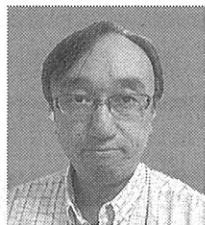


# 埼玉経済



## サイ・テク 知と技の発信 こらむ・・・

【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う大規模で複雑な計算が、より速く行えるようになつてきました。では、大きな速いコンピュー

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「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できるようになります。

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

5年前のノーベル化学賞は、量子化学の計算と分子動力学法という別の方法による計算を併せて行うことでの巨大な分子であるタンパク質の構造計算が行えるようになったことが受賞しています。実験系の研究者でもパソコンで手軽に分子軌道計算が行えるようになり、実験で得られた結果を説明するために計算化学を利用する論文も数多く見られます。

#### ■天気予報や天体運行

5年前のノーベル化学賞は、量子化学の計算と分子動力学法といふ別な方法による計算を併せて行うことでの巨大な分子であるタンパク質の構造計算が行えるようになったことが受賞しています。実験系の研究者でもパソコンで手軽に分子軌道計算が行えるようになり、実験で得られた結果を説明するために計算化学を利用する論文も数多く見られます。

#### ■天気予報や天体運行

果たして、観測点を増設し、地下何千㍍の地層の状態を随時解析できるようにすることで、地震や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大気を予測でき、遠く離れた恒星に噴火を予測できるようになります。

一方で、地震や噴火に関しては、います。

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