

# Lehrstuhl für Theoretische Chemie

## Ruhr-Universität Bochum

www.theochem.ruhr-uni-bochum.de

### Theoretisch-Chemisches Kolloquium (SS 2005)

---

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

---

13. 04. 2005 **Alan Mark**, Department of Biophysical Chemistry, University of Groningen  
*Self-organization in biomolecular systems: Simulating the folding and aggregation of peptides, proteins and lipids*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
20. 04. 2005 **Wenjian Liu**, Institute of theoretical & computational Chemistry, Peking University  
*Time dependent relativistic density functional theory and application*
- Sondertermin** **Mats Persson**, Department of Applied Physics, Chalmers/Göteborg University of  
**Di 26.** 04. 2005 Technology  
11:15, NC 5/99 *Control and characterization of matter on the atomic scale*  
(Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
- Sondertermin** **Jeppe Olsen**, Theoretical Chemistry, University of Aarhus  
**Do 28.** 04. 2005 *The electronic structure and spectra of quantum dots using quantum chemical*  
**Zeit: 17:15** *methods*
04. 05. 2005 **Alexander Hofmann**, Quantenchemie, Humboldt Universität Berlin  
*Strategies for the localisation of transition states on surfaces: the oxidative dehydrogenation of butane on sulphated zirconia*
11. 05. 2005 **Josef Wachtveitl**, Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Frankfurt  
*Ultrafast Peptide Dynamics*
25. 05. 2005 **Günter Wächtershäuser**, Patentanwaltskanzlei Wächtershäuser & Hartz, München  
*Retrodiction of the pioneer organism of life in a volcanic setting*  
(Gemeinsames Seminar mit FOR 436 "Wasser an Grenzflächen")
01. 06. 2005 **Casey (James) Hynes**, Département de Chimie, Ecole normale supérieure  
*Photochemical funnels: environmental impacts on conical intersections*
08. 06. 2005 **Annamaria Fiethen**, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
*Elektronische Struktur und Austausch-Kopplung in [2Fe2S] Komplexen*
22. 06. 2005 **Timo Fleig**, Institut für Theoretische Chemie und Computerchemie, Heinrich Heine  
Universität Düsseldorf  
*Implementation and application of 4-component multi-reference correlation methods*
- Sondertermin** **Michael Moseler**, Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM, Freiburg  
**Di 28.** 06. 2005 *The oxidation of gasphase and metal-oxide supported palladium clusters*  
11:15, NC 5/99 (Gemeinsames Seminar mit SFB 558 "Heterogene Katalyse")
29. 06. 2005 **Hauke Trinks**, Arbeitsbereich Messtechnik, Technische Universität  
Hamburg-Harburg  
*Frozen sea water mediating early steps in the origin of life*
06. 07. 2005 **Ivano Tavernelli**, Laboratoire de chimie et biochimie computationnelles, École  
polytechnique fédérale de Lausanne  
*Charge and electron transfer dynamics in molecular systems using DFT-QM/MM ab initio techniques*

gez. Die Dozenten der Theoretischen Chemie

---

Gäste sind herzlich willkommen !