

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2003)

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

23. 04. 2003 **Michel Mons**, Laboratoire Francis Perrin, Saclay/Gif-sur-Yvette Cedex, France
Laser spectroscopy of isolated biomolecules
30. 04. 2003 kein Kolloquium : Woche der Chemie im Ruhrpark Bochum
07. 05. 2003 **Bernd Meyer**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Composition and structure of complex surfaces: Combining DFT and thermodynamics
14. 05. 2003 **Martin Kaupp**, Institut für Anorganische Chemie, Universität Würzburg
Density functional calculations of electronic g-tensors: methods and applications
21. 05. 2003 **Ralph Jaquet**, Theoretische Chemie, Universität Siegen
 H_3^+
28. 05. 2003 kein Kolloquium
04. 06. 2003 **Thierry Deutsch**, Laboratoire de Simulation Atomistique (CEA), Grenoble
Combining ab initio calculations and Monte Carlo simulations: Applications to Si with point defects
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
11. 06. 2003 **Huib Bakker**, Ultrafast Spectroscopy, AMOLF, Amsterdam
Solvation and hydrogen-bond dynamics of water
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
18. 06. 2003 **Konstantinos Kotsis**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Structure and UV/VIS spectra of ZnO complexes
- Sondertermin** **Christian Elsässer**, Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg
Di 24. 06. 2003 *Pd and Mo films on SrTiO₃ (001) surfaces - analysis of interfacial structure and bonding*
11:15, NC 5/99
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
25. 06. 2003 **Anja Metzeltin**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Ab initio MD of the ammonia dimer
02. 07. 2003 **Jozef Noga**, Slovak Academy of Sciences, Institute of Inorganic Chemistry, Bratislava
Towards the spectroscopic accuracy in quantum chemistry of small systems via explicitly correlated wave functions. The potential hypersurface of H₂O - H₂.
09. 07. 2003 **Udo Schmitt**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum
Quantum dynamics of proton transport through complex hydrogen-bonded networks
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
- Sondertermin** **Martin Jungen**, Institut für Physikalische Chemie, Universität Basel
16. 07. 2003 *What is a muon doing in atoms or molecules?*
Zeit: 9:15
23. 07. 2003 kein Kolloquium : ICQC Bonn
30. 07. 2003 **Kurt Binder**, Institut für Physik, Universität Mainz
Computer simulation of molten and glassy silica and its mixtures with sodium oxide and aluminium oxide

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

Gäste sind herzlich willkommen !