

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2013)

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

24. 04. 2013 **Benjamin Helmich & Daniel Friese**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Analytic Hessians and vibrational spectra calculations for RI-CC2 and RI-MP2 & A low scaling pair natural approach for excited states
12. 06. 2013 **Angelos Michaelides**, Theoretical Chemistry, London Centre for Nanotechnology,
Raum: NB 2/99 London
Towards accurate and reliable simulations of ice, water at surfaces, and some other things...
(Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 "RESOLV")
- Sondertermin** **Alexander Sokolov**, Center for Computational Quantum Chemistry, The University
Di 18. 06. 2013 of Georgia, USA
Recent Developments in Density Cumulant Functional Theory
19. 06. 2013 **Tobias Morawietz**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Development of Efficient and Accurate Potentials for the Simulation of Water Based on Artificial Neural Networks
26. 06. 2013 **Stephan Ehrlich**, Mulliken Centre for Theoretical Chemistry, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn
Dispersion Coefficients in DFT-D3: Development and Applications
(Seminar austauschprogramm Bonn / Bochum)
17. 07. 2013 **Miriam Wollenhaupt**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Mechanochemistry of Cyclopropane Ring-Opening Reactions

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !