

## Liste der Vorträge seit 1997 (Stand: September 2010)

110. „Intermolecular Interactions in Systems with 1000 and More Atoms — Challenges for Quantum Chemistry“;  
CeNS Workshop 2010, Nanosciences: Merging Disciplines, Venedig, Italien, 20.-24. September 2010
109. „The Laplace Approach in Linear-Scaling HF, DFT, and MP2 Methods“;  
XVth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Cambridge, England, 31. August - 5. September 2010
108. „Quantum Chemistry for Molecules with 1000 and More Atoms: Methods and Applications“;  
3rd EuCheMS, Nürnberg, Deutschland, 29. August - 2. September 2010
107. „Overview & Perspectives: Quantum-Chemical Methods“;  
Gordon Research Conference, 15-min-talk as session chair, Les Diablerets, Schweiz, 29. August - 3. September 2010
106. „Intermolecular Interactions in Systems with 1000 and More Atoms Challenges for Quantum Chemistry“;  
ICIQ Tarragona, Spanien, 16. Juli 2010
105. „Intermolecular Interactions in Systems with 1000 and More Atoms Challenges for Quantum Chemistry“;  
IBBI2010, Isolated biomolecules and biomolecular interactions, FHI, Berlin, Deutschland, 12.-17. Juni 2010
104. „The Laplace Approach in Linear-Scaling HF, DFT, and MP2 Methods“;  
MQM 'Molecular Quantum Mechanics' Conference, in Honor of Henry F. Schaefer III, Berkeley, USA, 24.-29. Mai 2010
103. „Linear-Scaling AO-MP2 for Large Molecules“;  
SPP1145-Abschlußsymposium, Bad Herrenalb, Deutschland, 29. März - 1. April 2010
102. „Quantum Chemistry for Molecules with 1000 and More Atoms“;  
International conference of the SFB 749 in Kloster Irsee, Allgäu, Deutschland, 21.-24. März 2010
101. „Quantum Chemistry for Molecules with 1000 and More Atoms“;  
University of Aarhus, Aarhus, Dänemark 11. Februar 2010
100. „Intermolekulare Wechselwirkungen in großen Molekülsystemen — Herausforderungen für die Quantenchemie“;  
Universität Braunschweig, Braunschweig, Deutschland, 27. Januar 2010
99. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
Dechema Arbeitsausschuß 'Kinetik und Reaktionsmechanismen', Frankfurt, Deutschland, 11. Januar 2010
98. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
ETH Zürich, Zürich, Schweiz, 17. Dezember 2009
97. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
2nd bilateral Symposium on 'Modeling Chemistry and Biological (Re)Activity' (MCBR2), Wildbad-Kreuth, Deutschland, 4.-7. Oktober 2009

96. „Quantum Chemistry for Molecules with 1000 and More Atoms: Method Developments and Applications“;  
Statussymposium 'New Conceptual Approaches to Modeling and Simulation of Complex Systems' der Volkswagen-Stiftung, Mainz, Deutschland, 21.–23. September 2009
95. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Linear-Scaling for Mean-Field and Correlated Approaches“;  
Universität Erlangen, Erlangen, Deutschland, 20. Juli 2009
94. „Quantenchemie für große Moleküle“;  
Tag der Chemie, Universität Tübingen, Tübingen, Deutschland, 8. Juli 2009
93. „Quantum Chemistry for Molecules with 1000 and More Atoms: Method Developments and Applications“;  
Uppsala University, Uppsala, Schweden, 28. Mai 2009
92. „Quantum Chemistry for Molecules with 1000 and More Atoms: Method Developments and Applications“;  
Universität München (LMU), München, Deutschland, 15. Mai 2009
91. „Quantum Chemistry for Molecules with 1000 and More Atoms: Method Developments and Applications“;  
Universität Wien, Wien, Österreich, 7. Mai 2009
90. „Quantum Chemistry for Molecules with 1000 and More Atoms: Method Developments and Applications“;  
FU Berlin, Berlin, Deutschland, 2. April 2009
89. „Quantenchemie für Moleküle mit 1000 und mehr Atomen: Methodenentwicklung und Anwendung“;  
