

第 57 回 分子科学若手の会夏の学校

サーキュラー 1 号

平成 29 年 4 月 14 日

発行：分子科学若手の会 夏の学校事務局

1 分子科学若手の会 夏の学校のおさそい

分子科学若手の会 夏の学校事務局より、『第 57 分子科学若手の会 夏の学校』のご案内を差し上げます。私どもは、昨年 9 月より新たな顔ぶれにて夏の学校の準備を進めております。

今年度もまた、分子科学若手の会 夏の学校の季節が近づいて参りました。本サーキュラーでは第 57 回 分子科学若手の会夏の学校の概要のみをお知らせし、詳細はサーキュラー第 2 号（5 月上旬配信予定）および Web サイト(<http://www.ymsa.jp/>)にて改めてお知らせいたします。

分子科学若手の会 夏の学校では、第 1 回の開催当初から変わらず、最先端の研究課題について時間をかけて、体系的に学ぶことを重視して「集中講義・議論」の形式をとっています。近年では 5 つの分科会に分かれ、それぞれの設定テーマについて活動することとしております。

今年度も最先端でご活躍されている先生方をお招きして、分子科学に関する以下の分科会を設けました。

第一分科会 牛山浩 先生（東京大学）

『量子ダイナミクスの基礎と化学反応への応用』

第二分科会 岸根順一郎 先生（放送大学）

『分子科学者のための磁性理論入門』

第三分科会 井上圭一 先生（名古屋工業大学）

『光受容タンパク質の分子科学研究』

第四分科会 本林健太 先生（名古屋工業大学）

『イオン液体の界面科学：その場観測と表面科学的視点』

第五分科会 石村和也 先生（分子科学研究所）

『大規模並列量子化学計算』

毎年参加されている研究室はもちろんのこと、しばらく遠ざかっていた研究室、また今回が初めてという研究室の方も、ぜひ奮ってご参加ください。

2 分子科学若手の会 夏の学校 概要

「分子科学若手の会」とは、実験・理論を問わず分子科学に関心を持つ、若手研究者・大学院生からなる集まりです。この会は、若手研究者の交流の機会を設け、研究活動の推進と発展に資することを目的として活動し、合宿形式での勉強会を開催しています。1961年に始まり、今年で第57回目をむかえるこの勉強会を「分子科学若手の会 夏の学校」と呼びます。

夏の学校では、全国の大学・研究機関から若手研究者が集まります。参加者のほとんどは大学院生ですが、分子科学の研究者はもちろん、近年では生命科学・物性物理学を研究する方の参加も増え、多様性のある会となってきました。

夏の学校では、主として以下の活動を行います。

分科会

夏の学校の参加者は5つの分科会のうちの1つを選択してその講義を受けます。講師の先生方の趣向に応じて最先端の内容を踏まえた講義や、基礎的な内容をみっちり扱う講義など様々な形式があります。講師の先生と聴講する学生の双方で作り上げていく形になることも多く、夏の学校の代表的な行事といえます。

懇親会・ポスターセッション・レクリエーションなど

講義だけでなく、集まったからこそできる交流もあるはずです。毎晩開かれる懇親会は、全国各地から集まった参加者同士の親睦を深める貴重な機会であり、分子科学の研究者を志す仲間を作る絶好のチャンスでもあります。参加者によるポスター発表（任意）の時間も設けているので、他の参加者がどのような研究を行っているのかを聞き、研究内容の議論を行うことができます。学会と異なり、若手を中心とした場での自由闊達な議論が行える点が特徴的といえます。

講師の方への質問コーナー

講師の方への質問コーナーでは、研究生活・海外留学・人生設計などについて参加者の方々から寄せられた質問に対して、講師の方々にざっくばらんに答えていただきます。分科会で聴ける学術的内容以外のことを講師の方々に訊くチャンスです。

参加者は、さまざまな知識・知恵を吸収することができるでしょう。そして、夏の学校は若手研究者同士の議論・交流を深める場としての意義も持っています。

分子科学について深く考え、議論を戦わせ、そしてこの分野の将来を熱く語り合う、それが分子科学若手の会 夏の学校なのです！

3 夏の学校 開催案内

日程	2017年8月21日(月) - 25日(金)
会場	分子科学研究所・教室 および 岡崎コンファレンスセンター (愛知県岡崎市明大寺町字伝馬 8-1) https://www.ims.ac.jp/
宿	(8/21-24) グリーンホテルリッチ徳川園 (愛知県岡崎市明大寺町字狐塚 26 番地) http://www.tokugawaen.com/ 岡崎セントラルホテル (愛知県岡崎市明大寺町字耳取 34 番地) http://www.okazaki-centralhotel.com/
	(8/24-25) 松風園 (愛知県蒲郡市三谷町鳶欠 14-4) http://www.shofuen.jp/

4 参加登録

参加登録は Web サイトにて受け付ける予定です。参加登録期間は 5 月 1 日(月) - 5 月 31 日(水)の予定です。詳細は後日、サーキュラー2号 および Web サイトにてお知らせいたします。

5 参加費と交通費補助

夏の学校への参加費は、4泊5日(食事つき)で30000円 - 35000円を予定しております。実際の金額は、参加者の人数等によって確定後、お知らせいたします。

また、遠方からの参加者に対して、交通費の補助を行います。詳細はサーキュラー2号 および Web サイトにてお知らせいたします。

6 分科会の紹介

第一分科会

牛山 浩 先生（東京大学工学部 准教授）

題目『量子ダイナミクスの基礎と化学反応への応用』

大学で習う化学反応論は、通常、遷移状態理論に代表される静的な理論に基づいて理解されています。反応座標に沿った反応物と遷移状態の構造やエネルギー等の量子化学計算で得られる情報から反応機構を議論できるため、理論計算でも様々な系に適応され大きな成果を得てきました。

一方で、近年の実験技術の進歩はアト秒・フェムト秒のオーダーでの分子運動の直接観測を可能にしつつあります。考えてみると、化学反応は原子や分子が衝突した際の電子の組み換えによって起こる本質的に時間依存の問題ですので、直接時間領域で反応を捉えるのが自然だと考えられます。こうしたミクロの世界を記述するのは量子力学ですので、必然的に時間依存のシュレーディンガー方程式を扱う必要が出てきます。

本分科会では、時間依存のシュレーディンガー方程式を基に波束の概念を用いて議論を進めていく予定です。経路積分法や半古典理論についても解説し、実際にプログラム（量子波束の計算や半古典計算等）を動かして、近似の精度等についても議論していきます。こうした方法に基づき、核波束や電子波束を用いた化学反応論へと議論を展開していこうと考えています。昨年の第一分科会での高柳先生の講義と重なる部分もありますが、化学系の授業では習うこともないと思いますので、この機会にダイナミクスの世界を一緒に楽しめたらと思っています。

担当：杉澤 宏樹（金沢大学 水野・井田研究室 M1）

第一分科会では、東京大学の牛山浩准教授をお招きし、時間依存の量子力学の基礎と応用に関する講義をしていただきます。

近年、科学技術（計算機、レーザー 等）の急速な発達により、理論、実験の両方において時間依存の量子力学の重要性が高まってきました。しかし、量子力学はその描像の複雑さから理論的解釈が難しい場合が多々あります。そのため、本講義では基礎理論から応用まで、演習問題（プログラミング等）を挟みつつ進行していくことで、実践的に時間依存の量子力学を習得し、その知識を深めることを目指していきたいと考えています。

理論、実験にかかわらず時間依存の量子力学に興味、関心がある方はぜひご参加ください。

第二分科会

岸根 順一郎 先生 (放送大学 教授)

題目『分子科学者のための磁性理論入門』

本講義では「スピンと磁性」をテーマに、化学系出身の大学院生を念頭に固体の量子論、対称性理論、相転移論およびこれらを記述する基本言語である量子・統計力学および場の理論の手法を解説します。具体的な内容（予定）は以下の通りです。磁性は広大な分野なので、欲張ると散らかり放題になってしまいます。これを避けるため、テーマを絞って物理のエッセンスを伝えることに重点を置きます（といいながらかなり欲張っていますので、実際には少し切り詰める可能性があります）。

1.スピンの起源

スピンは相対論と量子論の結合から自然に生まれてきます。ここでは、ディラックの電子論からどのようにしてスピンの導かれるかを解説します（相対論の知識は仮定しません）。また、スピンの波動関数がスピノールとして表現されることを示し、そこから導かれる不思議な性質を紹介します。スピン間の交換相互作用が電子の置換対称性からどう導かれるかにも触れます。

2. たかがイジング、されどイジング

磁性を記述するもっとも簡単なモデルであるイジング模型の本質に迫ります。ごく簡単なイジング模型ですが、実は汲めども尽きぬ深みと豊かさを持っています。イジングスピンのダイナミクスを中心に解説し、古典論と量子論のつながりにも言及します。分子の超常磁性や磁気相転移の仕組みにも触れます。

3.スピンの量子ダイナミクス

スピンの運動方程式は、驚くべきことに古典論でも量子論でも同じ形を持ちます。その理由から始め、スピンの量子ダイナミクスの特徴を二準位系を例に解説します。磁気共鳴の原理にも触れます。

4. 分子の量子磁性

スピクラスター（分子磁石）の磁化の理論を題材に、経路積分によるスピン系の量子化について解説します。ここは、本講義の山場の一つとなります。統計力学と経路積分との関連、ベリー位相とトポロジーなど現代物理学の重要概念がいくつも現れます。このテーマは数学的にも興味深い内容を含みます。物理、化学、数理の絶妙な結合を味わっていただければと思います。

5. 結晶対称性と磁気秩序

対称性と群論の基礎から初めて、結晶点群・空間群、相転移のランダウ理論、そして磁気秩序を分類整理する方法である磁性表現論のエッセンスを解説します。

6. Chirality と磁性

最後に、私（岸根）自身の研究内容を踏まえてキラル対称性（左右対称性）の破れを指導原理とする物質機能の探求について話します。キラル構造は非対称・非線形・非局所という普遍的特性を持ちます。これが電気・磁気・力学的な自由度間の結合をもたらす、多様な物質機能が生まれます。その仕組みを説明します。私たちが進めてきたキラル螺旋磁性体の研究を簡単に紹介し、磁性分野を超えて「キラル物質科学」という新しい分野を開拓する必要性と意義を語りたいと思います。

担当：坂本 想一（京都大学 谷村研究室 M2）

第二分科会では放送大学の岸根順一郎先生をお招きして、スピンと磁性について解説して頂きます。岸根先生はカイラル磁性等磁性理論の第一線でご活躍されております。また分子科学研究所に在籍していたこともあり、分子科学にも造詣の深い先生です。

スピンというものは純量子力学的な概念であり、その理解は中々に難しいです。しかしながら化学の講義ではその物理的な起源は十分に語られること無く、結果として曖昧な理解のまま終わってしまうことが少なくありません。そこで本分科会ではスピンの起源から始め、その物理的な本質を学び、曖昧な理解から脱却することを目標とします。そしてスピンへの理解を基に磁性へと話を進め、物性物理学の最前線に到達することを目指します。スピンと磁性という、難解な分野をしっかりと理解できる絶好の機会です。皆様の参加をお待ちしております。

第三分科会

井上 圭一 先生（名古屋工業大学 准教授）

題目『光受容タンパク質の分子科学研究』

自然界において太陽光は生態系に欠かせないものであり、多様な生物が光を生体化学反応のエネルギー源や周囲の環境を認識するための情報源として、その生存に利用している。そしてこの時電磁波である光と相互作用し、そのエネルギーを吸収することで、関連する生体反応を駆動するのが多種多様な光受容タンパク質である。中でも我々にとって最も身近な例が、動物の視覚を認識するための網膜中に存在するロドプシンと、植物の葉緑体の中で光合成を行う光化学系である。また近年光を使って損傷した DNA を修復する、光回復酵素についての研究が 2015 年のノーベル化学賞の対象となったことも記憶に新しい。

