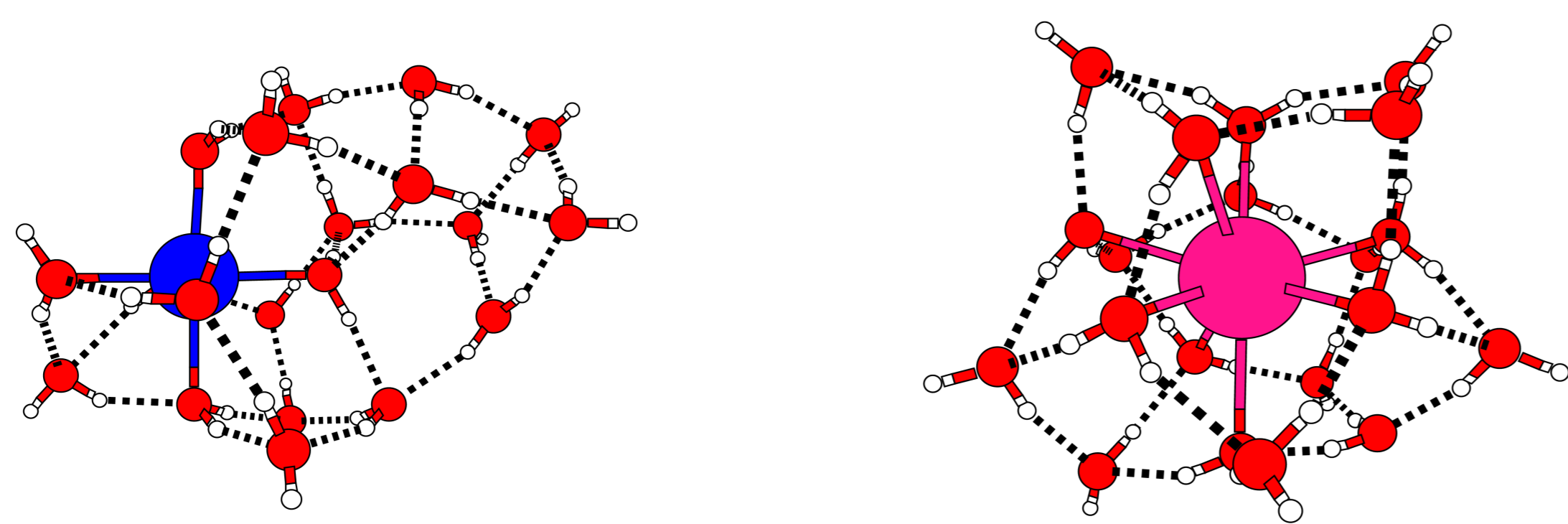
- die Nanotechnologie (Verkleinerung von Bauteilen)
- die Biochemie (Proteine, Oligosaccharide)
- die Atmosphärenchemie (Reaktionen an/in Wasserclustern)

Bereits die Vorhersage der wahrscheinlichsten Clusterstruktur ist extrem schwierig, da die Anzahl von Strukturen mit lokaler minimaler Energie mit der Clustergröße exponentiell ansteigt: Die Anzahl lokaler Minima eines Clusters aus 100 Argonatomen wird auf 10^{40} geschätzt.

Wir verwenden speziell adaptierte und erweiterte Evolutionäre Algorithmen auf massiv parallelen Großrechnern, zur globalen Optimierung von Strukturen u.a. für folgende Systeme:

- *Mikrohydratationscluster:*

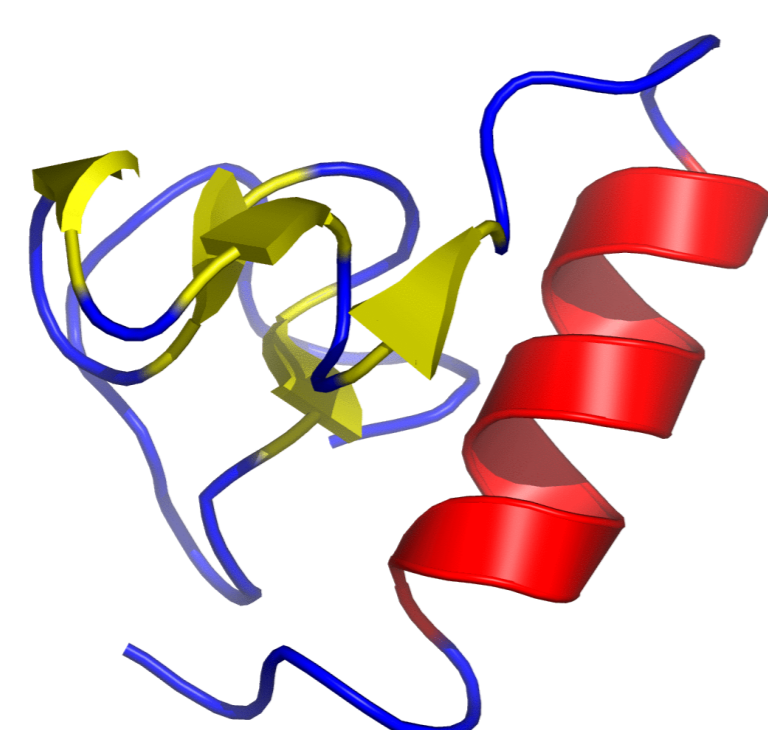
Beim kleinen Natriumkation sind völlig andere, irreguläre Strukturen bevorzugt als beim etwas größeren Kaliumkation:



