

Post-doc.の話

中西浩一郎

倉敷芸術科学大学産業科学技術学部

(2002年9月30日受理)

1. Prologue

最近post-doc. (博士研究員) という言葉をよく耳にするようになった。これは主として理学系、工学系の大学院博士過程を終えて学位を取得した後、引き続き研究に専念する有給非常勤の若手研究者のことを指す。欧米では、設備の整った研究室を主宰する有名教授・助教授の下で研究に従事し、やがて認められてどこかの大学の助手・助教授に採用されるというのが最も一般的なコースであり、このための奨学金がNSF (National Science Foundation, 最近はNISTと改名) のような財団や大学自身からも広く供給されている。このpost-doc. の時期はある意味ではその研究者にとって黄金時代であると言ってよいかもしれない。一般に年令も若いのでactiveとかaggressiveといわれる人達が特に理学系の理論家を中心として多く見られる。しかし、すべてがそうではない。只、共通しているのは各人それぞれ優れて個性的であるといえる。

このポストは、米国では広く外国人に対しても開かれていて、日本からも毎年多くの若者 (自称も含む) が渡米している。一方、日本では最近やっとこの種のポストが設定され出したというのが現状であろう。本稿では筆者の周辺を通過して行ったpost-doc. について回想をこめて紹介してみたい。

2. Chapman君の場合

1980年代中頃の8月、筆者らはJSPS (日本学術振興会) とNSFの支援の下に日米共同研究実施のため、米国側代表者のKeith. E. Gubbins教授の研究室のあるNew York州北部のIthacaのCornell大学に滞在していた (現在はNorth Carolina State Univ.に移っている)。

Gubbins教授は早くに米国に移っておられるが、元来英国の出身であり、研究室や御自宅には周囲のアメリカ風の田園地帯とは異なるヨーロッパの雰囲気が漂っていた。研究室は少人数で当時は院生は一人であとはスタッフとポストドクという構成であった。

このような事情を背景にGubbins教授は夏には英国出身の在アメリカ人や英国の若手研究者を集めてセミナーやミニ研究会を組織していた。そこにはCornellの名声もあってか最先端の研究者が少数乍ら来訪し、質の高い討論が行われていた。

さて、セミナーが開催されると決まると必然的に起こることは、若い人が雑用係として超多忙となることである。この時その貧乏籤を引いたのが当時はまだPhD. studentであったWalter Chapman君である。セミナーの設営から参加者の案内に至るもろもろの雑事で大いそがしであ

った。セミナーの中休み、いわゆるコーヒー・ブレイクの雑談の中で日本からの参加者より、アメリカ人の間で目上の方にfirst nameやその略称で話しかける習慣があるがそれには抵抗が大きいとの発言が出た。筆者も昔、パークレーでpost-doc. をしていた時、ボスのJoel H. Hildebrand教授（年齢差半世紀）をJoelとなかなかスムーズに呼べなかったものである。ところが、Prof. Gubbinsによると、これは必ずしも外国人に限ったことではない。Walterも私をキース（Gubbins教授のファーストネーム）とはなかなか呼んでくれなかった。そういうアメリカ人も結構いるよということであった。実際Walterは大人しいかにも優等生タイプの院生であり、しかもアメリカでも最も保守的なディープサウスの出身であった。アメリカはいわゆるmelting potで多民族の混合体であるとの認識が通用していて、このような例外は案外見のがされているのではないだろうか。Chapman君はその後間もなくPhDをとって大手石油会社の研究職として一旦大学をはなれたが、現在はRice大学（Texas）の化学工学科のassociate professorとして液体理論の分野で活躍している。

3. Eva Voigt

滞在中はfirst nameに過剰な拒絶反応を示していた筆者もEva. M. Voigtに対しては別だった。彼女は1963～64年の約14ヶ月の間、Hildebrand研究室のpost-doc.であった。当時ひそかにdragon ladyと呼んでいたのは、1927年生れの童年であったことと、当時ヴェトナムの指導者であったマダム・ヌーと似ていると思われた風貌と行動の故である。彼女はカナダのバンクーバーにあるUniversity of British Columbiaのpost-doc.をしていた分子分光学の専門家である。当初は筆者と同日着任の予定が、事務上の手続きの手違いで遅れたことを気にしていた。しかし、与えられた研究のテーマは「ヨウ素又は気体の溶解度」の研究というHildebrand研のメインテーマであった。滞在中のEvaは少なくとも筆者の見る限りにおいては分光学的研究に、より大きな関心を抱いているようであった。Evaがパークレーで公表した論文は実質的には総説であって広く溶解度データへの統一的理解を試みたものであり、この点Hildebrandの寛容さがうかがえる。



