

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2011/2012)

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

19. 10. 2011 **Martin Müser**, Lehrstuhl für Materialsimulation, Universität des Saarlandes
From electronic DFT to continuum mechanics based descriptions of tribological phenomena
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
26. 10. 2011 **Benjamin Helmich**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Local pair natural orbitals for excited states
- Sondertermin Do 27. 10. 2011** **Malgorzata Krasowska**, Faculty of Chemistry, University of Wroclaw, Poland
Intramolecular hydrogen bonding in thiosemicarbazones and dipyrins
09. 11. 2011 **Hauke Clausen-Schaumann**, Physikalische Technik, Hochschule für Angewandte Wissenschaften, München
Chemical Reactions under Force: Kinetic Measurements of Mechanically Activated Bond Scission
(Reinhard Koselleck Vorlesung)
16. 11. 2011 **Christoph Jacob**, CFN-Nachwuchsgruppe Theoretische Chemie, Karlsruher Institut für Technologie
Subsystem and Embedding Methods for Quantum Chemistry
23. 11. 2011 **Tucker Carrington Jr.**, Chemistry Department, Queen's University, Ontario
Computing ro-vibrational spectra
14. 12. 2011 **Jean-Francois Lambert**, Laboratoire de Reactivite de Surface, Universite Pierre et Marie Curie, Paris
Small Biomolecules on Inorganic Oxide Surfaces; Adsorption Mechanisms, Reactivity, and Prebiotic Buildup of Complexity
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
11. 01. 2012 **Gregor Diezemann**, Theoretische Chemie, Johannes Gutenberg-Universität Mainz
Force Probe Molecular Dynamics Simulations of Reversible Hydrogen-Bond Network Dynamics in Supramolecular Complexes
(Reinhard Koselleck Vorlesung)
18. 01. 2012 **Joachim Dzubiella**, Institut für Weiche Materie und Funktionale Materialien, Helmholtz-Zentrum Berlin
Modeling Hydration and Ion-Specific Effects in Protein Folding and Association
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
- Sondertermin Di 24. 01. 2012** **Axel Groß**, Institut für Theoretische Chemie, Universität Ulm
First Principles Description of Elementary Steps in Electrocatalysis
11:15, NC 2/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
01. 02. 2012 **Benoit Champagne**, Laboratoire de Chimie Theorique, Facultes Universitaires Notre-Dame de la Paix, Namur
Predicting and interpreting the second-and third-order nonlinear optical properties: from simple to more complex systems

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !