

Assoz.-Prof. Dr. Thomas Hofer

Institut für Allgemeine, Anorganische und Theoretische Chemie

Kooperationspartner: Dr. Martin Field

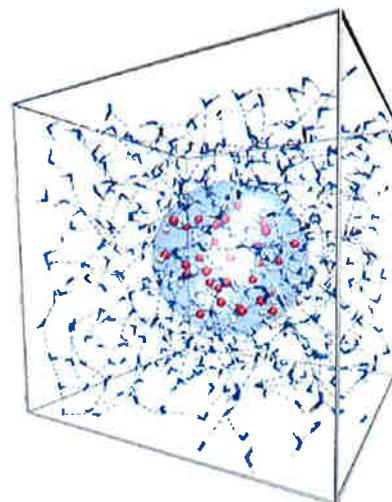
Institut de Biologie Structurale – Jean-Pierre Ebel, Grenoble

Trends für QM/MM Simulationstechniken

22.10.2012 – 23.10.2012

Im Rahmen des Frankreichschwerpunktes der Universität Innsbruck wurde Dr. Martin Field vom Institut de Biologie de Structurale (IBS), Grenoble im Oktober 2012 zu einem zweitägigen Besuch an der Abteilung für Theoretische Chemie am Centrum für Chemie und Biomedizin eingeladen

Dr. Martin Field ist ein bekannter Wissenschaftler auf dem Gebiet der Computersimulationen molekularer Systeme, insbesondere im Bereich der quantenmechanischen/molekularmechanischen Hybridansätze (QM/MM). Hier wird der chemisch besonders interessante Teil des Systems mit fortgeschrittenen, quantenmechanischen (QM) Verfahren behandelt (z.B. der Bereich innerhalb der blauen Kugel im Bild, rechts), während der verbleibende Bereich mittels molekularmechanischen (MM) Potentials behandelt wird. Diese Berechnungsmethode verbindet die Genauigkeit einer quantenmechanischen Beschreibung des chemisch relevanten Teils mit der Effizienz molekularmechanischer Verfahren, was Untersuchungen größerer chemischer Systeme mit quantenchemischer Genauigkeit ermöglicht.



Diese QM/MM Ansätze werden sowohl in der Arbeitsgruppe von Dr. Field am Institut de Biologie Structurale - Jean-Pierre Ebel, Grenoble wie auch an der Abteilung für Theoretische Chemie der Universität Innsbruck entwickelt. Vor kurzem ergab sich die Möglichkeit einer wissenschaftlichen Kooperation und einer gemeinsamen Veröffentlichung der Resultate mit der Arbeitsgruppe am IBS. Um die Inhalte dieses Manuskripts im Detail zu besprechen, wurde Dr. Field eingeladen, die Abteilung für Theoretische Chemie in Innsbruck zu besuchen.

Darüber hinaus hielt Dr. Field einen spannenden und aufschlussreichen Vortrag über seine Forschungsaktivität mit dem Titel "*Hybrid Potential Simulations of Enzyme Catalysis*" in der Seminarreihe "*Recent Developments in Theoretical Chemistry*" (SE 724951). Zusätzlich zu den MitarbeiterInnen der Abteilung für Theoretische Chemie waren Forschende anderer Institute (Analytische Chemie, Pharmazeutische Chemie) beim Vortrag anwesend.

Themen für eine Weiterführung der Kooperationen zwischen der Arbeitsgruppe von Dr. Field und der Abteilung für Theoretische Chemie wurden ebenfalls besprochen, unter anderem bei einem Treffen mit der Koordinatorin des Frankreich Schwerpunktes Frau Univ.-Prof. Dr. Eva Lavric.