TU Berlin, Berlin, Deutschland, 15. Januar 2009
88. „Quantenchemie für Moleküle mit 1000 und mehr Atomen: Methodenentwicklung und Anwendung“;  
Universität Konstanz, Konstanz, Deutschland, 24. November 2008
87. „Linear-Scaling AO-MP2 by Rigorous Integral Screening“;  
XIV European Seminar on Computational Methods in Quantum Chemistry (ESCMQC), Elba, Italien, 2.–6. Oktober 2008
86. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Linear-Scaling Mean-Field and Correlated Approaches“;  
Keynote Lecture (26. Sept. 2008), International Conference on Computational Methods in Science and Engineering (ICCMSE), Kreta, Griechenland, 25.–30. September 2008
85. „Laplace-Based Approaches in Linear-Scaling HF, DFT, and MP2 Theories“;  
Linear-Scaling Symposium (29. Sept. 2008), International Conference on Computational Methods in Science and Engineering (ICCMSE), Kreta, Griechenland, 25.–30. September 2008
84. „Intermolekulare Wechselwirkungen in großen Molekülsystemen — Herausforderungen für die Quantenchemie“;  
GDCh-Kolloquium, Chemische Gesellschaft zu Heidelberg, Universität Heidelberg, Heidelberg, Deutschland, 8. Juli 2008
83. „Linear-Scaling AO-MP2 by Rigorous Integral Screening“;  
SPP 1145 Symposium, Tutzing, Deutschland, 21.–23. Mai 2008
82. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
LMU München, München, Deutschland, 14. Mai 2008

81. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Linear-Scaling Methods for Mean-Field and Correlated Approaches“;  
Universität Bonn, Bonn, Deutschland, 17. April 2008
80. „Quantenchemie für 1000 Atome: Möglichkeiten und Herausforderungen“;  
Emmy Noether Abendvortrag, FU Berlin, Berlin, Deutschland, 14. März 2008
79. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
TU Dresden, Dresden, Deutschland, 3. März 2008
78. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin, Deutschland, 24. Januar 2008
77. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
KTH University, Stockholm, Schweden, 13. Dezember 2007
76. „Intermolekulare Wechselwirkungen in großen Molekülsystemen — Herausforderungen für die Quantenchemie“;  
GDCh-Kolloquium, Universität Konstanz, Konstanz, Deutschland; 8. November 2007
75. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Linear-Scaling Methods for Mean-Field and Correlated Approaches“;  
Aarhus University, Dänemark, 12. Oktober 2007
74. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
Workshop 'Methods of Molecular Simulation', Universität Heidelberg, Heidelberg, Deutschland; 24.–26. September 2007
73. „A Linear-Scaling AO-Based MP2 Method for Large Molecules by Rigorous Integral Estimates“;  
43. Symposium für Theoretische Chemie, Saarbrücken, Deutschland, 16.–20. September 2007
72. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
ESF Workshop on 'Biosupramolecular Chemistry', Bristol, England, 4.-8. September 2007
71. „Intermolecular Interactions in Large Molecular Systems — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
University of Wisconsin Madison, Madison, USA; 6. August 2007
70. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Linear-Scaling Methods for Mean-Field and Correlated Approaches“;  
Institute for Mathematics and Its Applications (IMA), University of Minnesota, Minneapolis, USA; 31. Juli – 3. August 2007
69. „Quantenchemie — Möglichkeiten und Herausforderungen“;  
Schwerpunkt Quantenphänomene Universität Tübingen, Tübingen, Deutschland, 20. Juli 2007
68. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Linear-Scaling Methods for Mean-Field and Correlated Approaches“;  
SFB 558 'Metall-Substratwechselwirkung in der Heterogenen Katalyse', Universität Bochum, Bochum, Deutschland, 13. Juni 2007
67. „Molecular Recognition — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
4th SUPRAPHONE meeting, Cost D31, Lipari, Italien; 31. Mai – 3. Juni 2007

66. „Large Molecules — A Challenge for Quantum Chemistry“;  
University of Helsinki, Helsinki, Finnland; 26. April 2007
65. „Ab-Initio Calculation of NMR Shieldings for 1000 and More Atoms“;  
XXIInd International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems; Göttingen,  
Deutschland, 20.–25. August 2006
64. „Rigorous Integral Estimates for Linear-Scaling Electron Correlation Methods“;  
SPP 1145 Symposium, Bad Herrenalb, Deutschland, 26.–28. Juli 2006
63. „Molekulare Erkennung — Herausforderungen für die Quantenchemie“;  
Universität Stuttgart, Stuttgart, Deutschland, 20. Juni 2006
62. „Quantenchemie für Moleküle mit 1000 und mehr Atomen: Methodenentwicklung und An-  
wendung“;  
Universität Kaiserslautern, Kaiserslautern, Deutschland, 18. Mai 2006
61. „Quantenchemie für große Moleküle: Methodenentwicklung und Anwendung“;  
Universität Frankfurt, Frankfurt, Deutschland, 6. Februar 2006
60. „Multipole-Based Integral Estimates for Quantum Chemical Methods“;  
Universität Stuttgart, Stuttgart, Deutschland, 31. Januar 2006
59. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Development and Application“;  
Universität Basel, Basel, Schweiz, 19. Januar 2006
58. „Quantenchemische Berechnung von NMR-Spektren für 1000 und mehr Atome“;  
Universität Freiburg, Freiburg, Deutschland, 15. November 2005
57. „Rigorous Integral Screening for Electron Correlation Methods“;  
41. Symposium für Theoretische Chemie, Innsbruck, Österreich, 5.–7. September 2005
56. „Linear-Scaling Ab Initio Methods“;  
MPI-Workshop 'Complex Functional Materials: Interplay of Experiment and Simulation',  
Schloß Ringberg, Tegernsee, Deutschland, 28. August – 2. September 2005
55. „Towards Linear-Scaling Electron Correlation Methods by Rigorous Integral Criteria“;  
Universität Mainz, Mainz, Deutschland, 26. Juli 2005
54. „Development of a Linear-Scaling MP2 Method for Large Molecules by Rigorous Integral  
Criteria“;  
SPP 1145 Workshop, Bonn, Deutschland, 4.–6. Juli 2005
53. „Ab initio NMR Shieldings for 1000 and More Atoms: Linear Scaling Methods“;  
Universität Göttingen, Göttingen, Deutschland, 9. Februar 2005
52. „Ab initio NMR-Spektren für 1000 und mehr Atome: linear-skalierende Methoden“;  
Universität Essen, Essen, Deutschland, 31. Januar 2005
51. „Ab-initio NMR-Spektren für molekulare Systeme mit 1000 und mehr Atomen: linear-  
skalierende Methoden“;  
Dechema Arbeitsausschuß 'Kinetik und Reaktionsmechanismen', Frankfurt, Deutschland,  
10. Januar 2005
50. „Quantum Chemistry for Large Molecular Systems with 1000 and More Atoms: Development  
and Application“;  
University of Geneva, Genf, Schweiz, 9. Dezember 2004
49. „Quantenchemie für große Moleküle“;  
Dozentenversammlung; GK; Bad Teinach, Deutschland, 5.–7. Dezember 2004

48. „Ab initio NMR Shieldings for 1000 and More Atoms: Linear Scaling Methods“; Symposium in Honor of Henry F. Schaefer’s 60th Birthday, ACS Meeting, Philadelphia, USA, 22.–26. August 2004
47. „Computer statt Reagenzglas — wie macht man Chemie mit dem Computer?“; Studium Generale; Universität Tübingen, Tübingen, Deutschland, 9. Februar 2004
46. „Quantenchemie von der Astrophysik zur Biochemie“; GDCh-Kolloquium (Antrittsvorlesung), Universität Tübingen, Tübingen, Deutschland, 11. Dezember 2003
45. „Quantenchemie für große Moleküle: Entwicklung und Anwendung“; Universität Erlangen, Erlangen, Deutschland, 4. Dezember 2003
44. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Development and Application“; Universität Marburg, Deutschland, 28. Oktober 2003
43. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Development and Application“; SFB-Symposium, Universität Bielefeld, Deutschland, 9.–10. Oktober 2003
42. „Linear-scaling Methods for Large Molecules“; Konferenz „A Coastal Voyage in Quantum Chemistry“; Tromsø-Trondheim, Norwegen, 18.–21. September 2003
41. „Quantum Chemistry for Large Molecules: Development and Application“; Peking University, Peking, China, 12. September 2003
40. „Entwicklung und Anwendung linear-skalierender Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Molekülsysteme“; Universität Würzburg, Deutschland, 19. Mai 2003
39. „Large Molecules — A Challenge for Quantum Chemistry“; SFB-Symposium „Frontiers in Theory and Synthesis of Complex Molecules“, Universität Münster, Deutschland, 16. Mai 2003
38. „Entwicklung und Anwendung linear skalierender Ab-initio-Methoden für die Berechnung großer Moleküle“; DPG-Frühjahrstagung, Hauptvortrag, Hannover, Deutschland, 24.–28. März 2003
37. „Linear-scaling Methods in Hartree-Fock and Density-Functional Theory“; Vortragsreihe (3 Vorträge) im Rahmen des Workshops Theoretische Chemie, Mariapfarr, Salzburg, Österreich, 18.–21. Februar 2003
36. „Entwicklung und Anwendung linear skalierender Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“; Graduiertenkolleg „Chemie in Interphasen“, Universität Tübingen, Deutschland, 29. Oktober 2002
35. „Structure Determination in the Solid State by Coupling Theory and Experiment“; „E.L.B.A – Max Planck Forum on Nanoscale Science and Technology“ MPIP, Mainz, Deutschland, 25.–28. September 2002
34. „Linear Scaling ab initio Methods for Large Molecules: Development and Application“; 2nd German American Symposium „Frontiers of Chemistry“ (GAFOC), Durham, New Hampshire, USA, 23.–25. August 2002
33. „Linear Scaling ab initio Methods for Large Molecules: Development and Application“; EURESCO-Konferenz „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Wildbad-Kreuth, Deutschland, 21.–26. Juli 2002
32. „Theorie und Anwendung der Car-Parrinello-Moleküldynamik in der Chemie“; Habilitationskolloquium, Universität Mainz, Mainz, Deutschland, 11. Juni 2002

31. „Strukturbestimmung durch Kopplung von Theorie und Experiment“; Symposium „Molekulare Erkennung“;  
Essen, Deutschland, 7.–9. März 2002
30. „Linear Scaling ab initio Methods for Large Molecules“;  
Universität Bochum, Bochum, Deutschland, 23. Januar 2002
29. „Entwicklung und Anwendung linear skalierende Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Fa. Merck, Stipendiatentreffen des FCI, Darmstadt, Deutschland, 28. September 2001
28. „Linear Scaling ab initio Methods for Large Molecules: Development and Application“;  
37. Symposium für Theoretische Chemie, Bad Herrenalb, Deutschland, 23.–27. September 2001
27. „Entwicklung und Anwendung neuer Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Universität Erlangen, Erlangen, Deutschland, 10. Juli 2001
26. „Large Biomolecules as a Challenge for Quantum Chemistry“;  
International Symposium „Isolated Molecules of Biological Interest“, Düsseldorf, Deutschland, 27. Juni – 1. Juli 2001
25. „Entwicklung und Anwendung linear skalierender Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Universität Bonn, Bonn, Deutschland, 11. Juni 2001
24. „Entwicklung und Anwendung neuer Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Bunsentagung 2001 Stuttgart, Deutschland, 24.–26. Mai 2001
23. „Entwicklung und Anwendung linear skalierender Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Universität Kiel, Kiel, Deutschland, 22. Mai 2001
