Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

Seminar über Theoretische Chemie

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

10.11.16 **Dr. Xavier Blase (Institut Néel, Grenoble)**
The *GW* and Bethe-Salpeter formalisms for gas phase and bulk organic systems

17.11.16 **Nils Schieschke**
Combining continuum solvation models and frozen-density embedding for molecular properties

01.12.16[*)] **Jakob Kottmann (HU Berlin)**
Multiresolution CC2

08.12.16 **PD Dr. Ralf Tonner (Universität Marburg)**
Concepts for functional materials from computational chemistry

15.12.16 **Dr. Philipp N. Pleßow (IKFT)**
Towards first-principles simulation of sintering

12.01.17 **Dr. Peter Limacher**
Computational study of molecular structure and hydrogen bonding in the Hamilton wedge/cyanuric acid binding motif

19.01.17 **Dr. Heike Fliegl (Universität Oslo)**
Theory and applications of magnetically induced current densities

26.01.17 **Dr. Juliusz A. Wolny (TU Kaiserslautern)**
Intramolecular cooperativity in 1D spin crossover polynuclear complexes modelled with DFT

03.02.17[**)] **Dr. Michael Harding**
High-accuracy extrapolated *ab initio* thermochemistry of the cyanonitrene radical

gez. K. Fink, W. Klopper, F. Weigend

---

*) Am 01.12.2016 beginnt der Vortrag um 16:00 Uhr.
**) Am 03.02.2017 beginnt der Vortrag um 10:00 Uhr.