

## プロローグ

私の名前は吉隆。吉は「幸運」、隆は「昇る」という意味だ。子供の頃、私は自分の名前があまり一般的でなかったのが、好きではありませんでした。私は神戸で生まれ、東京で育ちました。父は川崎重工のジェットエンジンの技術者で、日本のサラリーマンとして酷使されていた。公立の学校に通っていましたが、成績はごく普通でした。ただ、相対性理論や量子力学など、科学の本を読むのは好きでした。姉は勉強熱心で、兄はテクノロジーオタクだった。兄は、パソコンをアメリカから直輸入して、おそらく日本で一番早く入手した一人です。今は、ゲーム会社の社長をしています。

普通の少年でなくなったのは、高校時代にロッククライミングとアイスクライミングを始めたときからです。17歳の時、友人たちと冬の険しい山に数日間閉じ込められたことがあり、テレビや新聞で大騒ぎになりました。その時は、足の指が全部凍傷になってしまいました。

私は、数学や物理は得意でしたが、勉強は大嫌いでした。だから、英語も生物も化学も、地道な努力が必要な科目は苦手でした。そんな勉強不足の私だったのですが、日本でも有数の大学である慶應義塾大学工学部に、なんとか入学することができました。

## 慶應義塾大学

入学してからの山登りへの思い入れは相当なもので、年間200日以上、山に登りました。2年生の時にはインドのヒマラヤに行き、ガンジス川の女神が初めて大地に触れたとされるガンゴトリのカルチャークンド山(6632m)に初登頂しました。当時は、私はプロの登山家になって、8000m級の山々を全部登ろうと思っていました。一方、大学での成績は最悪でした。

20歳の時、友人がロッククライミング中に事故で亡くなりました。この出来事が、私の人生を大きく変えました。それまで山に通っていたのと同じような感情で、人生の目的や意味を理解したいと強く思うようになったのです。最初は哲学に興味があったのですが、哲学科の友人が哲学的なことを何もしていないことに気づき、興味を失いました。そして、なぜここにいるのかというような、深い問いに答えるほどには、人間はまだ進化しておらず、まだそのような知識の基礎を築いている最中なのだという結論に達しました。そして、真理に到達する道は、もともと興味があった基礎科学しかないと確信したのです。しかし、その基礎づくりを自分ができるわけがない事もわかっていました。しかし、基礎科学を通じて、後世の人々が「真理」に到達する手助けができればと思ったのです。

理論物理学の基礎研究を志すというのは、成績の悪い学生には絶望的に高い頂上でした。実際、それまで私は大学のキャンパスにはほとんど足を運んでおらず、その結果、2年生を留年することになったのです。しかも、私は工学部にいたため、物理を授業として体系的に学ぶことができませんでした。そこで、留年した年次を利用して、物理の基礎を独学で勉強しました。特に、ランダウ・リフシッツは念入りに勉強しました。また、必要に応じて数学

の勉強もしました。この時期が、人生で一番勉強した時期です。3年生の秋には、力学、量子力学、一般相対性理論をマスターしていました。しかし、物理の基礎はマスターしましたが、科学を学ぶことと、科学研究をすることは天と地ほどの差があることに気づき、打ちのめされました。

#### 久保亮五先生

ちょうどその頃、慶應義塾大学が物理学科と化学学科を新設し、理工学部へ改組するとの知らせを受けました。そして、慶應義塾には世界的な物理学者である久保亮五が来ることも知りました。丁度留年で進学が1年遅れたおかげで、久保グループに参加できるかもしれないと思いました。ある時、大学の食堂の近くで友人とその話をしていると、少し離れたところから、こちらを見ている老紳士がいることに気がつきました。それから1ヵ月後、久保先生が他学部から学生を受け入れるという発表があったので、あわてて先生の研究室を訪ねると、そこにはあの老紳士が座っていました。それが久保先生との最初の出会いでした。

私は4年生の時に、他学科の学生とともに久保研に入りました。ファインマン、ブロッホ、ランダウ、久保といった重要な科学論文の読み方を、理論物理学の教授陣が交代で教授して頂き、私は犬のように勉強しました。

