物性研に着任して

物質設計評価施設　　河村 光晶

2018 年 4 月 1 日に物質設計評価施設、尾崎研究室の助教に着任いたしました、河村光晶(かわむらみつあき)と申します。この場をお借りして自己紹介を致します。

私は 2010 年に東北大学理学部物理学科を卒業したのち、東京大学理学系研究科物理学専攻の常行研究室で超伝導転移温度(T_c)の第一原理計算というテーマで修士・博士課程の研究をしました。これは、なんら経験的なパラメーターを用いずにいろいろな物質の T_c を予測してしまおうというもので、私が修士に入る数年前に実用的な表式が提案された超伝導密度汎関数理論(SCDFT)をプログラムに実装したり、いくつかの物質に適用したり、手法改良を試みたりしました。常行研では取り組んでいるテーマは一人ひとりバラバラですが、手法開発や第一原理プログラムの実装を行っている人が多くおり、互いのノウハウを交換し合ってそれぞれの研究を進めていました。SCDFT の改良についてはあまりうまくいきませんでしたが、これを使った実際の物質の研究をおこなうことはできました。その中のひとつに私が D3 のときに見つかった、超高圧化での硫化水素超伝導体の第一原理計算があります。この研究は当時常行研の助教になったばかりの明石僚介さんらと共同で行ったもので、実験で観測された T_c の高い状態と低い状態が、それぞれどのような構造をしているのかシミュレーションで確かめてみようというものでした。明石さんは常行研に来る前、私とほぼ同じころに SCDFT の研究を始めていて、互いにある程度研究を進めて発表するようになるまで存在を知りませんでした。またこのとき、ある種の超伝導の発現において重要な、格子振動の計算をする中で着想を得て、ブリルアンゾーン内で状態和を取る時の数値積分方法に取り組みました。その縁でウーディネ大学のジャンノッジ先生を中心として開発されている第一原理計算コード「Quantum ESPRESSO」の開発メンバーに加わりました。

2015 年に博士号を取った後は、物性研の電子計算機室(現在では二つに分かれた内の大型計算機室)に新しくできたソフトウェア高度化推進チームのポスドクとして採用されました。このチームは物性研スパコンを、ハードウェアだけでなくソフトウェアの面でも使い勝手の良いものにすることを目指して設立されたもので、物性研究者が作った(もしくは作りたい)プログラムを高度化することを目的としています。この「高度化」とは単に速くする、機能を強化するという事だけでなく、あらゆる研究者が参画できるようオープンソースソフトウェアとして公開したり、マニュアルを作ったり、講習会を開催したりすることも含まれています。これを私と同時に採用された吉見さんをチームリーダーとする二人体制で行いました。吉見さんは物性研の加藤研出身で、高度化推進チーム設立前は構造計画研究所という IT 企業に勤めていたという異色の経歴の持ち主であり、高度化プロジェクトの進捗管理において辣腕をふるいました。高度化対象のプログラムは公募によって決まりますが、物性研スパコンを使うあらゆる分野の研究者が応募することが出来るため、とても視野を広げることが出来ました。このときに採用されたプログラムとして、数値局在基底を用いた第一原理計算コード「OpenMX」(開発者:尾崎先生)、量子格子モデルの厳密対角化コード「HΦ」(山地洋平さんと三澤貴洋さん)と変分モンテカルロ法コード「mVMC」(三澤さん)、動的平均場理論による計算コード「DCore」(品岡寛さん)などがあります。これらの方々に手取り足取り教えてもらいながら高度化を進めていきました。また、物性研内の他の研究室の方から研究のお誘いを頂き、長谷川先生らによる超伝導鉛探針を用いた固有伝導チャネル測定、バオジェ・フェンさんらによるホウ素単層物質「ボロフェン」におけるディラック電子の観測、平井大悟郎さんらによる可視光領域で多色性を示すレニウム化合物の合成、という共同研究に参加することが出来ました。

今後は、これまでいろいろな方々とやってきた研究を発展させていくとともに、新たなテーマにもチャレンジしていこうと考えています。近年大変な盛り上がりをみせている機械学習や、それを用いた物質探索を私がこれまでやってきた研究と組み合わせてやってみるとどうなるかというのが目下実行し始めているテーマです。これからも尾崎先生や研究室のメンバー、そして物性研の皆様と一緒に研究を楽しんでいく所存です。どうぞよろしくお願い致します。