

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2012)

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

04. 04. 2012 kein Kolloquium
11. 04. 2012 **Peter Schwerdtfeger**, Centre for Theoretical Chemistry and Physics, Massey University, Auckland
Spheres, Fullerenes and Hyperfullerenes
18. 04. 2012 kein Kolloquium
25. 04. 2012 **Piero Ugliengo**, Dipartimento Chimica IFM, University of Torino, Italy
Computational Simulations of Prebiotic Processes
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
02. 05. 2012 **Alexander Urban**, Interdisciplinary Center for Molecular Materials (ICMM) and Computer-Chemistry-Center (CCC) Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
Crystal-field tight-binding as approximate DFT
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
09. 05. 2012 **Waldemar Hujo**, Organisch-Chemisches Institut, Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Accurate description of Ionic liquids, weak hydrogen bonds and thermochemistry by dispersion-corrected density functional theory
16. 05. 2012 wird noch bekannt gegeben
23. 05. 2012 **Evert Jan Meijer**, Computational Chemistry and Physics Group, Amsterdam Center for Multiscale Modeling (ACMM), University of Amsterdam, The Netherlands
Understanding Aqueous Chemistry by Molecular Simulation
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
30. 05. 2012 **Dimitri G. Liakos**, Max-Planck-Institut für Bioanorganische Chemie, Mülheim a.d. Ruhr
Improved Correlation Energy Extrapolation Schemes based on Local Pair Natural Orbital Methods
06. 06. 2012 wird noch bekannt gegeben
13. 06. 2012 **Thomas la Cour Jansen**, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, University of Groningen, The Netherlands
The theory and simulation of two-dimensional vibrational spectroscopy
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
20. 06. 2012 wird noch bekannt gegeben
27. 06. 2012 **Till Westermann**, Theoretische Chemie, Fakultät für Chemie, Universität Bielefeld
First principle non-linear quantum dynamics using a correlation-based von Neumann entropy
04. 07. 2012 **Ralf Ludwig**, Institute of Chemistry, University of Rostock
Raum: NC 5/99 *Effects of temperature, pressure and additives on the structure and dynamics of water*
(Gemeinsames Seminar mit Research Department "IFSC")
11. 07. 2012 wird noch bekannt gegeben

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !