X線回折実験とシミュレーションのデータ同化による結晶構造解析

東京大学大学院理学系研究科 藤堂眞治, 常行真司

Syngé TODO and Shinji TSUNEYUKI: Crystal Structure Analysis by Data Assimilation of X-ray Diffraction Experiment and Simulation

Prediction of crystal structure from the chemical composition has been a long-standing challenge in natural science. Although various numerical methods have been developed over the last decades, it remains still tricky to numerically predict crystal structures comprising more than several tens of atoms in the supercell. We propose a new “data assimilation” approach for crystal structure prediction from numerical simulations with support of X-ray diffraction experimental data. We show that even if the experimental data is insufficient for conventional structure analysis, it can still support and substantially accelerate structure simulation.

1. はじめに

近年, 第一原理電子状態計算手法の発達やスーパーコンピュータの性能向上により, 複雑な構造をもつ物質のシミュレーションが可能となってきた. また, シミュレーションソフトウェアのオープンソース化も進み, 専門家でなくとも手軽にシミュレーションを実行できる環境も整ってきている.¹⁾⁻⁴⁾ 原子配置 $\mathbf{R}$ が与えられると, モデル化された原子間ポテンシャル, あるいは密度汎関数理論に基づく第一原理電子構造計算により, 系の全エネルギー $E(\mathbf{R})$ を精密に計算することができる. 原理的には, 全エネルギーを最小化する原子配置 $\mathbf{R}$ を求めることで, 安定結晶構造が得られる. しかしながら, 複雑な物質の結晶構造を現実的な時間で予測することは, シミュレーション技術の発達した現代においても, 依然として非常に難しい問題である. その理由の1つに, 構造最適化に必要な時間スケールの問題がある. シミュレーションで得られる全エネルギーの多次元ランドスケープには非常に多くの局所最適点がある.⁵⁾ 通常の勾配降下法などでは, 簡単に局所最適に捕らわれてしまい, 大域的な最適点, すなわち真の結晶構造を見つけ出すには指数関数的に長い時間が必要となる(図1). この困難を解決するため, 「メタヒューリスティクス」と呼ばれるさまざまな最適化手法が開発されてきた. 代表的な手法としては, ランダムサーチ,⁶⁾ シミュレーテッドアニーリング,⁷⁾ 遺伝的アルゴリズム,⁸⁾ 粒子群最適化,^{9),10)} 交換モンテカルロ,¹¹⁾ ベイズ最適化¹²⁾ などが挙げられる.

一方, X線回折をはじめ, 物質の原子構造を調べるためのさまざまな回折実験技術が開発され, 固体物理や生

図1 X線回折実験とシミュレーションのデータ同化の概念図. (Concept of data assimilation of X-ray diffraction experiment and simulation.) 横軸は結晶中の原子配置 $\mathbf{R}$ を表す. シミュレーションで得られる全エネルギー $E(\mathbf{R})$ は多くの局所最適点をもつ(青線). データ同化手法では, 全エネルギーとX線回折ピークの実験との一致度 $D(\mathbf{R})$ を組み合わせたハイブリッドコスト関数 $F(\mathbf{R})$ を導入する(赤線). 2つのコスト関数の局所最適点の位置は大域最適点(オレンジ丸)を除いてまったく異なるので, 結果として局所最適点是不安定化し, 高い確率で正しい結晶構造予測が可能となる(文献17)より転載). 編集部注: カラーの図は電子版を参照下さい.

物化学など幅広い分野で不可欠なツールとなっている. 理論的には, 粉末X線回折パターンは, 物質中の電子密度のフーリエ変換の絶対値から計算される. この計算過程において, 結晶方位や位相の情報が欠落してしまうため, 実験で得られたX線回折パターンから原子構造を一意に再現することはできない. これまで, 粉末X線回折結果の解析には, 直接空間法^{13),14)} が広く使われてきた. この手法では, 原子位置を少しずつ動かし, 実験結果に近いX線回折パターンを探すことで構造最適化を行う. パターンの「近さ」を表す代表的な指標として, R 因子

$$R = \frac{\int |I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R}) - I_{\text{exp}}(\theta)| d\theta}{\int |I_{\text{exp}}(\theta)| d\theta} \quad (1)$$

が挙げられる。ここで、 $I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R})$ は原子配置 $\mathbf{R}$ から理論的に計算される X 線回折パターン、 $I_{\text{exp}}(\theta)$ は実験で得られた X 線回折パターンを表す。しかし、この R 因子も、2 つの原子が同じ場所を専有した状態など非常に多くの局所最適点をもつため、原子間の有効的な斥力など何らかの正則化項を導入することが必要である。^{15),16)} さらに、回折強度が弱い、解像度が低い、バックグラウンドノイズが多い、測定角度が限られているなど、実験による回折データが不十分な場合は、構造予測はさらに困難となる。

シミュレーションと粉末 X 線回折パターンからの結晶構造予測の両者に共通するのは、どちらも順方向の計算（原子配置からの全エネルギーや回折パターンの計算）は比較的容易であるが、逆方向（全エネルギーや回折パターンからの構造予測）は非常に難しいという点である。このような順問題と逆問題の非対称性は、結晶構造予測に限らず、幅広い分野において普遍的に見られる課題である。最近われわれは、X 線回折実験データとシミュレーションの「データ同化」による、結晶構造予測のための新しいアプローチを提案した。^{17),18)} この手法では、シミュレーションにより計算される全エネルギーと X 線回折パターンとの一致度から定義されるハイブリッドコスト関数を最適化する。性質のまったく異なる複数のコスト関数を組み合わせることで、実験データが不十分で従来の構造解析を行うことができないような場合においても、結晶構造予測の精度を大幅に向上することができる。本稿では、「データ同化」の考え方について簡単に触れた後、 SiO_2 の多形の結晶構造予測への適用例¹⁷⁾を紹介する。また、複数のコスト関数を同時に最適化するための新しい最適化手法¹⁸⁾についても解説する。

2. データ同化とは？

「データ同化」は気象・気候のシミュレーションにおいて最初に導入された考え方である。¹⁹⁾ 気象予測（天気予報）は年々正確になってきているが、この精度向上においてもシミュレーションは大きな役割を果たしている。現代のスーパーコンピュータを用いると、非常に細かな空間メッシュで長時間のシミュレーションが可能となる。シミュレーションには、正確な初期条件や境界条件（ある時刻における温度や気圧、風速など）が必要であるが、すべてのメッシュ上の初期条件を正確に知ることは原理的に不可能である。加えて、気象シミュレーションの数値モデルは、初期条件やモデルパラメータに非常に敏感であり（バタフライ効果）、わずかな不確定性が計算結果に大きな誤差を生じる。一方、実際の観測データは、それぞれの測定点において時々刻々と変化する物理量を正確に測定することができる。しかしなが

ら、シミュレーションで用いるメッシュと比較すると、観測可能な点の数は非常に限られている。これらの性質や精度のまったく異なるデータを組み合わせることで、初期状態やシミュレーションモデルのパラメータにおける不確定性を減らし、気象予測の精度を高める数値的手法がデータ同化である。

データ同化の本質は、ベイズ推定に基づく統計的機械学習にある。まず、条件付き確率に関するベイズの定理

$$p(x|y) = \frac{p(y|x)p(x)}{p(y)} \quad (2)$$

を考える。式(2)において、分母は単なる正規化定数であるので、しばしば省略される。ベイズ統計では、この条件付き確率の式を以下のように解釈する。 x は初期条件やモデルのパラメータなどの未知パラメータを表す。ベイズ統計では、 x は確定した値ではなくある分布に従って変動する量として考える。 y は観測データであり、ベイズ統計ではすでに確定したものとする。右辺の $p(x)$ は事前確率と呼ばれる確率分布であり、未知パラメータに関するわれわれの何らかの事前知識を表す。次に、 $p(y|x)$ は本来、初期条件 x からのシミュレーションにより物理量 y が得られる確率を表すが、ベイズ推定では y はすでに確定した観測データであるので、 x の関数と解釈する。尤度と呼び $l(x|y)$ とも書く。事前分布と尤度の積で与えられる $p(x|y)$ は、観測データ y が得られたときの初期条件 x の確からしさを示す確率分布であり、事後確率と呼ばれる。このように、事前確率に尤度を掛けていくことで、一般的にはより鋭い事後分布が得られることになる。言い換えると、観測により追加の知識が得られることで、未知パラメータ x に関する不確定性を減らすことができる。

3. 結晶構造解析への適用

前節で説明したデータ同化の考え方を、結晶構造解析に当てはめてみよう。

われわれの知りたい量（未知パラメータ）は、結晶構造における原子配置 $\mathbf{R}$ である。超格子に含まれる原子の数を N とすると、 $\mathbf{R}$ は $3(N-1)$ 次元のベクトルである。まず、 $\mathbf{R}$ の事前分布として、シミュレーションで得られる全エネルギー $E(\mathbf{R})$ を用いて、 $\exp[-\beta E(\mathbf{R})]$ の形を仮定する（ β は不確定性の度合いを表す定数）。この事前分布は、全エネルギーが最小となる点で最大確率をとるが、それ以外の多数のエネルギー準安定状態においても極大をとる多峰分布となっている。一方、測定値 y は、実験で得られた X 線回折データ $I_{\text{exp}}(\theta)$ である。尤度 $p(I_{\text{exp}}(\theta)|\mathbf{R})$ は本来、 $\mathbf{R}$ が与えられた下で $I_{\text{exp}}(\theta)$ が得られる確率として定義される。この確率分布は、 $\mathbf{R}$ から理論的に計算される回折強度 $I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R})$ の近くで大きな値をとる分布であるべきである。したがって、 $I_{\text{exp}}(\theta)$ と $I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R})$ の「近さ」を表す何

らかのパナルティー汎関数 $D[I_{\text{exp}}(\theta), I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R})]$ を導入し、 $p(I_{\text{exp}}(\theta) | \mathbf{R}) = \exp\{-\gamma D[I_{\text{exp}}(\theta), I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R})]\}$ のような形で表すことにする (γ はある定数)。データ同化においては、 $I_{\text{exp}}(\theta)$ は実験によりすでに確定した量であるので、 $D[I_{\text{exp}}(\theta), I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R})]$ は、 $\mathbf{R}$ だけの関数であることに注意する。この尤度も凸関数ではなく多数の極大をもつ。

以上のように定義した事前確率と尤度をベイズの定理に代入すると、 $\mathbf{R}$ に関する事後確率

$$\begin{aligned} p(\mathbf{R} | I_{\text{exp}}(\theta)) &\propto \exp\{-\beta E(\mathbf{R}) - \gamma D[I_{\text{exp}}(\theta), I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R})]\} \\ &= \exp\{-\beta[E(\mathbf{R}) + \alpha ND(\mathbf{R})]\} \end{aligned} \quad (3)$$

が得られる。ここで、 $E(\mathbf{R})$ と $D(\mathbf{R})$ (定義は以下で与える) がそれぞれ、 $O(N)$ 、 $O(1)$ の量であることを考慮に入れ、重み係数 $\alpha = \gamma/\beta N$ を導入した。

この事後確率を最大にするには、 $F(\mathbf{R}) \equiv E(\mathbf{R}) + \alpha ND(\mathbf{R})$ を最小にする $\mathbf{R}$ を求めればよい。これを最大事後確率 (MAP) 推定と呼ぶ。事前分布と尤度は、ともに正しい結晶構造で最大値をとる。それ以外にも両者は多数の極大値をもつが、事前分布 (= 全エネルギー) は近距離の構造を、尤度 (= 実験との一致度) は長距離の周期構造を反映した量であるため、局所最適点の分布はまったく異なると期待できる。したがって、それらを掛け合わせた事後分布では、正しい結晶構造に対応した大域最適点のみが強調され、より効率的に正しい結晶構造を探索することが可能となる (図1)。

次に、実験データとの一致度を表すパナルティー汎関数をどう構成するかについて考えよう。これまで、 R 因子 [式 (1)] が広く用いられてきたが、実験データが不完全な場合にもロバストに使える指標として、以下で定義される「結晶化度」 $\lambda(\mathbf{R})$ を導入する。

$$\lambda(\mathbf{R}) = \frac{\sum_{\theta_{\text{obs}}}^{\theta_{\text{obs}} + \Delta} I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R}) d\theta}{\int I_{\text{calc}}(\theta; \mathbf{R}) d\theta} \quad (4)$$

