

Kagaku To Kogyo (Osaka)

科学と工業

第97巻 第9号 2023年9月

目 次

解説

多孔性結晶から創り出す機能性高分子材料

豊田工業大学 小門 憲太 … 279
豊田工業大学 阿南 静佳
北海道大学 佐田 和己

キーワード：多孔性結晶，逐次重合，多面体，モンテカルロ・シミュレーション，
高分子ゲル，異方伸縮

解説

第一原理計算による接着分子理論の構築に向けて： 金属とエポキシ樹脂の接着相互作用

九州大学 住谷 陽輔 … 287
九州大学 吉澤 一成

キーワード：量子化学計算，密度汎関数理論，接着剤，エポキシ樹脂，
酸化銅表面，金表面

解説

有機材料開発への計算機シミュレーションの利用

(地独)大阪産業技術研究所 松元 深 … 293

キーワード：計算機シミュレーション，量子化学計算法，分子動力学法

大阪工研協会会報 …………… 300

Contents

【Review】

Functional Polymer Materials Derived from Porous Crystals

Kenta KOKADO, Shizuka ANAN, Kazuki SADA ...279

Toward Development of Molecular Theory for Adhesion by First-Principles Calculations:
Adhesive Interaction between Metal and Epoxy Resin

Yosuke SUMIYA, Kazunari YOSHIKAWA ... 287

Application of Computer Simulation in Organic Materials Development

Fukashi MATSUMOTO ... 293

今月号のここがポイント！

本号では、3件の解説記事を掲載いたしました。1件目は多孔性結晶を用いた新しい高分子の重合法についてです。この重合法は溶液重合と結晶重合の特徴を併せ持ち、構造制御が可能な新たなソフトマテリアルを得ることができます。解説記事2件目は、第一原理計算を用いた接着分子理論についてです。本記事ではエポキシ樹脂と金属表面の接着について、密度汎関数理論などを用いて分子レベルで理論的に解析した結果を紹介しており、接着に関して本質的な理解に基づく材料開発への発展が期待されます。3件目は、計算機シミュレーションを利用した有機材料開発についてです。計算機シミュレーションを用いた物性計算における予測精度やコストについて実践的な観点から解説し、有機分子の物性の実際の計算例について紹介しています。