



## 城塚達也博士（森田 G 博士研究員）茨城大学助教に栄転

森田 明弘（東北大院理・A01 計画研究代表者）

本領域 A01 計画班の森田グループで博士研究員として活躍された城塚達也博士が、茨城大学工学部の助教のポジションを得て栄転されることになりました。城塚さんは 2014 年に私の研究室に博士研究員として加わり、それ以降本グループの界面分光の理論の発展において中心的な役割を果たしてきました。今回その成果を高く評価されて、昇進されたことを心よりお祝い申し上げます。

城塚さんは早稲田大学の出身ですが、京都大学理学研究科の大学院に進学して学位を取りました。大学院時代には谷村教授や安藤准教授（当時）のもとで、水溶液中のプロトン移動や振動ダイナミックスの理論研究をされていました。私とは彼がまだ京大の谷村研の大学院生だった頃に、広島での分子科学夏の学校で初めて知り合いました。私が講師をした界面分光の分科会に参加してくれて、休み時間中にも物おじせず突っ込んだ質問をしてくれたことを思い出します。学位を取得後にフランスの *Ecole Normale Superior* の *Damian Laage* 教授のもとで博士研究員となり、溶液中での振動デコヒーレンスの量子効果の理論研究に従事しました。そこで国際経験と流暢な英語を身につけて、私の研究室に加わりました。

彼は私のグループに加わって、まず振動差スペクトルの理論計算の研究を成し遂げました。[1] 系のなかで一部のみ異なる 2 つのスペクトルの差は、その部分の情報を選択的に取り出す方法として、実験の測定でよく用いられます。しかし理論計算で微小な差スペクトルを解析しようとしても、微小な差を求めるには莫大な統計平均が必要で、実際上は困難でした。我々は 2 つのスペクトルを求めて差をとるのではなく、差スペクトルそのものを直接に計算する一般的な理論手法を考案して、この困難をクリアしました。彼はそのプロジェクトにおいて、新たな理論の開発とプログラムの実装を完成させました。開発当初は困難の連続でしたが、持ち前の熱意で成功に導いてくれたのは彼の力です。この成功体験は、私からみても彼にとって大きな財産になったように思います。研究者として独り立ちする自信を身につけ、明らかに成長を遂げたと感じました。

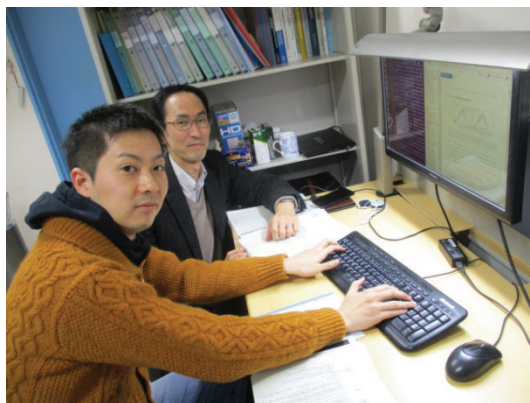
続いて、城塚さんは帯電した界面における SFG 分光法の 3 次の感受率の計算を世界的に初めて成し遂げて明らかにしました。[2] 帯電した界面での SFG は、電極界面やシリカなど多くの固液界面への応用で現れますが、そのスペクトル中には帯電の効果が 3 次の寄与として含まれています。彼はその効果を理論計算で曖昧さなく明らかにできることを示し、固液界面の SFG から界面情報を得る解析をきれいに示しました。この成果は本新学術領域の *Phys. Chem. Chem. Phys.* 特集号で発表され、*Hot Article* にも選出されました。（ニュースレター 54 号に掲載予定）

彼は普段から非常に研究熱心で、研究室内の学生からは兄貴分のような、ムードメーカーのような存在でいてくれました。本新学術領域の研究で成果を上げるにつれて、物理化学のコミュニティーの中でも認知を上げていったと思います。最近では周りから目をかけていただいて、若手研究者としていろいろと招待講演にも呼んでいただくようになりましたので、研究者ポジションを獲得するのは時間の問題だと思っておりました。これから独立した後も、理論化学の若手の代表格として、ぜひ活躍して行ってほしいと願っております。

## 引用文献

[1] T. Joutsuka and A. Morita, *J. Chem. Theory Comput.*, **12**, 5026-5036 (2016); *J. Phys. Chem. B*, **120**, 11229-11238 (2016).

[2] T. Joutsuka, T. Hirano, M. Sprik, and A. Morita, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, DOI: 10.1039/C7CP01978E (2018).



研究室でのディスカッションの様子