

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2009)

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

22. 04. 2009 **Sebastian Höfener**, Institut für Physikalische Chemie, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Karlsruhe
Time-independent properties from explicitly correlated methods
29. 04. 2009 **Asbjörn Burow**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin
Calculation of Coulomb energies for periodic systems with DFT, Gaussian basis functions, and the resolution of identity method
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
- Sondertermin** **Michael Springborg**, Physikalische und Theoretische Chemie, Universität des Saarlandes, Saarbrücken
Di 05. 05. 2009 11:15, NC 5/99 *Theoretical Studies of Structural and Electronic Properties of Clusters*
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
13. 05. 2009 **Jörg Koßmann**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Calculation of vibrational frequencies of adsorbates and adatoms on ZnO surfaces
20. 05. 2009 **Johannes Kästner**, Institut für Theoretische Chemie, Universität Stuttgart
Biochemical Simulations using QM/MM Techniques
27. 05. 2009 **Michael Römel**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Bonn
EPR spectroscopic properties of $Mo[(h\nu N)_3NX]$, $X=N_2, CO, NH_3$
(Seminar austauschprogramm Bonn / Bochum)
10. 06. 2009 **Daniel Borgis**, Laboratory for Analysis and Modelling for Biology and Environment, University of Evry-Val d'Essonne, Evry
Coarse-graining proteins and water for protein-protein interactions
17. 06. 2009 **Sara Bonella**, Department of Physics, University of Rome
Trajectory based simulations of mixed quantum-classical time correlation functions
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
- Sondertermin** **Thomas Bredow**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Bonn
Di 23. 06. 2009 11:15, NC 5/99 *Adsorption at metal and oxide surfaces: some challenges for theory*
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
01. 07. 2009 **Klaus Ruedenberg**, Department of Chemistry and Ames Laboratory, Iowa State University
Accurate potential energy curves and the transition from the covalent to the van der Waals regime
08. 07. 2009 **Sonia Coriani**, Università degli Studi di Trieste, Trieste
In silico determination of spectroscopic properties: a few recent methodological and applicative results
15. 07. 2009 **Bernd Ensing**, Van't Hoff Institute for Molecular Sciences, University of Amsterdam
Multiscale molecular dynamics of chemical and biophysical transitions

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !