

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretical Chemistry Colloquia (WS 2000/2001)

---

Time: wednesdays 14:15, Location: 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(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>*
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

---

Visitors are welcome to the seminar.