Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemische Biologie

Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15:15 Uhr, im Seminarraum 4. OG, Geb. 30.44

06.05.10 **Michael Gaus**
Basic theory and new developments of SCC-DFTB

20.05.10 **Dr. Thomas Kubar**
Charge transfer in DNA using coarse grained TD-DFT simulations

27.05.10 **Dr. Christoph Jacob** (CFN-Nachwuchsgruppe, KIT)
Towards a subsystem-DFT description of covalent bonds

10.06.10 **Dr. Andreas Köhn** (Universität Mainz)
Molecular interactions in the excited state: Excimers and excitons

24.06.10 **Prof. Dr. Jozef Noga** (Slovak Academy of Sciences, Bratislava)
An exact reformulation of SCF methods via variational coupled-cluster singles — an alternative way to diagonalization-free algorithms using non-unitary transformations

01.07.10 **Dr. Thomas Adler** (Universität Stuttgart)
Local explicitly correlated methods: Reaching the coupled cluster basis set limit for large molecules

15.07.10 **Andrey Yachmenev** (MPI für Kohlenforschung, Mülheim)
First principles calculations of rovibrational molecular properties

22.07.10 **Dr. Jorge Aguilera-Iparraguirre**
On the perfomance of explicitly-correlated methodologies in the determination of reaction barriers

gez. M. Elstner, W. Klopper