

Technikerstraße 13/7  
A-6020 Innsbruck  
Telefon: +43 512 507 6071 oder 6097

E-Mail: [mathematik@uibk.ac.at](mailto:mathematik@uibk.ac.at)  
<http://www2.uibk.ac.at/mathematik/>  
Fax: +43 512 507 2920

# MATHEMATIKKOLLOQUIUM

Das Institut für Mathematik lädt zu folgendem Vortrag ein:

**Christian Lubich**

Mathematisches Institut, Universität Tübingen

## **Variationelle Approximationen in der molekularen Quantendynamik**

Es wird ein Überblick gegeben über Modellreduktionen, die von der hochdimensionalen molekularen Schrödinger-Gleichung zur klassischen Moleküldynamik mit Newtonschen Bewegungsgleichungen führen. Den Approximationsschritten liegt ein auf Dirac zurückgehendes Variationsprinzip zugrunde, auf dessen Eigenschaften im Vortrag näher eingegangen wird. Weiters werden numerische Verfahren zur nähерungsweisen Lösung der Bewegungsgleichungen der reduzierten Modelle vorgestellt.

Zeit: **Donnerstag, den 31. Januar 2008 um 11:15 Uhr**

Ort: **Viktor-Franz-Hess-Haus, Technikerstraße 25, HS D**

*Alexander Ostermann*

**Gäste sind herzlich willkommen!**