Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

Doktorandenseminar über Quantenchemische Berechnungen mit TURBOMOLE

jeweils montags, 10:30 Uhr, im Seminarraum 803 (Geb. 30.44)

16.10.17	**Nils Schieschke** Efficient Hartree-Fock and DFT calculations
23.10.17	**Johannes Heuser** MP2 and Coupled-Cluster calculations
06.11.17	**Kevin Reiter** IR, Raman and VCD spectra
13.11.17	**Fabian Mack** NMR shielding constants at levels HF, DFT and MP2
20.11.17	**Xin Gui** Electronically excited states with DFT
27.11.17	**Twinkle Yadav** Tools for wave function analysis
04.12.17	**Christoph Holzer** Electron correlation in the random phase approximation
11.12.17	**Yannick Franzke** Relativistic effects
18.12.17	**Asfaw Yohannes** Molecular dynamics, genetic algorithms
15.01.18	**Christoph van Wüllen** Parallel computing with TURBOMOLE
22.01.18	**Stephan Kohaut** Periodic boundary conditions
29.01.18	**Jessica Groß** Reaction pathways and transition state optimization

gez. K. Fink, C. van Wüllen, F. Weigend