



## Seminar über Theoretische Chemie

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

- 28.04.05**    **Dr. Christof Hättig (INT)**  
Parallel Implementation of RI-MP2 and RI-CC2.  
Part I: Fundamentals & Concepts
- 12.05.05**    **Dr. Arnim Hellweg (INT)**  
Parallel Implementation of RI-MP2 and RI-CC2.  
Part II: Performance & First Applications
- 19.05.05**    **Sebastian Höfener (Vertiefungspraktikum)**  
Lösungsmittelleffekte in quantenchemischen Rechnungen
- 09.06.05**    **Dr. Florian Weigend (INT)**  
Neue Basissätze in TURBOMOLE
- 16.06.05**    **Angela Bihlmeier**  
DFT-Rechnungen an kleinen Fullerenen
- 23.06.05**    **Dr. Nathan Crawford**  
Molecular Dynamics of Copper Selenide Clusters in Solution
- 30.06.05**    **Dr. Olaf Hübner (INT)**  
Quantenchemische Rechnungen an einem zweikernigen Eisenkomplex
- 07.07.05**    **Andreas Glöß**  
Berechnung intermolekularer Wechselwirkungen mit der RI-LMP2-R12-Methode
- 14.07.05**    **Stephan Bernadotte**  
Paritätsverletzung in chiralen Molekülen