これら光受容タンパク質は、光で反応をトリガーできるという性質を活かすことで、その反応過程を極めて詳細に調べることが可能であり、タンパク質の反応機構を調べるためのモデル系として、長年広範な研究が行われてきた。またさらにその中で各種分光法や理論化学計算などの分子科学的研究が、これらの分子の理解に大きな役割を果たしてきた。そこで本分科会では講師の専門とする光受容膜タンパク質である「微生物型ロドプシン」を中心に、過渡吸収法やフーリエ変換赤外分光法、ラマン分光法、量子化学計算、分子動力学計算などを用いてこれらの光受容タンパク質のメカニズムがどのように理解されるか、過去の事例と共にその詳細を学ぶ。微生物型ロドプシンは近年のゲノム研究により、非常に広範な生物種によって利用され、また多様な機能を発現することが明らかになっており、そのメカニズム研究はタンパク質の動作原理を理解する上で極めて重要な役割を果たすと期待される。そして本分科会では光遺伝学（オプトジェネティクス）などの応用研究を含めた光受容タンパク質研究の最前線についても紹介し、今後さらに重要度が高まると期待される生体分子の分子科学研究の将来展望を俯瞰する。

担当：姜 天龍（上智大学 南部研究室 D2）

第三分科会では名古屋工業大学の井上圭一先生をお招きし、「光受容タンパク質の分子科学研究」と題してお話して頂きます。井上先生は光受容膜タンパク質である「微生物型ロドプシン」を中心に、生体分子分光学、時間分解分光、オプトジェネティクス等の研究分野において第一線で活躍されております。本分科会では、井上先生による講義を通じて、光受容膜タンパク質ロドプシンの光化学の基礎研究から最前線まで理解を深めたいと考えています。専門を問わず、様々な分野の方々の参加を心からお待ちしています。

第四分科会

本林 健太 先生（名古屋工業大学 助教）

題目『イオン液体の界面科学：その場観測と表面科学的視点』

室温で液体となるイオン性化合物、イオン液体は、その優れた物理的特性から最近注目を集める新材料です。様々な応用展開が期待され、中でも二次電池などの電気化学デバイスの電解液としての活用が有力視されています。デバイスを駆動する電気化学反応の設計と制御にあたっては、反応場である電極と溶液の界面で何が起きているのか、分子科学的な視点から理解することが重要です。イオン液体には、従来型の電気化学的考え方による電極界面の構造モデルが直接あてはまりません。最近の様々な理論的・実験的な取り組みによってようやく、イオン液体/電極界面の微視的な描像が見え始め、現在でも検討が続いています。

固液界面を実験的な側面から検討する上で最初に直面する困難は、固液界面がいわゆる「埋もれた界面」であり、分析の際に固体や液体が「邪魔」であることです。これを乗り越えるアプローチには二つあります。一つは、界面を構成する最低限の要素を残して邪魔な液体を取り去り、様々な表面科学的分析手法が使える真空中で仮想的な固液界面を詳しく観測する「モデル表面的」手法です。もう一つは、液体も存在するできるだけ実界面に近い状態で、限られた分析手法を駆使して固液界面の分析に挑む「その場観測的」手法です。前者は界面の微視的描像を詳しく議論できる一方、実界面での再現性についての疑義がつきまといまいます。後者は逆に、実界面の観測は保証されますが、得られる情報には限りがあります。両手法の一長一短のギャップをどう埋めてどう力を合わせるか、それは両分野の研究者がここ最近頭を悩ませている問題でもあります。

本講義では、イオン液体/電極界面の科学の進展について、基本的な考え方から最新の話題まで幅広く解説します。その中で、モデル表面的手法とその場観測的手法を合わせることで何ができるのか、参加者の皆さんと議論しながら学んでいきたいと考えています。

担当：岡上 大二郎（大阪大学 福井研究室 D1）

第四分科会では、名古屋工業大学の本林健太先生をお招きして、イオン液体/電極界面科学の進展を解説いただき、その場観察と表面科学的視点の重要性について講演していただきます。

本林先生は表面科学分野で最先端である、STM を用いた単一分子化学の研究でご活躍されたのち、近年では、表面増強赤外分光法（SEIRAS）を用いて、固液界面におけるその場観察の研究をなされ、多くの成果をあげられております。

この第四分科会では、凝縮相を代々取り扱ってきましたが、凝縮相で最近の一大トピックといえばイオン液体です。イオン液体は様々な興味深い性質を持ち、特に電気化学分野では電解質としての応用が期待されています。しかし近年、電極界面で、従来の電気化学の知識に従わない特有の振る舞いを示すことが明らかになってきました。この課題に取り組むためには、凝縮相によく用いられる電気化学だけでなく、表面科学からの微視的視点が不可欠です。

そこで本分科会は、表面科学出身の本林先生から表面科学の基礎と、凝縮相界面研究への応用を学ぶことで、固液界面科学の最前線に触れることを目的とします。バルクでもなく表面でもない、両者の知識を組み合わせ初めて見えてくる固液界面を学べる絶好の機会です。皆様のご参加を心よりお待ちしております。

第五分科会

石村 和也 先生（分子科学研究所 特任研究員）

題目『大規模並列量子化学計算』

2000年以降、消費電力や発熱などの問題によりCPUクロック数の伸びが止まり、CPUコア単体の性能向上もほぼ止まったため、CPUコア数やノード数を増やして計算機の性能向上が図られるようになりました。2000年ごろまでのように、一度プログラムを作ると、その後何もなくても時間がたてば計算が速くなる時代は終わり、効率的に計算を行うためには計算機をある程度理解した上で利用することが、開発者、ユーザー共に求められています。そして、スーパーコンピュータだけではなく研究室レベルの計算機でも並列計算が不可欠になっています。

前半は、プログラム開発者、ユーザー双方の視点から、以下の内容について量子化学計算を基に解説します。量子化学計算の細かな式にはあまり立ち入らず、できるだけ他の理論・計算分野でも共通する内容を中心に説明します。

1.1 計算機の変遷

1.2 計算コストを削減するための計算手法とアルゴリズム

1.3 高速化・並列化方法

1.4 これからの計算機を効率的に使うための計算手法とプログラミング技術

後半は、より理解を深めるために大規模並列量子化学計算プログラム SMASH を使った実習を行います。開発者向け、もしくはユーザー向けの課題に Linux マシンで取り組んでもらいます。そのため、この分科会に参加される方はノート PC を持参してください。

2.1 ノード内(OpenMP)とノード間(MPI)並列計算

2.2 他のプログラムとの比較

2.3 カットオフ値の違いによる計算時間とエネルギー値の変化

2.4 行列演算ライブラリー-BLAS と LAPACK の使い方

2.5 速いプログラムの書き方

担当：浦谷 浩輝 (東京大学 山下・牛山研究室 M2)

分子科学の分野において、量子化学計算や分子動力学計算などの理論計算はいまや欠かせない研究ツールです。便利なソフトの普及や計算機の性能向上に伴い、理論家だけでなく実験家もごく普通に計算を利用する時代になりました。皆さんの中でも、自分で計算をしたり、計算を使った研究を見かけたりした経験がある方は多いと思います。しかし、近年の計算ソフトは高機能である反面、内部で具体的にどのような計算が行われているのかを理解することが難しく、ユーザーにとっては事実上ブラックボックスとなっているのが現状です。

本分科会では、量子化学計算ソフト「SMASH」の開発に取り組まれている石村先生をお招きし、「ソフトはどうやって計算をしているのか」「速く計算するためにどのような工夫がなされているのか」等について解説していただきます。また、量子化学分野に限定されない、計算機を効率よく使うための一般的な技法についても扱います。

本格的な計算ソフトの開発ができる日本人研究者は少ないため、本分科会は非常に貴重な機会です。奮ってご参加ください。

特に、研究で計算ソフトや計算機を使う機会のある方には是非参加をお勧めします。

最後になりますが、今年度の夏の学校事務局は、**沖野隼之介** (学習院大学 岩田研 D2), **米田勇祐** (大阪大学 宮坂研 D2), **遠藤あすか** (近畿大学 若林研 M2), **鶴岡和幸** (東京大学 佃研 D1), **桑畑和明** (横浜国立大学 大野研 D3), **川嶋裕介** (大阪大学 高木研 D1), **上野那美** (近畿大学 森澤研 D1), **杉田心平** (東京理科大学 B2), **江守宗次郎** (東京大学 佃研 D1), **加藤史明** (京都大学 松本研 D1), **高橋翔太** (京都大学 松本研 D1), **小松原航** (東京大学 酒井研 M2) が担当し、分科会担当者と協力して活動しております。今後ともよろしく願いいたします。