



## 卒業後9年目



【5月某日】

丁度、2週間の一人旅をする直前に、「OBの今」の原稿依頼が舞い込んできた。分子研を「卒業」してから、すでに、2回も雑文を書いているので<sup>1)</sup>、何人かの別候補を推薦して逃れようと試みたのだが、結局断り切ることができなかった。そこで、分子研計算機センター長時代に「センター長報告」としてしばしば試みたように「旅日記」風に、近況を報告させていただこう。今回のアメリカ行きは、旅行ではなく、私が開発しているプログラムを、PNNLのグループたちが長年かけて作っている総合化学プログラムパッケージNWChemに接続できるかを検討するため、PNNL (Pacific Northwest National Laboratories) に滞在する。

1) 分子研レターズ44号巻頭言「変わるってドキドキ」；分子研レターズ49号「どこへ行くのか研究の評価」

【6月3日】

PNNLは、いろいろとsecurityが高く、建物に入るカードの交付を受ける前に、web上で、「講習と試験」を受けなけ

岩田 末廣

(財団法人豊田理化学研究所 フェロー／広島大学大学院理学研究科特任教授 (非常勤) ／分子科学研究所名誉教授)

いわたすえひろ／1967年東大理学研究科博士課程修了後、理化学研究所研究員。1972年から75年まで諸熊教授とK. Freed教授の下で博士研究員。1981年慶応大学理工学部化学科助教授、86年同教授。1994年分子研教授。2000年広島大理学研究科教授。2001年大学評価・学位授与機構教授。2004年広島大学量子生命科学プロジェクト研究センター・理学研究科特任教授。2008年豊田理化学研究所フェロー。

ればならない。まずその前に持って行ったMacBookProをネットワークにつなげるための「講習と試験」に通過しなければいけない。この二つのシステムはなかなかよくできていて興味深かったが、正直に画面を読んで解答していくと結構時間をとられてしまった。

【6月6日】

この2、3日でNWChemのSource Licenceを取り、downloadするところまではできた。Programers マニュアルを眺め始めた。いろいろな量子化学計算やシミュレーションのタスクから構成されている。主にFortran77で書かれているが、各タスクがモジュール化されていて、何よりもcommonがないのがよい。Include文で処理しているようだが、どうせならfortran90にしてmodule文を使えばよいのに。gfortranというpublic domainのfortran90(95) compilerがある今fortran77に固執する意図がわからない。しかし、GAMESSやHONDOに比してずっと私の玩具パッケージMOLYXとは相性が良さそうだ。今晚は、NWChemの中の多電子理論の部分の開発に携わっているDr.Fang,P.-D.とDr.Kowalskiに夕飯を誘われている。広島大の相田研からDupuisのところに来ていた山田君も一緒だ。Fangさんとはフロリダ大の平田聡さんのところで

知り合っており、Kowalskiは平田さんがPNNL時代に開発始めたTCEプロジェクトを引き継いでいる<sup>2)</sup>。私はこのところ、彼らのような若手の量子化学者には、So HirataとSeiichiro Ten-noのポストであったことがある人として知られており、今晚のようにいろいろ得をさせていただいている。食事の後は、山の上のwineryで地元の赤ワインもご馳走になってしまった。PNNLのあるTricity近傍はこのところワインの製造で売り出しており、カリフォルニアワインを越えたという説も聞かされた。

2) 平田さんはこの6月に国際量子分子科学アカデミー賞を受賞している。日本人では1978年の諸熊先生以来である。彼のその他の近況はこのシリーズ、分子研レターズ56に詳しい。これでtenureを確実にしたといえよう。

【6月8日 (日曜)】

今日は、PNNLのHostであるSotiris Xantheasがドライブでワシントン州の北にあるリゾートCoeur D' Aleneまで連れて行ってくれる。ドイツから夏の間だけ来ている大学院生Werham, Jasperと一緒に。Sotirisとは、十数年のつきあいになる。彼はギリシャ人だが、娘たちが手を離れたら、車で3時間ほどのこの湖畔のリゾートで週末を過ごすんだといっている。この長いド

ライブでSotirisとはいろいろな話をした。その一つが「卒業証書」だ。確か西さんが主催してくれたのだと記憶しているが、1999年12月にIMS COE 国際会議”Interplay of theories and experiments in structural analyses of molecular clusters”に、Sotirisは参加している。その夕食会の際に、外国からの出席者たちが私に「分子研卒業証書」なるものを贈ってくれたのだ<sup>3)</sup>。Jim Lisy、Klaus Muller-Dethlef、Denis Salahub、Mike Duncan、Niedner-Schattenbergなどが署名をしてくれた。翌3月に分子研を辞すとしても、それで私がretireするつもりもないことを知っていた誰か（多分Lisy）が「分子研を定年で辞める」を「分子研を卒業する」と言い換えてくれたのだ。幸いにも、「卒業後」にも国家公務員を4年務めることができ、4年の常勤の特任教授（うち1年は公務員共済に加盟）を加えると、8年間full salaryの勤務に就いていたことになる。

ドライブ中のもう一つの話は、この雑文に添付した写真についてだ。これは、昨年Sotirisが来日した折、広島大の江幡さんと尾道に遊んだ時千光寺で撮影したものである。「なぜおまえの名前のpine treeがあるのか」の説明を簡単に「めでたい言葉だから」と説明しただけですましていたのだが、長ドライブのさなかでこの質問がぶり返されたのだ。正直言って私もこの名で父が何を意図したのかまじめに考えたことがなかった。私のすぐ上の兄は桃太郎といい、これは当時の軍国主義の風潮の中で軍隊に入れば「桃太郎閣下」ということで、そのかっこよさが名の由来といわれてきた。この春岡山を観光する機会があり、もう一つの「桃太郎」の由来に気がついた。父はウキタ家の出で、私の祖父に当たる「ウキタ」

達は明治の始めに八丈島から東京に出てきたことがわかっている。宇喜多秀家は流刑地で子孫を残したことになるのだ。このウキタ達は、「宇喜多」を避けて、「浮田」を使っているが、いところの話では今でも一緒に八丈から出てきた人の子孫たちとは連絡がとれているという。桃太郎伝説の岡山は、宇喜多家のゆかり土地なのだ。兄の名の由来はともかくも何で俺は「末廣」何だ。ともかく「めでたい言葉だからレストランの名によく使われるよ」という説明で今までごまかして来たが、Sotirisとの会話の中ではたと気がついた。これが確かに本当の理由なのだ。私が生まれた当時、両親は銀座5丁目で「お京」というふぐ料理屋をやっていた。そして今も銀座にある「末廣」は、洋食レストランとして当時すでに繁盛していたという。父達は自分たちと同じ仕事するのに便利な「末廣」を私に与えたと考えるとつじつまが合う。Sotirisのしつこい質問攻めのおかげで長年の私の謎を解くことができた。

3) 何度かの私の移転で今見つけることができなかった。確か、博士記と一緒に大切に保管してあるはずなのだが。

【6月10日】

NWChemをMacBookPro上でcompileすることに成功。テストjobの半分ぐらいは正常終了したが、残りは多分すべて同じ理由で途中までしか走らない。過去の質問・回答集を調べるとMacBookPro、Leopard、intel compilerの組み合わせの例が見つからない。ともかくも、MacBookPro上でCompileした人に問い合わせのメールを打つ。また、FangさんにNWChemの移植に詳しいWang, Dunyouを紹介してもらう。

【6月11日】

問い合わせの返事が戻ってきたがあまり助けにならない。Intel compilerは高価だからgfortranにしたという。Wangの部屋を訪問する。彼はMacMiniしか持っていないし、OSも新しくしていないという。彼は、LeopardのXcodeとintel compilerの相性ではないかという。これらをはじめからinstallし直すことを勧められた。帰国後ということになる。

【7月某日】

いっぺんに2、3週間飛んでしまう。名古屋大学の岡崎さんと岡本さんの招待で、名古屋大工学部でセミナーをさせていただく。この数年間の「研究成果」を話す。感心していただいたのは、中身よりもむしろ「単著」の研究成果であることだ。もちろんセミナーの後には、飲み会。天能さんも加わり楽しく歓談する。皆さん、分子研のOBだ。誰かがどこかに書いていたが、分子研の最大の業績は、優れた人材を日本全国の大学に供給してきたことという話がある。「最大」では、かなり困った事だとは思いますが、確かに、どこの大学を訪ねても、分子研を通過してきた先生方にお目にかかる。広島大学でも、多くの先生が分子研を経験されていたが、名古屋大学は地元であることもあって、たぶん十指を越える方々が現役で名古屋大におられることだろう。斉藤真ちゃんのように<sup>4)</sup>、分子研に舞い戻った方もいるが。

