



THE DANISH CHEMICAL SOCIETY

FOUNDED 1879

**KEMISK FORENING**

UNIVERSITETSPARKEN 5  
DK-2100 KØBENHAVN, DANMARK

www.chemsoc.dk

## Efterårsmøde af Sektionen for Teoretisk Kemi med **GENERALFORSAMLING**

Fredag den 28. oktober 2011

### **Auditorium 2**

Københavns Universitet, H. C. Ørsted Institut, Universitetsparken 5, 2100 København Ø

**Organisator:** Stephan P. A. Sauer, KU

### **Program**

- 12:00 – 13:00 Frokost med sandwich og smørrebrød i vandrehallen
- 13:00 – 13:45 **Ulf Ryde** (Lund Universitet)  
Comparison and improvements of methods to calculate ligand binding affinities
- 13:45 – 14:30 **Susanne Salzmann** (Århus Universitet)  
Molecular Dynamics studies on the 'Tick-over' of Complement Component 3
- 14:30 – 15:00 **Patrik Rydberg** (Københavns Universitet - Farma)  
Prediction of drug metabolism - from quantum chemistry to cheminformatics
- 15:00 – 15:30 Kaffepause
- 15:30 – 16:15 **Gemma Solomon** (Københavns Universitet - Nat)  
Developing chemical intuition for molecular electron transport
- 16:15 – 16:45 **Thomas B. Pedersen** (Oslo Universitet)  
Lagrangian formulation of the random phase approximation to electron correlation
- 16:45 – 17:15 **Jan H. Jensen** (Københavns Universitet - Nat)  
Use of IT and simulations in teaching
- 17:30 – 18:00 **Ekstraordinær Generalforsamling**  
(Forslag til dagsorden kan sendes til bestyrelsen: [sauer@kiku.dk](mailto:sauer@kiku.dk))
- 18:00 – 20:00 Aftensmad i C305

**Tilmelding:** **Alle er velkommen. Tilmelding senest den 7. oktober via e-mail**  
til Stephan P. A. Sauer ([sauer@kiku.dk](mailto:sauer@kiku.dk)) med følgende indhold:

Subject: Tilmelding til Teoretisk Kemi efterårsmøde

Navn:

Institution:

E-mail og telefonnummer:

Aftensmad: Ja/Nej