#### 確率過程論

4年生の後半は、久保先生の指導のもと、研究課題に取り組みました。卒論のテーマは、久保の確率リュービル方程式 (SLE) で記述されるランダム変調多値系の非線形光学スペクトルの解析でした。このアプローチは現象論的でありながら、非マルコフ的・非摂動的揺らぎのもとでの系の3次光学応答関数の解析的計算を容易にするものです。マルコフ的量子マスター方程式 (QME) アプローチでは、ディラック・デルタ型のラマンピークとローレンツ型の燐光ピークしか予測できないのに対し、SLE アプローチでは、この2つのピークに加えて、ラマンピークの位置に現れるローレンツ型のブロードなラマンピークも予測できるので、このアプローチの性能は明らかでした。

2ヶ月間悩んだ末に、久保グループの高野宏助手の協力も得て、ブロード化したラマンピークの明示的な解析表現を得ることができました。そして、このピークが、高速変調限界ではラマンスペクトルの一部となり、低速変調限界では燐光スペクトルの一部となるという特異な性質を持っていることを発見しました。

そこで、この結果を久保先生に誇らしげに説明したところ、先生は黙って聞いているだけでした。驚いたのは、その1週間後に、先生は、私のささやかな結果をもとに一般論を展開し、その応用として私の式を導き出したのです。「井の中の蛙、大海を知らず」というのはこういうことだと思い知りました。私は、この成果をもとに卒業論文を書きました。

久保先生は、物静かで思慮深い人でした。先生の指示は曖昧でわかりにくく、久保研に入ってから長い間、何を考えているのかさっぱりわかりませんでした。私にとってヨーダのよ

うな人でした。

大学院に入学してからは、JPSJ に投稿するために論文を英語で書き直しました。英語の勉強を怠っていたせいで、この罰ゲームに丸1年かかりました。それでも質が低かった。その頃、久保先生は日本学術会議の会長になられ、多忙を極めていました。そのため、卒業論文が論文として発表されるまで、実に2年半もかかりました (1、以下、カッコ内は私の論文リストにおける関連論文)。論文の完成を待つ間、私は再び山登りを始めました。驚いたことに、3年以上岩壁から遠ざかっていたにもかかわらず、私のロッククライミングの腕は上がっていました。以前ほど頻繁には登りませんが、登るルートは非常に技術的に高度なものになりました。

### 階層型運動方程式(HEOM)

私が研究した広帯域化ラマン過程は、現象論的な SLE から得られたものです。SLE で記述されるノイズは非摂動的でマルコフ的ですが、当時はこのような現象を記述するハミルトニアンを基礎とした力学的理論が存在しませんでした。そのため、本当にそのプロセスが存在するかどうか、確信が持てませんでした。SLE は、フーリエ・ラプラス変換された解が特徴的な収束を持つ連分数形式で表現できるため、非摂動・非マルコフ的なノイズを扱うことができます。私は、SLE と同じような形式のハミルトン系に基づく運動方程式 (EOM) を導出できないかと考えました。

ちょうどその頃、修士課程の学生数名が後輩として久保グループに加わりました。皆で熱浴と相互作用する系の時間発展を縮約された密度演算子 (RDO) で経路積分表現するファインマン-バーノン理論の論文の輪読をしました。熱浴の効果は、散逸と、系-浴相互作用のスペクトル分布関数(SDF)で特徴づけられる温度依存の揺らぎという影響関数として RDO に取り込まれます。これらは久保の揺らぎ-散逸定理(FDT)を介して関連し、全システムは長時間の極限で熱平衡状態に導きます。

私は、この理論における揺らぎが、SLE におけるランダムノイズに相当するのではないかと考えました。この点を探る第一歩として、RDO を時間に対して微分し、EOM を求めました。その結果をグループゼミで報告しました。しかし、久保先生は私のアプローチに懐疑的で、「汎関数積分で表現された密度行列を微分しても、何も新しいことは出てこない」とお怒りになりました。私はとてもがっかりしました。しかし、数日後、経路積分は配位空間の積分表現であり、そのため、時間に関して微分しても元に戻らないことに気づきました。次のゼミでこの点を指摘し、さらに一步踏み込んで導出された QME を提示することで議論を進めました。しかし、久保先生は険しい顔をして「TLS はエネルギー状態で表されるもので、配位空間ではありません。この系は経路積分では表せません」と言われました。しかし私は懲りず、翌週、TLS の RDO が、グラスマン変数によるコヒーレント状態表現を用いれば、経路積分形式で表現できることを示した。その頃、カルデイラとレゲットが、私と同じような方法で、ブラウンハミルトニアンからマルコフ熱浴の量子フォッカー・プラン

ク方程式 (QFPE) を導いた論文を見つけました。久保先生も徐々に私の方法を認めてくれるようになりました。

SDF がオーミックで熱浴の温度が高いと仮定すると、ゆらぎ項と散逸項はともにデルタ関数型 (マルコフ的条件) になり、QFPE の場合と同じように QME が得られます。従来の QME とは異なり、この方程式は温度に比例した揺らぎ項を持つ。この QME の定常解は、有限温度での熱平衡状態である。この方程式は高温でのみ適用可能であるが、回転波近似は必要ありません

この QME から、オーミック SDF を Drude SDF に置き換えると、QME の揺らぎが SLE のランダムノイズと同じ時間相関を示すことに気づきました。SLE は、確率的固有状態における系密度演算子で表される連立微分方程式に書き換えることができることは知っていました。この方程式を参考にして、RDO を Drude SDF のケースで微分しました。摂動近似の代わりに、緩和を表す項を補助密度演算子(ADO)に置き換えたのです。この ADO を微分すると、元の RDO と ADO の項に加え、新たな ADO が現れました。この ADO を時間微分することを繰り返すと、SLE の場合と同じように EOM の階層が得られます。これは、後に階層的運動方程式 (HEOM) と呼ばれることになる EOM の原型です。

HEOM は力学理論の枠組みで構成されており、SLE とは異なり、揺らぎだけでなく散逸も含んでいます。この散逸は FDT によって揺らぎと関連づけられるため、HEOM の定常解は有限温度での熱平衡状態となる。そして何より、HEOM は非摂動的、非マルコフ的な力学理論を構成しているのです。これらの結果は 1986 年に得られていましたが、久保先生は多忙のため、1988 年まで、私の論文は見てもらえませんでした。

この時、久保グループには私と高野さんだけでした。久保先生は私を孫のように可愛がってくれましたが、私は毎週のゼミのたびに何か報告する必要がありました。そのプレッシャーのおかげで、HEOM 法を物理観測の非線形応答関数に拡張して、3 本の論文を書きました。ゼミでは久保先生だけでなく、高野さんも寝てしまうことがあり、起きるまで一人で 30 分くらい待っていたこともありました。

1988 年の半ばになると、久保先生はようやく私の博士課程が終わりに近づいていることに気がつき、私の原稿を校正し始めました。私が導き出した EOM は、マスター方程式の拡張であり、博士課程で導き出したものなので、「ドクター方程式」と名付けました。しかし、残念ながら、この部分は久保先生によって削除されてしまいました。

私は博士号取得後にアメリカで仕事をしたかったので、Physical Review 誌に投稿したかったのですが、久保先生は日本の雑誌の科学的アイデンティティを保つことを重視され、そのために JPSJ にしか投稿を許されませんでした(2)。久保先生はこの論文を校正するのに大変時間がかかりましたが、他の 3 つの論文も JPSJ に投稿するというと、すぐに校正してくれた (3-5)。この 4 本の論文が、私の博士論文の基礎となりました。

これらの論文が受理された後、私は久保先生に、私の HEOM の導出方法が、おかしな物ではなかったことを認めてもらおうと思いました。そこで「久保先生、RDO を経路積分で

表現して時間微分しても新しいものは生まれないとおっしゃっていましたが、でましたよね？」と尋ねました。それに対して先生は、「そんなこと言いましたかねー？」とおっしゃいました。久保先生はいつも私の師匠でした。

視野を広げるため、そして英語力を高めるために、私は博士号取得後に海外に出ることにしました。しかし、日本を発つ前に、8年前に友人が亡くなった岩壁をフリーソロで登ることにしました。そこにたどり着くまではとても時間がかかったのですが、登り始めると通常の10分の1の、30分で登り終えてしまいました。

#### イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校(UIUC)

論文発表の後、トニー・レゲット教授に連絡を取り、ポストクのポジションがないか伺いました。航空便でやり取りしていたので時間がかかりましたが、最終的にトニー・レゲット教授と化学のピーター・ウォーリンズ教授、電気工学のカール・ヘス教授が共同でポストクのポジションを用意してくれました。化学の成績が悪かったので、化学の問題に取り組めるかどうか不安でしたが、最終的には、視野を広げる良い機会になると思い、UIUCに行くことにしました。

1989年5月、5つ星ホテルのようなベックマン研究所で、新しい研究プロジェクトをスタートさせた。UIUCでは、まさに新しい地平線が広がっていました。

#### 低温補正された HEOM

私は、カールと共に、ナノワイヤーにおける電子伝導の熱的影響を調べることに取り組みました。フォノン熱浴を調べるための第一歩として、私は階層のフーリエ表現を用いて、任意のSDFと温度を扱えるようにHEOMを拡張しました。その応用として、低温補正項を導入した。最もよく使われたHEOMの形はこの論文(6)に書かれているが、当時の高性能コンピュータでも32MBのメモリしかなかったため、検証することができず、15年近く結果が埋没していた。正直なところ、私が生きている間に必要な計算ができるようになるとは思ってもいなかったのです。

#### 階層的量子フォッカー・プランク方程式(HQFPE)

当初、私はピーターと一緒にタンパク質の折り畳み問題に取り組む予定でしたが、結局、SBモデルで記述される化学反応(CR)の問題に取り組むことになりました。Peterは過去に、変分原理を用いた手法で化学反応過程の量子効果を研究していました。彼は、HEOMを拡張して、ダブルウェルのポテンシャルエネルギー面(PES)を持つ系に適用することを提案しました。この問題は、量子力学の基礎を研究しようとした量子測定問題へのカルデイラ・レゲット理論の適用とも密接な関係があります。

この系に対して、私はHEOMを拡張し、配位空間を記述するウィグナー分布関数(WDF)を用いました。これまでSLEもHEOMも、ラプラス変換を使った連分数形式でしか解け

ませんでした。しかし、WDF 空間はラプラス変換するには大きすぎるため、階層的微分方程式を無限次元の連立微分方程式として解くしかありません。試行の末、上位の階層 ADO の間に簡単な関係があり、それを利用すれば精度を落とさずに連立方程式を切ることを発見しました。この結果は、HEOM(7)を発展において重要な一歩になりました。

階層的量子フォッカー・プランク方程式 (HQFPE) を数値的に積分することで、あらゆる形状の PES を扱うことができるようになりました。また、時間依存の外場も任意の形状、強さで適用することができ、余分な計算コストもかかりません。HQFPE はマルコフ的 QFPE を拡張したものです。古典的極限では、この方程式群は非マルコフ的なノイズの場合への Kramers 方程式の拡張となっています。古典的な対応関係が存在することで、同じ物理条件下で量子計算と古典計算の結果を比較することにより、量子効果を容易に同定することも可能となりました。HQFPE を用いて、量子領域と古典領域の CR 率を熱浴結合強度、雑音相関、温度の関数として計算したところ、量子の結果も Kramers turnover の振る舞いを示すことが分かりました(8)。

地平線の広がるイリノイに引っ越して、山登りはあきらめていました。しかし、友人から「西に 1000 マイル走ればロッキー山脈にたどり着く」と言われ、そこに何度か足を運びました。山登りだけでなく、愛車 (ポンティアック・フィエロ) のドライブも楽しみました。クリスマスにはルイジアナ、テキサス、アリゾナなどの州を 10 日間で 8,000 マイル走破し、山歩きもしました。いろいろやっているうち m50 州それぞれの最高地点まで登ることを目標にしました。

当時の日本では、統計物理学の研究者の大半がスピン格子系の臨界現象に取り組んでおり、私のように開放系の量子力学理論に取り組んでいる研究者は稀有でした。ピーター、カール、トニー、そして彼らのポストドクや学生たちとの交流を通じて、私が行っている研究がアメリカではメジャーな分野であること、特に私の分野は化学と相性が良いことに気づきました。統計物理学の最先端実験は、物理化学の研究室で行われていたのです。

UIUC には 2 年余り滞在しました。そこでの研究をある程度終えた後、さらに視野を広げたいと思い、米国のいくつかの大学の教員募集に応募しました。しかし、当時のアメリカは不景気で、ポジションがほとんどありません。しかも、ソ連が崩壊し、ロシアの大物科学者が大勢米国に渡ってきて、私が教員の職を得るのは不可能に思えました。

そこで、ロチェスター大学化学科の Shaul・ムカメル教授に連絡を取り、ポストドクのポストがないかを問い合わせた。すると、すぐに「すぐにロチェスターに来い」と返事が来ました。カールやトニーにこれ以上尽くせないという後ろめたさを感じながら、1991 年秋にロチェスターに引っ越しました。

ロチェスター大学

イリノイ州は寒いところだと思っていました。しかし、ロチェスターに移ってから、イリノイも悪くないと思うようになりました。その年の冬、ロチェスターの気温は $-32^{\circ}\text{C}$ まで下が

りました。

Shaul は、超高速非線形分光実験の動向を十分に把握し、さまざまなバックグラウンドを持つポストドクを集めて、新しい現象の観測への道を指し示し、実験家の助けになるような研究をしていました。彼は勤勉で1日に2回、5人のポストドク一人ひとりのところに来て、熱心に議論しました。これを私たちは「モーニングサービス」と「イブニングサービス」と呼んでいました。

### 多準位量子フォッカー・プランク方程式(MSQFPE)

ロチェスターでの最初のプロジェクトとして、私は QFPE を拡張し、電子 PES 間の非断熱・レーザー相互作用の任意の形と時間依存性を持つ電子遷移を扱えるようにしました (MSQFPE)。そして、この方法を超高速非線形スペクトルの計算に応用することを試みました。当時、Shaul は 3 次応答関数をレーザー励起部とプローブ部に分割して計算する方法を開発しようとしていた (ドアウエイ・ウインドウ描像)。しかし、この方法は熱浴と結合した系ではうまく行きません。そこで、その理由を明らかにしてほしいと言われました。そこで、MSQFPE プロジェクトが完了したらやると返事をしたのですが、彼はその後毎日、私のオフィスにやってきては、"Taka、やれ!" と言い始めました。1 週間断り続けていたら、とうとう "Ta か、お願いだからやってくれないか" と言われ、とうとう、MSQFPE プロジェクトを中断して、面倒な経路積分の計算をすることになってしまいました。

ロチェスターの冬の長く静かな雪の夜は、このような計算をするのに最適な季節でした。Herman Grabart らが得たブラウン系の RDO の解析解を拡張して、任意の次数の非線形応答関数を計算できる生成汎関数 (GF) を導きました(9)。そしてドアウエイ・ウインドウ描像がうまくいかないのは、システムと熱浴の間の量子コヒーレンスを無視しているからであることを突き止めました。このコヒーレンスがなければ、例えば、光子エコー測定では、エコーのピークが発生しません。さらに、私の HEOM の定式化では、このコヒーレンスが ADO に組み込まれており、時間依存の外場を扱い、非線形応答関数を計算することができることに気づいたのです。

### 多次元分光スペクトル

この仕事をほぼ終え、さあ MSQFPE プロジェクトに戻ろう、と思ったとき、Shaul が私のオフィスにやってきて、分子液体のモデルとして使われていたブラウン系の 7 次ラマンエコー信号を GF 法で計算することを提案しました。実際に計算してみると、このモデルではエコーがないばかりか、信号さえも発生しないことがわかりました。Shaul は私の結果に憤慨していましたが、数学に怒っても仕方がありません。しかし、分極の非線形成分を加えることで、7 次だけでなく 5 次でも信号が発生するモデルを構築することができました。この結果では、明確なエコーピークが得られなかったので、励起パルスと検出パルスの時間間隔を関数として 2 次元スペクトルをプロットしてみました。この 2 次元のプロファイルは、

従来の分光法よりもはるかに環境条件に敏感であることに気が付きました。

2次元NMRに触発された Shaul は、2次元レーザー分光法の可能性を考えていました。そのため、私がプロットした2次元ラマン散乱プロファイルを大変喜んでくれました。その論文当時は光源がラマンに限られていましたが、一応、赤外線 (IR) レーザーでも同様の実験が可能であることを指摘しました。そして、電子共鳴測定の数式とともに、この結果を5次元2次元ラマン分光の理論として発表しました(11)。しかし、このような測定が、後に超高速コヒーレント2次元分光の研究において、ごく一般的な現実となるとは思いもよりませんでした。

この2次元ラマンの論文を投稿した後、Shaul が私のオフィスにやってきて、「Taka、お前は どうして MSQFPE プロジェクトをやめてしまったのだ？」と満面の笑みを浮かべながら尋ねました。彼は、ようやく MSQFPE の調査を終える許可をくれたのです(14)。