（右）筆者、（左）Eva Voigt

そういう訳で時間を戻すと、研究室はEvaの来るまでは筆者一人のことであり、来るのはドイツ人で、しかも女性とあって、どんな人が現れるのか心待ち状態であった。そして、筆者の着任後1ヶ月ばかり経った頃Evaは遂に着任した。

会ってみると、予想に反して気さくな女性で（写真1参照）研究室への初出勤もカジュアルっぽいラフなスタイルであった。しかしそこはドイツ人、愛車はVolkswagenの小型車を乗り回し、日常の会話ではwhyを連発し、些細なことでも徹底的に理解しようとする姿勢には感心しつつも閉口させられる毎日であった。

Evaたちの考え方で特に強く印象づけられたのは、アメリカ人全般の雰囲気と行動に対する厳しい批判である。彼女は事あるごとにコメントして、アメリカ人はstupidだと軽蔑の気持ちをあらわにすることであった。これには筆者も共鳴することがしばしばであった。この時代アメリカは経済的にも繁栄を極めていたが、このあとすぐに始まったヴェトナム戦争とその事実上の敗北によって大きな打撃を受けることになるのである。

Evaは現在75歳になりretireしているが、バークレーで尚数年を過ごした後、再びバンクーバーに戻り、同地の州立Simon Fraser大学に教授として勤め、われわれの招きで訪日も果たしている。

4. Intermezzo 1

筆者のpost-doc.時代のサラリーはHildebrand教授がもらっていたNSFやAEC (Atomic Energy Commission) からの奨学金に基づいている。このためにはかなり部厚な詳細な申請書を提出しなければならず、多くの研究者が多量の時間と精力を注ぐことになる。又、NSFはこのような単独の研究の他、グループ研究を支援している。筆者はCornell大学のGubbins教授と日米共同研究を5年に渡って行ったが、それは日米両方のグループが分子シミュレーションの化学工学への応用という分野で共にpioneer的な研究を進めていた故であろう。

このような申請書は膨大な長さになるが、NSFは適当な研究者4名に依頼してコメントを求め、その結果は採否の有力な判断材料となるようである。われわれのプロポーザルに対するコメントは何れも好意的なものばかりであったが、原文は無署名であるので、ここで引用しても差し障りないであろう。この審査員によるプロポーザルへの評価は5段階で成されている。因に5段階とは、高い方から以下の順である。

①Excellent ②Very good ③Good ④Fair ⑤Poor

である。

Table 1は筆者のプロポーザルへのコメントの一例 (①と判定されたもの) を示す。われわれ (Gubbins教授と筆者) の提案は①, ①, ②, ②と何れのreviewerからも高い評点を頂いている。

**Table 1. National Science Foundation への共同研究のプロポーザルの一例
Proposal Evaluation Form**

This is an excellent proposal to support cooperation between two groups that both have extensive experience in the area of complex fluid modelling. While reading this proposal, this reviewer wondered why these groups were not being supported by an industrial consortium this work will profoundly influence research and development in such private sector groups. On reflection, however, this reviewer feels it important that this kind of work be as unencumbered from special interest influences as possible; hence, the NSF is a very appropriate sponsor. This work also represents a significant departure from present-day industrial prediction schemes, whose origins rest not so much in efforts to understand molecular influences on the properties of fluids as a dependence upon extensive mixture data and the ability to play interpolation games with Nature. Such traditional schemes are fundamentally flawed; approaches such as the one proposed by Gubbins and Nakanishi will inevitably win out.

This reviewer then feels that the NSF has the happy opportunity to support not only some fine work but also inter-laboratory and international cooperation.

☒ Excellent
 ☐ Very Good
 ☐ Good
 ☐ Fair
 ☐ Poor

5. *Intermezzo 2*

(化学工学熱力学／分子シミュレーション)

化学工学の一分野として化学工学熱力学という専門分野がある。化学プラントの設計と運転に必要な多くの物質や混合物の物理的性質の測定・推算・相関を行う地味乍ら、なくてはならない専門分野である。この分野では、物性値と構造の計算が中心となるが、その数式的表現は多くの場合経験的であった。これを分子間相互作用に基づく関係に変えて行った代表的なものがPrausnitz一門の仕事Molecular Thermodynamicsであったと言えよう。それに対して、分子を分子間ポテンシャルを用いてモデル化したものについて分子シミュレーションを適用して行こうという新しい試みが、local compositionに関するわれわれのモンテカルロ計算であった。その論文は、J. Chem. Phys. 誌に1979年に発表されたが、化学工学の中に一つの分野を作ったと共に、post-doc.の希望者を増やす効果をもたらしたのである。

6. 海外からのPost-doc.

米国が多数のpost-doc.を抱えているのに対して日本ではどうか。前記のように最近には種々のグラントが海外から日本へ来て研究を行う博士研究員をサポートするようになったが、ごく最

近に至るまで多くの識者からの提案にも関わらず、日本のpost-doc. の数は限られていた。筆者の研究室でもpost-doc. 又は、それに準じる待遇で長期間の来日を果たしたのはTable 2に示したP. Gierycz, K.B. Domanski (共にPoland) , Julio Abusleme (Chile/Canada) J.-W. Shen (中国) Joan Button (UK/U.S.A.) と過去凡そ20年の間にわずか5名にすぎなかった。

以下海外から日本へ来たpost-doc.について筆者らの体験を簡単に述べよう。

Table 2は、筆者がお世話させて頂いた全員を網羅している。注目したいのは彼等の希望に基づく研究テーマが私共のpioneer的研究によって知名度が高い分野に属していることである。

Pawelはポーランド科学アカデミー直属の物理化学研究所の上席研究員であるMalanowski博士のグループからやって来た。液体の気液相平衡の専門家であるが、筆者の研究室ではLJモデルのモンテカルロ計算を行って、始めて分子のサイズに差のある二成分系の熱力学的性質のデータをまとめ、2報の論文をFluid Phase Equilibria 誌に発表している。彼の帰国後、ポーランドは連帯 (solidarite) 運動に大学なども巻き込まれているが、彼が革新派か保守派かどちらの立場にいるかは研究室でも意見が分かれた。

次のJulio はカナダのMcGill大学化学工学科のJ. H. Vera教授のPhD. Studentであるが、こちらではやはりLJの3成分系のモンテ・カルロ計算を行い、結果は一部は発表済み (Fluid Phase Equilibria) だが、積み残しがあり、いつもX'masカードなどで催促されている。帰国後すぐMcGill大学で学位を取得し、現在はイタリア、ミラノの化学会社勤めている。

さらに、Domanski君は、ワルシャワの工科大学の院生で、Domanska教授の下で電解質溶液の物性について研究していたが、ここでは北尾修博士 (現在 産総研) の指導下で超臨界流体に関する研究を行い、特にCO₂ のpair potentialについて最適化パラメータ数65の式をまとめたが、まだ不十分であり (一応既発表となっているが) 引き続いての研究が必要と思われる。

JoanさんはCornell大学の学生のまま来日し、われわれのところではポリアルコールやアルコールアミン水溶液の束縛分子動力学法による研究をしていたが、この研究は筆者の研究室では、林 治尚氏 (現在 姫路工大) らが手掛けたものだが、その転出後は田中 秀樹氏 (現在 岡

Table 2. Post-doctoral or -graduate fellows of our laboratory in Kyoto University between 1980 and 1990

氏 名	国 名	所 属	スポンサー
Pawel Gierycz	Poland	ポーランド科学アカデミー	JSPS
Julio A. Abusleme	Chile/ Canada	McGill Univ., Montreal	文部省
K.B. Domanski	Poland	ワルシャワ工科大学	文部省
Joan Button	U.S.A.	Cornell Univ.	JSPS
J. -W. Shen	China	東北工科大学	—

山大学教授)が引き継いで指導助言に当った。渡されたプログラムリストを受取ってもしばらく何も反応が無いので、改めて聴いてみると折角のプログラムをバラバラにして自己流に変えているとのことであった。Joanは英国出身で恵まれた家庭の出であり、物静かな性格であるが、研究者として芯の強さはなかなかのものがあつた。現在はやはりGubbins 教授のグループにいるはずである。

最後にShen君は、Domanski君らと連絡をとりながら量子化学における分子軌道計算を*ab initio*で勉強し、超臨界流体の研究に展開した。京都大学で学位を得て、現在は三菱化学の研究員である。

7. Epilogue

筆者の研究室の看板は「分子シミュレーション」であるが、ここで述べなかったもう一つの看板は「水と水溶液」である。その理由は、主として筆者が1960年に発表した*t-butyl alcohol*水溶液の部分モル体積に関する短い論文にあり、この論文はこれまでに少なくとも160回の引用とそれに見合う別刷リクエストを世界各国から今でも頂いており、発表後40年が経過して尚生き残っているのは、心強いことである。この研究は又非電解質水溶液や超臨界流体の分子シミュレーションにつながっている。

A Short Story on Post-doc.

Koichiro NAKANISHI

College of Science and Industrial Technology

Kurashiki University of Science and the Arts,

2640 Nishinoura, Tsurajima-cho, Kurashiki-shi, Okayama 712-8505, Japan

(Received September 30, 2002)

Post-doc. research in fundamental science and technology is now popular especially in the U.S. Short stories of post-doc. in the U.S.A are given; are included some experiences in UC Berkeley and Cornell. Also presented is a brief account on the record foreign post-doc. in Kyoto University, Kyoto, Japan.