

構造物理化学研究G 講演会のお知らせ

Prof. G. Naresh Patwari

Dept. of Chemistry, Indian Institute of Technology Bombay

”Electrostatics and Stark Effects in Intermolecular Interactions”

日時：平成29年4月21日(金)

13:30-15:00

場所：理学部 **B-301** 講義室



Abstract : The intermolecular Stark field experienced by a molecule in a cluster depends on its local environment comprising of surrounding solvent molecules. This electric field can be evaluated using simple electrostatic model using molecular electrostatic potential (MESP). We have evaluated Stark field in several systems such as water clusters, carboxylic acid dimers and mineral acid-water clusters. In the case of water clusters and carboxylic acid dimers, the Stark effect on vibrational frequencies follows linear correlation [2,3]. On the other hand in the case of mineral acid-water clusters, the dissociation of the acid is associated with the critical Stark field. Further, we use vibrational stark effect to unify the entire spectrum of hydrogen bonding irrespective of the nature of the shift in the X-H stretching frequency (Red, Blue or No Shift) using an alternate but physically simplistic model.

G. Naresh Patwari 教授は、インド工科大学(ボンベイ)化学科において、気相分子や分子クラスターのレーザー分光や構造研究を活発に行っている科学者です。RSC(Royal Society of Chemistry)から出版されている物理化学学会誌 Phys. Chem. Chem. Phys. のAdvisory boardとしても活躍しています。皆様のご来聴をお待ちしています。

連絡先 : 構造物理化学研究グループ 江幡孝之 (7407)