

## Contents

### Foreword

- Toward Computational Materials Science and Engineering Takaaki Matsuoka  
計算材料科学と計算材料技術に向けて

### Special Issue : Multiscale Simulations for Materials

#### Review

- 1 Multiscale Simulations for Materials (Conspectus) Shi-aki Hyodo  
材料のマルチスケールシミュレーション (概況)

#### Research Reports

- 10 Hierarchical Procedure Bridging the Gap between Satoru Yamamoto  
Mesoscopic and Atomistic Simulations for Materials Design  
材料設計のためのメソとミクロをつなぐ階層的シミュレーション
- 17 Lattice Boltzmann Method and its Application to Flow Hidemitsu Hayashi  
Analysis in Porous Media  
格子ボルツマン法とその多孔体中の流れ解析への応用
- 26 Electronic State Calculation for Hydrogen Atom under Shunsuke Yamakawa  
Inhomogeneous Field Shi-aki Hyodo  
不均一場における水素原子の電子状態

#### Review

- 33 Problems on the Connection between Quantum and Shi-aki Hyodo  
Classical Pictures (Commentary)  
量子力学的描像と古典的描像の共存における問題 (解説)

#### Review

- 39 Material Recycling Technology of Kenzo Fukumori  
Crosslinked Rubber Waste Mitsumasa Matsushita  
架橋ゴム廃材のマテリアルリサイクル技術

#### Research Reports

- 48 Time and Space Variations of Main Species Concentration of Masayoshi Karasawa  
Fine Particulate in the Kanto Region  
関東地域における微小粒子中主要成分の時空間変動
- 57 Secondary Organic Aerosol Formation from Photochemical Hideto Takekawa  
Reaction of Aromatic Hydrocarbons  
芳香族炭化水素の光化学反応による二次有機エアロゾル生成

#### Topics

- 63 "OptDesigner": Optical Simulator of Organic Takahiro Shiga  
Light-Emitting Diodes  
有機EL素子における光学シミュレーション技術