

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2022)

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

All Theoretical Chemistry Colloquia will be announced on an individual basis.

27. 04. 2022 **Archy Tripathi**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland
Deposition of a pure solid hydrogen matrix using Path Integral simulations
04. 05. 2022 **Dr. Chanbum Park**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland
Deciphering Hydrogen Bonding at the Gold/Water Interface down to the Electronic Structure Level
11. 05. 2022 **Professor Ralf Drautz**, Interdisciplinary Centre for Advanced Materials Simulation (ICAMS), Ruhr-Universität Bochum, Deutschland
Atomic Cluster Expansion for fast and accurate Interatomic Potentials
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
18. 05. 2022 **Dr. Saumyak Mukherjee**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland
Water entropy calculations in high-concentration protein solutions
01. 06. 2022 **Dr. Jan-Michael Mewes**, Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Deutschland
What do singlet-triplet gaps of charge-transfer states, periodic trends in melting and boiling points, and London-dispersion effects have in common?
15. 06. 2022 **Dr. Michael Häfner**, Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Deutschland
Exploring the Chemistry of the Alkali Halide F Center
(Seminaustauschprogramm Bonn/Bochum)
22. 06. 2022 **apl. Prof. Dr. Karin Fink**, Karlsruhe Institut of Technology, Institute for Nanotechnology, Karlsruhe, Deutschland
Quantum chemistry from molecules to materials
29. 06. 2022 **Juniorprofessor Jan Meisner**, Institut für Physikalische Chemie, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Heinrich-Heine Universität Düsseldorf, Deutschland
Reaction Discovery by Accelerated Molecular Dynamics
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
06. 07. 2022 **Professor Kai Leonhard**, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, RWTH Aachen, Deutschland
Exploring Reaction Network with ChemTraYzer
14. 09. 2022 **Dr. Christoph Schran**, Department of Chemistry, University of Cambridge, United Kingdom

Understanding complex aqueous systems with machine learning
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen!