



# Seminar über Theoretische Chemie

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

- 23.04.09<sup>1</sup>**    **Adam Kubas** (Universität Poznan)  
Quantum chemical studies of the substitution effects in the silylative coupling of olefins
- 07.05.09**    **Robert Send**  
Radiationless decay by internal conversion
- 14.05.09**    **Dr. Andreas Mavrandonakis** (INT)  
H<sub>2</sub> binding in metal carboxylate clusters. A comparative study on the cluster topology, metal composition and the spin states
- 04.06.09**    **Andreas Fuchs** (Universität Marburg/BASF)  
Modeling charge transport in amorphous layers of N-N'-Dicarbazoyl-1,3-benzene (mCP)
- 10.06.09<sup>2</sup>**    **Johannes Kiecherer**  
Geschwindigkeitskonstanten und Symmetriezahlen
- 02.07.09**    **Matthias Peter**  
Adsorption von 2-Ethynylpyridin auf der Au(111)-Oberfläche
- 09.07.09**    **Nils Middendorf**  
Direkte Störungstheorie relativistischer Effekte
- 14.07.09<sup>3</sup>**    **Prof. Dr. Seiichiro Ten-no** (Kobe University)  
Development of hybrid QM/MM methods for solvation and biological molecules
- 16.07.09**    **Martin Koos**  
Dichtefunktionalrechnungen mit periodischen Randbedingungen
- 23.07.09**    **Dr. Trond Saue** (CNRS and Université Louis Pasteur, Strasbourg)  
Charge, current and spin density in a relativistic framework

gez. W. Klopper

---

<sup>1</sup> Ausnahmsweise um 15:00 Uhr.

<sup>2</sup> Ausnahmsweise mittwochs. Ort: AOC 401, Geb. 30.45; Zeit: 15:15 Uhr.

<sup>3</sup> Ausnahmsweise dienstags. Ort: SR 311, Geb. 30.43; Zeit: 15:15 Uhr.