

# Seminar über Theoretische Chemie

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

- 27.04.23 Anna Mauri (INT)**  
Quantum mechanical study of photoinitiators for 3D laser printing
- 11.05.23 Sascha Marx**  
Der Einfluss der Kernkoordinaten auf die Berechnung ausgewählter molekularer Eigenschaften
- 25.05.23 Adrian Ellinger**  
Atomare Rumpforbitale für quantenchemische Rechnungen an 4f-Elementspezies
- 22.06.23 Anja Appenzeller**  
Theoretische Atomspektroskopie der Lanthanoid-Ionen  $\text{Sm}^{2+}$  und  $\text{Eu}^{3+}$
- 29.06.23 Dominik Steinmetz**  
Analytical computation of the Berry curvature for the investigation of population analyses
- 06.07.23 Chengyu Jin (INT)**  
Quantum chemical investigations of multi-spin-center compounds
- 13.07.23 Dr. Ansgar Pausch**  
Strong magnetic fields as the origin of peculiar molecular bands in the spectra of white dwarfs?
- 20.07.23 Dr. Juana Vázquez Quesada (INT)**  
Some examples and concepts of the vibrational motions of molecules on surfaces
- 27.07.23 Sopheak Seng (Vertiefungsvortrag)**  
Local correlation methods

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