

第一原理計算による NMR パラメータの予測：K-cymrite と AlPO_4 多形
Prediction of NMR parameters by first-principles calculation: K-cymrite and polymorphs of AlPO_4

神崎 正美^{1*}, 薛 献宇¹

KANZAKI, Masami^{1*}, XUE, Xianyu¹

¹ 岡山大学地球物質科研セ

¹ISEI, Okayama Univ.

See English abstract.

キーワード: 核磁気共鳴法, 第一原理計算, 化学シフト, 結晶構造, AlPO_4 , K-cymrite

Keywords: NMR, first-principles calculation, chemical shift, crystal structure, AlPO_4 , K-cymrite