irreguläre Natrium-Struktur zentriertes Kalium-Dodekaeder

- *Proteinfaltung:*

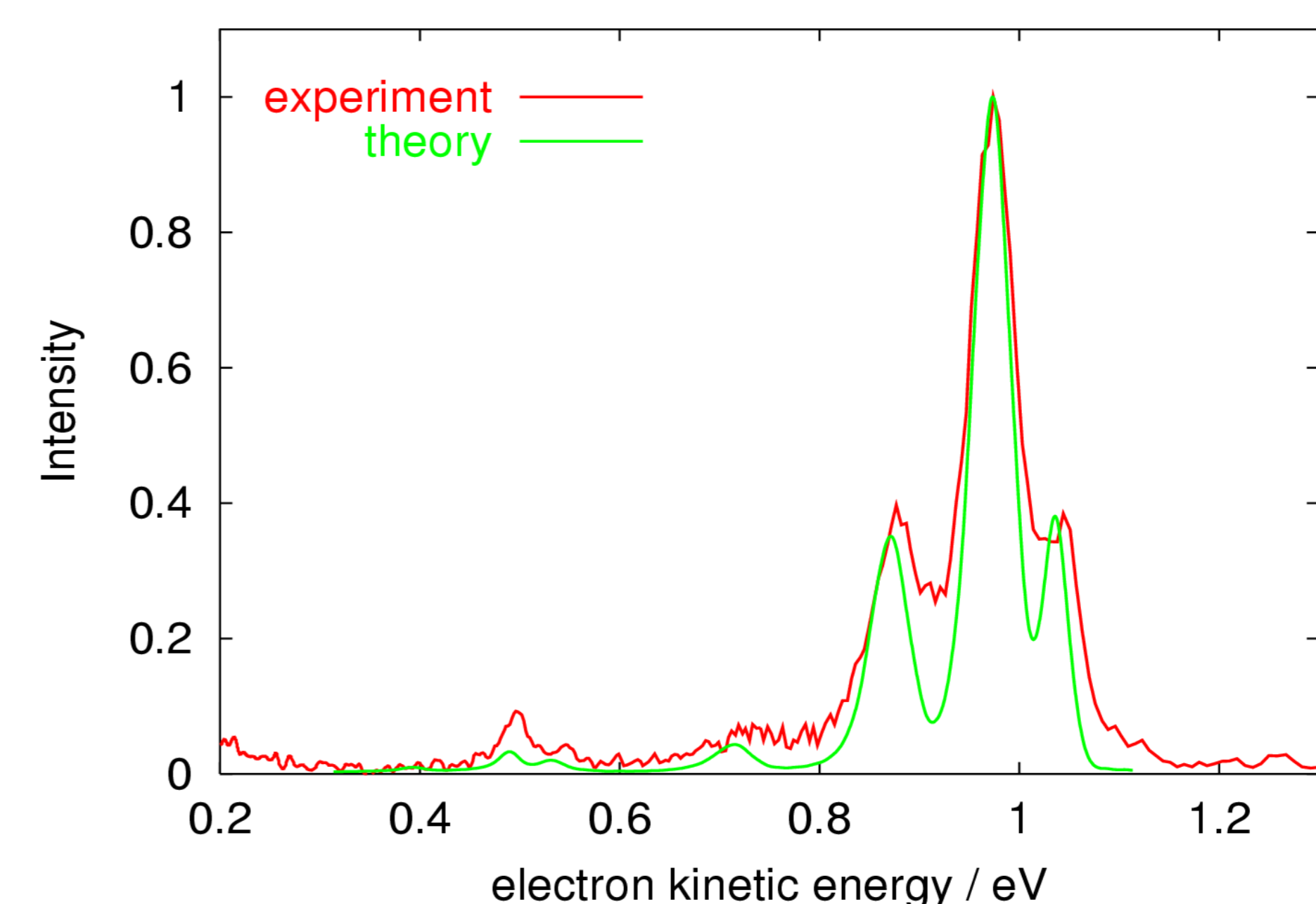
Theoretische Vorhersage der für die biologische Funktion nötigen dreidimensionalen Struktur aus der vom genetischen Code vorgegebenen Abfolge der Aminosäuren:



