物性研に着任して

物質設計評価施設　　樋口 祐次

2017 年 4 月 1 日付けで物質設計評価施設野口研究室の助教に着任いたしました樋口祐次と申します。どうぞよろしくお願いいたします。簡単に自己紹介とこれまでの研究を紹介させていただきます。

私は京都大学大学院理学研究科物理学・宇宙物理学専攻で博士の学位を取得しました。学部四年生から六年間、吉川研一教授にご指導いただき、DNA の構造転移の研究を行っていました。DNA は良溶媒から貧溶媒(高温から低温)へと条件を変えると、密度をオーダーパラメータとして不連続な構造転移を示すことが知られています。不連続な構造転移における平衡論からダイナミクスまで幅広く研究を行ってきました。初めの一年半は蛍光顕微鏡を用いて DNA 構造転移におけるヒステリシスの研究を行っていましたが、修士一年生の途中からシミュレーションに興味を持ち、そこからは計算を中心に研究を続けています。シンプルなモデルを発展させ、実際の生体内の条件に近づけた時に構造転移がどのように変化するのかに興味を持ち研究を行ってきました。細胞内のような閉じ込め空間では構造転移の不連続性が失われること、長鎖での構造転移においては気相固相転移から液相が出現すること、二重らせんの影響を取り入れたトポロジーの効果を考慮し、ねじれにより DNA のタンパク質への巻きつきを制御できること、などを明らかにしました。吉川先生には自由に研究をさせていただき、研究の楽しさや自立して研究をする重要性を学ぶことができました。

学位取得後は東北大学の久保百司教授の元で六年間助教として仕事をさせていただきました。久保研究室は量子化学計算を用いてセラミックスを中心とした材料の研究を行っています。原子スケールの加工プロセスでは、「加工の際の衝撃、摩擦、応力などを考慮した化学反応ダイナミクス」、「ミクロな現象がマクロなスケールに与える影響」が課題となっています。量子分子動力学法を用いて結晶成長プロセス、エッチングプロセス、摩擦プロセスにおける化学反応ダイナミクスを久保先生、研究室の学生と研究してきました。私の物理の知識を活用することで計算結果の統計的な解析や、原子スケールの物性値と理論モデルを用いることで実験結果と比較可能なマクロな物性値(応力や拡散距離)を得ることもできました。理学から工学、物理から化学、生体分子から固体材料と大きく分野が変わることにより、非常に多くのことを学ぶことができました。とくに工学や化学の発想を得ることができたのは大きな収穫となりました。私自身は高分子材料の劣化と破壊現象の研究を行っていました。

工学や化学の視点を取り入れることにより、2013 年 10 月から 2017 年 3 月まで科学技術振興機構さきがけ研究員を兼任することができました。東京大学教授加藤隆史研究総括の「分子技術と新機能創出」領域で多くのことを学びました。企業の方とお話しする機会や、高分子材料の研究者と議論する機会も増え、物理的なシンプルなモデルと実際の材料物性とのギャップを意識することになりました。この期間を通じ、計算も大規模化することができ、ポリエチレンの変形・破壊プロセスをシミュレーションで定性的に再現することに成功しました。シミュレーションではポリエチレン等の結晶性高分子の機械的特性は定性的な再現すらできていなかったことから、大きな一歩になったと思います。久保先生や加藤先生のご指導から、物理的なモデルに原子スケールの情報を取り入れる重要性を見出しました。

東北大学は実学尊重を理念として掲げていること、上記のさきがけ研究においても実際の材料を意識することを強く求められたことから、基礎的な研究からアウトプットまで強く意識するようになりました。実学の中にも理学から見て興味深く未解決の問題は多く存在し、理学が実学に役立つ面が多くあると確信して研究を進めております。

今後は材料から生体分子まで幅広い物性研究を通し物性研究所へ貢献したいと思います。とくに理学から実学へ、化学の視点を取り入れた物理モデルの確立を目標にして新しい研究分野を切り開いていきます。これまでの研究に加え、野口先生と協力してソフトマターの自己集合プロセスやモデリング等を研究し、研究の視野・知識を広げていきたいと思います。ご指導ご鞭撻のほど何卒よろしくお願いいたします。