

Construcción de superficies de energía potencial

Researchers:

• Eloísa González Lavado. Departamento de <u>Ingeniería Química y Química Fisica</u> [1] (<u>GCYDEX</u> [2]) de la <u>Universidad de Extremadura</u> [3].

Idioma Indefinido

Objectives:

• Construcción de superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos basada en cálculos ab initio de alto nivel.

Methodology:

• Programas escritos en lenguaje FORTRAN.

URL de origem: https://web.computaex.es/pt-pt/proyectos/construccion-superficies-energia-potencial

Ligações

[1] http://www.unex.es/conoce-la-uex/estructura-academica/departamentos/ficha_estructura?idDpto=Y063 [2] http://www.unex.es/investigacion/grupos/gcydex/ [3] http://www.unex.es