

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretical Chemistry Colloquia (WS 2004/2005)

Time: wednesdays 14:15, Location: Seminarraum NC 03/399

13. 10. 2004 **Dr. Rochus Schmid**, Anorganische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Theoretical investigation of the decomposition mechanism of a single molecule precursor for gallium nitride
20. 10. 2004 **Professor Dr. Bern Kohler**, Department of Chemistry, Ohio State University
Ultrafast photodynamics in nucleic acids
- Special date** **Dr. Beate Paulus**, Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden
27. 10. 2004 *Wellenfunktionsbasierte Korrelationsmethoden für Festkörper - eine Alternative zur*
17:15, NC 5/99 *Dichtefunktionalmethode?*
- Special date** **Privatdozent Dr. Uwe Birkenheuer**, Max-Planck-Institut für Physik komplexer
03. 11. 2004 Systeme, Dresden
17:15, NC 5/99 *Quantenchemische Methoden für Festkörper und Oberflächen*
- Special date** **Privatdozent Dr. Frank Neese**, Max-Planck-Institut für Bioorganische Chemie,
Tu 09. 11. 2004 Mülheim an der Ruhr
17:15, NC 5/99 *Entwicklung und Anwendung von quantenchemischen Methoden zur theoretischen*
optischen und magnetischen Spektroskopie: von zweiatomigen Molekülen zu
Metallproteinen
- Special date** **Dr. Klaus Doll**, Institut für Mathematische Physik, Technische Universität
10. 11. 2004 Braunschweig
17:15, NC 5/99 *Elektronische Strukturrechnungen mit dem CRYSTAL-Programm*
- Special date** **Junior Professor Dr. Martin Albrecht**, Theoretische Chemie, Universität Siegen
Tu 23. 11. 2004 *Elektronische Korrelationen in heterogenen und in periodischen Systemen - erfassen*
17:15, NC 5/99 *und verstehen*
- Special date** **Privatdozent Dr. Christof Hättig**, Institut für Nanotechnologie,
24. 11. 2004 Forschungszentrum Karlsruhe
17:15, NC 5/99 *Berechnung korrelierter Grundzustands- und Anregungsenergien großer Moleküle*
mit RI-MP2 und RI-CC2
- Special date** **Privatdozent Dr. Markus Reiher**, Theoretische Chemie, Universität Bonn
Tu 30. 11. 2004 *Theorie für die Chemie: Entwicklung neuer quantenchemischer Verfahren für das*
17:15, NC 5/99 *Studium molekularer Systeme*
- Special date** **Professor Dr. Thorsten Klüner**, Institut für Reine und Angewandte Chemie,
Tu 07. 12. 2004 Universität Oldenburg
17:15, NC 5/99 *Theorie der Photochemie auf Oberflächen: Status und Perspektiven*
19. 01. 2005 **Dipl. Phys. Roman Kovacik**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität
Bochum
Calculation of STM images of clean, defective, and adsorbate-covered ZnO(10-10)
surfaces
(Joint seminar with SFB 558 "Heterogeneous Catalysis")
- Special date** **Dr. Rosendo Valero**, Leiden Institute of Chemistry, Gorlaeus Laboratories, Leiden
Fr 21. 01. 2005 University
Quantum dynamics and an ab initio PES for OH + CO: a challenge to current
methods
26. 01. 2005 **Dr. Juan Carlos Cuevas**, Theoretische Festkörperphysik, Universität Karlsruhe
Theory of electrical conduction in single-molecule junctions
(Joint seminar with the institute for theoretical physics III)
02. 02. 2005 **Professor Dr. Dr. Thomas Lippert**, Zentralinstitut für Angewandte Mathematik,
Forschungszentrum Jülich
New Science through High-End Supercomputing
- Special date** **Dr. Björn Feuerbacher**, Theoretische Chemie, Universität Heidelberg
Th 03. 02. 2005 *Diagrammatic approaches to the inelastic propagator*
Time: 16:15

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Visitors are welcome to the seminar.