

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2007)

---

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

---

04. 04. 2007 **Jun Yang**, Institut für Theoretische Chemie, Universität Köln  
*DFT simulations of metal triborates containing Bi and lanthanides and evaluations of optical tensors for large systems in wavefunction-based approaches*
11. 04. 2007 **Christian Tuma**, Institut für Chemie, Humboldt-Universität Berlin  
*A QM/QM hybrid method for MP2/plane-wave-DFT studies of extended systems*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
18. 04. 2007 **David E. Manolopoulos**, Physical & Theoretical Chemistry Laboratory, University of Oxford  
*Beyond quantum transition state theory: chemical reaction rates from ring polymer molecular dynamics*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
25. 04. 2007 **David Tew**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Karlsruhe  
*New developments in R12 methods*
02. 05. 2007 **Harald Nieber**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Nonadiabatic ab initio molecular dynamics: photochemistry of biomolecules*
09. 05. 2007 **Otto E. Rössler**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Tübingen  
*Origin of life*
16. 05. 2007 **Dusanka Janezic**, National Institute of Chemistry, Ljubljana  
*Computing infrared spectra for complex molecular systems*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
23. 05. 2007 **Darragh O'Neill**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Mainz  
*Third-order properties in coupled-cluster theory*
30. 05. 2007 **Gero Schmidt**, Lehrstuhl für Theoretische Physik, Universität Paderborn  
*Organic molecule adsorption on solid surfaces from density-functional calculations*
06. 06. 2007 **Mark Tuckerman**, Department of Chemistry and Courant Institute, New York University  
*Ab initio molecular dynamics in the complete basis set limit using DVR techniques*
- Sondertermin Di 12. 06. 2007** **Christian Ochsenfeld**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Tübingen  
11.15, NC 5/99 *Quantum chemistry for large molecules: linear-scaling methods for mean-field and correlated approaches*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
20. 06. 2007 **Philippe Hünenberger**, Physikalische Chemie, ETH Hönggerberg Zürich  
*The determination of single-ion solvation free energies: an experimental and theoretical puzzle*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
27. 06. 2007 **Sara Bonella**, Department of Physics, University of Rome "La Sapienza"  
*Mixed quantum-classical approaches to nonadiabatic MD*  
**- cancelled -**
- Sondertermin Di 03. 07. 2007** **Marco Bernasconi**, Department of Materials Science, University of Milano Bicocca  
11.15, NC 5/99 *Chemical reactions at surfaces by ab-initio metadynamics*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
11. 07. 2007 **Alessandro Laio**, Statistical and Biological Physics, SISSA Trieste  
*Recent developments of metadynamics*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

**Gäste sind herzlich willkommen !**