



Seminar über Theoretische Chemie

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

- 02.11.06** **R.A. Bachorz**
RI-MP2-R12 and coupled-cluster calculations of the uracil anion
- 16.11.06** **Priv.-Doz. Dr. K. Fink (INT/FZK)**
Elektronen einmal anders: F-Zentren, ihre Eigenschaften und Anwendungen
- 23.11.06** **Professor K.A. Peterson (Washington State University)**
Recent Advances in Correlation Consistent Basis Sets for Applications to Accurate Potential Energy Surfaces
- 30.11.06** **Dr. S. Tretiak (Los Alamos Nat. Lab.)**
Selected applications of quantum chemistry to functional optical materials
- 07.12.06** **Dr. C. Neiß (INT/FZK)**
Higher-order properties using CCSD(R12)
- 14.12.06** **Dr. O. Hübner (INT/FZK)**
Calculations on Rh₂
- 11.01.07** **Dr. F.R. Manby (University of Bristol)**
Gas phase quantum chemistry for condensed phase problems
- 18.01.07** **A. Bihlmeier**
Hydrierung von Fullerenen
- 25.01.07** **S. Höfener**
Parallelisierung des TURBOMOLE-Moduls „aoforce“
- 01.02.07** **Dr. N. Crawford**
Genetic algorithms: Useful for more than keeping the cluster room warm?
- 08.02.07** **T. Pankewitz**
DFT-Untersuchungen zu Strukturen und Zuständen des Al₂P₄(^tBu)₈