

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2023)

Zeit: mittwochs 14:15, Ort: Seminarraum NC 5/99

19. 04. 2023 **Florian Bischoff**, Institut für Chemie, Humboldt Universität zu Berlin
Computing molecular properties in real space
26. 04. 2023 **Robert Meißner**, Molekulardynamische Simulation weicher Materie,
Technische Universität Hamburg
TBA
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
03. 05. 2023 **Florian Weigend**, Applied Quantum Chemistry, Philipps-Universität Marburg
Relativity in quantum chemistry: recent developments and applications
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
10. 05. 2023 **Roberto Covino**, FIAS - Frankfurt Institute of Advanced Studies
*Investigating mechanisms of biomolecular self-organization by integrating
physics-based simulations and AI*
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
17. 05. 2023 **A. Marco Saitta**, Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de
Cosmochimie (IMPMC), Université Pierre et Marie Curie - Sorbonne, France
*Ab initio and machine learning approaches to prebiotic chemistry/origins of
life studies*
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
24. 05. 2023 **Thomas Heine**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Technische Universität
Dresden
Mattermorphosis
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
07. 06. 2023 **Michael Schmitt**, Institut für Physikalische Chemie,
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf
*Molecules in their electronically excited states - Modulation of structures, life
times and dipole moments*
14. 06. 2023 **Daan Geerke**, Molecular and Computational Toxicology, Vrije Universiteit
Amsterdam, Netherlands
*Deriving a Polarizable Force Field for Biomolecules with Minimal Empirical
Calibration*
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
21. 06. 2023 **Uwe Manthe**, Theoretische Chemie, Universität Bielefeld
Quantum dynamics of reactions and fluid motions
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
28. 06. 2023 **Amalendu Chandra**, Theoretical Chemistry Group, Indian Institute of
Technology, India
*Nonlinear vibrational spectroscopy of aqueous systems: Use of spectral maps
and beyond*
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)

12. 07. 2023

Thomas Froitzheim, Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Universität Bonn

Method, Structure and Embedding: What TADF Emitters can teach us about Quantum Chemistry

(Seminar austauschprogramm Bonn/Bochum)

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen!