

# Seminar über Theoretische Chemie

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

- 03.11.22** **Felix Zeller** (U Bremen)  
GOSTSHYP: an implicit pressure model for ab initio calculations
- 16.11.22<sup>\*)</sup>** **Dr. Tilmann Bodenstein** (U Oslo)  
Bivariational multireference coupled-cluster theory
- 24.11.22** **Christian Pachi**  
Obtaining transition moments and dipolar interactions from spin-orbit CI
- 01.12.22** **Artus Leonhardt**  
Berechnung von RPA-Korrelationsenergien atomarer Zweielektronensysteme aus Wellenfunktionen der Konfigurationswechselwirkung
- 15.12.22** **Jonas Weinhold**  
Quantenchemische Untersuchungen zu einer Nebenreaktion mit molekularem Sauerstoff während der anionischen Polymerisation
- 12.01.23** **Siddhi Gojare**  
Quantum-chemical calculations on  $Pt_nH_m^-$  clusters
- 26.01.23** **Lisa Schröder** (Vertiefungsvortrag)  
CREST (Conformer–Rotamer Ensemble Sampling Tool)
- 02.02.23** **Nina Rauwolf**  
Rechnergestützte Photoelektronenspektroskopie: Einfluss von Phosphanliganden in Molybdän- und Wolframkomplexen
- 16.02.23** **Maximilian Kronenberger** (Vertiefungsvortrag)  
Das direkte Self-Consistent-Field-Verfahren

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

<sup>\*)</sup> Mittwoch, den 16.11.2022, 13:30 Uhr, Institut für Nanotechnologie (Campus Nord).