

## 逃げ水

梶川 浩太郎

(東京工業大学)

光を用いた表面分析は、非破壊でその場観察が可能であるという特徴がある。加えて、高真空を必要とせず、汚い環境（失礼！）でも測定できる利点をもつ。これは、溶液中や気液界面での測定を可能にする。中でも、二次の非線形光学効果は、反転対称性を欠く分子や構造からの信号を選択的に観測できるという特徴がある。この特徴は強力で、線形分光ではわからない分極構造の有無や試料の対称性などを知ることができる。この分野の研究は、1980年代初頭に Shen らによりスタートした。その後、光第二高調波発生（SHG）や和周波発生（SFG）を用いて水面上の単分子膜や液界面の研究が行われた。そして、多くの研究者により表面の非線形分光が続けられ今日に至っているのは皆の知るところである。

さて、SHG や SFG はスマートな表面分光法であるが、信号は弱く、暗闇での長時間の実験が必要である。また、強いレーザー光を使うので、試料へのダメージの回避に神経を使った。暗闇には慣れたが、次の悩みはデータ解析のための煩雑な計算であった。解析式は多量の三角関数を含み、その数値計算に頭を抱えた。計算機といえば PC-98 で、フロッピーディスクを使って OS を立ち上げ、文書作成に一太郎を使っていた時代である。指導教官に頼んで、HD を搭載した Macintosh と発売されたばかりの Mathematica という数式処理ソフトを導入してもらった。このときは、国産の計算機ではこのソフトは動かなかった。これがきわめて強力で、複雑な関数の三次元プロットや行列計算、回帰計算などを簡単にこなしてくれた。懸案が解決し、このソフトのおかげで、めでたく学位を頂くことができた。

その後の 30 年間は、表面プラズモン共鳴、エリプソメトリー、表面増強ラマン散乱、メタマテリアルなど、さまざまな表面分光測定を行ってきたが、解析に厳密さを追求すると計算が膨れ上がった。計算機が当時とは比較にならないほど高速となり、大きな計算を容易に行えるようになったはずだが、さらに高度な結果を求めると、計算量は増加する一方であった。最近は機械学習というツールもできたので、データセットを作成するために何百コアもの計算機を走らせて電磁場解析を行う羽目に陥っており、ちっとも楽になっていない。計算機の進歩は喜ばしいことなのだが、私にとってのゴールは逃げ水のように遠のいていくばかりである。