



Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15.15 Uhr, im Seminarraum 311 (Geb. 30.43)

- 29.04.04** **Dr. Daniel Boese (INT)**
Berechnung anharmonischer Kraftfelder durch DFT
- 13.05.04** **Uwe Huniar**
DFT-Rechnungen zur Nitrogenase
- 27.05.04** **Dr. Olaf Hübner (INT)**
MRCI-Rechnungen an Ti₂
- 17.06.03** **Dr. Oliver Rubner (INT)**
Elektronische Wellenpakete in Molekülen
- 24.06.04** **Dr. Florian Weigend (INT)**
Neue Interpretationswerkzeuge in Turbomole
- 01.07.04** **Dr. Frank Striebel (Lehrstuhl für Molekulare Physikalische Chemie)**
Statistische Methoden: RRKM-Theorie
- 08.07.04** **Jorge Aguilera**
Statistical Adiabatic Channel Model (SACM)
- 15.07.04** **Marco Kattaneck**
Effiziente DFT-Quadratur-Algorithmen
- 22.07.04** **Dr. Alexander A. Auer (TU Chemnitz)**
A different approach for local coupled-cluster methods