

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2007/2008)

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

17. 10. 2007 kein Kolloquium
24. 10. 2007 **Taras Petrenko**, Theoretische Chemie, Universität Bonn
Analysis and prediction of absorption bandshapes, fluorescence bandshapes, resonance Raman intensities and excitation profiles using the time dependent theory of electronic spectroscopy
(Seminarar Austauschprogramm Bonn / Bochum)
31. 10. 2007 kein Kolloquium
07. 11. 2007 **Christoph Dellago**, Computational Physics Group, Universität Wien
Transition path sampling simulations of phase transitions
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
14. 11. 2007 **Jochen Schirmer**, Theoretische Chemie, Universität Heidelberg
Is time-dependent density functional theory (TDDFT) formally exact?
- Sondertermin** **Walter Langel**, Institut für Biochemie, Universität Greifswald
Di 20. 11. 2007 *Simulations of titanium dioxide surfaces in real world systems*
11.15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
28. 11. 2007 **Hermann Gies**, Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik,
Ruhr-Universität Bochum
Minerals and prebiotic chemistry
05. 12. 2007 **Alexander Witt**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Quantum simulations of protonated methane: structure, IR spectra, and microsolvation
- Sondertermin** **Jörg Behler**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Di 11. 12. 2007 *Neural Network Potentials for Chemical Reactions: From Dynamics at Surfaces*
11.15, NC 5/99 *to Phase Transitions in Solids*
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
12. 12. 2007 **Wolfgang Hieringer**, Theoretische Chemie, Universität Erlangen-Nürnberg
Aspects of response property calculations using density-functional methods
- Sondertermin** **Ulrich Heiz**, Physikalische Chemie, Technische Universität München
19. 12. 2007 *Size effects in cluster catalysis*
14.15, NB 2/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
09. 01. 2008 **Hans Kricheldorf**, Institut für Technische und Makromolekulare Chemie,
Universität Hamburg
Polypeptides from alpha-Amino Acid-N-Carboxyanhydrides
- Sondertermin** **Mark Waller**, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr
Di 15. 01. 2008 *Simulating the ⁵¹V Solid-State MAS NMR spectra of VCPO: A QM/MM Success*
14.15, NC 03/399 *Story*
16. 01. 2008 **Christoph van Wüllen**, Theoretische Chemie, Technische Universität
Kaiserslautern
Quantum chemical investigations on metal-catalyzed Michael reactions
- Sondertermin** **Nuria Lopez**, ICIQ Institut Català d' Investigació Química, Barcelona
Di 22. 01. 2008 *Different aspects of gold catalysis*
11.15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
30. 01. 2008 **Thomas Adler**, Theoretische Chemie, Universität Stuttgart
Local explicitly correlated F12 theories
06. 02. 2008 **Volker Blum**, Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin
DFT and beyond with local orbitals - FHI-aims, a new all-electron/full-potential code
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
13. 02. 2008 **Yoshitaka Tateyama**, National Institute for Materials Science, Tsukuba
Photo- and Electro-chemical reactions by TDDFT propagation and CPMD energy gap schemes

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !