

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2000/2001)

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

25. 10. 2000 **Arne Lüchow**, Institut für Physikalische Chemie, Universität Düsseldorf
Quantum Monte Carlo: Ein Verfahren für Elektronenstruktur- und Kerndynamikrechnungen
08. 11. 2000 **Gotthard Seifert**, Theoretische Physik, Universität Paderborn
Advances in calculations of optical properties within density functional theory
15. 11. 2000 **Jürgen Schnack**, Fachbereich Physik, Universität Osnabrück
Molecular Dynamics for Fermions
22. 11. 2000 **Michael Smit**, Instituut voor Theoretische Chemie, Katholieke Universiteit Nijmegen, NL
Intermolekulare Schwingungen des Wasserdimers
29. 11. 2000 **Nikolaj Otte**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Seminarvortrag über Vertiefungsarbeit
06. 12. 2000 **Volker Staemmler**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Electronic excitations at surfaces
13. 12. 2000 **Phineus Markwick**, Lehrstuhl für Physikalische Chemie II, Ruhr-Universität Bochum
DFT MD Simulations of Partially Disordered Systems: Reorientation Dynamics in 4 Dimensions
20. 12. 2000 **Andreas Leitheuß**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Periodische Hartree-Fock-Rechnungen an Oxidoberflächen
10. 01. 2001 **Rainer Siegfried**, Bibliothek der Fakultät für Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Fachinformation Chemie - "e;Die Digitale Bibliothek";
17. 01. 2001 **Andreas Görling**, Inst. für Physikalische und Theoretische Chemie, TU München
The treatment of excited states in density-functional theory
24. 01. 2001 **Wenjian Liu**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Extensive quantum chemical investigations on PtH, PtF, PtCl and Pt(NH₃)₂Cl₂
31. 01. 2001 **Karin Fink**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Berechnung elektronisch angeregter Zustände in periodischen Systemen
07. 02. 2001 **Christian Toepffer**, Institut für Theoretische Physik II, Universität Erlangen-Nürnberg
Hydrogen under extreme conditions
14. 02. 2001 **Max Mühlhäuser**, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn
Theoretische Spektroskopie an Kohlenstoff-Clustern

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !