

講義関連事項のメモ

佐藤啓文*

工学研究科分子工学専攻・工学部工業科学科 分子理論化学講座

<http://www.riron.moleng.kyoto-u.ac.jp/>

平成 23 年 7 月 7 日

1 水のシミュレーション

1.1 松本正和先生のページ (水の動画)

<http://theochem.chem.okayama-u.ac.jp/wiki/wiki.cgi/matto>

水の動画は左側「gallery」の「動画」から

1.2 原著論文

M. Matsumoto *et al.* Nature, 416, 409-413 (2002).

2 pH

2.1 原著論文

H. Sato *et al.* J. Phys. Chem. A, 102, 2603 (1998).

H. Sato *et al.* J. Phys. Chem. B, 103, 6596 (1999).

T. Yagasaki *et al.* J. Chem. Phys. 122, 144504 (2005).

K. Kido *et al.* J. Phys. Chem. B, 113, 10509 (2009).

3 蛋白質の水和

<http://www.rsc.org/chemistryworld/News/2005/October/25100501.asp>

4 「京」関連など

- 理化学研究所 計算科学研究機構
<http://www.aics.riken.jp/>
- HPCI 戦略プログラム 分野 2「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ (CMSI)
<http://www.cms-initiative.jp/>
- CMSI 計算分子科学研究拠点
<http://tcci.ims.ac.jp/tcci/>
- 「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト
<http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/>

*hirofumi"@moleng.kyoto-u.ac.jp