

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2003/2004)

---

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

---

15. 10. 2003 **Veronika Brazdova**, Institut für Chemie, Humboldt Universität Berlin  
*Periodic density functional calculations on vanadium oxide aggregates: structures, stability and vibrational spectra*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
22. 10. 2003 **Per Jensen**, Theoretische Chemie, Universität Wuppertal  
*Molecular structure determination: quantum chemistry and spectroscopy vs. Coulomb explosion imaging for small molecules*
29. 10. 2003 **Stephan Thiel**, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr  
*QM/MM studies of the enzyme-catalysed aromatic hydroxylation of p-hydroxybenzoate*
05. 11. 2003 **Klaus Doll**, Institut für Mathematische Physik, TU Braunschweig  
*Ab initio calculations for metals with a local basis set*
- Sondertermin** **Notker Rösch**, Theoretische Chemie, TU München  
**Di 11. 11. 2003** *Metal clusters on oxide supports*  
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
19. 11. 2003 **Martin Albrecht**, Theoretische Chemie, Universität Siegen  
*First-principle calculations of charge transport through single molecules*
26. 11. 2003 **Stefan Goedecker**, Institut für Physik, Universität Basel  
*Towards the virtual chemistry and physics laboratory*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
03. 12. 2003 **Andreas Hebelmann**, Theoretische Organische Chemie, Universität Duisburg-Essen  
*A combined Kohn-Sham and intermolecular perturbation theory approach*
- Sondertermin** **Martin Zacharias**, Computational Biology, International University Bremen  
10. 12. 2003 *Computer simulation of biomolecule dynamics and complex formation*  
**Zeit: 16:15** (Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
- Sondertermin** **Dimitri Khoshtariya**, Institute of Molecular Biology and Biophysics, Georgian  
**Mo 15. 12. 2003** Academy of Sciences  
**Zeit: 16:15** *Local hydrogen-bonded structures of water - from bulk to protein surface and the interior*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
17. 12. 2003 **Ilka Hegemann**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Investigation of Cu/ZnO-catalysts - a cluster approach*
07. 01. 2004 **Michael Schmitt**, Physikalische Chemie, Universität Düsseldorf  
*Determination of the structure of large isolated molecules in various electronic states*
14. 01. 2004 **Tony Scott**, Theoretische Organische Chemie, Universität Duisburg-Essen  
*Asymptotics of quantum mechanical systems via the Holstein-Herring method*
- Sondertermin** **Robert Zillich**, Department of Chemistry, University of California at Berkeley  
**Do 15. 01. 2004** *Spectroscopy of molecules in superfluid helium-4 clusters*  
**Zeit: 13:15**
21. 01. 2004 **Irmgard Frank**, Physikalische Chemie, LMU München  
*Simulation of ultrafast reactions with first-principles molecular dynamics*
28. 01. 2004 **Frank Neese**, Max-Planck-Institut für Bioanorganische Chemie, Mülheim an der Ruhr  
*Theoretical spectroscopy of open-shell transition metal complexes*
- Sondertermin** **Rodolphe Pollet**, Laboratoire Francis Perrin, Saclay/Gif-sur-Yvette Cedex, France  
**Do 29. 01. 2004** *Cooperative effects in a molecular dynamics simulation of a lanthanum(III)-water cluster*  
**Zeit: 16:15**
04. 02. 2004 **Holger Langer**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Photophysics of guanine: a nonadiabatic Car-Parrinello study*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

Gäste sind herzlich willkommen !