

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2008)

Zeit: mittwochs 14:15, Ort: Seminarraum NC 03/399

09. 04. 2008 **Dr. Florian Janetzko**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn
Simulation of extended systems using the cyclic cluster model
(Seminararustauschprogramm Bonn / Bochum)
16. 04. 2008 **Prof. Dr. Stefan Grimme**, Organisch-Chemisches Institut (Abt. Theoretische Chemie), Westfälische Wilhelms-Universität
Non-local Electron Correlation Effects and Non-covalent Interactions in Large Molecules
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
23. 04. 2008 **Prof. Dr. Wenjian Liu**, Institute for Theoretical and Computational Chemistry, College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University
Relativistic Theory for NMR Parameters
30. 04. 2008 **Prof. Dr. Reinhold Fink**, Institut für Physikalische Chemie, Universität Würzburg
Understanding organic solar cells: A challenge for Quantum Chemistry
07. 05. 2008 **M.Sc. Nina Winter**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Equilibrium structures of the adenine thymine base pair in the ground and first excited state
14. 05. 2008 kein Kolloquium
- Sondertermin** **Dr. Mark Pederson**, Center for Computational Materials Science, Naval Research Lab.-639, Washington DC
Mo 19. 05. 2008 14:15, NC 03/399 *Theory of Molecules and Clusters and Nanoscale Devices*
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
21. 05. 2008 kein Kolloquium
- Sondertermin** **Prof. Dr. Axel Groß**, Institut für Theoretische Chemie, Universität Ulm
Di 27. 05. 2008 11:15, NC 5/99 *Reactions at surfaces from first principles: energetics, dynamics and kinetics*
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
04. 06. 2008 **M.Sc. Janos Kiss**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Theoretical investigation of the high-pressure methanol synthesis process
11. 06. 2008 **Dr. Michael Thoss**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Technische Universität München
Quantum dynamics of charge transfer processes in the condensed phase
18. 06. 2008 **Dr. Andreas Glöb**, Lehrstuhl Theoretische Chemie, Institut für Physikalische Chemie, Universität Karlsruhe
Efficient implementation of the MP2-R12 method for applications to large molecules
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
25. 06. 2008 **Dr. Florian Weigend**, Institut für Nanotechnologie, Forschungszentrum Karlsruhe
Density functional treatments of metal- and semi-metal clusters
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
02. 07. 2008 kein Kolloquium
09. 07. 2008 **Dr. Jordi Ribas Arino**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Several aspects of mechanochemistry: from thiolates adsorbed on gold surfaces to electrocyclic reactions
- Sondertermin** **Prof. Dr. Martin Schütz**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Regensburg
Di 15. 07. 2008 11:15, NC 5/99 *Local correlation methods for excited states*
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
13. 08. 2008 **Dr. Lukasz Walewski**, Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling, University of Warsaw
Molecular simulations of proton transfer reaction in porphycene

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !