

分子研に赴任して

関連領域研究系分子クラスター研究部門 高 須 昌 子

平成12年4月に、金沢大学理学部計算科学科より、
関連領域研究系分子クラスター部門の赴任しました。

研究グループの現在の構成員は、高須昌子（助教
授）、橋本昌人（IMS Fellow）、野口博司（学振PD）、
野坂誠（D2）の4名です。

流動部門に赴任するに当たっては、伊藤機構長、
茅所長、平田教授、西教授を始め、皆様に大変お世
話になりました。

また、快く送り出して下さった、金沢大学理学部
の樋渡学部長を始め、計算科学科の皆様に感謝いた
します。

分子研には、数年前から、いろいろな研究会に来る
機会があり、なじみのある場所です。平田先生から、
分子研の流動のお話をいただいた時も、即座に行く
気になりました。2000年3月まで流動で来られてい
た三好先生（九大）から、宿舎内部の家具を譲って
いただき、おかげさまで、スムーズな移動となりました。

私は、高校までは京都で育ち、大学以降は、東京、
金沢、カルフォルニアのパークレーなどにありまし
た。友達には、「全国観光地周り」などと言われて
います。今回の岡崎は、今までいた場所とは、また
違ったよさがあり、楽しんでおります。

大学から研究所に移って、まず嬉しかったことは、
時間がたっぷりあることです。大学にいた時は、入
試問題の作成や会議、授業の準備や試験の採点、大
勢のマスターの院生や4年生の指導など、とても忙
しかったです。分子研に来ると、朝から研究ができ
て、嬉しいです。

また、研究費の点でも、恵まれているようです。
おかげさまで、コンピュータを購入して、さっそく
計算をしています。

図書館に夜でも電気がついていて、コピーできる
所は、パークレーに似てます。1990年から1992
年まで、パークレーの化学科でポスドクをやってお
りました。当時の生活に戻ったようです。

毎週水曜夜のジョギングにも参加させていただい
てます。この2年間で、体力もつけよう、と思っ
てます。

研究室では、ほぼ週1度セミナーをしております。
愛知工業大の村中氏も常連メンバーです。グループ
のメンバーの他、理論のポスドクの方々や外部の方
にセミナーをお願いしています。

他には、月1度、分子クラスターでゼミをやってい
ます。分子クラスターは、流動講座で、実験と理論の
混成です。いいチャンスと思って、実験の話も聞かせ
ていただいています。12名の小人数なので、厳しい質
問も出ます。院生やポスドクの若い人にとって、違う
分野の人の前で話することは、就職の面接にも役立
つと考えてます。午前中にゼミをやって、皆で焼肉ラ
ンチを食べに行くのも楽しみです。笠井先生が阪大、
久保先生が京大、私が金沢大からの流動なため、関西
系の人が多く、ランチでは関西弁が飛び交ってます。

また、関連の渡辺先生やグループの皆さん、太田
さん、谷澤さんにも、大変お世話になってます。

私の研究室では、物性のシミュレーションをやっ
ています。私がシミュレーションを初めて知ったの



は、大学院生の頃です。統計力学の研究室にいました。東大理学部物理学科で鈴木増雄先生にご指導いただきました。その頃助手をされていた宮下精二先生にも、大変お世話になりました。当時は、2次元量子スピン系のモンテカルロシミュレーションをやっていました。

その頃、研究発表をすると、必ず聞かれたことは、「そういう量子スピン系は現実にあるのですか？」でした。「ある場合もあるが、大部分は今後の実験で出てくるだろう」などと、苦しい答をしていました。

最近、分子研のコロキウムなどを聞いていると、10年前になかった物質も、化学の方々の努力により合成されているようで、嬉しいです。

さて、ドクター修了後、私は金沢に移り、樋渡先生の影響もあり、ポリマーなどのソフトマターにも興味が出てきました。1990年から1992年にパークレーに行った時は、チャンドラー教授の研究室で、電子移動のモデル計算をしました。少しは化学の世界を知ることができました。1994年に金沢大学の物理学科の助教授になり、研究室を持つようになっては、他のテーマにも広がってきました。その後、1996年に計算科学科が新設され、講座ごと、新学科に移動しました。

最近の主要なターゲットは、ポリマーやゲルなどの高分子系と、ヘリウムなどの量子系の2つです。

ゲルに関しては、大学院生の野坂君が精力的に計算しています。化学ゲルのモデルを作成し、リンカー数などのパラメータを変えた時の、パーコレーシ

ョンの有無を判定します。実験の研究者の方々とともに議論して、研究を進行中です。

量子系については、大学院生の時に、いわゆる符号問題で、さんざん苦労しました。符号問題というのは、量子系を次元が1つ上がった古典系に変換してから、コンピュータで計算すると、位相のせいで、計算の精度が悪くなる問題です。量子平衡系では、三角格子上の反強磁性ハイゼンベルグモデルなど、フラストレーション系で符号問題が発生します。フェルミオン系でも発生します。量子非平衡系では、時間発展が複素数になるので、たいいてい発生します。多くの人が、近似や改良を試みてますが、完全解決はまだなされてません。

その後、「符号問題がなくて、おもしろい系」を探して、エアロゲルなど、ランダム媒質中のヘリウム4の系に取り組むことになりました。この系のシミュレーションを、ポスドクの橋本君がやっています。最近、クラスターアルゴリズムをこの系に適用しています。

また、DNAの電気泳動のモデル計算をポスドクの野口君がやっております。実験と定性的によく合う、いい結果を得ています。

個人的な興味としては、雪崩や経済現象のシミュレーションもやりたいと思っています。現在は分子研所属なので、大学の計算科学科に戻って、学生が大勢来た時のテーマとして、考えている所です。

以上、簡単ですが、現在の研究の様子などを紹介させていただきました。

今後もしよろしくお願ひいたします。