Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

Seminar über Theoretische Chemie

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

24.10.24 **Max Kronenberger**
Computation of atomic Berry charges in the framework of DFT

14.11.24 **Anja Appenzeller**
(A) One-component computations in a weak magnetic field
(B) Chemical bonding in transition-metal complexes

21.11.24 **Roman Zielke**
Frozen-density embedding in weak magnetic fields

28.11.24 **Christian Pachl**
Intramolecular coupling in lanthanide-based coordination compounds

12.12.24 **Dominik Steinmetz**
The relativistic Berry curvarture – calculation of spin-vibrational orbit interactions for spin-relaxation times of qubits

19.12.24 **Janina Vohdin (Vertiefungsvortrag)**
AC-Korrelationsenergien (AC = Adiabatic Connection)

16.01.25 **Nina Rauwolf**
Ln-based intermetalloid clusters – application of frequency-sampled CD-*GW*

23.01.25 **Nikita Matsokin**
Olefin oligomerization made precise: A better way to study catalysts with a cluster correction approach

06.02.25 **Benedikt Menges (Vertiefungsvortrag)**
Das relativistische Wasserstoffproblem

13.02.25 **Falko Sinaga (Vertiefungsvortrag)**
ADC-Verfahren (ADC = Algebraic Diagrammatic Construction)

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