

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretical Chemistry Colloquia (WS 2012/2013)

---

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

---

17. 10. 2012 **Marcel Nooijen**, University of Waterloo, Canada  
*Multireference equation of Motion Coupled Cluster theory with applications to molecular spectroscopy*
- Special date** **Ezequiel Leiva**, Departamento de Matemática y Física, Universidad Nacional de  
**Fr 26. 10. 2012** Cordoba  
*Application of Computer Simulations to Nanometric Systems: Nanoparticles and Molecular Wires*
14. 11. 2012 **Georg Madsen**, Interdisciplinary Centre of Advanced Simulation ICAMS,  
Ruhr-Universität Bochum  
*Systematic tight binding approaches. Slater-Koster and beyond*
21. 11. 2012 **Immanuel Gadaczek**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie,  
Rheinische Friedrich-Wilhelms Universität Bonn  
*Excited States in periodic systems*  
(Speaker Exchange Program Bonn / Bochum)
28. 11. 2012 **Roland Mitric**, Fachbereich Physik, Freie Universität Berlin  
*Ultrafast nonadiabatic dynamics: Analysis and Control*  
(Joint seminar with EXC 1069 "RESOLV")
05. 12. 2012 **Dieter Braun**, Department of Physics, Ludwig Maximilian-Universität  
*Prebiotic living systems in the lab*
- Special date** **Dominik Horinek**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie,  
12. 12. 2012 Universität Regensburg  
**Room: NC 02/99** *Solvation Effects in colloidal and biological Systems*  
(Joint seminar with EXC 1069 "RESOLV")
19. 12. 2012 **Porntip Seema**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Self-Assembled Monolayers of Alkanethiolates at the Coinage Metal Surfaces: DFT and Mechanochemical Studies*
09. 01. 2013 **Arne Lüchow**, Institut für Physikalische Chemie, RWTH Aachen  
*Quantum Monte Carlo: Latest News*
16. 01. 2013 **Nora Graf**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Calculation of harmonic and anharmonic force constants for the formic acid dimer*
23. 01. 2013 **Gunnar Schmitz**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Implementation and Application of low scaling MP2 with a hybrid OSV-PNO approach*
30. 01. 2013 **Michael Dolg**, Theoretical Chemistry, University of Cologne  
*Quantum chemical study of the Ln(III)/An(III) separation with Cyanex 301*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

Visitors are welcome to the seminar.