

## 目 次

### I 理論化学・計算化学の挑戦

はじめに .....	1
平尾公彦 東京大学大学院工学系研究科	
1. 量子化学の未来フィールド .....	3
中辻 博 京都大学大学院工学研究科	
2. 次世代分子理論の開発 .....	11
平尾公彦 東京大学大学院工学系研究科	
3. 理論と計算による分子の設計 .....	16
永瀬 茂 分子科学研究所理論研究系	
4. 理論計算による化学反応の理解と予測 .....	21
榊 茂好 京都大学大学院工学研究科	
5. 物性量子化学の基礎と展開 .....	28
山口 兆 大阪大学大学院理学研究科	
6. 動力学理論の将来展望 .....	33
中村宏樹 分子科学研究所理論研究系	
7. 化学動力学理論の展開 .....	37
中村宏樹 分子科学研究所理論研究系	
8. 光で化学反応をコントロール——核・電子波束の量子制御 .....	43
藤村勇一 東北大学大学院理学研究科	
9. 多体系の量子ダイナミクスに向けて .....	51
山下晃一 東京大学大学院工学系研究科	
10. 分子のダイナミクスにおける複雑さの起源 .....	57
高塚和夫 東京大学大学院総合文化研究科	
11. 生命現象に計算化学がどこまで迫れるか .....	63
岡本祐幸 分子科学研究所理論研究系	

## II クラスタ科学

はじめに	69
近藤 保    豊田工業大学クラスター研究室	
1. クラスタ科学——原子・分子と凝縮相の中間領域	71
近藤 保    豊田工業大学クラスター研究室	
2. 気相分子クラスター構造・物性のレーザー分光解析	76
三上直彦    東北大学大学院理学研究科	
3. 孤立クラスターの構造・物性・ダイナミクス	82
寺崎 亨    豊田工業大学クラスター研究室	
4. クラスタを媒介とする化学反応	89
永田 敬    東京大学大学院総合文化研究科	
5. 金属クラスターの反応性とサイズ依存性	94
近藤 保    豊田工業大学クラスター研究室	
市橋正彦    豊田工業大学クラスター研究室	
6. 溶液中での磁性クラスターの合成	99
西 信之    分子科学研究所電子構造研究系	
7. 表面修飾による金属クラスターの安定化と機能化	107
佃 達哉    分子科学研究所分子スケールナノサイエンスセンター	
8. クラスタの材料化——気相合成とソフトランディング	112
中嶋 敦    慶應義塾大学理工学部化学科	
9. 超臨界流体中のクラスター	120
梶本興亜    京都大学大学院理学研究科	
10. クラスタの構造転移のダイナミクス	128
高塚和夫    東京大学大学院総合文化研究科	
11. 理論計算によるクラスター研究——構造と電子状態	134
橋本健朗    東京都立大学大学院理学研究科	

## III スペースケミストリー

はじめに	141
廣田 襄    宇宙開発事業団宇宙環境利用研究システム	
1. 晩期型星周辺部と星間雲の分光化学	144

川口建太郎 岡山大学理学部化学科

2. 星間空間での化学反応 .....151  
百瀬孝昌 京都大学大学院理学研究科
3. 新しい観測装置が開く星間化学 .....157  
山本 智 東京大学大学院理学系研究科
4. 宇宙における生命の起源と分布を探る .....162  
小林憲正 横浜国立大学大学院工学研究院
5. 宇宙環境における実験化学者 .....170  
毛利 衛 日本科学未来館
6. 微小重力利用が開く科学の世界——国際宇宙ステーションの実験環境 .....175  
清水順一郎 宇宙開発事業団宇宙環境利用システム本部
7. 新たなスペースケミストリーの開拓の試み——化学の世界の新しい窓を開く .....183  
石川正道 株式会社三菱総合研究所先端科学研究センター
8. 氷のパターン形成——宇宙実験による機構解明を目指して .....191  
古川義純 北海道大学低温科学研究所
9. 宇宙環境における原子状酸素による宇宙用材料の特性劣化 .....198  
今井文一 宇宙開発事業団技術研究本部
10. 次世代宇宙ミッションと化学——宇宙開発をナノテクノロジーで .....206  
石川正道 株式会社三菱総合研究所先端科学研究センター