

サイ・テック 知と技の発信

【352】

埼玉大学・理工学研究の現場

■分子の軌道計算

近年、コンピュータの飛躍的な進歩に伴い、多くのパラメータを扱った大規模で複雑な計算が、より速く行えるようになってきました。では、大きな速いコンピュータ

タを使えば、何でも正確に予測できるものなのでしょうか？

化学の分野でよく知られていることですが、一つしか水素を持つたない水素類似原子のみ、その電子の軌道を正確に計算するこ



たちかわ たつや 1965年生。93年3月東京大学大学院修了。博士(理学)。埼玉大学大学院助手を経て、2006年1月から現職。専門は機能性有機色素材料の開発研究。

コンピュータによる予測 太刀川 達也 講師

とができます。水素類似原子以外の大多数の原子や分子、それらの集合体である「物質」に対しては、より正解に近い答えを得るために近似を行う必要があります。タンパク質のような大きな分子や「物質」で起る複雑な現象も、コンピュータの進歩によりシミュレーションできるようになりまし

とができます。水素類似原子以外の大多数の原子や分子、それらの集合体である「物質」に対しては、より正解に近い答えを得るために近似を行う必要があります。タンパク質のような大きな分子や「物質」で起る複雑な現象も、コンピュータの進歩によりシミュレーションできるようになりまし

そこでは、実験結果に基づいて得られた考察や説明が確からしいことを保証するために計算を用いることが主であり、計算だけでは有用な分子や物質を設計するのは、またまた難しいように思いますが、化学以外の分野でも、計算でした予測が確からしいもの、そうでないものがあるように思っています。噴火においても予測できずには大きな被害がもたらされ

■天気予報や天体連行

天気予報や天体の連行に関する研究では、コンピュータが、多くのパラメータを扱えるようになれば、より正確にこれからの天気や噴火を予測できるものか、いやいや、地殻のひずみ

果たして、観測点を増設し、地下の地層の状態を随時解析できることにすることで、地震や噴火を予測できるようになるものか、いやいや、地殻のひずみ

一方で、地震や噴火に関しては、研究者は判定する必要が

埼玉経済

企業、団体、商店街などの話題や情報をお寄せください
TEL 048・795・9161 FAX 048・653
keizai@saitama-np.co.jp