



外国人研究職員の紹介

Prof. CHOI, Cheol Ho



Choi助教授は韓国で1967年に生まれて、1986年にソウル大学に入学して1992年修士課程を修了して、兵役で韓国空軍にしばらく従事した後米国に行き、1998年にジョージタウン大学で学位を取得しました。その後、アイオワ州立大学アメス研究所のゴードン教授のもとで博士研究員として量子化学を学び、2001年に韓国に帰国して慶北大学の助教授をされている量子化学

者です。Choi助教授とはほとんど毎年国際会議等で会っています。最近では、2005年の第11回日韓合同シンポジウムでは分子研に、2006年の国際量子化学会議では京都に来られています。温厚誠実な方ですが、アルコールが入ると話題が大いに盛り上がります。量子化学の数学的な展開に特に興味があり得意です。

小さい分子の理論と計算は実験に匹敵する有力な方法として進展しているが、大きい分子系への適用と実用汎用化が現在では重要な課題となっている。Choi助教授は、(1) 量子化学計算のNオーダ法の開発と生体分子とナノ分子への応用、(2) SIMOMM (Surface Integrated Molecular Orbital and Molecular Mechanics) 法と高速FMM (Fast Multiple Method) 法の開発と表面化学反応への応用、(3) 大規模MCSCF (Multi-configurational

Self-consistent Field Method)) 計算法の開発、(4) 化学センサー、酵素の触媒作用等の量子化学計算等を活発に展開しています。これらは、最近の話題であるナノ機能分子やナノ素材の理論と計算法の開発と応用にいずれも非常に興味あるもので、Choi助教授のこれまでに開発された方法論とプログラムの幾つかは代表的な汎用量子化学計算パッケージである「GAMESS」に取り入れられています。今回、平成19年3月1日から平成20年1月31日までの11か月間分子研に滞在されて研究されるので、ナノ分子系の分子理論を進展させると同時に精度の高い大規模量子化学計算を高速に実行できる方法とプログラムを開発して、ナノ分子、生体分子、表面化学反応等への応用が展開できることを楽しみにしています。

(永瀬 茂 記)

Prof. KIM, Bongsoo

Kim教授は液体の非平衡統計力学の分野、特に、ガラス転移の分野で韓国における第一人者である。Kim教授は、場の理論的な手法を用いて、液体の統計力学の問題、特にガラス転移の問題に取り組んで来られている。

ガラス転移点付近における過冷却液体のスローダイナミクスを第一原理的に記述する微視的理論としては、いわゆるモード結合理論(MCT)が最も成功を収めた理論として知られている。実際、MCTが予言する過冷却液体の複雑な緩和の挙動と実験や計算機シミュレーションとの一致は驚くほどである。しかし、MCTは実際のガラス転移点よりかなり高温で非エルゴード転移を示すといった、深刻な問題も古くから指

摘されてきている。また、平衡状態の液体論に立脚した現在のMCTを不均一な系(例えば、ずれ応力存在下での過冷却液体の挙動)や非平衡系(例えば、エイジングの問題)にそのまま適用するのは問題があるように思われる。一方、場の理論的な手法を用いても、「1ループ近似」と呼ばれる近似を用いるとMCTと「同等な」方程式を導けることが古くから認識されている。ところが、これまでの場の理論的な手法に基づく方法論には数々の問題があり、特に(i) 数学的には非常に似通っているが、MCTと厳密に同等な方程式が導けるわけではないこと、(ii) Fluctuation-Dissipation Relation と呼ばれる関係式を満足しないこと、が大きな問題として知られてきている。

Kim教授が最近なされた仕事はまさに

これらの問題を解決されたことである。

このことにより、(i) 「1ループ近似」を超える近似を用いることによって、MCTの問題点が解決される可能性がある、(ii) これまでのMCTでは取り扱いの難しかった不均一系や非平衡系への拡張が行える可能性がある。

以上のようにこれまでもつぱら物理分野における問題で統計力学を進めてこられたが、分子科学分野(化学)での研究に新境地を拓くべく、川崎恭治先生の紹介により、分子研を訪問されることになった。分子研においては溶液内化学反応や液液相分離における動的臨界現象など分子科学が深い関わりをもつ非平衡過程の研究において新しい研究成果が期待される。

(平田文男 記)

Prof. DASCALU, Traian

Dr. Traian Dascalu (トライアン・ダスカル) は、ルーマニア (Romania) ブカレスト大学物理学部を卒業後、同国の原子炉研究所、電気工学研究所を経て、レーザーとプラズマ物理学研究所にて学位を取得された。その後も同研究所に席を置きドイツ (博士研究員)、メキシコ (客員研究員)、そして日本ですが、最初はJST福井地域結集事業客員研究員 (2001年4月～2003年3月) として来日、その間、共同研究で分子研に来られた。帰国後2006年1月には1級研究主任に昇進され、2006年10月からは分子研の客員として約半年招聘されることとなっ

た。研究題目は「高効率・高出力フェムト秒小型レーザー発振に関する研究 (Study of efficient high power femtoseconds laser emission in compact configuration)」で、分子研レーザーセンターで準備してきたエッジ励起Yb:YAGマイクロチップレーザーを基に、高出力超短パルスレーザーに向けた研究を行う事になっている。研究期間も短く実験的な成果を挙げるのは大変であるが、すでに、レーザーセラミックスが内包する問題について新たな事実を見だし、その内容で国際会議にも投稿するなどの成果が出つつある。

ところで、先の来日で彼は日本文化に興味を持たれ、特に2004年より

岡崎弓道会 < <http://www.i-chubu.ne.jp/~okayumi/syoukai.html> > にて弓道を始められた。すでに、2005年には初段の試験にも合格されているなどの腕前である。現在も、一週間に2回、岡崎中央総合公園の一角にある岡崎市弓道場で練習されるなど、大変お気に入りのようである。氏にとって、弓道は自己の能力を伸ばす良い方法 (a way of personal development) で、皆さんにも是非弓道をお勧めしたいとのこと。

早いもので3月の初旬には帰国される。残された期間が氏にとって充実したものとなる事と今後のますますの御活躍をお祈りしたい。

(平等拓範 記)

外国人研究職員の



印象記

Wonderful experience in Okazaki

Wen-Ping WANG

It is a pleasure to memory my wonderful experience during my stay at IMS, Okazaki. Arrived at the end of March, 2006, I have been working in IMS for three quarters of a year now. Lots of things about wonderful experience are worthy of being written, although my visit to IMS is short. I recorded only a few main ones of them here.

The first is about the scientific environment of IMS. I think that every foreign researcher working at IMS has a precious opportunity to meet, discuss, and collaborate with the best scientists in their fields. Open seminars held in IMS, provide chances for researchers to freely discuss with others both from and outside of IMS. I have attended more than ten seminars. Among them, seminars such as

reported by Dr. Michel Mortier and by Prof. Bonacic-Koutecky were very impressive and broadened my eyeshot. I have also established a new relationship with these research groups now. I hope it will be very useful for future collaboration. The frequently professional exchange established among the research groups in IMS and these outside of IMS is also nice evidence that the level of the research work in IMS is at the top of their fields in the world.

The facilities of IMS are abundant, effective, and are of great benefit to researchers in molecular sciences. During my stay here, I can find the instruments that I need to measure my samples and obtain data just in IMS. The abundant facilities also allow for a nice training in operating various machines.

I find that IMS has a very nice library, where researchers can get on-line papers or literatures they are looking for. The easy access to many key journals and the nice research system enable researchers in IMS exactly and timely updating the progress in the related fields.

The second I would like to say is people and lifestyle in Okazaki. People I met both in IMS and on the streets in Okazaki city are friendly and kind enough. Mild and comfortable expression appears naturally on their faces all the time. Sakura blossoms in spring, fireworks in summer, and red maple leaves in autumn are beautiful and difficult to forget. What a nice and quiet place for research! I will tell my friends that I had a nice experience both of work in IMS and life in Okazaki town,