

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2004)

---

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

---

- Sondertermin** **Alexander Wolf**, Theoretische Chemie, Universität Bonn  
21. 04. 2004 *Decoupling schemes for the Dirac Hamiltonian and the generalized Douglas-Kroll transformation*  
**Zeit: 11:15** (Austauschseminar mit der Universität Bonn)
28. 04. 2004 **Thomas Elsässer**, Max-Born-Institut, Berlin  
*Ultrafast hydrogen bond dynamics and proton transfer in the liquid phase*
05. 05. 2004 **Pekka Pyykkö**, Department of Chemistry, University of Helsinki  
*QED-effects in chemistry*
12. 05. 2004 **Joachim Heberle**, Biologische Strukturforchung, Forschungszentrum Jülich  
*The vibrations of active proton transfer across the cell membrane*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
19. 05. 2004 **Andreas Heyden**, Chemische Reaktionstechnik, Technische Universität Hamburg-Harburg  
*Determination of reaction paths for the dissociation of  $N_2O$  in Fe-ZSM5*
26. 05. 2004 **Fritz Haake**, Theoretische Physik, Universität Duisburg-Essen  
*Decoherence or why the world behaves classically*
02. 06. 2004 **Karin Fink**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Magnetic exchange coupling in transition metal compounds*
09. 06. 2004 **Werner Kutzelnigg**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*The Nooijen conjecture: A detective story*
16. 06. 2004 **Jürgen König**, Theoretische Physik, Ruhr-Universität Bochum  
*Electron transport through interacting quantum dots*
23. 06. 2004 **Claudia Filippi**, Lorentz Institute for Theoretical Physics, Leiden University  
*Excitations in photoactive molecules from quantum Monte Carlo*
30. 06. 2004 **Mark Tuckerman**, Department of Chemistry and Courant Institute, New York University  
*A dual length scale approach to mixed quantum mechanical/molecular mechanical (QM/MM) simulations*
- Sondertermin** **Klaus Hermann**, Fritz-Haber Institut, Berlin  
**Di 06. 07. 2004** *Electronic and vibrational excitations at oxide surfaces: cluster models for vanadium oxide*  
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
- Sondertermin** **Sibylle Gemming**, Theoretische Physik, Technische Universität Chemnitz  
**Di 13. 07. 2004** *Density-functional investigation of systems with reduced dimensionality*  
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
14. 07. 2004 **Nisanth Nair**, Theoretische Chemie, Universität Hannover  
*Molecular Dynamics simulations using MSINDO*
- Sondertermin** **Gerald Mathias**, Biomolekulare Optik, Ludwig-Maximilians-Universität München  
**Fr 16. 07. 2004** *Description of long-range electrostatics in complex solvents by MD simulations: Angular dependence and range of dipolar ordering in water*  
**Zeit: 15:15**
21. 07. 2004 **Marcel Baer**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Investigation on folding of the oligopeptide GVG(VPGVG)*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
- Sondertermin** **Jens Antony**, Numerische Mathematik, Freie Universität Berlin  
**Do 22. 07. 2004** *Non-adiabatic effect in the amide-I Population Dynamics of glycine-dipeptide*
28. 07. 2004 **Peter Bloechl**, Theoretische Physik, Technische Universität Clausthal  
*How does nature break the strongest bond: First principles simulations of the enzyme nitrogenase*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

Gäste sind herzlich willkommen !