ロチェスターには2年半ほど滞在しました。週末には、東部20州の最高峰を訪ねるために、車を走らせました。Shaul の厳しい労務管理下でありながら、この事業をやり遂げたことに、Guanha Che と Vladimir Chernyak は称賛の声を上げました。

5年間のアメリカ滞在を経て、私は、実験家と理論家の間で激しい議論が交わされる化学系の学部 にいた方が、自分の研究がより発展するのではないかと思うようになりました。そこで、私は日本の分子科学研究所 (IMS) の教員に応募しました。そして、Shaul とドウェイン・ミラーの強力なサポートにより、IMS の助教授に採用されました。Shaul は、まるで自分のことのように喜んでくれました。

### 分子科学研究所(IMS)

1994年4月の33歳の時でIMSに移りました。日本の大学と違って、分子研の助教授は独立していて、資金もあり、自分の研究員やポスドクも採用できました。博士課程の学生もおりましたが、教育業務はごくわずかでした。理論系の主管だった中村宏樹先生は、「もし生まれ変わったら、分子研の助教授として戻ってきたい」と言っていました。

奥村剛が助手として私のグループに加わり、2次元ラマン分光をはじめとする非線形応答関数の解析理論の開発に取り組みました。また、鈴木陽子さんと加藤毅君は、さまざまなアプローチで2次元分光の理論に取り組みました。

博士課程では、3人の学生を指導しました。学生が私のグループのポジションを求めてくるたびに、私は「理論研究は難しい、人生は短い、そして何より仕事がない」という真実を告げました。しかも、日本の大学の多くがそうであるように、学生は授業料も生活費も自分で払わなければならない。

そのため、私は「基礎科学研究のために悲惨な生活をしてかまわないなら、歓迎しますよ」と研究室配属を希望する学生に告げておりました。しかし、その言葉にひるむことなく、彼らは私のグループに加わりました。それ以来、京都大学に移ってからも、私のグループに入りたいという学生には、同じ言葉をかけ続けています。これが、基礎科学をやりたいとい



う高い志を持つ学生を見極める最も効率的な方法だと思ったからです。

IMS の学生は、他大学で修士号を取得した後に大学院に入学してきました。私は、彼らのさまざまな経歴を生かして、研究の幅を広げていきました。コンピュータに強い丸山豊君の協力を得て、MSQFPE を拡張し、非マルコフ的な場合のポンプ・プローブ・スペクトルを計算しました (22)。量子化学を専攻する今村穰の協力により、有機超伝導体の物理モデルを開発しました (39)。また、相関電子状態を効率的に計算する方法論を日野修君と発展させました (50)。私は量子化学の知識は全くなかったのですが日本で最も優れた量子化学者の一人であり、幅広い科学の素養のある天能精一郎氏が、最初から最後まで我々を指導してくれました。彼は当時から私の親友の一人です。

IMS は当時、物理化学分野の外国人研究者にとって、日本の登竜門的な存在でした。伊藤光男所長は、私に国際ワークショップや会議、スクールを開催するよう何度も勧めてくれました。これらの活動を通じて、グラハム・フレミング、アンドレイ・トクマコフ、トーマス・エルセッサー、ピーター・ハムなど、多くの実験家たちと知り合うことができました。私は、最高の実験家は、計算をせずに簡単なモデルを使って結果を分析できる理論家でもあることを見出しました。また、Biman Bagchi、Minhaeng Cho、Jose Onuchic、Oliver Khün、Eok-Kyun Lee を客員教授として迎え入れました。Jose 一家や Lee 一家とは富士山に登りに行きました。富永圭介、田原太平、斉藤慎二、信定克幸、大嶺巖氏らとも IMS で知り合いになりました。

IMS で数年研究を続けた後、私は IMS にいることの利点を十分に活かせていないことに気づきました。そこで、モンブランやデナリ (マッキンレー) などの山登りを始めました。秋山良や住斉氏とアコンカグア山 (6961m) に登りに行ったこともあります。IMS では恵まれた研究生活を送っていましたが、私のポジションは若手研究者のために用意されたものです。そして、私の経験や知識を、私と同じように基礎科学に情熱を持つ学生たちに伝えることも私の義務に思えました。そこで、2003 年、43 歳のときに分子研を離れ、京都大学理学部化学科の教授に就任しました。

