



Seminar über Theoretische Chemie

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

- 11.11.04 Uwe Huniar**
Integralberechnung für gedämpften Hartree-Fock-Austausch
- 25.11.04 Dr. Cristian Villani**
Entwicklung und Anwendung der RI-MP2-R12-Methode
- 09.12.04 Heike Fliegl**
Das CCSD(R12)-Modell
- 13.01.05 Florian Bischoff**
Vortrag im Rahmen des Vertiefungspraktikums
Thema: MCSCF/CASSCF-Verfahren
- 20.01.05 Dr. Daniel Boese**
Basissatzabhängigkeiten von MP2-Rechnungen
für schwach gebundene Systeme
- 27.01.05 Dr. Filipp Furche**
Dichtefunktionalmethoden für elektronisch angeregte Zustände
I. Grundlagen und vertikale Anregungen
- 03.02.05 Dmitrij Rappoport**
Dichtefunktionalmethoden für elektronisch angeregte Zustände
II. Angeregte Potentialflächen
- 10.02.05 Markus Armbruster**
Zweikomponentige Hartree-Fock- und Dichtefunktionalmethoden