



## Christina Ertural, geb. Zitlau



✉ christina.ertural@rwth-aachen.de

in christina-ertural

R<sup>G</sup> Christina-Ertural

Geboren am 30. Januar 1992 in Sawety Iljitscha, Russland  
Nationalität: Deutsch

### AKADEMISCHE LAUFBAHN

Dezember 2017 – Juli 2022

#### Promotion in Chemie

Lehrstuhl für Festkörper- und Quantenchemie, Institut für Anorganische Chemie, RWTH Aachen University, Arbeitskreis Dronskowski, Note: 1,0

- Dissertation: Über die elektronische Struktur funktioneller Festkörpermateriale und ihre Beschreibung mittels lokaler Bindungsindikatoren
- Forschungsgebiet: Chemische Bindung in (funktionellen) Festkörpermateriale
- LOBSTER-Softwareentwicklung in C++ (cohpc.de)

2015 – 2017

#### Master of Science in Chemie

Fachgruppe Chemie, RWTH Aachen University; Note: 1,4

- Masterarbeit: „Vollständige Wellenfunktionsoptimierung von Übergangsmetallverbindungen mit Quanten-Monte-Carlo“ (Englisch)  
Institut für Physikalische Chemie
- Forschungspraktikum: „N-CH<sub>3</sub>/N-CF<sub>3</sub>-Bioisosteriestudien über pharmazeutisch relevante Verbindungen: Auswirkung auf Löslichkeiten und pK<sub>A</sub>“ (Englisch)  
Institut für Organische Chemie
- Forschungspraktikum: „Metallizität, Ionizität und Kovalenz in einigen Mono-Übergangsmetallmonoboriden“ (Deutsch)  
Institut für Anorganische Chemie

2011 – 2015

#### Bachelor of Science in Chemie

Fachgruppe Chemie, RWTH Aachen University; Note: 2,7

- Bachelorarbeit: „Optimierung der Bedingungen zur Synthese von Poly-Diacetylen-stabilisierten Goldnanopartikeln“ (Deutsch)  
Institut für Anorganische Chemie

### WEITERE QUALIFIKATIONEN

Sprachen	Deutsch (Muttersprache), Englisch (B2-Zertifikat, fließend)
Software- und Programmierkenntnisse	VASP, Adobe Illustrator, CorelDRAW (Fortgeschritten) Quantum ESPRESSO, ABINIT, Gaussian, Molpro (Grundlagen) C++ (Fortgeschritten), Python, bash, gnuplot (Grundlagen)
Workshopbetreuung	• LOBSTER Summer School – „Explicit Chemical-Bonding Analysis of Materials from High-Performance First-Principles Simulations“ (2018, 2019, 2020)
Vorträge	• 48. Hirschegg-Seminar Festkörperchemie (2019) Vortragstitel „Populationsanalyse in LOBSTER“
Teilnahme an	• HPC Tuning Workshop – Introduction to Performance Engineering and Analysis (aiXcelerate 2019) • LOBSTER Summer School – „Explicit Chemical-Bonding Analysis of Materials from High-Performance First-Principles Simulations“ (CECAM 2017) • Summer School „The Chemical Bonds at the 21st Century – 2017“ (CB2017, VB2017)
Interessen	Ehrenamt, Handarbeiten, Sport, Sprachen