Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

Seminar über Theoretische Chemie

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

30.10.09 **Dr. Maxim Zakharov** (Universität Frankfurt)
On the Magnitude of Basis-Set Superposition Error in the Ground- and Excited-State Atom-Centered Electronic-Structure Calculations

10.11.09[1] **Dr. Ioannis D. Petsalakis** (Nat. Hellenic Research Foundation, Athens)
Calculations on photoinduced electron transfer processes in chemical sensors and carbon nanohybrids.

27.11.09 **PD Dr. Hans-Peter Lüthi** (ETH Zürich)
Electron Delocalization and Conjugation Efficiency in Donor-Acceptor Functionalized π-Conjugated Systems

04.12.09 **Philipp Pleßow**
Valence-Bond-Theorie

11.12.09 **Dr. Núria González-García** (Molekulare Physikalische Chemie)
The oxidation of SO_2 in the atmosphere: From quantum chemical calculations to rate coefficients

18.12.09 **Rebekka Gulde**
Optimierungsverfahren

08.01.10 **Alexander Baldes**
Die NBO-Analyse

15.01.10 **Ben Woiczikowski** (Theoretische Chemische Biologie)
Combined density functional theory and Landauer approach for hole transfer in DNA along classical molecular dynamics trajectories

05.02.10 **Dr. Thomas Steinbrecher** (Theoretische Chemische Biologie)
Fast QM/MM-calculations on electron transfer in solvated carbon nanotubes

gez. W. Klopper

[1] Ausnahmsweise an einem Dienstag. Zeit: 15:45 Uhr. Ort: SR 311, Geb. 30.43.