

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2018/2019)

---

Zeit: mittwochs 14:15, Ort: Seminarraum NC 03/399

---

17. 10. 2018      **Giovanni Li Manni**, Department of Electronic Structure Theory,  
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart, Deutschland  
*Spin State Energetics of Transition Metal Compounds from Modern  
Multireference Methods*
24. 10. 2018      **Michele Ceotto**, Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano,  
Milan, Italy  
*Semiclassical Methods for Spectroscopic Calculations of High Dimensional  
Molecular System*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 „RESOLV“)
31. 10. 2018      **Lisa Warczynski**, AG Quantenchemie, Lehrstuhl für Theoretische Chemie,  
Ruhr-Universität Bochum, Deutschland  
*Chemical Reactions at Carbon Surfaces: Computational Study and Method  
Development*
07. 11. 2018      **Krisztian Palotas**, Department of Theoretical Physics, Budapest University  
of Technology and Economics, Budapest, Hungary  
*Scanning Tunneling Microscopy Simulations from First Principles*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 „RESOLV“)
14. 11. 2018      **Jean-Philip Piquemal**, Laboratoire de Chimie Théorique, Sorbonne  
Université, Paris, France  
*Tinker-HP, a Massively Parallel Package for Scalable Polarizable and Hybrid  
Molecular Dynamics*
21. 11. 2018      **Ralph Jaquet**, Theoretische Chemie, Universität Siegen, Deutschland  
*Investigation of Nonadiabatic Effects for the Ro-vibrational Spectrum of H<sub>3</sub><sup>+</sup>  
using Geometry-dependent Nuclear Masses*
28. 11. 2018      **Fabian Bohle**, Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Rheinische  
Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Deutschland  
*Computation of Molecular Recognition Processes in Solution*  
(Seminar austauschprogramm Bonn/Bochum)
05. 12. 2018      **Martin Zacharias**, Physik-Department, Technische Universität München,  
Deutschland  
*Investigating DNA Recognition and Repair Using Advanced Sampling  
Simulations*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 „RESOLV“)
12. 12. 2018      **Oriol Vendrell**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Physikalisch-Chemisches  
Institut, Universität Heidelberg, Deutschland  
*Correlated Dynamics of Nuclei, Electrons and Trapped Photons*
- Abgesagt**  
09. 01. 2019      **Reinhard Dörner**, Institut für Kernphysik, Goethe-Universität, Frankfurt am  
Main, Deutschland  
*Imaging of Molecular and Electronic Structure*

- 16.01.2019      **Dieter Gerlich**, Institut für Physik, Technische Universität Chemnitz, Deutschland  
*IR Spectroscopy of Cold Trapped Molecular Ions Using He-tagging*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
- 23.01.2019      **Christoph Dellago**, Fakultät für Physik, Universität Wien, Österreich  
*Exploring the Mechanism and Kinetics of Nucleation Processes: From Ice Nucleation to Cavitation in Water under Tension*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
- 30.01.2019      **Jérôme Hénin**, Laboratoire de Biochimie Théorique, Institut de Biologie Physico-Chimique, CNRS, Paris, France  
*Adaptive Sampling Based on Collective Variables in Biomolecular Simulations*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
- Sondertermin**  
06.02.2019      **Özlem Yönder**, AG Quantenchemie, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland  
*Atomistic Multiscale Simulation of Char Combustion*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

**Gäste sind herzlich willkommen!**