

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (WS 2001/2002)

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

24. 10. 2001 **Daniel Krüger**, Physikalisches Institut, Universität Münster
Simulation of the bond rupture process of thiolate on gold
31. 10. 2001 **John Stubbs**, Department of Chemistry, University of Minnesota (currently at RUB)
Monte Carlo simulations for the aggregation of alkanols in nonpolar solvents
07. 11. 2001 **Florian Müller-Plathe**, Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz
Simulating polymers on several length scales: Methods and applications
- Sondertermin** **Daniel Boese**, Theoretical Chemistry, Cambridge University (currently at RUB)
Fr 09. 11. 2001 *Development and assessment of exchange-correlation functionals*
14. 11. 2001 kein Kolloquium
21. 11. 2001 **Roger Rousseau**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Bochum
Phase stability and structural chemistry at high pressure
28. 11. 2001 **Uwe Birkenheuer**, Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden
Ab initio determination of correlated wavefunctions for excited hole and electron capture states in solids
05. 12. 2001 **Michael Rohlfing**, Institut für Festkörpertheorie, Universität Münster
Excited states and optical spectra of solids, surfaces and molecules
- Sondertermin** **Rajendra Prasad**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Bochum
Fr 14. 12. 2001 *Ab initio studies of electronic structure and molecular properties of transient molecules in their ground and excited states*
19. 12. 2001 **W. H. Eugen Schwarz**, Theoretische Chemie, Universität Siegen
Vortrag entfällt
Single configuration DFT for states with strong configuration mixing?
09. 01. 2002 **Gerald Geudtner**, Theoretische Chemie, Universität Hannover
Growth of Cu- and Ga-clusters on MgO
- Sondertermin** **Mike W. Finnis**, School of Mathematics and Physics, The Queen's University of Belfast
Di 15. 01. 2002 11:15, NC 5/99 *Theory of oxide-metal interfaces: structure and stoichiometry*
23. 01. 2002 **Christian Ochsenfeld**, Institut für Physikalische Chemie, Universität Mainz
Linear scaling in ab initio methods for large molecules
30. 01. 2002 **Holger Langer**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Universität Bochum
Ab initio study of excited states of DNA-bases and base pairs
06. 02. 2002 **Reinhold Egger**, Theoretische Physik, Universität Düsseldorf
Real time path integral Monte Carlo Simulations
13. 02. 2002 **Michael Atanasov**, Theoretische Chemie, Universität Düsseldorf
Theoretical studies of cyano complexes

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !