

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretical Chemistry Colloquia (SS 2001)

Time: wednesdays 14:15, Location: 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
- Special date** **Jürgen Schlitter**, Lehrstuhl für Biophysik, Ruhr-Universität Bochum
16. 05. 2001 *Simulation of Conformational Transitions in Proteins*
Time: 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
- Special date** **Ivan Stich**, Department of Physics, Slovak Technical University Bratislava
Tu 03. 07. 2001 *Tip-surface interactions and atomic resolution in non-contact AFM*
11:15, NC 5/99 (Joint seminar with SFB 558 "Heterogeneous Catalysis")
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

Visitors are welcome to the seminar.