

# Atomistische Modellierung der Struktur und Funktion von Biomolekülen

Marcus Elstner

## **Zusammenfassung:**

Biologische Strukturen zeichnen sich dadurch aus, chemische oder photochemische Reaktionen sehr effizient ablaufen zu lassen und die Aufklärung dieser Prozesse führt nicht nur zu einem grundlegenden Verständnis dieser Naturvorgänge sondern gewinnt auch technologisch an Bedeutung. In den letzten Jahren tragen vermehrt theoretische Studien zum Verständnis der Struktur und Funktion biologischer Systeme im atomaren Detail bei. Dies liegt einerseits an den immensen Fortschritten in der Computertechnologie, andererseits an der Entwicklung effizienter numerischer Algorithmen.

In der vorliegenden Arbeit werden, ausgehend von der approximativen Dichtefunktionalmethode SCC-DFTB, Methoden vorgestellt, die zur Beschreibung der Komplexität und Größe biologischer Strukturen nötig sind. Dies betrifft zum einen Weiterentwicklungen zur Behandlung von van der Waals und Wasserstoffbrücken gebundenen Systemen, zum Anderen die Simulation großer Systeme/Moleküle und langer Zeitskalen durch Kopplung an empirische Kraftfeldmethoden (QM/MM) und linear skalierende Algorithmen ( $O(N)$ ). Ferner werden Algorithmen vorgestellt, die eine Beschreibung von optischen Anregungen und Licht-Materie Wechselwirkungen ermöglichen. Diese Entwicklungen sind die Grundlage für die Untersuchung von Ladungstransportprozessen und der molekularen Dynamik im Anschluss an optische Anregungen.