4) 斉藤真司教授が私にとってまだ真ちゃんであること理由は、分子研レターズ53号参照。

【7月某日】

編集委員に催促されて、ともかくも

書き上げることにする。今は、名古屋から日吉の我が家に戻る途中。新幹線の700号車両の先頭と後尾の席では電源コンセントが使える。指定ではなかなか1xや13xの席を取ることができないこともあって、もっぱら、自由席を使っている。もちろん価格面の理由もあるが、この4ヶ月弱の往復で自由席に座れなかったことがない。

今日はまあハッピーだ。平尾特定で2001年に購入し、一橋から東広島を経て、長久手にまで供をさせてきたCompaqのDS20Eを立ち上げ、無事にネットワークにつなげることができた。あまり高速とはいえないが個人的な量子化学計算専用機としては十分使えると判断している。RCCSにsubmitする入力データのテストをする計算として使うつもりでいる。

今日ようやく科学研究費の報告書が製本されてきた。分子研から広島大に移った2000年の春にはまだ「平尾特定」の計画班に参加しており、上記のDS20eはこの予算で2001年大学評価学位授与機構時代に購入した。その後も、基盤研究Cを2002-2004と2005-2007に採用していただいた。今日届いた報告書はこの2005からの3年間の成果報告書である。これは、広島大学の相田美砂子教授の主宰する「ナ

ノ・バイオ・IT融合教育プログラム（文科省科学振興調整費振興分野人材養成）」の特任教授に採用された年（2004年）の秋に申請したもので、広島大でのこの4年間の私の研究を支えてくれた。2008年3月にはこのプログラムが終了になることになっていたが、その後も客員の肩書きがいただけそうであったので、広島大学を通じて2008年からの科学研究費を申請させていただいた。幸いこの4月から豊田理化学研究所のフェローとして研究を続けられることになった上に、申請していた科学研究費も採用されたので、一人で理論・計算化学研究を続けるには研究費に不便をしなくてすむことになった。いくつか課題を進めているが、単著の論文を1年1報書くことを目指したい。

豊田理研には、吉原名誉教授と北川名誉教授が先任でおられ、元気にご活躍されている。ここは、特に、理論・計算研究をするのに適している<sup>5)</sup>。私はこのところ主にMacをUNIX機械として使っているが、その性能の高さには驚かせる。豊田理研の予算と科研費で購入したQuadra duo MacProはかなり大規模の量子化学計算を実行できる。NWChemは、CPU=8と設定すると8CPU並列実行ができるという。残念ながら、まだ完全にはうまく

compileに成功していない。

5) この唯一の不満は、VPNで家からオフィスのMacを使えないことである。オフィスは豊田中央研究所の一室なので、ネットワークのsecurityが高いのである。独立棟がそのうち作られると聞いているが、そのときにはぜひVPNが使えるようにしていただくよう希望を出している。

#### 【7月某日】

最後は、名古屋駅から藤が丘までの地下鉄内で打ち込むことになってしまった。かくのごとく、ともかくも、卒業後9年目を迎えた今も、それぞれ異なるOSで動いている複数の計算機と戯れて、研究を文字通り楽しんでいく。「自己批判」とか「自己否定」という言葉がむしろそれが強制されるものであったことを見抜いていた私の青春時代の仲間たちは意図的にこれらの言葉を自分に対しては使わないできた。今はやりの「自己評価」も似た性格を持っていて、好きになれる言葉ではない。しかし、「公の」研究費を使って研究をしているのであるから、自分で判断を下して、ある時点で、これまでのような「研究生活」を打ち切るつもりではいる。





## 岡崎を離れて約二年



### 三澤 宣雄

(東京大学 IRT 研究機構 生産技術研究所 特任助教)

みさわ・のぶお / 2003年3月 東京農工大学大学院 生命工学研究科 修士課程修了  
 2003年4月 総合研究大学院大学 物理科学研究科 進学  
 2006年3月 総合研究大学院大学より博士(理学)の学位取得  
 2006年4月-10月 分子科学研究所 極端紫外光科学研究系 博士研究員  
 2006年11月-現在 東京大学 IRT 研究機構 生産技術研究所 特任助教

