



Berliner Physikalisches Kolloquium

im Magnus-Haus, Am Kupfergraben 7, 10117 Berlin

Eine gemeinsame Veranstaltung der Physikalischen Gesellschaft zu Berlin e.V.,
der Freien Universität Berlin, der Humboldt-Universität zu Berlin,
der Technischen Universität Berlin und der Universität Potsdam
– *gefördert durch die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung* –

Am Donnerstag, dem **7. Juli 2016**, um **18:30 Uhr**

spricht

Prof. Dr. Karsten Reuter

**Lehrstuhl für Theoretische Chemie und Zentralinstitut für
Katalyseforschung, Technische Universität München**

über das Thema

„Bewegliche und gebundene Elektronen in der Computer-gestützten Energieforschung“

Moderation: Sabine Klapp, Technische Universität Berlin

Die Fähigkeit zur gezielten Konversion frei beweglicher und in Molekülorbitalen gebundener Elektronen ist der Schlüssel zu einer nachhaltigen Energieversorgung. Die effiziente Erzeugung und Kontrolle der Mobilität freier Elektronen sind z.B. Kerngrößen der direkten Umwandlung von solarer in elektrische Energie. Die Bildung neuer Molekülorbitale mittels mobiler Elektronen ist wiederum ein essentieller Schritt für die Speicherung der Energie in regenerativen Energieträgern. Wie in vielen anderen Anwendungsbereichen spielen Computer-gestützte Modellierung und Simulation eine zunehmende Rolle bei der rationalen Entwicklung entsprechender Konzepte. Zum Einsatz kommen schnelle Computational-Screening Verfahren zur Identifikation neuartiger Materialien ebenso wie detaillierte, oft Multiskalen-basierte Ansätze, die mechanistische Einsichten in den Zusammenhang von Elementarschritten und makroskopischer Funktionalität erlauben. Anhand ausgewählter Beispiele illustriert der Vortrag den gegenwärtigen Stand und die aktuellen Herausforderungen dieses hochgradig interdisziplinären Gebietes.