

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2005/2006)

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

19. 10. 2005 **Falk Renth**, Physikalische Chemie, Universität Kiel
Photoinduced molecular dynamics of azobenzenes and nucleobases
26. 10. 2005 **Ulrich Kleinekathöfer**, Theoretische Physik, Technische Universität Chemnitz
Dynamics in molecular systems: classical and quantum mechanically
02. 11. 2005 **Michael Springborg**, Physikalische und Theoretische Chemie, Universität des Saarlandes
Electronic and structural properties of clusters and colloids
09. 11. 2005 **Nick Besley**, Department of Chemistry, University of Nottingham
Intracules, electron correlation and excited states
16. 11. 2005 **Workshop**, Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Theoretical approaches to ferredoxins
23. 11. 2005 **Michael Resch**, Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart/Universität Stuttgart
Simulation on supercomputers - a key technology for Europe?
30. 11. 2005 **Matthias Ullmann**, Biopolymere, Universität Bayreuth
Electrostatic regulation of protein action
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
07. 12. 2005 **Konstantinos Kotsis**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Ab initio calculations of O1s XPS spectra of bulk ZnO and ZnO surfaces
14. 12. 2005 **Hardy (E.K.U.) Gross**, Theoretische Physik, Freie Universität Berlin
Density functional theory beyond the Born-Oppenheimer approximation
21. 12. 2005 **Tillmann Klamroth**, Theoretische Chemie, Universität Potsdam
Correlated many-electron dynamics in molecules and metallic model systems
11. 01. 2006 **Peter Vöhringer**, Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn
Femtosecond spectroscopy of electronic and vibrational excitations in hydrogen-bonded fluids
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
18. 01. 2006 **Michael Filatov**, Theoretische Chemie, Universität Groningen
Non-dynamic electron correlation in DFT: perspectives of the ensemble approach
- Sondertermin** **Angelos Michaelides**, Abteilung Theorie, Fritz-Haber-Institut, Berlin
Di 24. 01. 2006 *Simulating ice nucleation from first principles*
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
01. 02. 2006 **Frank Lechermann**, Centre de Physique Théorique, École Polytechnique, Palaiseau
An introduction to the dynamical mean field approach to the electronic structure of correlated materials
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
- Sondertermin** **Carmen Sousa**, Departament de Química Física, Universitat de Barcelona
Di 07. 02. 2006 *Ab initio studies of defects in bulk and surface oxides. Metal clusters supported on the MgO surface*
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
- Sondertermin** **Sergei Ivanov**, V. A. Fock Physics Research Institute, Saint-Petersburg State University
Mo 20. 02. 2006 *Developing Bead-Fourier Path Integral Molecular Dynamics*
Zeit: 14.15
- Sondertermin** **Pawel Rodziewicz**, Chemistry, University of Leiden
Do 23. 02. 2006 *Blue-shifted hydrogen bonds*
Zeit: 14.00
- Sondertermin** **Diedrich T. F. Möhlmann**, DLR-Institut für Plantetenforschung
15. 03. 2006 *Water on Mars: presence, consequences, and challenges*
Zeit: 14.15 (Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
- Sondertermin** **Christof Drechsel-Grau**, Département de Chimie at École Normale Supérieure,
Do 16. 03. 2006 Paris
Zeit: 14.15 *Environmental effects on conical intersections: a model study of ethylen*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !