



Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15:15 Uhr, im Seminarraum 311 (Geb. 30.43)

- 26.04.07** **Dr. Aleksey B. Alekseyev** (Universität Wuppertal)
Vibrational state control of photodissociation: An ab initio study of CH₃I and related molecules
- 03.05.07** **Dr. David P. Tew**
New developments in R12 methods
- 24.05.07^{*)}** **Dr. Núria González-García** (LS für Molekulare Physikalische Chemie)
Dimethyl sulfide atmospheric oxidation processes: a theoretical study
- 14.06.07** **Dr. Espen Sagvolden**
A new look at the discontinuity of the exchange-correlation potential v_{xc}
- 21.06.07** **Sebastian Höfener**
Erweiterte Funktionalität der R12-Methoden in Turbomole, Teil 1
- 28.06.07** **Florian Bischoff**
Erweiterte Funktionalität der R12-Methoden in Turbomole, Teil 2
- 12.07.07** **PD Dr. Irmgard Frank** (LMU München)
Diabatic first-principles simulation of photoreactions
- 19.07.07** **Jorge Aguilera-Iparraguirre**
Hydrogen abstraction by the hydroperoxyl radical from C1 through C4 hydrocarbons

gez. R. Ahlrichs, W. Klopper

*) Am 24.05.07 ausnahmsweise um 15:45 Uhr.