

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2010)

---

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

---

21. 04. 2010 kein Kolloquium
- Sondertermin Christian Schön**, MPI für Festkörperforschung, Stuttgart  
**Di 27. 04. 2010** *Providing solid state chemistry with a theoretical foundation: employing energy landscapes for crystal structure prediction and the modeling of amorphous compounds*  
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
05. 05. 2010 **Georg Jansen**, Theoretische Organische Chemie, Universität Duisburg-Essen  
*Description of intermolecular interactions with density functional- and perturbation theory-based approaches*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
12. 05. 2010 **Thomas Dittrich**, Departamento de Fisica, Universidad Nacional de Colombia, Bogota  
*Complex quantum dynamics in phase space - making sense of Wigner functions*
19. 05. 2010 Thema wird noch bekannt gegeben
02. 06. 2010 **Antonio Rizzo**, Institute for chemical and physical processes, National Research Council, Pisa  
*Linear and Nonlinear Absorption Spectra: Vibrational and Confirmation Effects*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
09. 06. 2010 **Daniel Sebastiani**, Fachbereich Physik, Freie Universität Berlin  
*Interplay of first-principles molecular dynamics and theoretical spectroscopy in complex systems: More than the sum of the components*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
- Sondertermin Pavel Mach**, Department of Biophysics and Molecular Physics, Comenius  
**Di 15. 06. 2010** University, Bratislava  
11:15, NC 5/99 *Beryllium - hydrogen clusters, what can theory contribute*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
23. 06. 2010 **Gerald Knizia**, Institut für Theoretische Chemie, Universität Stuttgart  
*A tensor framework for implementing general quantum chemistry algorithms*
30. 06. 2010 **Dmitry Ganyushin**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn  
*A spin-orbit coupled complete active space self-consistent field approach*  
(Seminar austauschprogramm Bonn / Bochum)
07. 07. 2010 kein Kolloquium
14. 07. 2010 **Sebastian Höfener**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Institut für Physikalische Chemie, Universität Karlsruhe  
*Analytic calculation of first-order molecular properties at the MP2-F12 level*
21. 07. 2010 **Jozef Noga**, Slovak Academy of Science, Bratislava  
*An exact reformulation of SCF methods via variational coupled-cluster singles - an alternative way to diagonalization-free algorithms using non-unitary transformations*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

Gäste sind herzlich willkommen !