

# A U S H A N G

---

## FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Mathematik und Informatik

Promotionsbüro, Arnimallee 14, 14195 Berlin

## DISPUTATION

**Montag, 27. November 2023, 15:00 Uhr**

**Ort: Seminarraum 005**

**(Fachbereich Mathematik und Informatik, Takustr. 9, 14195 Berlin)**

**Disputation über die Doktorarbeit von**

**Niels Thorren Kirschbaum**

**Thema der Dissertation:**

**On the Electronic Structure of Nanodiamonds for Photocatalysis**

**Thema der Disputation:**

**Machine Learning for Chemistry**

Die Arbeit wurde unter der Betreuung von **Prof. Dr. F. Noé** durchgeführt.

Abstract: In chemistry, machine learning has been used to tackle a large variety of problems, ranging from high-throughput-screening to the acceleration of molecular dynamics simulations. This presentation introduces the algorithms used for supervised machine learning of atomic and molecular properties, i.e., atomic fingerprints and graph neural networks. I explain the fundamental concepts of the different types of algorithms and give one example for each of them.

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. F. Noé