ここで、分母は原子位置 $\mathbf{R}$ から計算された回折強度の和、分子はこの回折パターンのうち、実験で観測されているピークと角度が一致するものだけについての和になっている。結晶化度の計算には、実験で得られたピークの位置のみを使い、その強度情報は利用しない。そのため、実験データのノイズやバックグラウンドの影響をうけず、実験データが不完全な場合においても、安定した解析が可能となる。計算により得られたピークの位置が実験のものと完全に一致する場合には $\lambda(\mathbf{R}) = 1$ 、一致しないものがある場合には1よりも小さな非負の値をとる。この $\lambda(\mathbf{R})$ を用いて、パナルティー汎関数を $D(\mathbf{R}) = 1 - \lambda(\mathbf{R})$ と定義する。

図2に、 SiO_2 多形の1つであるコーサイトに対してデータ同化結晶構造予測手法を適用した結果を示す。コーサイトの空間群は $C2/c$ である。結晶の対称性は非常に低

図2 コーサイトに対する構造最適化。(Structure optimization for coesite.) 全エネルギー $E(\mathbf{R})$ のみを最適化した場合 (黒線) には、結晶化度 [式 (4)] の値は0.4程度と低い値に留まる。一方で、X線回折ピークの実験との一致度 $D(\mathbf{R})$ と組み合わせたハイブリッドコスト関数を最適化すると、結晶化度はほぼ1まで上昇し、実験結果と一致する長周期構造が実現されていることがわかる。

く、単位格子に48原子を含む複雑な構造をもっている。計算には96原子を含む、 $2 \times 1 \times 1$ のサイズの超格子を用い、温度5000 Kからのシミュレートドアニーリングにより最適化を行った。全エネルギー $E(\mathbf{R})$ のみを最適化した場合 (黒線) には、結晶化度 [式 (4)] の値は0.4程度と低い値に留まっており、局所的に正しい構造が得られているものの、正しい周期をもたないアモルファス的な構造に捕らわれてしまっていることが見てとれる。一方で、X線回折ピークの実験との一致度 $D(\mathbf{R})$ と組み合わせたハイブリッドコスト関数を最適化すると、結晶化度はほぼ1まで上昇し、最終的に実験結果と一致する長周期構造が得られていることがわかる。

実際の構造予測精度 (図3) は、重み係数 α の選び方に大きく依存しており、 α の値が小さすぎても大きすぎても予測精度は低下する。局所最適と大域最適との間のエネルギーバリアを超えるには、コスト関数の第2項 $\alpha ND(\mathbf{R})$ の大きさが、バリアの高さの数倍程度になるような α の値を調整する必要がある。バリアの高さは、結晶の融点を T_m とすると、 $\frac{3}{2} N k_B T_m$ 程度と見積もることができる。一方、局所最適構造における $D(\mathbf{R}) = 1 - \lambda(\mathbf{R})$ の大きさは典型的には2/3程度である (図2)。この両者が釣り合うのは、 $\frac{4\alpha}{9k_B} = T_m$ のときである。われわれのシミュレーションでは、 $\frac{4\alpha}{9k_B}$ を T_m の4倍程度に選んだ場合に、予測効率が最大となっており (図3)、上記の見積もりが正しいことが確認できる。図4に $\frac{4\alpha}{9k_B} = 4T_m$ の場合の最適化の様子を示す。実験データとの一致度と組み合わせたハイブリッドコスト関数は、ほぼ単調に減少しているが、全エネルギーはいったん上昇し、その後正しい結晶構造にたどり着いていることがわかる。このように、正しい重み係数を選択することで、局所最適から抜け出し、高い確率で大域最適点にたどり着くことが可能となる。

図3 コーサイトに対するデータ同化構造最適化により得られた最終的な結晶構造の全エネルギー分布。(Total energy distribution of final crystal structure obtained by data-assimilation structure optimization for coesite.) 全エネルギーのみを最適化した場合 ($\alpha = 0$), 2,500回の試行においても正しい結晶構造は1回も得られない。重みパラメータ α の値を大きくしていくと、徐々に正しい結晶構造(赤)が得られるようになる。 $4\alpha/9k_B$ が融点の数倍程度するとき、最も高い確率で正しい結晶構造にたどり着くことがわかる(文献17)より転載)。編集部注：カラーの図は電子版を参照下さい。

