



## 計算センターの外から内へ

計算分子科学研究系・計算科学研究センター 森田 明 弘

2004年1月1日付けで岡崎共通研究施設の計算科学研究センターに赴任しました森田です。計算センターには前任地の京都大学の時代から外部ユーザーとしてお世話になっておりましたが、分子研で研究室を構えるというのは心躍る思いでありました。どうぞよろしくお願いたします。

実際自分が内部の人間になって多少運営にも関わってみて、今まで研究しかしたことのなかった私としては、毎日が新しい経験の連続でした。今まで外部ユーザーとして文句を言っていたことが、今度は自分にそのままはね返ってくることになります。また計算センターは一つの部局としては所帯が非常に小さく、私のような新米でも自分の研究室のことだけにかまけているわけにはいきません。赴任していきなり法人化に伴う改組や計算分子科学研究系の新設など波風の高い政治的に重要な場面に立ち会い、一方でこれは大変なところに来たものだとも思いました。やっと少し慣れてきたところですが、この間センター長の永瀬先生、岡崎先生をはじめ、センターの皆様には、あらゆる面で大変にお世話になりました。改めてお礼を申し上げたいと思います。

さて、計算センターに来て最初に感じたことは、技官の人たちの有能さと役割の重さでした。大学では技官の役割は私にとってやや見えにくいものでしたが、センターでは技官が運営の主役で、教員側と対等かそれ以上の内容をもっておられることは大変に印象的でした。私など教えられることばかりですが、この借りは今後担当する計算機システム更新作業のときに返さなくてはならないと思っています。とはいえ、現在の体制では技官の個人的な有能さに

頼った運営の部分が多く、技官体制のシステムティックな確立と充実は計算センターとしては差し迫った問題です。

計算センターの基本的な役目は言うまでもなく、全国の大学などの研究者に計算機資源とライブラリやノウハウなどを提供して、計算化学・物理などの研究を推進する共同利用施設で、昨年で133グループ、550人のユーザーに利用されています。その意味での重要性には今後も変わりなく、近年では理論家のみならず実験研究者の利用が広がっています。しかし各人が自前でパソコンなどの計算環境をもつようになるにつれて、センターの役割も今水面下で変革の最中にあり、非常に多面的な役割を求められていることに、赴任してすぐに気づかされました。これは決して易しいことではありませんが、センターの生き残りのためには避けて通れない道でもあります。共同利用としても、小口の一般ユーザーへの支援と、先端的な大規模計算研究の推進の両立は以前から多く議論されてきた問題ですが、今でも模索中の最も新しい問題です。昨年は、従来の共同利用に加えてナノグリッド(NAREGI)プロジェクトが動き出し、センターの役割と業務量は一気に2倍になりました。さらに研究者としては、センター業務だけでなく、自らの研究を推進していかなければなりません。全体として、センターが計算化学・物理の研究体制の中で能動的な役割を果たすことが、以前にも増して望まれているといえます。

やや責任感を感じすぎて(?)大上段の話しになってしまいましたが、少し自分自身の研究や研究室

のことなどをお話ししたいと思います。私は修士までは物理化学の実験をしており、東大(当時)の朽津耕三先生、梶本興亜先生の指導を受けて気相反応および超臨界流体中の分光実験をしました。分子研に来てみて、久しぶりに再会した先輩方などもおられます。博士課程から京都に移って理論化学に転向し、そのまま京都におりました。京都では、加藤重樹先生のもとでスピン-軌道相互作用の電子状態プログラムを書いて学位をとりました。その後、分子内の電子分極の理論を開発し、分子動力学シミュレーションを併用して溶液内での分子の拡散や振動緩和のダイナミクスなどを研究しました。そうしているうちに、1999-2000年にコロラド大学のCasey Hynes教授のところに留学する機会があり、ボールダーは全米でも大気化学のメッカでもあって、不均質大気化学に興味をもつようになりました。気相と凝集相の両方にまたがった化学は界面現象との関係も深く、物理化学としても今後の問題が多く残されています。帰国後は大気化学のsocietyにも首をつっこみ、共同研究で流体力学計算や大気モデル計算の研究までやって、国内外の大気化学の人たちと論争したりしました。こうしてみると自分の研究に一貫性がないと改めて思いますが、研究の視野を広げようとする暗中模索の結果だと思っています。

現在の研究室はまだ私と秘書の川口律子さんの二人ですが、現在助手の方を選考中で、さらにポストクも一人募集中です。これからの研究の主テーマとしては、界面和周波発生分光の理論をやるつもりです。可視-赤外の界面和周波発生分光は、1987

年に初めて報告された比較的新しい分光法ですが、大気圧下での表面やwetな界面なども含めて広い応用性と多くのユニークな特徴をもつために、近年急速に実用化と普及が進みました。しかし実験の進歩に比べて理論的な解析は著しく遅れており、ほとんど経験的な解釈に留まっています。和周波発生的一般論としては1960年代の昔からありますが、物質に即して実験データを解析できるレベルの理論にはなっておりませんでした。私がこの分光法に関心をもったのは、もともと不均質大気化学への応用からでしたが、理論化学として大きな貢献をできることに気づいて研究をスタートしました。今までに私たちは、電子状態理論と分子動力学シミュレーションに基づいて、和周波発生スペクトルを非経験的に計算して解析する理論的方法論を初めて提案し、手始めに水表面のスペクトルはうまくいくことがわかりました。分子研ではこうしたシーズを育て、広く界面構造解析に貢献できる理論に完成させていきたいと思っています。

このテーマの良いところの一つは、日本国内はもとより国際的にも同様の研究を進めている人がまだほとんどいない点で、自分のペースで新しい理論を開拓しているという気分になれます。これが本当にうまくいくようになれば、今後参入してくる人も増えてくると思いますが、それとも関係しますが、第二には基礎的な理論のレベルでやることが多く、基礎理論の開発と大規模計算への発展の両方を自分の課題として視野に入れられる点で、個別の問題に特化していく以前の萌芽的な段階にあるといえます。これは私のように電子状態にもシミュレーションに



も特化できない人間にはふさわしい問題だと思いません。第三には、今まであまり付き合いのなかった分野の実験屋さんとの交流が増えることで、実験家にとって役に立つ理論を開発していきたいというのは私の最も基本的な願いです。

最後に京都から岡崎に移って、岡崎での暮らしの印象を記します。現在妻と4歳の娘および岡崎に来てから産まれた0歳の娘の4人暮らしです。以前から岡崎へは研究会などで幾度となく来ていましたが、暮らしてみると言葉は別としてほとんどアメリカのように感じました。車社会でどこでも駐車場は完備されており、ショッピングセンターの規模などもアメリカにいたときを彷彿とさせます。何ごとにせよゆったりとして広いのは気持ちのよいものです。これは京都から来たから特にそう思うのかもしれませんが。岡崎の八丁みそも愛用するようになりました。田舎過ぎず都会過ぎず、思ったよりも暮らしやすいところで、妻ともども満足しています。