

Frontier Chemistry Center フロンティア化学教育研究センター

演題: Global Analytical Representations of Potential Energy Surfaces for Spectroscopy and Molecular Quantum Dynamics

講 師: Prof. Roberto Marquardt

Laboratoire de Chimie Quantique, Institut de Chimie, Université de Strasbourg, France

日時: 2013年7月1日(月) 16:30~17:30

場 所: 理学部 7 号館 2 階 7-2-19 室

要旨:

In this talk we first present novel developments for the derivation of compact analytical representations of potential energy surfaces in polyatomic molecules that are aimed to be used to reproduce semi-quantitatively date both from high resolution spectroscopy and quantum dynamics. The developments are then illustrated at selected examples of the water and ammonia molecule, as well as for the adsorption system CO/Cu(100).

本講演は、大学院総合化学院『化学研究先端講義/総合化学特別研究第二』の一部として認定されています。

連絡先:理学研究院化学部門 武次徹也(内線:3535)