

「表面赤外振動分光データやナノバイオロジーの解析に必須な計算機シミュレーション」

講演者氏名	宇理須恒雄
共同研究者氏名	王志宏、渡辺秀和、南部伸考、真木淳、青柳睦
所属	分子研
講演タイトル	「表面赤外振動分光データやナノバイオロジーの解析に必須な計算機シミュレーション」
講演概略	私のグループではこの9年間、BML-IRRASという新しいSi表面の振動分光法を開発してきました。特にSi表面の水素と水の反応について多くのあたらしいピークを観測し、計算科学の恩恵を受け、お陰で多数の蜜スペクトルの帰属に成功し、BML-IRRASの有用性を実証出来ました。