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

08.05.2025 15:20*	**Florian Bogdain** BSE@GW-Based Protocol for Spin-Vibronic Quantum Dynamics using the Linear Vibronic Coupling Model
15.05.2025	**Jimmy Weissert** Entwicklung eines iterativen Algorithmus für die Berechnung rekursiver ECP-Integrale und deren Ableitungen in Fortran
22.05.2025	**Maximilian Hartmann** Machine-Learning Corrections of DFT Calculated Excitation Energies and Redox Potentials
26.06.2025	**Marvin Kolter** Spin-orbit contributions to the thermochemistry of light elements
03.07.2025	**Florian Bruder** Use of the RI approximation for the calculation of NMR shielding tensors with MP2
10.07.2025	**Xenia Kraft** Adsorption of formic acid on CeO_2 surfaces using embedded cluster models
24.07.2025	**Marcel Lukanowski** Lanthanide halide clusters: A combined ion mobility and DFT study
31.07.2025	**Max Kronenberger** Analytical second derivatives combined with frozen-density embedding

*geänderte Anfangszeit am 08.05.2025

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