## 京都大学

京都大学の理学部の特徴は、基礎科学に特化していることです。教授が結果を気にせず、"好奇心の駆動され研究する"伝統があります。例えば、ミバエを 50 年 (3,000 世代) 暗闇で飼育して、何が変わったかを調べていた教授もいました。

私は化学系の学部生を対象に 1 年間、統計熱力学の授業を担当しましたが、当時の京都大学にはシラバスも授業登録もありません。そこで私は、確率論や久保の線形応答理論など、高度な統計力学を教えました。

私が赴任して間もなく、学内外から何人かの学生が、悲惨な生活を送ることになるぞ、と忠告したにもかかわらず、私のグループに加わりました。その中には、石崎章仁、永田勇樹、鈴木洋一、長谷川泰祐君らがいました。彼らのほとんどは、学外でアルバイトをして、生活

を支えながら研究をしていました。彼らは研究に対して、非常に意欲的で真面目な学生であり、私の戦友だと思っていました。

このころの私の研究は、HEOM と多次元分光法という 2 つの柱で構成されていました。これらは、方法論は違えども、応用範囲が広いものです。章仁は HEOM を低温系に応用できるようにし (62)、勇樹と太祐は真司と Thomas Jansen の研究を発展させ、分子動力学 (MD) シミュレーションから直接 2 次元スペクトルを計算する方法を開発しました (64,67,75)。MD シミュレーションを用いた研究は、2 次元ラマン測定があまりにも困難で、信号強度を推定しない限り、実験者が理論予測に関心を示さなくなったことから始めたものです。これらの HEOM と MD の研究は、私たちの研究プログラムをさらに発展させるための基礎となったのです。

京都大学に移って間もなく、平田文男氏の大学院生だったあゆみと、東京ディズニーランドで結婚しました。両親や友人たちは大変なショックを受けながらも、私たちを祝福してくれました。しばらくして長男の亮太と次男の光一が生まれました。それまで大学院生は我が子のように思っていたのですが、自分の子供の方が 100 倍もかわいいことに気づきました。

化学や物理の学部生たちが、惨めな生活を求めて定期的に私のグループに参加するようになりました。大学院生の多くは、成果獲得を急がず、基礎科学に時間を費やすことを楽しんでいました。

植野由美子さんというすごい秘書がいて、グループのメンバーや外国からの訪問者を献身的に支えてくれました。昨年の夏、癌のため急逝されたことは、私たちにとって大きな悲しみでした。

## 階層方程式 (HEOM)

章仁とグラハムがエネルギー移動に成功して以来、20 年近く全く注目されていなかった HEOM が、徐々に認知されるようになりました。Yijing Yan, Qiang Shi, Jianshu Cao, Michael Thoss などの優秀な研究者や、私の友人でもある多くの研究者の寄与と、コンピュータ技術の進歩のおかげで、HEOM が扱えるシステムの範囲は広がってきました (130)。私は、櫻井敦教、加藤章仁らと、共鳴トンネルダイオード (RTD)、量子ラチェット、電子移動 (ET) など、これまで低温系には適用できないマルコフ近似でしか調べられなかった有名な問題を再研究しました。その結果、RTD における自励振動 (99, 102, 112) や量子トンネルによるラチェット電流の抑制 (100) など、様々な特異な効果を見いだしました。ニュージーランドからのポスドク、Daniel Packwood は、非ガウスの確率過程を探求しました (89)。田中翠は修士課程の学生だった頃、低温で変位するブラウン振動子系に対する HEOM を導きました (82, 85)。私はこれらを「本当の」マスター方程式と名付けました。

## 2 次元分光

HEOM 法は、低温、非摂動的、非マルコフ的な SB 相互作用を扱えることが特徴で、2 次

元スペクトルの計算には最適である。一般に、微視的なハミルトニアンに基づく MD アプローチはボトムアップ型であり、モデルに基づく HEOM アプローチはトップダウン型である。MD は分子のミクロな運動を解析し、SB モデルのパラメータを決定するのに役立つ (106)、HEOM は分子の集団運動に関するマクロな情報を得るのに役立つ、また MD アプローチでは実現不可能な 2 次元測定 of 量子シミュレーションを行うことができる (87)、この二つのアプローチは相互補完的なものです。

