

II 特別連載 II

科学技術  
振興機構 『さくらサイエンスプログラム』友情と感激

第410回

## 横浜市立大学の活動報告



立川 仁典  
(横浜市立大学 大学院  
生命ナノシステム科学研究科  
物質システム科学専攻教授)

### タイ・カナダから招へい 量子水素シミュレーション

2023年1月14日(木)21日(水)、ウボンラーチャターニー大学(タイ)、モンクット王工科大学ラートクラパン校(タイ)、ブリティッシュコロンビア大学(カナダ)から、大学生、大学院生、教員、計10名を招へいしました。

#### ● 研究室での議論

タイとカナダからの招へい者に、当研究室で用いている先端的なシミュレーション手法を体験してもらうため、「最先端マルチスケール量子水素シミュレーション」による議論を実施しました。招へい者自身に選定してもらった研究テーマは以下の通りです。

①タンパク質(GFP類縁体)における水素/重水素による構造変化  
②金属表面における水素分子吸着機構  
③電子励起状態における水素移動反応機構  
④アミノ酸生成における水素/重水素効果

それぞれのテーマにおいて、最先端の研究を行っている当研究室の学生たちが研究発表を行いました。

招へい者は、特に当研究室での先端的なシミュレーション手法である、経路積分分子動力学(PIMD)法や多成分分子軌道(MC-MO)法に興味を持ち、その理論や実際のシミュレーションに熱心に取り組んでいました。その熱い議論は昼食休憩等の間も途切れず、一日を通して深い国際交流を行うことができました。

このような国際的な研究交流の場は、異なる専門領域や文化を持つ研究者同士が交流すること、その研究領域のさらなる発展や、共同研究の発足につながるものです。したがって今回の議論は、国際的な研究交流において非常に有益なものでした。

プログラムスケジュール	1月14日	カナダからの招へい者2名 来日
	1月15日	研究室で最先端シミュレーション体験 タイからの招へい者8名 来日
	1月16日	研究室紹介、日程調整、日本生活のガイダンスなど 研究室で最先端シミュレーション体験
	1月17日	研究室で最先端シミュレーション体験 日本文化の体験(鎌倉)
	1月18日	研究室で最先端シミュレーション体験
	1月19日	研究室で最先端シミュレーション体験 茨城大・岐阜大・広島大教員招き、共同研究に関する意見交換
	1月20日	第8回量子化学国際ミニワークショップへ参加
	1月21日	離日

#### ● 日本文化体験

横浜市大から近距離である鎌倉を訪問し、歴史的な史跡を巡りながら、日本の仏教文化と豊かな歴史に触れました。具体的には、大仏、長谷寺、鶴岡八幡宮の見学を行いました。日本の精神文化と歴史的背景を学びました。また、日本特有の習慣であるおみくじを引くなど、参加者に日本文化の一面を体験していただきました。食文化の面では、小町通りで食べ歩きを楽しみ、抹茶スイーツや練り物、寿司など、日本の多様な食べ物を味わいました。これは、日本の食文化を知ることができ、機会であり、参加者にとって記憶に残る体験となりました。

さらに、着物レンタルと着付けを体験し、日本の伝統衣装を身にまとい、古都鎌倉の街を散策することで、日本の伝統的な生活様式と美意識に触れることができました。

#### ● 量子化学国際ワークショップ

量子化学による国際的な交流をもつため、



量子化学国際ミニワークショップ



研究室で議論する招へい者ら



タイ・バンコクで開催された量子化学国際会議(2024年7月)



鎌倉では史跡などを見て回った

今後、今までの構築してきた日タイ間での国際共同研究成果や国際交流基盤を活用し、2〜3カ月程度の国際共同研究のための再招へいや、逆に、日本人学生のタイ先進大学への派遣も実施して参ります。それにより、日タイ間の積極的な人材交流を促し、若手人材の同志の関係構築を図り、より強固で持続可能な国際共同研究体制に発展させて参ります。

後日談になりますが、本年7月末、タイ・バンコクにおいて量子化学国際会議が開催され、当方が招待講演で、学生3名がポスター発表で、SSPによる共同研究内容の一部を報告しました。当研究室3名の学生全員が、ポスター賞受賞という快挙を成し遂げ、これは指導教員としてだけでなく、SSPの実施責任者として、大変うれしく思っております。

「第8回量子化学国際ミニワークショップ」を実施しました。ワークショップには、タイ・カナダの学生、教授の方々に講演を行っていただきました。また、広島大学や、岐阜大学、茨城大学からの国内招待講演者の方々にも参加していただきました。講演者の口頭発表は、量子化学の世界で最先端研究を取り扱ったものであり、質疑応答時間のみならず、休憩中にも日本人とタイ人、カナダ人を交えた議論が活発に行われました。また、当研究室と繋がり深い企業も参画し、日本の産業界における計算科学の活躍を紹介しました。このようにタイ・カナダ、日本国内のいくつかの大学・産業界の方々と多くの参加者により、非常に多角的な視点から量子化学、計算科学についての議論が行われました。

量子化学による、国際的なコミュニケーション作業を加速させることができ、国際研究交流の目的・趣旨に対して大変効果的でした。

● 今後の展望

我々の研究室では、2016年度から計7回の「さくらサイエンスプログラム(SSSP)」に継続的に採択いただき、タイ王国における先進4大学の量子化学グループから30名以上の学生・若手研究者を招へいた実績を有しております。SSPを契機に、横浜市立大学とチェンマイ大学、ウボンラーチャターニー大学との間でMOUを締結し、SSPの卒業生5名を、科研費などの別予算にて短期留学生として当研究室で受け入れました。それにより、国際共同研究をやり遂げ、複数の学会・共著論文を報告し、その中の最優秀な1名は、2021年に本学特任助教の内定を勝ち取ることもできました(当該者は、残念ながらコロナ禍のために再来日が叶わなかったのですが、今年度のSSSPで、タイ側の「教員」として横浜市大に招へいます)。