

*Pozivamo Vas na predavanje eminentnog znanstvenika*

**prof. dr. Zlatka Bačića**

*Sveučilište New York*

***Squeezing hydrogen molecules in tight places: energetics, quantum dynamics, Raman, and inelastic neutron scattering spectroscopy***

***u petak, 28. siječnja 2011. godine u 13:00 sati***

*dvorana III. krila*

*Institut Ruđer Bošković*

*Bijenička cesta 54*



Prof. dr. sc. Zlatko Bačić ugledni je znanstvenik iz područja teorijske i računalne kemije i kemijske fizike. Diplomirao je na Kemijskom odjelu Prirodoslovno-Matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu. Doktorski studij iz teorijske kemije je završio na Sveučilištu Utah u Salt Lake Cityu, SAD. Nekoliko godina proveo je na postdoktorskom usavršavanju na Max-Planck Institutu u Goettingenu, Hebrejskom Sveučilištu u Jeruzalemu, Sveučilištu Chicago, i Los Alamos Nacionalnom Laboratoriju. U tom periodu boravio je također i na Institutu za Fiziku u Zagrebu. 1988. godine izabran je za docenta na Odjelu za kemiju Sveučilišta New York u New Yorku, gdje kao redovni profesor radi i danas. Kao gostujući profesor boravio je na Max-Planck Institutu u Goettingenu, Sveučilištu Bern, ETH u Zürichu, i Institutu Ruđer Bošković (kao *Fulbright Scholar*). Sada je višegodišnji gostujući profesor na Sveučilištu East China Normal u Šangaju, a od travnja ove godine i na Technionu u Haifi, Izrael.

Dao je izuzetne doprinose teoriji dinamike i spektroskopije višeatomskih molekula sa vibracijama velikih amplituda, slabo vezanih molekulskih grozdova, i molekula vodika u nanometarskim šupljinama raznih materijala. Kao priznanje za ta dostignuća, 2009 izabran za *Fellow of the American Physical Society*. Autor je 101 znanstvenog rada koji su objavljeni u vrhunskim znanstvenim časopisima, a isti su citirani više od 3700 puta.

**Sažetak predavanja: „Squeezing hydrogen molecules in tight places: energetics, quantum dynamics, Raman, and inelastic neutron scattering spectroscopy“**

Confining hydrogen molecules in nanoscale cavities leads to the quantization of their translational degrees of freedom, in addition to the quantized rotational states. This opens the door for the investigations of the quantum dynamics of coupled translational and rotational motions of the guest molecules, and how it is affected by the size, shape, symmetry, and chemical composition of the host cavity. We will review our rigorous treatment in the past couple of years of the quantum translation-rotation (T-R) dynamics of hydrogen molecules trapped in the small and large cages of the structure II clathrate hydrate and inside the fullerenes  $C_{60}$  and  $C_{70}$ , and also in their open-cage derivatives. These studies have determined the maximum  $H_2$  occupancy of the host cavities, and demonstrated the key role that the T-R zero-point energy plays in it. They have also have quantified the temperature dependence of the spatial distributions of the guest molecules, as well as their intricate T-R energy level structure exhibiting conspicuous patterns of degeneracies and level splittings. Quantum methodology for rigorous calculations of the inelastic neutron scattering (INS) spectra of nanoconfined molecules has been developed and implemented. Our findings are in excellent agreement with the recent spectroscopic measurements of these systems.