



## Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15.15 Uhr, im Seminarraum 311 (Geb. 30.43)

- 23.10.03**     **Dr. Cristian Villani**  
Filter-Diagonalisierung
- 06.11.03**     **Dr. Andreas Köhn**  
Das RICC2-Modul: Entwicklungsstand und Anwendungspotential
- 13.11.03**     **Barbara Unterreiner**  
Aufbaureaktionen graphitanaloger Kohlenwasserstoffe
- 20.11.03**     **Dr. Christof Hättig**  
Eindeterminanten-Coupled-Cluster-Methoden
- 27.11.03**     **Dr. Florian Weigend**  
QZV-Basen
- 04.12.03**     **PD Dr. Markus Reiher (Universität Bonn)**  
Exakte Entkopplung des Dirac-Hamilton-Operators
- 11.12.03**     **Dr. David Tew (Universität Cambridge, UK)**  
Treating the Tunnelling Dynamics of Malonaldehyde
- 18.12.03**     **Dr. Daniel Boese (Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel)**  
New robust methods for accurate thermodynamics and kinetics:  
W3 and BM-K theories  
Achtung! Dieser Vortrag findet im Seminarraum 510 statt.
- 08.01.04**     **Andreas Glöß**  
Effiziente Implementierung der MP2-R12/B-Methode  
**Elena Vollmer**  
MP2-R12-Berechnungen molekularer Eigenschaften erster Ordnung
- 29.01.04**     **Yannick Carissan (Universität Toulouse, Frankreich)**  
Modeling ligands by means of Effective Group Potentials
- 05.02.04**     **Claudia Schrod**  
Pt/Ir-Cluster
- 12.02.04**     **Markus Armbruster**  
Quasirelativistische Hamilton-Operatoren