

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2001)

---

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

---

18. 04. 2001 **Alfons Geiger**, Physikalische Chemie, Universität Dortmund  
*Simulation studies of water in pores and at interfaces*
25. 04. 2001 **Enrico Clementi**, z. Zt. Theoretische Chemie, Universität Bonn  
*A progress report on the HF/CC method*
02. 05. 2001 **Bernd Meyer**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*First-principles studies of ferroelectric materials*
09. 05. 2001 **Thorsten Klüner**, Fritz-Haber-Institut, Berlin  
*Ab initio calculations for photochemical reactions at surfaces*
- Sondertermin** **Jürgen Schlitter**, Lehrstuhl für Biophysik, Ruhr-Universität Bochum  
16. 05. 2001 *Simulation of Conformational Transitions in Proteins*  
**Zeit: 16:15**
23. 05. 2001 **Horst Bögel**, Physikalische Chemie, Universität Halle  
*Teaching and Learning - Theoretical Chemistry in the Web*
30. 05. 2001 **Thorsten Koslowski**, Theoretische Chemie, Universität Freiburg  
*Localized electrons in solid state chemistry: macromolecules, polyanions and non-stoichiometric oxides*  
(Gemeinsames Seminar mit der "Anorganischen Festkörperchemie")
06. 06. 2001 **Daniil Kosov**, Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Frankfurt  
*Car-Parrinello molecular dynamics on excited state surfaces*
13. 06. 2001 **Thomas Sommerfeld**, Theoretische Chemie, Universität Heidelberg  
*Electronic metastable systems: Dianions and radical anions*
20. 06. 2001 **Eckhard Spohr**, Institut für Werkstoffe und Verfahren der Energietechnik, FZ Jülich  
*Computer Simulation of Proton Transfer in Porous Systems*
27. 06. 2001 **Xiaoyan Cao**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn  
*Ab initio calculations for f-elements*
- Sondertermin** **Ivan Stich**, Department of Physics, Slovak Technical University Bratislava  
**Di 03.** 07. 2001 *Tip-surface interactions and atomic resolution in non-contact AFM*  
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
11. 07. 2001 **Stefan Blügel**, Theoretische Physik, Universität Osnabrück  
*Magnetism in low-dimensional systems*
18. 07. 2001 **Michiel Sprik**, Theoretical Chemistry, Cambridge University  
*Car-Parrinello study of electrochemical half-reactions: Methods and applications*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

**Gäste sind herzlich willkommen !**