

Seminar über Theoretische Chemie

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

- | | |
|-----------------|--|
| 29.10.26 | Xenia Kraft
DFT investigation of formic-acid adsorption on the $\text{CeO}_2(111)$ surface using an embedded-cluster model |
| 19.11.25 | Sascha Marx (Vertiefungsvortrag)
Zeitabhängige zweikomponentige Dichtefunktionaltheorie |
| 26.11.26 | Constantin Weeber
Implementing Hyperfine Interaction in a Spin–Orbit CI Program |
| 03.12.26 | Adrian Ellinger
Magnetically induced ring currents: Efficient implementation and application |
| 10.12.26 | Fabian Hofmann
Electronic Structure of Hydrogen Halides in Strong Magnetic Fields |
| 17.12.26 | Jonas Weinhold
Spin-State Switching in Trinuclear Exchange-Coupled Systems |
| 14.01.27 | Roman Zielke
Two-component complete and restricted active space CI and SCF |
| 21.01.27 | Lasse Niehues (Vertiefungsvortrag)
Berechnung von Ionisierungsenergien in der GW-Näherung |

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