図4 データ同化構造最適化における結晶化度と全エネルギーの時間発展。(Time evolution of crystallinity and total energy during data-assimilation structure optimization.) 青点線が全エネルギーを表す。左下の準安定状態が出发点である。ハイブリッドコスト関数(赤線)を最適化することで、ポテンシャルの壁を超え、右下の正しい結晶構造にたどり着くことができる(文献17)より転載)。編集部注：カラーの図は電子版を参照下さい。

4. 新しい同時最適化手法

前節では、データ同化の考え方に基づいたハイブリッドコスト関数に対してシミュレーテッドアニーリングを用いて最適化を行った。通常の同時最適化では、複数のコスト関数を足し合わせた関数の最適点を探索する。しかしながら、われわれがここで考えているコスト関数は、通常の同時最適化とは質的に異なる特性を備えて

図5 新しい同時最適化手法(COM)の概念図。(Concept of combined optimization method(COM).) この最適化手法では、コスト関数の和(灰色点線)の最小点を探索するかわりに、複数のコスト関数(赤実線と青点線)に共通する極小点(中央の黒丸)を探索する。通常の勾配降下法(GD: Gradient Descent)では、足し合わせたコスト関数の極小点(左上の黒丸)に捕らわれてしまう。一方、COMでは、2つのコスト関数の勾配を分けて扱う。両者の符号が揃っている場合には、勾配の方向に進むが、どちらかの符号が反転した場合も、それまでの方向に進み続ける。一方、両者の符号が同時に反転した場合には、その軸に対する進む方向を反転し、さらに全体のステップ幅を小さくすることで、共通する極小点のまわりで減衰振動していく。このように、COMでは、局所最適点に捕らわれることなく、共通する極小点にたどり着くことが可能である(文献18)より転載)。編集部注：カラーの図は電子版を参照下さい。

いる。すなわち、2つのコスト関数は共通の大域最適点(=正しい結晶構造)をもつが、一方で、局所最適点の分布はまったく異なっている。この特性を考慮に入れ、われわれは新しい同時最適化の手法(COM: Combined Optimization Method)を提案した¹⁸⁾。この手法の概念を図5に示す。この最適化手法では、コスト関数の和の最小点を探索するかわりに、複数のコスト関数に共通する極小点を探索する。すなわち、それぞれのコスト関数の値そのものではなく、勾配の情報のみを用いる。すべてのコスト関数の勾配の符号が反転した場合に限って、最適化の方向を反転する。このように、記憶効果を取り入れることで、それぞれのコスト関数の局所最適点に捕らわれることなく、抜け出すことが可能となる。また、すべてのコスト関数に共通する極小点にたどり着いたときのみ、最適化は停止する。

図6に、 SiO_2 のまた別の多形である低温型クリストバライト(空間群 $P4_12_12$, 単位格子は12原子からなる)に対するデータ同化構造最適化により得られた最終的な結晶構造の全エネルギー分布を示す。計算には48原子を含む、 $2 \times 2 \times 1$ のサイズの超格子を用いた。コスト関数の和に対してシミュレーテッドアニーリングを使う場合と比べて、新しい最適化手法を使うことで、成功確率が

図6 低温型クリストバライトに対するデータ同化構造最適化により得られた最終的な結晶構造の全エネルギー分布。(Total energy distribution of final crystal structure obtained by data-assimilation optimization for low cristobalite.) コスト関数の和に対してシミュレーテッドアニーリングを使う場合(上)と比べて、COMを使う(下)ことで、成功確率が6倍以上向上する(文献18)より転載)。

大幅に向上していることが見てとれる。このように、ハイブリッドコスト関数の特性を反映した新しい最適化手法を導入することで、メタヒューリスティクスに頼らずとも結晶構造予測の精度を高めることが可能となった。

