

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2011/2012)

---

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

---

19. 10. 2011 **Martin Müser**, Lehrstuhl für Materialsimulation, Universität des Saarlandes  
*From electronic DFT to continuum mechanics based descriptions of tribological phenomena*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
26. 10. 2011 **Benjamin Helmich**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Local pair natural orbitals for excited states*
- Sondertermin** **Malgorzata Krasowska**, Faculty of Chemistry, University of Wroclaw, Poland  
**Do 27.** 10. 2011 *Intramolecular hydrogen bonding in thiosemicarbazones and dipyrrens*
09. 11. 2011 **Hauke Clausen-Schaumann**, Physikalische Technik, Hochschule für Angewandte Wissenschaften, München  
*Chemical Reactions under Force: Kinetic Measurements of Mechanically Activated Bond Scission*  
(Reinhard Koselleck Vorlesung)
16. 11. 2011 **Christoph Jacob**, CFN-Nachwuchsgruppe Theoretische Chemie, Karlsruher Institut für Technologie  
*Subsystem and Embedding Methods for Quantum Chemistry*
23. 11. 2011 **Tucker Carrington Jr.**, Chemistry Department, Queen's University, Ontario  
*Computing ro-vibrational spectra*
14. 12. 2011 **Jean-Francois Lambert**, Laboratoire de Reactivite de Surface, Universite Pierre et Marie Curie, Paris  
*Small Biomolecules on Inorganic Oxide Surfaces; Adsorption Mechanisms, Reactivity, and Prebiotic Buildup of Complexity*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
11. 01. 2012 **Gregor Diezemann**, Theoretische Chemie, Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
*Force Probe Molecular Dynamics Simulations of Reversible Hydrogen-Bond Network Dynamics in Supramolecular Complexes*  
(Reinhard Koselleck Vorlesung)
18. 01. 2012 **Joachim Dzubiella**, Institut für Weiche Materie und Funktionale Materialien, Helmholtz-Zentrum Berlin  
*Modeling Hydration and Ion-Specific Effects in Protein Folding and Association*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
- Sondertermin** **Axel Groß**, Institut für Theoretische Chemie, Universität Ulm  
**Di 24.** 01. 2012 *First Principles Description of Elementary Steps in Electrocatalysis*  
**11:15**, NC 2/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
01. 02. 2012 **Benoit Champagne**, Laboratoire de Chimie Theorique, Facultes Universitaires Notre-Dame de la Paix, Namur  
*Predicting and interpreting the second-and third-order nonlinear optical properties: from simple to more complex systems*
14. 03. 2012 **Mark Tuckerman**, Department of Chemistry and Courant Institute, New York University  
*Exploring free energy landscapes of peptides, polymers, and molecular crystals*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
- Sondertermin** **Toru Shiozaki**, Universität Stuttgart, Institut für Theoretische Chemie  
**Mo 26.** 03. 2012 *Recent developments in multireference electronic structure theories*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

**Gäste sind herzlich willkommen !**