Molekulare Dynamik

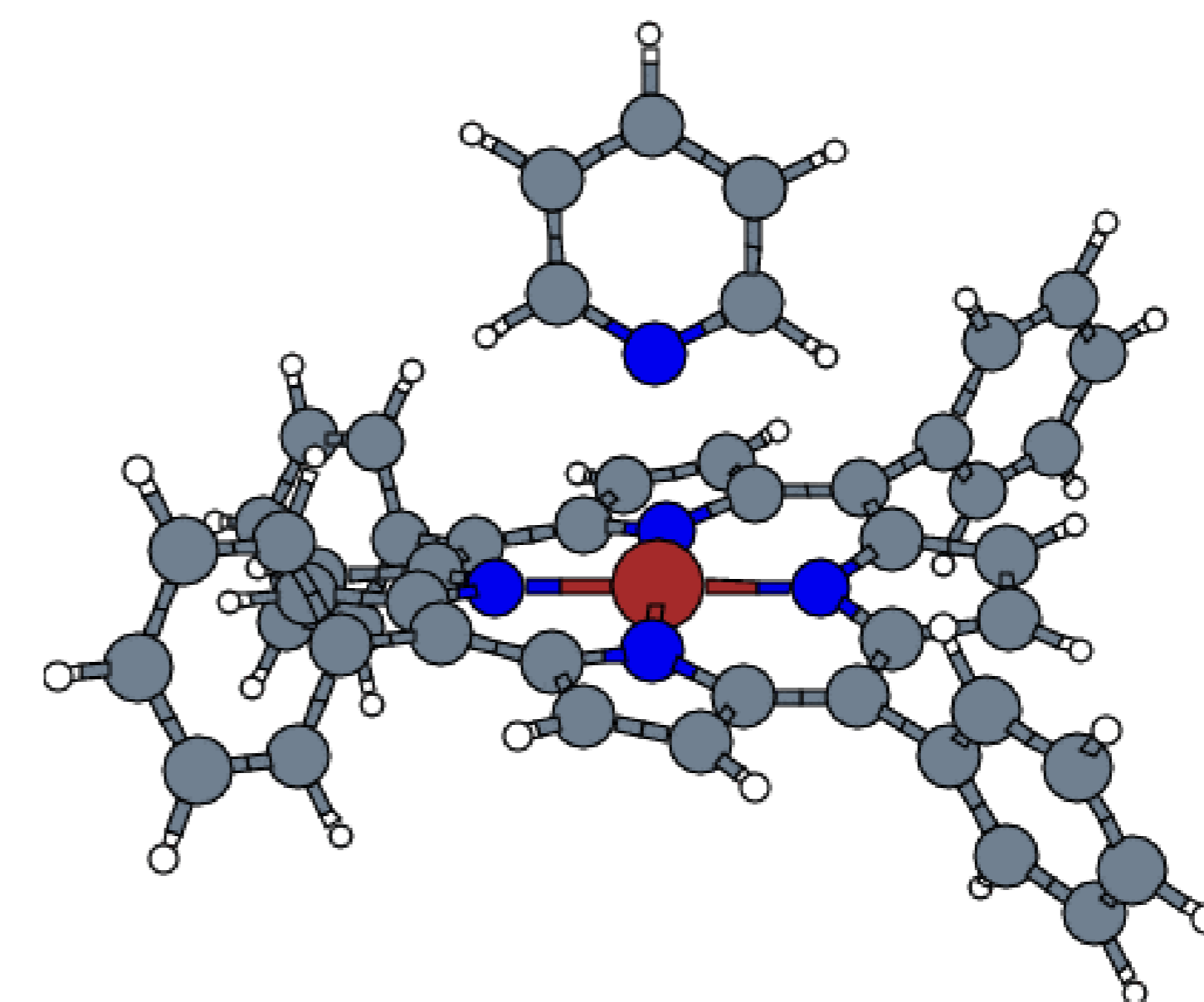
Für kleine Moleküle sind exakte, quantenmechanische Simulationen der Elektronen und Atomkerne in Molekülen möglich, auch unter Einwirkung elektromagnetischer Felder. Daraus können wir u.a. berechnen:

- detaillierte Abläufe chemischer Reaktionen
- genaue Analyse von Reaktionsmechanismen
- Reaktionen von Molekülen nach Anregung mit Laserlicht
- quantitativ genaue Vorhersage von Spektren, hier z.B. für das Reaktionssystem $F + H_2$:



Dabei wächst die Rechenzeit sehr stark mit der Systemgröße an. Daher müssen für größere Systeme vereinfachte, klassisch-mechanische Modelle verwendet werden.

Damit wird es dann aber möglich, das dynamische Verhalten komplexer molekularer Gebilde aus dem chemischen Syntheselabor oder aus biologischen Systemen zu simulieren:



Prof. Dr. Bernd Hartke
Theoretische Chemie
Inst. für Physikalische Chemie
Christian-Albrechts-Universität
Olshausenstraße 40
24098 Kiel

Tel.: 0431/880-2753
Fax: 0431/880-1758
e-mail: hartke@phc.uni-kiel.de
URL: <http://ravel.phc.uni-kiel.de>