

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2009/2010)

---

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

---

- Sondertermin Roman Martonak**, Department of Experimental Physics, Comenius University,  
**Di 13.** 10. 2009 Bratislava  
11:15, NC 5/99 *Study of polymorphism and structural transformations in crystals by metadynamics simulation*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
21. 10. 2009 **Ehesan Ali**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Tuning the Magnetic Coupling of Metalloporphyrin Molecules to Ferromagnetic Substrates*
28. 10. 2009 **Michael Hanrath**, Institut für Theoretische Chemie, Universität Köln  
*Multi-Reference Coupled Cluster: Perspectives, Theory, and Efficient Implementation*
04. 11. 2009 **Guntram Rauhut**, Institut für Theoretische Chemie, Universität Stuttgart  
*From the construction of accurate potential energy surfaces to the calculation of vibrational wavefunctions*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
11. 11. 2009 **Rint Sijbesma**, Molecular Science and Technology, Eindhoven University of Technology  
*Chemistry Induced by Mechanical Force*  
(Reinhard Koselleck Vorlesung)
18. 11. 2009 **Martin Beyer**, Institut für Physikalische Chemie, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel  
*Mechanochemistry - The Mechanical Activation of Covalent Bonds*  
(Reinhard Koselleck Vorlesung)
25. 11. 2009 **Jürgen Fritz**, School of Engineering and Science, Jacobs University Bremen  
*Imaging, Pulling, Bending: Atomic Force Microscopy on Biomolecular Systems*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 618 "Aggregation")
- Sondertermin Thomas Heine**, Theoretical Physics, Jacobs University Bremen  
**Di 01.** 12. 2009 *Hydrogen Storage in Nanoporous Materials: Myths and Facts*  
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
- Sondertermin Matteo Farnesi Camellone**, National Simulation Center, Trieste  
**Di 08.** 12. 2009 *Reaction Mechanisms for the CO Oxidation on Au/CeO<sub>2</sub> Catalysts*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
09. 12. 2009 **Rachel Glaves**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Understanding Enzymatic Reaction Mechanisms using QM/MM Simulations: Hydrolysis of Nucleotides in hGBP1*
16. 12. 2009 **Daniel Boese**, Theoretische Organische Chemie, Universität Duisburg-Essen  
*From Ab Initio Methods to the Development of New Force Fields*
23. 12. 2009 kein Kolloquium
06. 01. 2010 kein Kolloquium
13. 01. 2010 **Simone Kofmann**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Bonn  
*Improved Second Order Many-Body Perturbation Theory - Implementation and Validation*  
(Seminar austauschprogramm Bonn / Bochum)
20. 01. 2010 **Markus Reiher**, Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH Zürich  
*Quantum Chemical Methods for Vibrational Spectroscopy of Functional Molecules*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
27. 01. 2010 **Hermann Kümmel**, Institut für Theoretische Physik, Ruhr-Universität Bochum  
*The Story of the Coupled Cluster Method*
03. 02. 2010 **Nongnuch Artrith**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*High-Dimensional Neural Network Potentials: First Applications to Zinc Oxide*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

Gäste sind herzlich willkommen !