

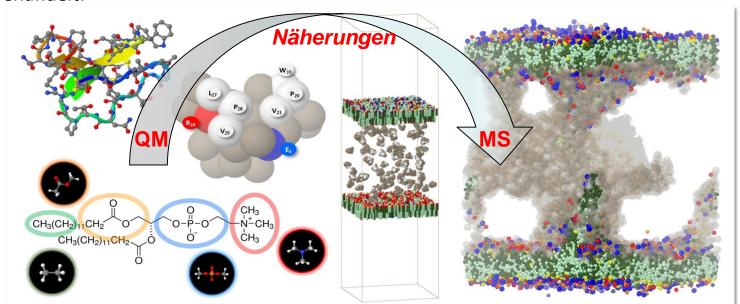
GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

## Prof. Dr. Achim Zielesny

Westfälische Hochschule

## Mesoskopische Simulation großer (bio)molekularer Systeme

"Die grundlegenden physikalischen Gesetze für die ... gesamte Chemie sind damit vollständig bekannt" – mit diesen Worten charakterisiert der Nobelpreisträger Paul Dirac im Jahre 1929 die neue Quantentheorie/mechanik (QM). Aber schon für kleine chemische Moleküle sind die grundlegenden physikalischen Bewegungsgesetze viel zu kompliziert, so dass für praktische Anwendungen nur (stark) vereinfachte Näherungen zum Einsatz kommen. Mesoskopische Simulationen (MS) dienen dem Verständnis großer molekularer Systeme mit Millionen von Atomen: Sie beschreiben die Dynamik der Nanowelt, die vielfältigen Materialeigenschaften als auch medizinisch-bedeutsamen molekularbiologischen Vorgängen zugrunde liegt. Möglichkeiten und Grenzen des mesokopischen Ansatzes, das Verhältnis von Experiment und mesoskopischer Simulation sowie aktuelle Forschungsergebnisse werden im Vortrag - möglichst anschaulich und animiert - behandelt.



## Dienstag, 29.10.2019 um 17:30 Uhr in Hörsaal A



August-Schmidt-Ring 10 45665 Recklinghausen www.w-hs.de/gdch