我々の研究を促進するために、太祐は分子間および分子内振動のスペクトル解析のための水ポテンシャルを開発した(88)。さらに、伊藤宏伸と Ju-Yeon Jo は、2 次元 THz-Raman (104, 116)、2 次元 IR-Raman (113)、シングルビーム 2 次元 Raman スペクトル (134) をシミュレーションし解析した。MD の研究を通して、Dwayne (79) や Peter Hamm (95) などの実験家とも協力したが、Peter は現在では理論家として表現したほうがいいかもしれない。

HEOM の適用範囲が広がるにつれ、私の好奇心も高まってきました。同時に、私のグループの大学院生も増えました。光誘起電子移動(123)や励起子移動(107)の研究を行った。Jiaji Zhang は、プロトン移動とプロトン結合電子移動過程を 2 次元スペクトルと結びつけて調べた(129, 135)。岩元勇樹は、回転不変な SB モデルを用いて 2 次元 THz スペクトルを計算した(126)。池田龍志は、非線形スペクトルを計算し、HEOM から得られた結果と比較することで、表面ホッピング法の適用性を示した(124)。

2 次元スペクトルの研究では、植野正嗣が MD と量子化学計算から得られた微視的軌道を基に、機械学習の手法を用いて基底状態と励起状態の PES を持つ SB モデルを作成した (127, 136)。そして、構築したモデルを用いて、HEOM アプローチによる様々な 2 次元振動・電子スペクトルを計算する。これにより、大規模計算の能力が向上することが期待される。

非線形応答関数を計算することで、2 次元スペクトルなどの実験的観測値として現れる量子散逸ダイナミクスの特異な効果を同定することができた。オランダのポスドク、Arend Dijkstra は、量子情報プロセスにおける非マルコフ的な SB 相互作用の役割を特徴付けることで、この点を実証した(86, 92)。Hyeon-Deuk Kim は、2 次元赤外スペクトルにおけるモード-モード相互作用を解析的に調べました。

## 量子統計熱力学

2014 年、フライブルク高等研究所に客員フェローとして滞在する機会を持ちました。HEOM の基礎をあらためて調べたところ、このアプローチが物理学の基礎問題に適用するのに十分な信頼性があると確信するようになりました(103, 105)。就職の可能性よりも哲学が重要であると考えた加藤章仁と坂本想一は、HEOM を用いた数値実験に基づいて量子熱力学を研究しました。HEOM 法の特徴は、熱やエントロピーの変化を系だけでなく、熱浴や SB との相互作用についても厳密に評価できることである(117)。このように、非平衡の

仕事を準静的自由エネルギーの変化とみなすことで、非平衡の場合でも量子熱力学が統計力学の枠組みで記述できることを示しました (131, 133)。

#### 固体物理の問題

UIUC 時代から、量子サーモスタットとしての HEOM 形式を固体物理の問題に応用することに興味を持っていました。Lipeng Chen、Mauro Cainelli と私は、様々なホルスタイン系に対する HEOM を導きました(109, 132)。私の目標は、時間依存の外力下で超伝導状態を実時間でシミュレートすることである。しかし、今のところ、中村清人が解いたのは、4 サイトのホルスタイン・ハバード系の HEOM だけです(137)。必要な計算機の開発には、あと 15 年はかかると思われます。

#### エピソード

京都に来てから、私の国際的な交友関係は広がりました。会議、セミナー、講義のために多くの国々を訪れました。また、海外からのお客様をたくさん迎えてきました。私はいつも彼らを私のお気に入りの寿司屋に連れて行きます。グラハム、ウラジミール、ドウェイン、トーン・プルリッツは、そんな VIP の人たちです。おかげで、私の「寿司教授」としての名声は世界中に広まり、ゲストの数は増え続けています。

私は、David Coker、Yang Zhao、Maxim Gellin、Howe-Siang Tan、Frank Grossmann、Raffaele Borrelli とともに、「サミットミーティング」という、参加者が特に行きたい場所で行う、自己組織的、自己集合的な科学会議を開催してきた。この会議で報告される科学は最高レベルであり、会議の最後には山登りが行われます。

私が科学の世界に足を踏み入れてから、もう 40 年以上になります。当初は、山頂も見えず、一人で登っていると思っていました。やってみると、相変わらず頂上は見えませんが、多くの友人や学生たちが私の登山に参加してくれました。登り続けることで、私の幸運はどんどん増しているような気がします。最近になって、吉隆という名が好きになってきました。