Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15:30 Uhr, im Seminarraum 408, 4. OG, Geb. 30.44

11.05.17 **Dr. Lei Liu (Universität Bonn)**
Computations: from atomic clusters to molecular crystals

18.05.17 **Christof Holzer**
GW methods in molecular quantum chemistry

24.05.17[a)] **Van Anh Tran (Universität Heidelberg)**
Relativistic investigation of the Renner-Teller effect in halocyanides X-CN

01.06.17 **Xin Gui**
Molecular excitation energies from the Bethe-Salpeter equation

22.06.17 **Kevin Reiter**
Further development of the mpshift module − improved efficiency and enhanced functionality

29.06.17 **Christoph Bannwarth (Universität Bonn)**
Simplified methods for the computation of electronic absorption and circular dichroism spectra

06.07.17 **Johannes Heuser**
Relaxed excited-state properties using frozen-density embedding

13.07.17 **Nils Schieschke**
Calculation of excited states with explicitly-correlated CC2 methods

20.07.17 **Asfaw Yohannes**
DFT study on negatively charged Pt clusters

gez. K. Fink, W. Klopper, F. Weigend

[a)] **Mittwoch, 24.05.2017, 15:45 Uhr, Geb. 30.45, Seminarraum 301.**