

**Kolloquium für Physikalische Chemie**  
**Herbstsemester 2022**  
**ETH Zürich, Vladimir-Prelog-Weg 2, HCI J3**  
**Zeit: 16.45 Uhr**  
(wenn nicht anderes vermerkt)

19.09.2022 – 23.12.2022

Dienstag, 20.09.2022	<p><b>Minisymposium Doktorierende</b></p> <p><b>Katja Csizi</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Dioxygen activation in Rieske Dioxygenases: A model study towards automated QM/MM protocols</i></p> <p><b>Luis Fábregas Ibañez</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Advanced data analysis and modeling in dipolar EPR spectroscopy</i></p> <p><b>Stefan Gugler</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Exploiting machine learning for quantum chemistry</i></p>
Dienstag, 27.09.2022	<p><b>Prof. Julia Stähler (Doktorandenwahlsprecherin)</b> Humboldt Universität Berlin, Deutschland <i>Ultrafast Dynamics at the Boundary of Physics and Chemistry</i></p>
Dienstag, 04.10.2022	<p><b>PD Dr. Philipp Marquetand (Doktorandenwahlsprecher)</b> Universität Wien, Wien, Österreich <i>Excited-state molecular dynamics based on machine learning</i></p>
Dienstag, 11.10.2022	<p><b>Minisymposium Doktorierende</b></p> <p><b>Jan Krohn</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Tracing the steps of nucleation and cluster growth at the molecular level</i></p> <p><b>Marco Weber</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Starting Solid-State NMR where X-Ray Crystallography Ends - Opportunities for Studying Complex Biomolecules</i></p> <p><b>Eric Heller</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Quantum rates from backward-in-time classical trajectories – Tunnelling between different electronic states</i></p>
Dienstag, 18.10.2022	<p><b>Dr. Guinevere Mathies</b> Universität Konstanz, Konstanz, Deutschland <i>Pulse(d) dynamic nuclear polarization</i></p>

Dienstag, 25.10.2022	<p><b>Minisymposium Doktorierende</b></p> <p><b>Yanick Fleischmann</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>In-cell NMR of the intrinsically disordered protein Prothymosine Alpha reveals its native dynamic histone 1 interaction in cells</i></p> <p><b>Max Waters</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Tracking dynamic molecular coherence with gas and liquid photoelectron spectroscopy</i></p>
Dienstag, 01.11.2022	<p><b>Prof. Heather J. Kulik</b> MIT, Department of Chemical Engineering, Cambridge, Massachusetts, USA <i>Molecular design blueprints: materials and catalysts from new simulation and machine learning tools</i></p>
Dienstag, 08.11.2022	<p><b>Dr. Loren Andreas</b> Max-Planck-Institut für Multidisziplinäre Naturwissenschaften, Göttingen, Deutschland <i>Selective recoupling pulse sequences for ultrafast magic-angle spinning NMR and application to membrane proteins</i></p>
<b>Mittwoch</b> <b>09.11.2022</b> <b>Audimax,</b> <b>HG F 30</b> <b>17.15 Uhr</b>	<p><b>Einführungsvorlesungen</b></p> <p><b>Prof. Máté Bezdek</b> Funktionelle Koordinationschemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Developing a Molecular Chemist's Sense for Environmental Pollutant Sensing</i></p> <p><b>Prof. Patrick Steinegger</b> Professur für Radiochemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Fantastic Elements and where to find them</i></p>
Dienstag, 15.11.2022	<p><b>Prof. Pietro Faccioli</b> Università di Trento, Povo, Italien <i>A new paradigm for rational drug discovery based on all-atom protein folding simulations</i></p>
Dienstag, 22.11.2022	<p><b>Minisymposium Doktorierende</b></p> <p><b>Stephanie Linker</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Dynamic Reweighting and Membrane Permeability of Macrocyclic Drugs</i></p> <p><b>Matias Chávez</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Continuous Floquet Theory - Design and analysis of solid-state NMR pulse schemes</i></p>
<b>Montag,</b> <b>28.11.2022</b> <b>Audimax HG F 30</b> <b>17.15 Uhr</b>	<p><b>Abschiedsvorlesung</b></p> <p><b>Prof. Gebhard F.X. Schertler</b> Division of Biology and Chemistry, Paul Scherrer Institut (PSI) Villigen, Schweiz <i>Signaling in vision and molecular pharmacology</i></p>

<p>Dienstag, 29.11.2022</p>	<p><b>Minisymposium Doktorierende</b></p> <p><b>Charlotte Müller</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Real-time Haptic Quantum Chemistry for Chemistry Education</i></p> <p><b>Simon Scheidegger</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Precision measurements of the Balmer series</i></p> <p><b>Miguel Steiner</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Autonomous first-principles-based exploration of catalytic processes</i></p>
<p>Dienstag 06.12.2022</p>	<p><b>Prof. Evangelos Miliordos</b> Auburn University, Auburn AL USA <i>Can theory guide experiment? Quantum calculations suggest novel materials and efficient catalysts for methane to methanol conversion</i></p>
<p>Dienstag, 13.12.2022</p>	<p><b>Minisymposium Doktorierende</b></p> <p><b>Paul Türtcher</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Navigating through Chemical Reaction Networks and Beyond</i></p> <p><b>Maximilian Mörchen</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>How to get the key dynamic electron correlation energy in the case of strong correlation in molecules</i></p> <p><b>Moritz Thürlemann</b> Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich, Schweiz <i>Development of Hybrid Classical/Machine Learning Potentials for the Description of Condensed Phase Systems</i></p>

<http://www.chab.ethz.ch/forschung/institute-und-laboratorien/LPC/lpc-veranstaltungen/kolloquien.html>

\* Einführungsvorlesungen will take place in the Audimax, the link can be found here:

<https://ethz.ch/en/news-and-events/events/inaugural-farewell-introductory-lectures.html>