Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

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**
Wird bekannt gegeben

04.12.25 **Anja Appenzeller**
Wird bekannt gegeben

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

22.01.26 **Nikita Matsokin**
Wird bekannt gegeben

29.01.26 **Fabian Hofmann (Vertiefungsvortrag)**
Coulomb-Explosion

05.02.26 **Lukas Hamm (Vertiefungsvortrag)**
Born-Oppenheimer-Näherung

12.02.26 **Nina Rauwolf**
Wird bekannt gegeben

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