

CONTENTS

Part III 研究最前線

1 章 軌道描像を超える高精度 F12

044 電子状態理論 天能 精一郎

2 章 巨大分子系の量子化学計算法

052 中井 浩巳

3 章 新しい反応動力学

061 —電子と原子核の運動の絡み合い
高塚 和夫

4 章 光励起された分子系の電子ダイナミクス
と太陽光エネルギー変換 山下 晃一

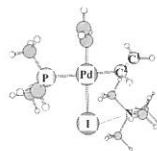
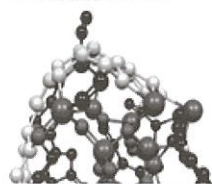
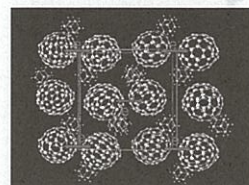
5 章 凝縮系のゆらぎ, 緩和と分光法
076 斉藤 真司

6 章 巨大システムの分子動力学
シミュレーション 082 岡崎 進

7 章 新しい分子統計力学・
統計的動力学記述法 088 平田 文男

8 章 大きい分子の量子化学計算
100 —多重結合化合物と金属内包フラレンを例として
永瀬 茂

9 章 フラレンとカーボンナノチューブ
106 の形成過程のダイナミクス 諸熊 奎治



CONTENTS

Part III 研究最前線

- 10章 錯体触媒反応——魅力に満ちた
113 遷移金属化学種の世界** 榊 茂好

- 11章 超臨界水と脂質膜
123 ——密度可変条件における水の役割** 松林 伸幸

- 12章 イオン液体——特異性と普遍性
129** 佐藤 啓文

- 13章 氷の多形とガス貯蔵庫としてのハイドレート
135 ——多様な氷, クラスレートハイドレート, ナノ空間での水と氷** 田中 秀樹

- 14章 液体界面の分子の状態
140** 森田 明弘

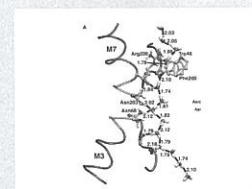
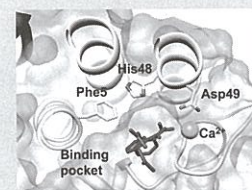
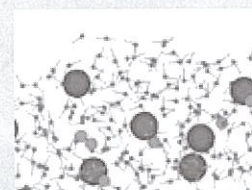
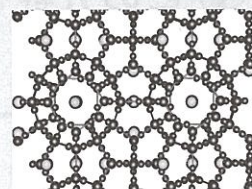
- 15章 水と生体分子のハーモニー
147 吉田 紀生・丸山 豊・清田 泰臣・平田 文男・今井 隆志**

- 16章 巨大生体分子のダイナミクス
159** 高田 彰二

- 17章 酵素反応と生体分子機能の分子
166 シミュレーション** 林 重彦

トピックス

- ガラス会社における理論化学・計算化学の応用と展開
172** 高田 章



CONTENTS

Part III

役に立つ情報・データ

① この分野を発展させた革新論文 49 176

② 日本のスーパーコンピュータ事情

岡崎 進 188

③ 覚えておきたい関連最重要用語 191

④ 知っておくと便利！ 関連情報 194

索引 197

執筆者紹介 202

★本書の関連サイト情報などは、以下の化学同人 HP にまとめてあります。

→<http://www.kagakudojin.co.jp/special/csj/index.html>

