

Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15:00 Uhr, im Seminarraum 408, 4. OG, Geb. 30.44

- 30.10.25** **Lea Fink**
Automatic generation of auxiliary basis sets for quantum chemical calculations
- 06.11.25** **Andreas Bischoff (Vertiefungsvortrag)**
Übergangsmomente und Intensitäten
- 13.11.25** **Jonas Weinhold**
Berechnung der *GW*-Grundzustandsenergie mittels der Summe der Ionisierungspotentiale
- 20.11.25** **Adrian Ellinger**
Kern-Elektron-Orbital-Verfahren mit zweikomponentigen Spinoren
- 27.11.25** **Constantin Weeber**
Multilevel magnetism of transition-metal-radical pairs
- 04.12.25** **Anja Appenzeller**
Effective core potentials in finite magnetic fields: Insights and updates
- 11.12.25** **Dominik Steinmetz**
Updates about the Berry curvature: Molecules in strong magnetic fields
- 15.01.26** **Roman Zielke**
TURBOMOLE implementation of two-component CAS-CI and application to lanthanide ions
- 29.01.26** **Fabian Hofmann (Vertiefungsvortrag)**
Intermolekularer Coulomb-Zerfall
- 05.02.26** **Lukas Hamm (Vertiefungsvortrag)**
Born-Oppenheimer-Näherung
- 12.02.26** **Nina Rauwolf**
Relativistic two-photon absorption from the two-component Bethe–Salpeter equation

gez. K. Fink, M. E. Harding, S. Höfener, C. Holzer, W. Klopper, F. Weigend