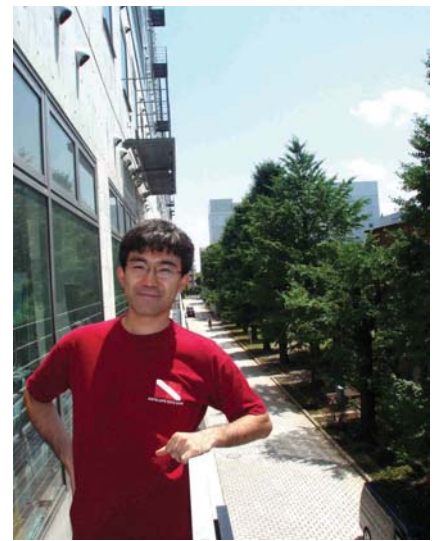
そろそろ研究室の時計の針が午前1時を指そうとしています。つい今の今まで次の会議で使う資料の準備に追われ、今日も実験室に入る時間はありませんでした。

略歴にもある通り、2006年の3月に総研大で博士課程を修了し、半年ほどそれまで所属していた研究室にいました。その秋に東京の駒場にある東京大学 生産技術研究所(生研)にかかりました。現在、自分はInformation Technology(いわゆるIT)とRobot Technology(RTというらしいです)が融合したIRTというプロジェクトの特任助教として雇用されています。IRTプロジェクトの詳細な内容は<http://www.irt.i.u-tokyo.ac.jp/>で確認できますので興味のある方は是非ご覧下さい。実験は駒場の生研でしていますが、IRT研究機構の拠点は本郷の工学部です。自分の正式な所属先は本郷にあります。そのため、最低一週間に一回は行われる全体の会議やグループの打合せのために駒場キャンパスから本郷キャンパスへ移動しなくてはなりません。駒場から本郷への移動は専ら地下鉄なのですが、電車内ではたいいてい情眼を貪っています。たまに研究のことも考えていますが、“ひとりブレインストーミング”は5分ともたないので、最近ほとんど熟睡しています。この移動の時は寝ていても、いつも不思議

と降りるべき駅で目が覚めるのですが、先日は途中で目が覚めて間違えて降りてしまいました。岡崎の研究所が輩出した人材がこの体たらくとは本当に恥ずかしい限りですが、今日び、過労でドロップアウトするよりはマシだろうという心意気で生活しています。

このように自分で書いていても大丈夫かと思う日々なのですが、思った以上に大丈夫ではないようです。それでも現在、携わっている研究は(最近では雑務が多いのですが……)やはり面白く、その点で非常に救われています。もちろん、こちらにうつってきて、研究室やプロジェクトのメンバーが気持ちの良い人たちということもあります。そう考えると、岡崎で博士後期課程を過ごした三年間に会った人たちも先生をはじめ、親切な方々ばかりで、思い出すのは楽しい風景ばかりです。特に分子研の総研大同期はみんな根が真面目な連中ばかりでした。冬になると研究室の目を盗んでスキーに明け暮れる奴もいれば、先生も交えた輪講に顔も出さずにバイトに精を出している奴もいました。良い意味でそういう同期がいたおかげもあり、研究所の外でも楽しい岡崎生活を送ることができました。UVSOR入口付近のテニスコートの隣でしばしば行われるバーベキューにも性懲りもなく頻繁に参加させて頂きましたし、東岡崎駅界隈でもよく飲み

梅雨の中休みに生産技術研究所の研究室のベランダで。



ました。どれも楽しい思い出です。誘って頂いたり、お付き合いして頂いた方々には本当に感謝の念に耐えません。まるで研究以外の時間が充実しているように書いていますが、ひとり静かにクリーンルームで行うシリコンウエハの洗浄や原子間力顕微鏡(AFM)につききりの時間もまた好ましい時間でした。修士号取得まで在籍していた東京農工大学とは違い、分子研は人口密度の低さから、設備や装置の使用でユーザー同士がかち合うという煩わしさを感じることは自分の場合、まずありませんでした。人が少ないことに対して学生としては少しつまらない? という農工大の同窓生(彼は研究会か何かで数日間、岡崎に滞在していました)が言っていたのを覚えています。自分はむしろその閑散とした雰囲気好

