

Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15:45 Uhr, im Seminarraum 408, 4. OG, Geb. 30.44

- 28.04.22** **Dr. Sven Thorwirth (Universität Köln)**
(High-resolution) spectroscopic studies of transient carbon-rich species
- 05.05.22** **Dominik Steinmetz**
Vortrag im Vertiefungspraktikum: Quantenchemische Kompositmethoden
- 12.05.22^{*)}** **Timais Janz**
Computergestütztes Durchsuchen des Konformationsraums flexibler binuklearer Metallkomplexe
- 19.05.22** **Lea Fink**
Density functional theory with frozen core orbitals
- 02.06.22^{**)}** **Robert Treß (Ruhr-Universität Bochum)**
Combining efficient coupled-cluster methods with frozen-density embedding in TURBOMOLE
- 30.06.22** **Laurenz Monzel**
Natural orbitals for the computation of quasiparticle energies in the *GW* approximation and for the Bethe-Salpeter equation
- 07.07.22** **Anja Appenzeller**
Vortrag im Vertiefungspraktikum: Quantenchemische Berechnung thermochemischer Beiträge
- 21.07.22** **Chengyu Jin**
Electronic structure and magnetic properties of lanthanoid compounds

gez. K. Fink, M.E. Harding, S. Höfener, W. Klopper

***) Am 12.05.2022 findet das Seminar über Zoom statt und beginnt es um 16:30 Uhr.**

*****) Am 02.06.2022 findet das Seminar im Seminarraum 007, EG, Geb. 30.44 statt (und über Zoom).**