





Dipl.-Chem. Supercomputer

Vor dem Computerzeitalter war chemische Forschung teueres und stupides Kochen, jetzt werden komplizierte Experimente gezielt im Rechner simuliert.

1984

Convex C1 Mini-Supercomputer

More powerful than the mainframes in the Erlangen computer center!



“The right answer for the right reason”

1993: Computer-Chemistry-Center



Paul von Ragué Schleyer
Ab initio and DFT calculations



Tim Clark
Semiempirical MO
Molecular Dynamics



Johnny Gasteiger
Cheminformatics

Groups in CCC (2016)



Tim Clark



Bernd Meyer



Dirk Zahn

Computational chemistry (*Ab Initio*, DFT, semiempirical MO, Force Field),
Cheminformatics, Molecular Dynamics, Surface Chemistry, Materials Science,
Nucleation and Selforganization, Software development, Theoretical chemistry

