

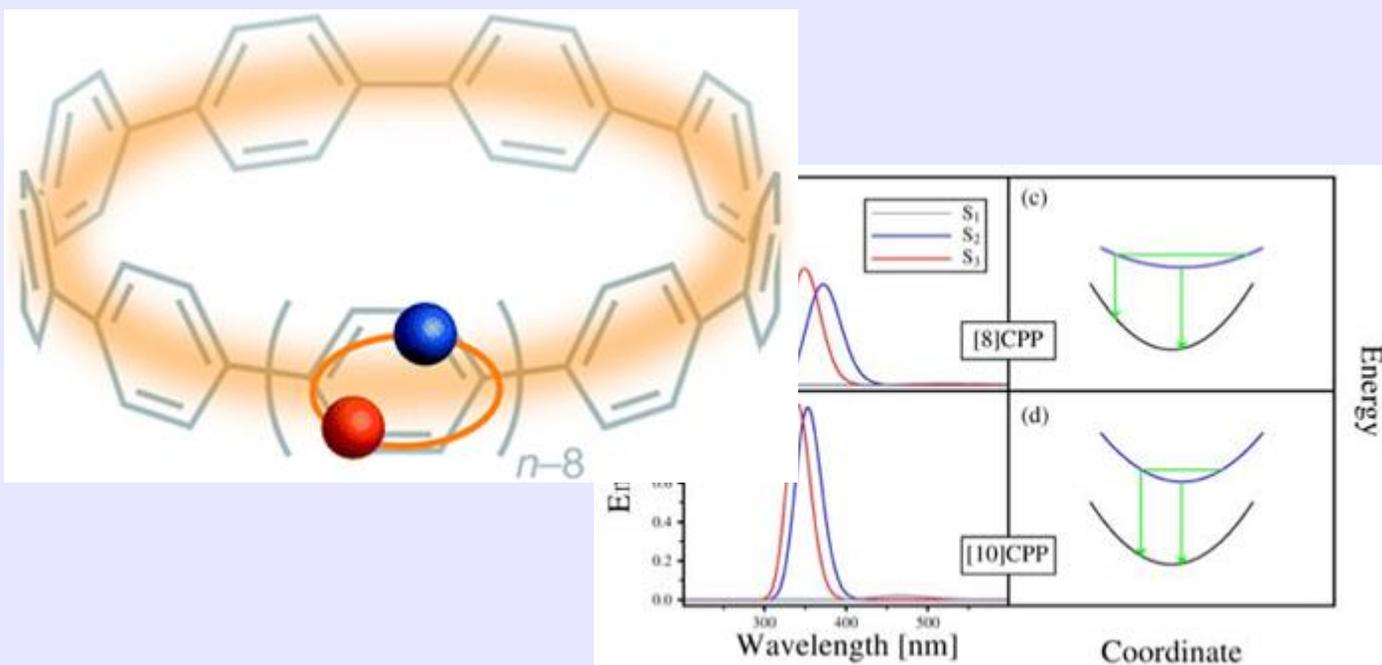
Thomas Niehaus教授講演会

Université Claude Bernard Lyon 1, France

Nanohoops - The unusual optical properties of [n]Cycloparaphenylenes

日時：2016年 3月8日(火) 16:00 ~ 17:00

場所：化学専攻第3講義室



Thomas Niehaus 教授は密度汎関数レベルで高速に電子状態計算ができるDFTB+プログラム(密度汎関数緊密結合法)[1]の中心開発者で, その時間依存版TD-DFTB と励起状態計算への応用について講演していただきます。シクロパラフェニレンのスペクトルの計算や非断熱遷移をともなう励起状態ダイナミクスについての成果を紹介される予定です。

[1] T.A. Niehaus *THEOCHEM* 914 38 (2009)

問い合わせ先: 数理化学研究室 河野 裕彦(Tel 795-7720)