

Seminar über Theoretische Chemie

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

- 25.10.12** **Monika Borkowska-Panek**
Spectroscopic Properties of Chlorophyll-a: Theoretical Studies
- 30.10.12^{*)}** **Katharina Krause (Universität Bonn)**
Übergangs-, angeregte und solvatisierte Zustände in einem semi-empirischen Kontext
- 09.11.12^{**)}** **Professor Thomas F. Miller (California Institute of Technology)**
Exactly Embedded Density Functional Theory for Modeling Chemical Reactions
- 22.11.12** **Michael Kühn**
Two-Component Relativistic Time-Dependent Density Functional Theory
- 29.11.12** **Nils Middendorf**
TURBOMOLE Implementation of Relativistic Direct Perturbation Theory
- 06.12.12** **Qiang Li**
Investigation of Spin-Flip Reactions of Transition Metals and Acetonitrile by Relativistic Density Functional Theory
- 13.12.12** **Dr. Nedko Drebov (Fraunhofer IWM Freiburg)**
Digging for new hard magnetic materials
- 10.01.13** **Dr. A. Daniel Boese (HU Berlin)**
Intermolecular Interactions: Biomolecules, Adsorbates and Molecular Crystals
- 17.01.13** **Dr. Christian Neiß (Universität Erlangen-Nürnberg)**
Graphynes: Carbon allotropes with "Dirac points"
- 31.01.13** **Dr. Angela Bihlmeier**
Atropisomerization of biphenyl cyclophanes

gez. W. Klopper

) Dienstag!** **) Freitag!**