22. „Entwicklung und Anwendung neuer Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Chemiedozenten-Tagung 2001, Leipzig, Deutschland, 18.–21. März 2001
21. „Entwicklung und Anwendung neuer Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Universität Essen, Essen, Deutschland, 5. Februar 2001
20. „Entwicklung und Anwendung neuer Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Universität Tübingen, Tübingen, Deutschland, 30. Januar 2001
19. „Linear skalierende Ab-initio-Methoden und ihre Anwendung auf große Moleküle am Beispiel von Hexabenzocoronenen, molekularen Pinzetten und H-verbrückten Systemen“;  
Universität Mainz, Mainz, Deutschland, 15. Januar 2001
18. „Linear-Scaling Methods for Large Molecules: Development and Application“;  
Universität Stuttgart, Stuttgart, Deutschland, 5. Dezember 2000
17. „Large Molecules as a Challenge for Quantum Chemistry“;  
Max-Planck Institut für Polymerforschung, Mainz, Deutschland, 21. Juni 2000
16. „Large Molecules — a Challenge for Quantum Chemistry“;  
MolProp Meeting, Stockholm, Schweden, 28.–29. Mai 2000

15. „Untersuchung großer Moleküle als Herausforderung für die Entwicklung neuer Ab-initio-Methoden“;  
Chemiedozenten-Tagung 2000, Regensburg, Deutschland, 19.–22. März 2000
14. „Große Moleküle — eine Herausforderung für die Ab-initio-Quantenchemie“;  
Universität Bonn, Bonn, Deutschland, 16. Dezember 1999
13. „Neue Ab-initio-Methoden zur Untersuchung chemischer Eigenschaften von großen Molekülen“;  
Forschungszentrum der Cynamid Forschung, Stipendiatentreffen des FCI, Schwabenheim, Deutschland, 26. Juni 1999
12. „Neue Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Bunsentagung 1999, Dortmund, Deutschland, 13.–15. Mai 1999
11. „Neue Ab-initio-Methoden zur Untersuchung großer Moleküle“;  
Steinheimer Gespräche; FCI; Steinheim, Deutschland, 15.–18. April 1999
10. „New ab initio Methods for the Treatment of Very Large Molecules“;  
The 100th Annual Meeting of the American Physical Society Atlanta, Georgia, USA, 21.–26. März 1999
9. „New ab initio Methods for Very Large Molecules“;  
Max-Planck Institut für Polymerforschung, Mainz, Deutschland, 20. Januar 1999
8. „Entwicklung neuer Ab-initio-Methoden: auf dem Weg von Astrophysik zur Biochemie“;  
Universität Dortmund, Dortmund, Deutschland, 22. Oktober 1998
7. „New ab initio methods for very large molecules“;  
34. Symposium für Theoretische Chemie, Gwatt-Zentrum am Thunersee, Schweiz, 20.–24. September 1998
6. „New Developments in ab initio Theory for Very Large Molecules and the Application to Chemically Important Systems“;  
SUNY Stony Brook, NY, USA, 20. Nov. 1997
5. „New Developments in ab initio Theory for Very Large Molecules and the Application to Chemically Important Systems“;  
University of Chicago, Chicago, IL, USA, 12. November 1997
4. „New Developments in ab initio Theory for Very Large Molecules and the Application to Chemically Important Systems“;  
Michigan State University, East Lansing, MI, USA, 5. November 1997
3. „New Developments in ab initio Theory for Very Large Molecules and the Application to Chemically Important Systems“;  
University of Washington, Seattle, USA, 31. Oktober 1997
2. „Linear-Scaling Schemes for Self-Consistent Field and Coupled Perturbed Theories using Density Matrix-Based Formulations“;  
213 th American Chemical Society National Meeting, San Francisco, California, USA, 13.–17. April 1997
1. „Linear-Scaling Schemes for Self-Consistent Field and Coupled Perturbed Theories Using Density Matrix-Based Formulations“;  
18th Annual West Coast Theoretical Chemistry Conference, Berkeley, California, USA, 9.–11. April 1997