RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

RUB

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2018)

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

25. 04. 2018	**Sebastian Stolzenberg**,Computational Molecular Biology, Freie Universität Berlin *Mechanistic Insights into MHC class II proteins using Molecular Dynamics Simulations and Markov State Modeling* (Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 „RESOLV“)
16. 05. 2018	**Ulrich Kleinekathöfer**,Department of Physics and Earth Sciences, Jacobs University Bremen gGmbH *Transport across Bacterial Membranes: Insights from Molecular Simulations* (Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 „RESOLV“)
30. 05. 2018	**Karin Fink**,Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Nanotechnologie, Karlsruhe *Ab initio calculations for transition metal chemistry*
06. 06. 2018	**Mario Barbatti**,Institut de Chimie Radicalaire, Aix-Marseille Université, Marseille, France *Nonadiabatic mixed quantum-classical dynamics simulations applied to organic molecules and assemblies*
13. 06. 2018	**Andreas Köhn**,Institute for Theoretical Chemistry, University of Stuttgart, Stuttgart *Accurate methods for complicated electronic structures*
20. 06. 2018	**Manuel Hochheim**,Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Universität Bonn *Surface Band-edge Levels From Current Hybrid DFT Methods, and Their Applications* (Seminaraustauschprogramm Bonn/Bochum)
27. 06. 2018	**Sebastian Höfener**,Karlsruher Institute of Technology (KIT), Institute of Physical Chemistry, Karlsruhe *Computing molecular properties in complex environments using frozen-density embedding methods* (Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 „RESOLV“)
04. 07. 2018	**Holger Gohlke**,Computational Pharmaceutical Chemistry, Heinrich-Heine-University, Düsseldorf *Rigidity theory-based perturbation approach to analyze dynamic allostery* (Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 „RESOLV“)
11. 07. 2018	**Alexander Auer**,Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr *From old methods for new applications to new methods for old problems - DFT for electrochemistry and tensor decomposition FCI*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen!

http://www.theochem.rub.de