

A U S H A N G

FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Mathematik und Informatik

Promotionsbüro, Arnimallee 14, 14195 Berlin

DISPUTATION

Donnerstag, 3. Mai 2018, 11.00 Uhr

**Ort: Fachbereich Physik der FUB, Dozentenraum (1.1.08),
Arnimallee 14, 14195 Berlin**

Disputation über die Doktorarbeit von

Herrn Christoph Gorgulla

Thema der Dissertation:

Free Energy Methods

Involving Quantum Physics, Path Integrals, and Virtual Screenings

Development, Implementation and Application in Drug Discovery

Thema der Disputation:

**Feynman's Path Integral Approach and its Application
in Computational Chemistry**

Die Arbeit wurde unter der Betreuung von **Prof. Dr. Chr. Schütte** durchgeführt.

Abstract: There exists a variety of alternative formulations of quantum mechanics. One of them is the path integral representation conceived by Richard Feynman, which has several distinct features and advantages. In this talk, the path integral formulation will be derived for a one-particle system. Furthermore, it will be shown how this form can be used in statistical mechanics to obtain alternative representations of the canonical partition function and corresponding ensemble averages. Finally, it will be illustrated how these results can be used in computational chemistry for explicitly including nuclear quantum effects via molecular dynamics-based simulations.

Die Disputation besteht aus dem o. g. Vortrag, danach der Vorstellung der Dissertation einschließlich jeweils anschließenden Aussprachen.

Interessierte werden hiermit herzlich eingeladen

Der Vorsitzende der Promotionskommission

Prof. Dr. Chr. Schütte