

"Der Teil und das Ganze in der Theorie der Chemie: Von fundamentalen Konzepten zu Anwendungen in der Photosynthese"

Die Photosynthese ist der essentielle physikalisch-chemische Prozess für die Konversion von Sonnenlicht in Energieformen, die von Lebewesen auf der Erde genutzt werden können. Aufgrund der Komplexität der Proteinkomplexe, die für die ersten Schritte der Photosynthese verantwortlich sind, spielt die Theoretische Chemie eine besondere Rolle bei der Charakterisierung dieser funktionalen Strukturen. In diesem Vortrag wird erläutert, wie Subsystem-basierte Ansätze in der Quantenchemie es ermöglichen, ohne Rückgriffe auf System-spezifische Parameter die Vorgänge der Lichtabsorption, des Energietransportes, und des Elektronentransportes in funktionalen molekularen Aggregaten zu beschreiben, wie sie auch in der Photosynthese vorkommen. Insbesondere wird diskutiert, wie die Subsystem-Dichtefunktionaltheorie [1] zwischen intuitiven chemischen Konzepten und einer fundamentalen quantentheoretischen Beschreibung komplexer Aggregate vermitteln kann.

[1] Übersichtsartikel: C.R. Jacob, J. Neugebauer, WIREs Comput. Mol. Sci. (2014), DOI: 10.1002/wcms.1175.