5. おわりに

本稿では、X線回折実験データとシミュレーションのデータ同化による、結晶構造予測のための新しいアプローチを紹介した^{17),18)}性質のまったくことなる複数のコスト関数を組み合わせることで、実験データが不十分で従来の構造解析を行うことができないような場合においても、結晶構造予測の精度を大幅に向上させることができる。われわれは、 SiO_2 のさまざまな多形以外にも、磁石材料や硫化水素高温超伝導、分子結晶などさまざまな物質にこの手法の適用を進めている。本提案手法は、バルク結晶だけではなく、表面や界面、不純物にも応用可能である。さらに、X線・中性子などの回折データだけではなく、NMRやXPSなどの分光学的データ、TEMなどの実空間データなど、あらゆる実験データとの組み合わせも考えられる。ベイズ推定に基づくデータ同化では、まったく質の異なる複数のデータをその情報量に応じて柔軟に組み合わせ、その予測精度を大幅に向上させることができる。今後、先端的な計算物質科学シミュレーションやさまざまな実験データを「部品」としてモジュール化し、最新のデータ科学の手法により組み合わせしていくことで、これまで不可能であった物質の構造予測や物性予測などが進んでいくことが期待される。

本稿で紹介した内容は、辻本直人氏、足立大樹氏、明石瞭介氏との共同研究に基づくものです。

文 献

- 1) 物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/>
- 2) Y. Konishi, *et al.*: *JPS Conf. Proc.* **5**, 011007 (2015).
- 3) 本山裕一, 三澤貴宏, 加藤岳生, 藤堂眞治: 固体物理 **52**, 743 (2017).
- 4) 井戸康太, 加藤岳生, 三澤貴宏, 藤堂眞治: アンサンブル **22**, 74 (2020).
- 5) C. W. Glass, A. R. Oganov and N. Hansen: *Comp. Phys. Comm.* **175**, 713 (2006).
- 6) L. Rastrigin: *Automation and Remote Control* **24**, 1337 (1963).
- 7) S. Kirkpatrick, C. Gelatt Jr. and M. Vecchi: *Science* **220**, 671 (1983).
- 8) J. Holland: *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, Univ. of Michigan Press (1975).
- 9) J. Kennedy and R. Eberhart: *Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks IV*, 1942 (1995).
- 10) Y. Shi and R. Eberhart: *Proceedings of IEEE International Conference on Evolutionary Computation*, 69 (1998).
- 11) K. Hukushima and K. Nemoto: *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1604 (1996).
- 12) J. Mockus: *Proceedings of the IFIP Technical Conference*, 400 (1974).
- 13) R. Černý and V. Fbavre-Nicolin: *Z. Kristallogr.* **222**, 105 (2007).
- 14) P. Gao, Q. Tong, J. Lv, Y. Wang and Y. Ma: *Comp. Phys. Comm.* **213**, 40 (2017).
- 15) H. Putz, J. C. Schön and M. Jansen: *J. Appl. Cryst.* **32**, 864 (1999).
- 16) O. J. Lanning, *et al.*: *Chem. Phys. Lett.* **317**, 296 (2000).
- 17) N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo and S. Tsuneyuki: *Phys. Rev. Mater.* **2**, 053801 (2018).
- 18) D. Adachi, N. Tsujimoto, R. Akashi, S. Todo and S. Tsuneyuki: *Comp. Phys. Comm.* **241**, 92 (2019).
- 19) 樋口知之: データ同化入門, 朝倉書店 (2011).

プロフィール

藤堂眞治 Syngé TODO
 東京大学大学院理学系研究科
 Department of Physics, The University of Tokyo
 〒113-0033 東京都文京区本郷7-3-1
 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan
 e-mail: wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp
 最終学歴: 東京大学大学院理学系研究科博士課程終了, 博士(理学)
 専門分野: 計算物理学, 統計物理学
 現在の研究テーマ: 強相関量子多体系のためのシミュレーション手法開発, 量子相転移, 量子ダイナミクス, 統計的機械学習による物質科学, オープンソースソフトウェア開発

常行真司 Shinji TSUNEYUKI
 東京大学大学院理学系研究科
 Department of Physics, The University of Tokyo
 〒113-0033 東京都文京区本郷7-3-1
 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan
 e-mail: stsune@phys.s.u-tokyo.ac.jp
 最終学歴: 東京大学大学院理学系研究科修士課程修了, 理学博士
 専門分野: 物性理論, 計算物質科学
 現在の研究テーマ: 第一原理電子状態計算手法の開発, 高圧下の物性, 表面・界面物性, 固体中の水素, 強誘電体, 超伝導, 熱伝導など