

「量子化学計算に基づいたスペクトルシミュレーション」

(概要)

理論に基づいて計算された材料物質モデルの分光スペクトル (IR, Raman, NMR, UV-Visible, MS, XPS, XES, AES)は、実測スペクトルと良く対応させることができるようになった。これは、量子化学計算が、その理論、技法の改良、プログラム開発および計算機の高性能化によって著しく進歩したからである。そこで、著者らが、最近纏めている量子化学計算による材料物質の代表的ポリマーのIR, MS, C13NMRや超イオン電導体CuAgIとガスハイドレートのSolid NMR, 溶媒中色素のUV-Visible, 第2周期元素のX線光電子及びオージェ電子スペクトルとその実測スペクトルとの関連性について述べる。

