

付録

エネルギー微分で得られる分子物性

R_n : 核座標 振動モード	F_α : 電場	B_α : 磁束密度	$\mu_{N\alpha}$: 核磁気モーメント
----------------------	-----------------	-------------------	----------------------------

$\frac{\partial E}{\partial R_n}$: 原子核に働く力
構造最適化

$\frac{\partial E}{\partial F_\alpha}$: 電子双極子
モーメント

$\frac{\partial E}{\partial B_\alpha}$: 磁気双極子
モーメント

$\frac{\partial^2 E}{\partial R_n \partial R_m}$: 力の定数行列
基準振動解析

$\frac{\partial^2 E}{\partial F_\alpha \partial F_\beta}$: 分極率

$\frac{\partial^2 E}{\partial B_\alpha \partial B_\beta}$: 磁化率

$\frac{\partial^2 E}{\partial R_n \partial F_\alpha}$: 電子双極子モーメント
の座標微分
IRの吸収強度

$\frac{\partial^2 E}{\partial B_\alpha \partial \mu_{N\beta}}$: 磁気遮蔽テンソル
NMR化学シフト

$\frac{\partial^3 E}{\partial R_n \partial R_m \partial R_l}$: 3次の力の定数
分子振動の非調和性

$\frac{\partial^3 E}{\partial R_n \partial F_\alpha \partial F_\beta}$: 分極率の座標微分
Raman強度