

上余白 25 mm

「講演番号」を
左上隅に記入
します。

講演題目

○ 講演者、共同研究者
所属

「講演番号」は、日本コンピュータ化学会ホームページ
<http://www.sccj.net/event/nenkai/2011sp/nenkai2011sp.htm>
に、掲示されているプログラムで確認してください。
※「講演番号」は、発表登録システムで使われている「予備登録番号」
ではありません。**(フォント指定: Arialあるいはゴシック 14pt)**

左余白
25 mm

右余白
25 mm

本文

A4版 1~2枚

使用するフォント、図表に関して
は特に指定はしません。

下余白 25 mm

予稿例

2P021

計算化学による赤外スペクトルの予測

— ポリグリシンの気相赤外スペクトルの計算 —

○計算 好子¹、化学 一郎²

¹ 計算大学工学部計算化学科 (〒123-4567 東京都練馬区北 1-2-3)

² 計算化学研究所 (〒321-7654 つくば市南 1-1-1)

【緒言】

分子軌道法や分子動力学法などの計算化学手法で振動スペクトルの理論的解釈がどの程度まで可能かを検証するために、5 種類のポリグリシン分子について振動数、赤外強度を 6-31G から AUG-cc-pVQZ に至る 30 種以上のいろいろな基底で計算したが、かなり高い基底で計算しても実測の振動数、赤外強度の再現はきわめて困難であることが分かった。

(略)

【方法】

(略)

【結果】

(略)

参考文献

(略)

おわり