きでした。休日にも気兼ねなく実験でき、隣接の図書館も重宝していました。研究環境には本当に恵まれていたと実感しています。

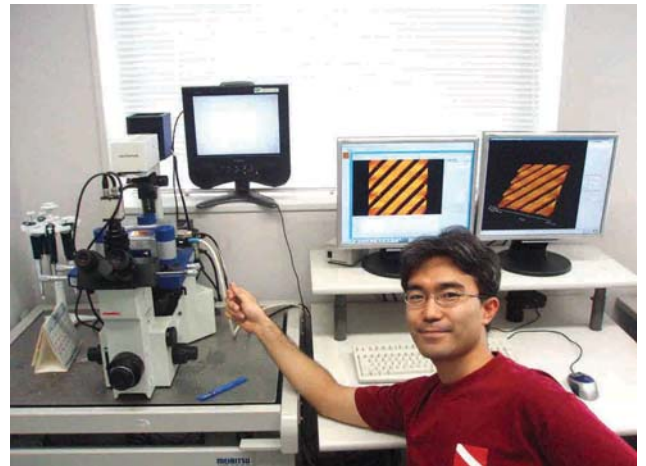
さて、岡崎を離れて二年が過ぎようとしていますが、生研にうつってきて何をなし得たかという、前述の通りの日々なので正直なところ、あまり成果はありません。既に小ネタで学会発表も何件か行いましたが、IRTプロジェクトで目指すところとしてはまだまだ道のりは長い印象です。現在、自分は生研の近くに住んでおり、終電を気にせずに実験ができます。頻繁に使用する装置はAFMなのですが、比較的、その操作に慣れているのは研究室では自分だけです。そのため、自分がAFMをほとんど独占しており、観察実験だけなら非常にやりやすいですが、クリーンルームは混雑しています。

生研は駒場リサーチキャンパスという場所にあり、先端科学技術研究センター（先端研）の隣に位置しています。生研と先端研の設立目的は今春のキャンパス公開の冊子によると、それぞれ「生産に関する技術的問題の科学的総合研究ならびに研究成果の実用化試験」と「先端科学技術やその関連分野の研究教育を行うこと」だそうです。当然

ですが、両研究機関の研究の垣根はないので、先端研の研究室とも交流でき、実際に研究の相談ができるのは心強い限りです。

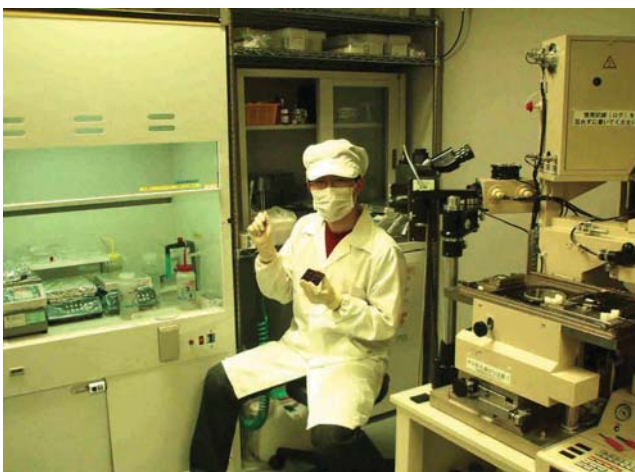
駒場キャンパス周辺は低層の建物が多いので生研の8階からの眺めは気持ちよく、非常に気に入っています。自転車を全速力でこげば、20分程度で新宿駅に着く距離ですので、ちょうど新宿のビル群を一望できるくらいの近さです。深夜、8階の実験室から居室へ戻る際に廊下から見える新宿副都心や六本木ヒルズ、東京タワーの夜景は実験疲れの頭には沁み入る光景です。また、反対側を臨めば、実験室の窓から十分に確認できる大きさで富士山が見えます。冬の朝など、空気が澄んでいる時は非常にはっきりと富士山が見え、夕方は特に日没直後の残光に映えるシルエットが格別です。

かなり滅裂な構成ですが、以上が断片的な自分の現状です。本稿を書くに



現在使っているAFMの前で。映っているのはガラス表面に作製した10 nm段差の縞模様です。

あたり、幾つかこれまでの「OBの今」を読ませて頂きました。みなさん真面目な話題を簡潔に述べられており、今更ながら自分が寄稿することに恐縮しています。そろそろ規定の字数も超えたようですし、明日もありますので、ここで筆をおきたいと思います。今、午前3時の少し前です（実際には後日、読み直したので二時間で書き上げたわけではありません）。



クリーンルーム内にあるイエロールームでガラスマスクを持って実験をしているふり。