Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15:15 Uhr, im Seminarraum 408, 4. OG, Geb. 30.44

19.04.12 **Dr. Sebastian Höfener (VU University Amsterdam, Niederlande)**
Towards an efficient ab-initio treatment of solvation effects: Embedding a coupled-cluster wave function in a frozen DFT environment

26.04.12 **Andrew J. Atkins**
Calculation of X-ray absorption spectra of transition metal complexes

03.05.12 **Dr. Robin Haunschild**
Modern explicitly correlated wavefunction methods

10.05.12 **Andreas Fuchs**
Berechung von Exciton-Energetik und -Kinetik an Donor-Akzeptor-Grenzflächen am Beispiel von Pentacen/C_{60}

24.05.12 **Vladimir Rybkin (Universität Oslo, Norwegen)**
Insights into the dynamics of evaporation and proton migration in protonated water clusters from large-scale *ab initio* molecular dynamics

31.05.12 **Dr. Robert Barthel (Steinbuch Centre for Computing, KIT)**
Grid computing in Baden-Württemberg – bwGRID

14.06.12 **Sandra Ahnen**
The MCTDH method (multiconfiguration time-dependent Hartree)

21.06.12 **Dr. Jana Friedrichs (cynora GmbH, Karlsruhe)**
First-principles molecular dynamics simulations of photoreactions using restricted open-shell Kohn-Sham (ROKS) theory

gez. W. Klopper