

「講演番号」を
左上隅に記入
します。

講演題目

「講演番号」は、日本コンピュータ化学会ホームページ
HYPERLINK
"<https://sites.google.com/view/sccj2023au/>"<https://sites.google.com/view/sccj2023au/> →「プログラム」に、掲示されている番号をご確認してください。
※「講演番号」については、フォント指定: Arialあるいはゴシック 14pt で
す。

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

2P21

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)

本フォーマットを上書きする形で予稿をご準備ください。
この枠線内の文章は作成時には削除ください。

ページ数は最大2ページまでです。