

◆ 研究テーマ

研究室のメインテーマはスーパーコンピュータを使い自然法則や基本原理に基づいて様々なシミュレーションを行うことです。非常に大規模な計算が必要になりますので、研究室では新しい計算アルゴリズムの開発や、数値計算技術の改良、大規模な並列計算手法の研究を行っています。卒業生の多くは科学技術解析を行う技術者として社会で活躍しています。

「光と色」をテーマに物質の発光機構や色の予測をはじめとした研究を例として説明します。発光や発色は私達がいつも直接感じることができる大切な現象です。特にその基本的な仕組みは、物質が光とどのような相互作用をするかということに立ち戻り調べていくことが必要です。

右図はモルフォ蝶の構造色解析です。鱗粉の構造により青色の発色が起っていることと、反射方向が通常とは異なることがわかります。

理論物理や数値シミュレーションでは、解析モデルを非常に単純化し理想的な状態を試すことが自由にできますので現象の本質に迫ることができます。

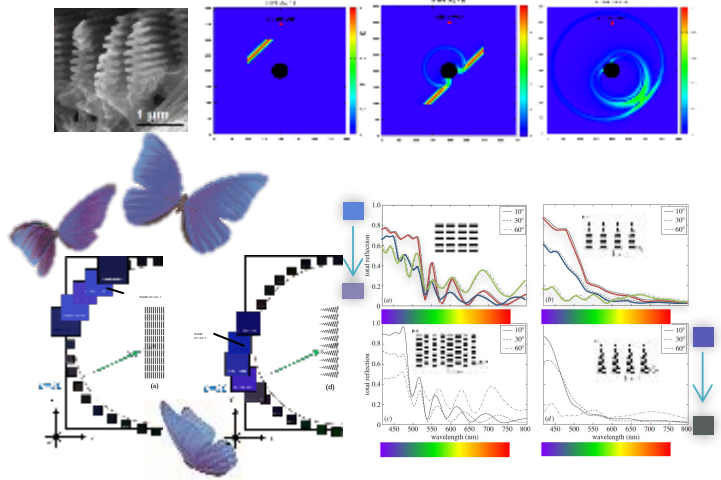


Fig.1 電磁波の基礎方程式から構造色を解析(FDTD法) 鱗粉のSEM像と電磁波の伝搬(上段)。入射・出射方向と鱗粉のモデルによる反射スペクトルの違い(下段)

◆ 展示内容

オープンキャンパスでは、卒論に取り組んでいる4年生をはじめ、大学院生やプロジェクト研究を行っている学部生がそれぞれの研究テーマについて紹介します。身近な現象のシミュレーション(流れや音、光)から、高度なレベルの知識を必要とする大学院の研究(最大エントロピー法)まで、わかりやすく説明してくれます。みんなチャレンジ精神が旺盛な研究室のメンバーです。遠慮なく聞いてください。

例 [有機EL材料の発光・吸収スペクトル予測]

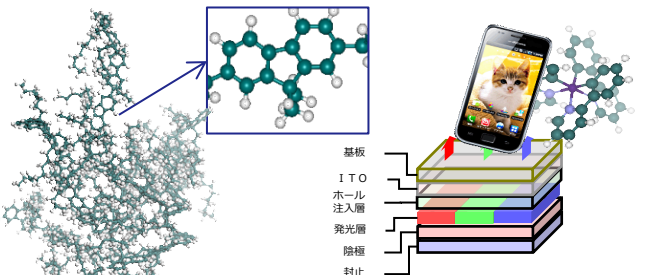
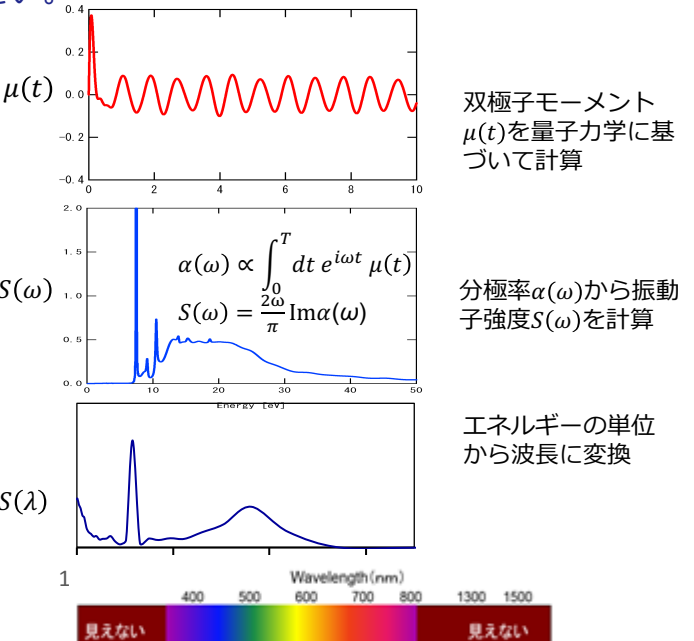


Fig.2 有機EL材料の分子構造 光の発光吸収には電子状態が重要



双極子モーメント $\mu(t)$ を量子力学に基づいて計算

分極率 $\alpha(\omega)$ から振動子強度 $S(\omega)$ を計算

エネルギーの単位から波長に変換

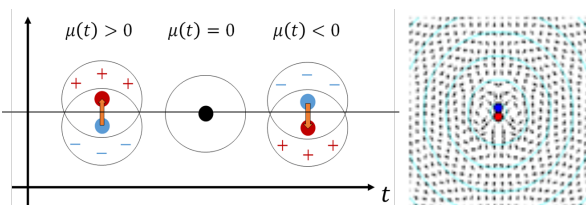


Fig.3 双極子モーメント $\mu(t)$ と電磁波。 $\mu(t)$ が変化する(a)と電磁波(光)が発生する(b)

Fig.4 発光・吸収スペクトルの計算手順