



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