

## Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2025)

---

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

---

16. 04. 2025      **Professor Stephan Schlemmer**, Universität zu Köln, I. Physikalisches Institut  
*Missing ions in laboratory and in space*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
30. 04. 2025      **Professor Mira Todorova**, Max Planck Institute for Sustainable Materials, Düsseldorf  
*Potential dynamics and reactions at electrochemical interfaces studied by ab initio supercell calculations*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
07. 05. 2025      **Dr. Ulrich Meier**, IQM Quantum Computers, München  
*The Basis Concepts of Quantum Computing*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
14. 05. 2025      **Professor Felipe Fantuzzi**, University of Kent, School of Chemistry and Forensic Science, United Kingdom  
*From Chemical Bonds to Interstellar Space: Contributions from Theory*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
21. 05. 2025      **Professor Jagannath Mondal**, Tata Institute of Fundamental Research, Hyderabad, Indien  
*Generative machine learning approach in biomolecular Simulation*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
04. 06. 2025      **Professor Andreas Köhn**, Universität Stuttgart, Theoretische Chemie, Stuttgart  
*Coupled-cluster theory for multiconfigurational states - are we there yet?*
18. 06. 2025      **Dr. Dorothea Golze**, Technische Universität Dresden, Computational Chemistry and Physics  
*TBA*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
25. 06. 2025      **Professor Shirin Faraji**, Heinrich Heine-Universität Düsseldorf, Theoretische Chemie und Computerchemie, Düsseldorf  
*Databased accelerated on-the-fly hybrid quantum/classical*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
09. 07. 2025      **Professor Patrick Rinke**, Technische Universität München, School of Natural Sciences, München  
*Machine-learning accelerated catalyst discovery and characterization*  
(Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
16. 07. 2025      **Marvin Friede**, Universität Bonn Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Bonn  
*dxtb an efficient and fully differentiable framework for extended tight-binding*  
(Seminar austauschprogramm Bonn/Bochum)

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

**Gäste sind herzlich willkommen!**