

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretical Chemistry Colloquia (SS 2002)

Time: wednesdays 14:15, Location: Seminarraum NC 03/399

17. 04. 2002 **Mikhail Pykavy**, Arbeitskreis angewandte Quantenchemie, Technische Universität Berlin
Multi-reference correlation calculation for vanadium-oxide clusters
24. 04. 2002 **Volkhard Helms**, Max-Planck-Institut für Biophysik, Frankfurt
Towards simulating proton transport in biological systems
(Joint seminar with FOR 436 "Water at Interfaces")
08. 05. 2002 **Jan Urban**, Department of Biophysics and Chemical Physics, Comenius Universität, Bratislava
Computation of the structure and properties of small rare gas clusters
15. 05. 2002 **Christian Boehme**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
The origin of life: From soup to crêpes
22. 05. 2002 **Frank Wennmohs**, Lehrstuhl für Biophysik, Ruhr-Universität Bochum
Untersuchungen zur Struktur und Energetik ungewöhnlicher Wasserstoffbrückenbindungen mit Schwefel
29. 05. 2002 no colloquium
05. 06. 2002 **Volker Kleinschmidt**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
About the DeBroglie-Bohm-formalism of quantum mechanics: Introduction to general theory and computational application
12. 06. 2002 **Norbert Rössler**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
XPS-Spectren von ZnO
- Special date** **Mark Tuckerman**, Department of Chemistry and Courant Institute, NYU
Fr 14. 06. 2002 *A novel variable transformation approach for enhancing conformational sampling in complex systems*
(Joint seminar with SFB 558 "Heterogeneous Catalysis")
19. 06. 2002 **Filipp Furche**, Institut für Physikalische Chemie, Universität Karlsruhe
Exploring excited state hypersurfaces by time-dependent density functional methods
26. 06. 2002 no colloquium
- Special date** **Ali Alavi**, Theoretical Chemistry, University of Cambridge
Tu 02. 07. 2002 *Metal surfaces in strong applied electric fields*
11:15, NC 5/99 (Joint seminar with SFB 558 "Heterogeneous Catalysis")
03. 07. 2002 **Wolfgang Domcke**, Institut für Physikalische and Theoretische Chemie, TU München
Ab initio exploration of excited-state electron and proton transfer processes in molecules and clusters
(Joint seminar with FOR 436 "Water at Interfaces")
10. 07. 2002 **Gereon Niedner-Schatteburg**, Physikalische Chemie, Universität Kaiserslautern
Hydration of Ions in Water Clusters: Experiments and Theory in Concert
17. 07. 2002 **Eugen Schwarz**, Theoretische Chemie, Universität Siegen
DFT for States with Strong Configuration Mixing
- Special date** **Philippe Bopp**, Laboratoire de Physico-Chimie Moléculaire, Université Bordeaux I
31. 07. 2002 *Modeling time resolved spectroscopies: HDO in D₂O*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Visitors are welcome to the seminar.