RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

RUB

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2019/2020)

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

Sondertermin Do 10. 10. 2019 15:00h, ZEMOS 0.17	**Sonia Coriani**, Department of Chemistry, University of Denmark, Copenhagen, Denmark *Theoretical 'Beamlines' for Modern Spectroscopic Experiments* (Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
23. 10. 2019	**Michael Walter**, Freiburg Centre for Interactive Materials and Bioinspired Technologies, University of Freiburg *From bond rupture to weakly interacting systems - insights from density functional theory*
30. 10. 2019	**Oldamur Hollóczki**, Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn *Nanoplastics from molecular dynamics simulations* (Seminaraustauschprogramm Bonn/Bochum)
06. 11. 2019	**Mihkel Ugandi**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum *Exploration of excited state potential energy surfaces: computations and implementation*
13. 11. 2019	**Laura Durán Caballero**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum *Quantum solvation of Molecules in para-hydrogen*
20. 11. 2019	**Reinhold Fink**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Tübingen *Approaching chemical accuracy with second order perturbation theory by mixing RE and MP Hamiltonians and orbital optimization*
27. 11. 2019	**Benjamin Rotenberg**, Laboratoire PHENIX, Sorbonne Université, Paris, France *Electrode/electrolyte interfaces: insights from classical molecular simulations and applications to energy storage, blue energy harvesting and water desalination* (Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
04. 12. 2019	**Esma Birsen Boydas**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum *Mechanistic insights into the reduction of carbon dioxide by supramolecular mixed-valent complexes from quantum chemical calculations*
18. 12. 2019	**Klaus-Robert Müller**, Institute of Software Engineering and Theoretical Computer Science, Machine Learning, Technische Universität Berlin *Machine Learning meets Quantum Chemistry* (Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)

RUB

08. 01. 2020	**Ivano Tavernelli**, IBM Zurich Research Laboratory, Zürich, Schweiz *Quantum computing and its applications in chemistry and physics* (Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
15. 01. 2020	**Toon Verstraelen**, Center for Molecular Modeling, Techlane Ghent Science Park, Campus Ardoyen, Zwijnaarde, Belgien *Force Field Modeling of Short-Range Induction Interactions and Polarizable Atomic Monopoles* (Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
22. 01. 2020	**Samuli Ollila**, Institute of Biotechnology, University of Helsinki, Finnland *Combination of NMR Experiments and MD Simulations to Study Disordered Biomolecules* (Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
29. 01. 2020	**Birgit Strodel**, Forschungzentrum Jülich, Biophysics and Soft Matter, Jülich *Possibilities and current limitations of joining MD simulations and experiments* (Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“)
Sondertermin Mi 05. 02. 2020 14:15h	**Sapna Sarupria**, Chemical and Biomolecular Engineering, Clemson University, USA *Pushing the limits of simulations of complex systems – from nucleation to biomolecules, from rare event sampling to multiscale modeling* (Gemeinsames Seminar mit EXC 2033 „RESOLV“ und „Research Department Solvation Science“)

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen!