

# 物性研究所に着任して

計算物質科学研究センター 三澤 貴宏

2023年4月1付で計算物質科学研究センターに特任准教授で着任しました、三澤貴宏と申します。どうぞよろしくお願いたします。実は、私は物性研に所属するのは、学生時代も含めて、これで三回目となります。三回も物性研に所属した人は珍しいと思いますので、その経緯についてすこし記したいと思います。

2004年に修士の学生として今田正俊先生の研究室に所属したのが最初でした。今はつくばエクスプレスも開通していて、柏の葉キャンパス駅からシャトルバスも出ているので、物性研への通学・通勤は非常に便利になっています。しかし、2004年当時は、つくばエクスプレスの開通前で、物性研に行くのはJR柏駅からバスで30分程度かかるなど、都心からのアクセスはかなり悪かった記憶があります。柏キャンパスの立地の悪さを表す言葉として、「Kashiwa is a sad place. LaLaport, and nothing.」というフレーズがネット上では有名ですが[1]、その当時は唯一の救い(?)ともいえるラレポートすらなかった時代でした。ただ、実際に物性研を訪れてみると、移設したばかりということもあって、色んな施設が新しく綺麗で、部屋も広々としていて、非常に良い印象を持ちました。また、数値計算に興味があったということもあって、様々なワークステーションや物性研スパコンが比較的容易に使える環境も魅力でした。こういうところで研究したいと思って、物性研を志望した記憶があります。実際に、修士の学生ときは大変ながらも非常に楽しく過ごすことができ、そのまま物性研で博士課程に進む気でした。しかし、指導教員の今田先生が本郷の理工学科に異動するというので、残念ながらたった2年で物性研を離れることになってしまいました。物性研を離れる際の送別会で、「物性研はいいところだったので、もっといたかったのに残念です」と言っていて、今田先生が困った顔をしていたような記憶があります。今から考えると、相当迷惑な学生だったのかなと思います。

2回目は、2016年に計算物質科学研究人材育成コンソーシアム(PCoMS)の主任研究員(PI)として着任したことでした。約10年ぶりに物性研究所に戻ることができて非常に嬉しかった記憶があります。研究の面では、このとき同じPCoMSのプロジェクトの主任研究員だった吉見一慶さ

んと強相関電子系を取り扱うソフトウェア開発・公開を本格的に始めました。開発を行った主なソフトウェアは厳密対角化のソフトウェア「HΦ」、多変数変分モンテカルロ法のソフトウェア「mVMC」、第一原理計算をもとに有効模型導出を行う「RESPACK」などがあります。また、PCoMSでは「滞在型研究」という他機関の研究室に、1年に1-2ヶ月程度滞在して、共同研究を行うというミッションがありました。滞在型研究の一つとして、当時、東北大学金属材料研究所におられた野村健太郎先生のところに滞在して、トポロジカル物質の量子輸送現象の研究を始めました。このとき、始めたトポロジカル物質の研究がきっかけとなって、いくつもの共同研究に繋がっていて、今の研究の柱の一つとなっています。このように、PCoMS時代の活動は、自分の研究の幅を広げることができた貴重な機会でした。研究以外では、学生のときはやってみようと思いつつ、結局できなかったテニスを再び物性研に戻ってきたことをきっかけに始めて、今でも続けています。

そのあと、紆余曲折がありまして、3回目として、またご縁があって物性研に戻ってきました。最後に、物性研で今後取り組んでいく研究の方向性について簡単に紹介したいと思います。前に少しふれましたように、吉見さんが率いるソフトウェア高度化プロジェクトの支援も受けて、強相関電子系に対する電子相関の効果を高精度に取り込める「強相関第一原理計算手法」を実行するソフトウェアの整備を進めています。この計算手法では、現実物質の格子構造を出発点にして第一原理計算をもとにして有効模型導出と、その有効模型解析を行うことで強相関電子系の電子状態を解析する計算手法です。従来の第一原理計算では取り扱うことが難しかった電子相関の効果を明示的に取り扱えるのがこの計算手法の利点となっています。この強相関第一原理計算手法を実行するソフトウェアを整備していくことで、今までの高々数個の物質に対して適用を行う段階から、幅広い物質群に対して網羅的な適用を行う段階へと発展させていくことを目論んでいます。このような網羅的解析を行うことで、高温超伝導・量子スピン液体・強相関トポロジカル物質などの新奇量子相を支配している微視的なパラメータ(記述子)を見出して、その知見をもとに、新奇

量子相の予言・制御を可能にする理論的基盤を築いていきたいと考えています。このような研究をすすめていく過程で、関連する実験の方々と議論・共同研究を行う事が得られれば幸いと考えています。どうぞ、よろしく願いいたします。

[1] このフレーズへの反論の記事を押川先生が書いていますので、そちらもご参照ください。

<https://www.u-tokyo.ac.jp/gen03/kouhou/1564/end.html>