

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretical Chemistry Colloquia (WS 2010/2011)

---

Time: wednesdays 14:15, Location: Seminarraum NC 03/399

---

20. 10. 2010 **Stefan Goedecker**, Department of Physics and Astronomy, University of Basel  
*Exploring the energy landscape of nanosystems on the density functional level*  
(Joint seminar with SFB 558 "Heterogeneous Catalysis")
27. 10. 2010 **Sebastian Braun**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Molecular dynamics studies of a photoswitchable foldamer in solution*
03. 11. 2010 no colloquium
10. 11. 2010 **Ors Legeza**, Research Institute for Solid-State Physics and Optics, Hungarian Academy of Sciences  
*Application of quantum information entropies in quantum chemistry using the density-matrix renormalization-group method*
17. 11. 2010 **Mathias Pabst**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Mainz,  
*Calculation of transient absorption spectra of triplet excimers*
24. 11. 2010 **Stefan M. Kast**, Theoretische Physikalische Chemie, Technische Universität Dortmund  
*Computational approaches to understand ion channel function*
01. 12. 2010 **Jörg Tatchen**, Institut für Theoretische Chemie und Computerchemie, Heinrich-Heine Universität Düsseldorf  
*Direct Semiclassical Dynamics: Joining Frozen-Gaussian Propagators and Quantum Chemistry*
08. 12. 2010 **Ivan Kondov**, Steinbuch Centre for Computing, Karlsruher Institut für Technologie  
*Models for disulfide bonds in protein folding simulations*
15. 12. 2010 **Andreas Savin**, Laboratoire de Chimie Theorique, Universite Pierre et Marie Curie  
*Open questions and recent conceptual development in density functional theory*
22. 12. 2010 no colloquium
12. 01. 2011 **Kantharuban Sivalingam**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn  
*N-Electron Valence Perturbation Theory: Exploring Approximation to Large-Scale Applications*  
(Speaker Exchange Program Bonn / Bochum)
19. 01. 2011 **Mauro Boero**, Institut de Physique et Chemie des Materiaux de Strasbourg, University of Strasbourg  
*LeuRS Synthetase: A Reactive QM/MM Investigation of Water Mediated Editing Reactions in a Hybrid Ribozyme/Protein System FOR 618*
26. 01. 2011 **Udo Seifert, II**, Institut für Theoretische Physik, Universität Stuttgart  
*Stochastik Thermodynamics for Biomolecules in Non-Equilibrium*  
(Reinhard Koselleck Lecture)
- Special date** **Roland Netz**, Fakultät für Physik, Technische Universität München  
**Tu 01. 02. 2011** *Biopolymer adsorption and dynamics: theoretical approaches at different scale*  
14:15, NC03/399 (Reinhard Koselleck Lecture)
02. 02. 2011 **Christof Drechsel-Grau**, Theoretical Chemistry Sector, University of Cambridge  
*Computing activation energies of classical electron-transfer model systems*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

Visitors are welcome to the seminar.