



表紙：栃木県虹見橋より龍王峡
(提供：鈴木宏記)

- 781 **巻頭言** 材料とマテリアル
宝野和博
- 785 **論説** 学術論文等のオープンアクセス化の推進
野口雅貴・赤池伸一

789 **特集** 分子シミュレーションで見える
景色

分子やその集合体のふるまいを見ることは、化学者の夢の1つだ。合成と解析技術の進歩に伴い、新しい分子や材料の作製やその解析技術が発展してきた。1つの低分子のふるまいはシミュレーションで見ることができても、高分子や多数の分子が関与する分子集合体のふるまいを見ることは計算コストの点で容易ではない。本特集では、近年、計算機や機械学習の発展に伴い、分子シミュレーションで見えるようになった分子集合体の「景色」を取り上げてみたい。 [担当：緒明佑哉・岡本敏宏・兵藤憲吾]

- 1 分子シミュレーションで有機分子集合体を見る・知る
——柔らかさと秩序の起源を解き明かし、新材料創製に活用
渡辺 豪
- 2 細胞内分子動態のシミュレーション
杉田有治
- 3 分子集合体の可視化による材料開発の深化
荒井規允
- 4 分子シミュレーションと機械学習で材料の秩序構造を見る
——局所秩序変数を用いた客観的な構造同定法
高橋和義
- 5 量子化学計算が拓く新素材開発
——新触媒による高機能ゴム・エラストマーの革新
福島里佳

- 804 **Gallery** 日本プロセス化学会 2024 ウィンターシンポジウム

- 813 **Division Topics**
- 1 光化学 高い活性と耐久性を両立する分子複合光触媒
 - 2 分析化学 電気伝導計測に基づく単分子分析
 - 3 触媒化学 金属触媒によるエタノール合成
 - 4 高分子 分岐構造を有する新しいポリビニルアルコールの合成と性質
 - 5 コロイド・界面化学 水熱炭素化-テンプレート法を利用した多孔質カーボン材料の合成

2024 年度化工誌編集委員会

委員長：西山 繁 理事：関根千津

幹事委員：菅 孝剛 / 長門石 暁 / 緒明佑哉 / 砂田祐輔 / 三宅亮介 / 朝倉則行 / 山本崇史 / 和田宏明 / 中村将志 / 岡本敏宏 / 岡添 隆 / 丸山由貴 / 栗山敬祐 / 矢島知子

委員：伊掛浩輝 / 畑中美穂 / 山本隆文 / 小林直樹 / 清水章弘 / 守谷 誠 / 兵藤憲吾 / 深澤倫子 / 須貝 威

監修：植村 榮 / 岩本振武

★化工誌記事についてのお問合せ E-mail: kakoshi@chemistry.or.jp

デザイン：(株) マツダオフィス

816

飛翔する若手研究者

- 1 天然物に学び、天然物を超える挑戦
大好孝幸
- 2 酵素反応を模倣した高分子主鎖変換
——環状構造をいかに使うか
山本浩司
- 3 酸化的カップリングによる天然ピアリール構造の構築
——エラジタンニンの有機合成化学の発展
若森晋之介

822

BCSJ/Chem Lett グラフィカルアブストラクト

824

支部だより

「未来につながる命のために科学ができること」 北海道支部
化学への招待—弘前大学—日体験化学教室 東北支部

827

部会だより

事業企画委員会の活動紹介 コロナイドおよび界面化学部会

828

CCI サロン

化学よもやま話 植村 榮

829

編集者の独り言

830

会告 (次号予告)

831

お知らせ

行事一覧

講習会・講演会

研究発表会——発表募集

研究発表会——プログラム

844

掲示板

845

求人・求職

次頁

広告索引・広告資料請求用紙 (ご活用下さい)

