

Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15:30 Uhr, im Seminarraum 408, 4. OG, Geb. 30.44

- 07.11.13** **Dr. Robin Haunschild**
Explicitly correlated multi-reference methods: Theory and application
- 14.11.13** **Dr. Sebastian Höfener**
Solvatochromic shifts from coupled-cluster frozen-density embedding
- 21.11.13** **Patrick Bleiziffer (Universität Erlangen-Nürnberg)**
Density-functional methods based on the adiabatic-connection fluctuation-dissipation theorem
- 28.11.13** **Kevin Reiter**
Aufklärung der Bindungsverhältnisse in einem $[\text{Pb}_6\text{I}_8(\text{Mn}(\text{CO})_5)_6]^{2-}$ -Cluster
- 05.12.13** **Vladimir Rybkin**
Molecular dynamics simulations of water-encapsulating open-cage fullerenes
- 12.12.13** **Benjamin Helmich (Ruhr-Universität Bochum)**
Local pair natural orbitals for excited states
- 19.12.14** **Dr. Peter Limacher (McMaster University, Hamilton, Ontario)**
Accurate bond dissociation curves at mean-field computational cost: Describing strongly correlated systems with nonorthogonal geminals
- 09.01.14** **Deborah Reuter**
Implementierung und Anwendung einer gitterbasierten Populationsanalyse nach Bader
- 16.01.14** **Patrik Pollak**
Entwicklung von fehlerkonsistenten segmentiert kontrahierten Allelektronenbasissätzen für quasirelativistische Ab-Initio-Methoden
- 23.01.14** **Sandra Ahnen**
Verwendung der Molekülsymmetrie in explizit korrelierter Møller-Plesset Störungstheorie zweiter Ordnung (MP2-F12)
- 30.01.14** **Dr. Heike Fliegl (Universität Oslo)**
What are magnetically induced currents good for?
- 06.02.14** **Pawel Panek**
Implementation of VCI based on local modes