

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2013/2014)

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

16. 10. 2013 Paul Johnson, Department of Chemistry, McMaster University, Canada
Wavefunction Ansätze for Strongly-Correlated Systems
- Sondertermin Festkolloquium zum 80. Geburtstag von Werner Kutzelnigg,
Do 24. 10. 2013 *International Symposium: 40 Years of Concepts in Theoretical Chemistry from*
14:00, H-NC 30 *the Bochum Perspective*
Neese, Werner, Köhn, Pulay, Jeziorski, Gauss, Valeev
13. 11. 2013 Jan Rossmeisl, Department of Physics, Technical University of Denmark
Raum: NB 6/99 *Trends in electrocatalysis at the atomic scale*
~~CANCELLED~~
(Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 "RESOLV")
20. 11. 2013 Martin Brehm, Wilhelm-Ostwald-Institut für Physikalische und Theoretische
Chemie, Universität Leipzig
TRAVIS - A Free Trajectory Analyzer
(Seminar austauschprogramm Bonn / Bochum)
27. 11. 2013 Gemma Solomon, Nano-Science Center and Department of Chemistry,
University of Copenhagen
Chemical control of charge transport in molecular junctions
04. 12. 2013 Martin Zacharias, Physik-Department T38, Technische Universität München
Simulation of nucleic acid and peptide dynamics using advanced sampling
methods
(Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 "RESOLV")
08. 01. 2014 Sho Imoto, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Theoretical methodology for calculating nonlinear (2D) IR spectra from MD
simulations
(Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 "RESOLV")
15. 01. 2014 Michele Ceriotti, Merton College, University of Oxford, UK
Nuclear quantum effects in (first principles) molecular dynamics by colored-noise
thermostats
29. 01. 2014 Marialore Sulpizi, Institute of Physics, Johannes Gutenberg Universität Mainz
Water interfaces: structure and vibrational spectroscopy from DFT-based MD
simulations
(Gemeinsames Seminar mit EXC 1069 "RESOLV")
- Sondertermin Welcome of Lars Schaefer, Professor for Molecular Simulation, and his group,
05. 02. 2014
Zeit: 16:00

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !