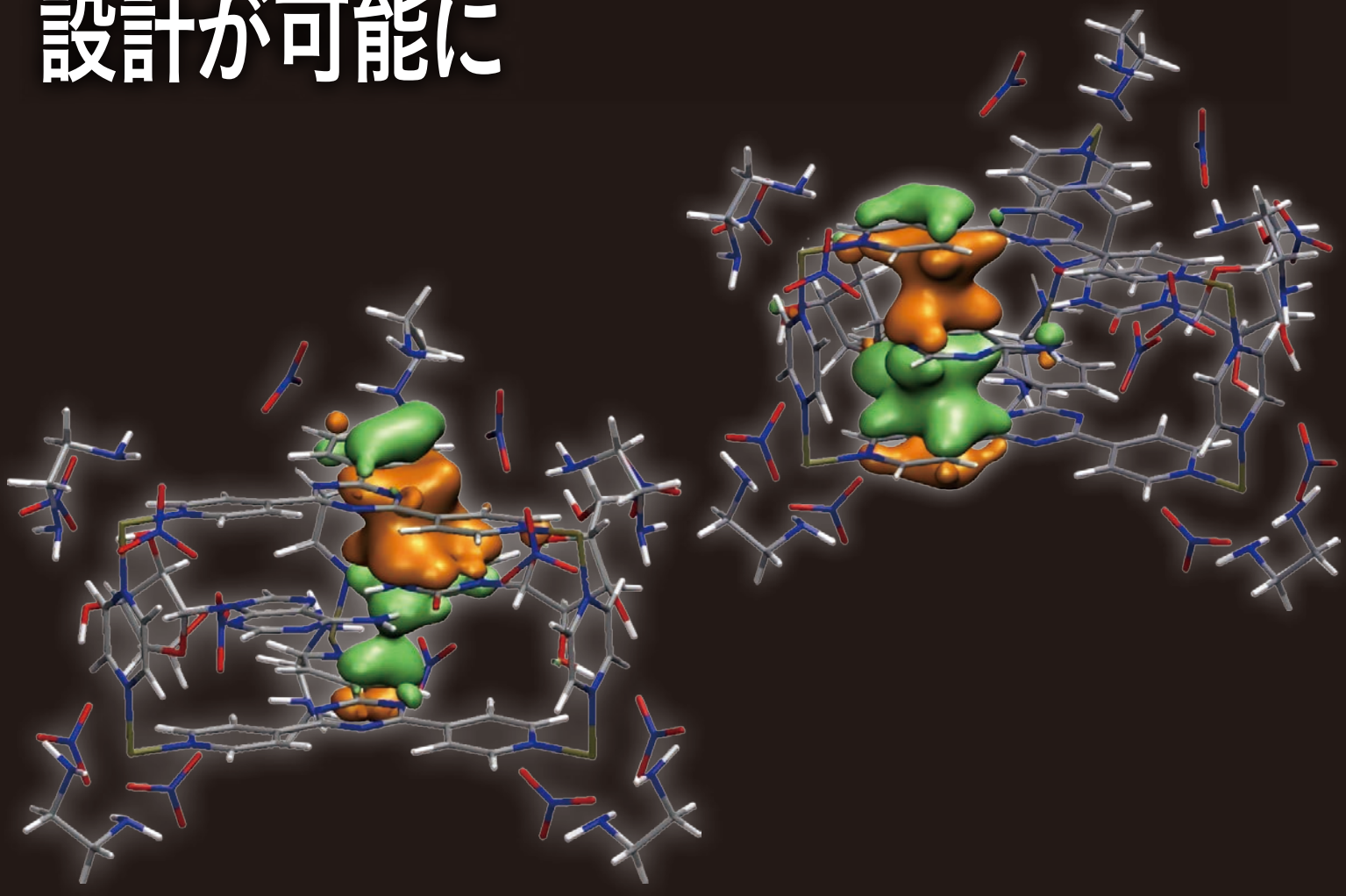
京
K computer

シミュレーションが
未来をひらく

計算科学の世界

K computer Newsletter
March 2019 NO. 18

シミュレーションで物質の性質を予測
理論分子科学で新たな材料の設計が可能に



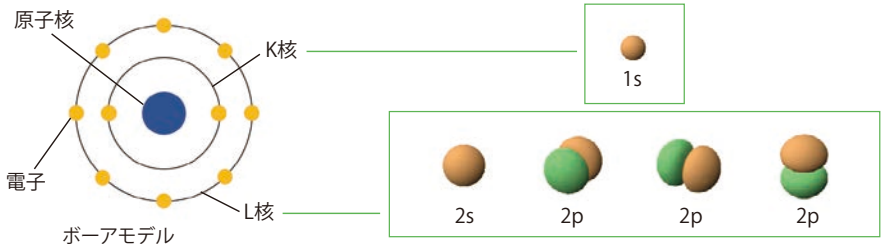
理化学研究所
計算科学研究センター
RIKEN Center for Computational Science

シミュレーションで物質の性質を予測
理論分子科学で新たな材料の設計が可能に

中嶋 隆人　Takahito Nakajima
理化学研究所 計算科学研究センター 量子系分子科学研究チーム
チームリーダー

a　原子を量子力学で見ると・・

原子の中の電子は、K殻、L殻、M殻・・に入ると説明されることもある（ボーアモデル）が、量子力学によれば、電子の位置は決めることができず、ある位置に電子が存在する確率だけがわかる。電子が存在する可能性のある範囲は、波動方程式を解くと得られ、「原子軌道」と呼ばれる。原子軌道にはs軌道、p軌道、d軌道などがあり、K殻、L殻、M殻・・との対応関係がある。

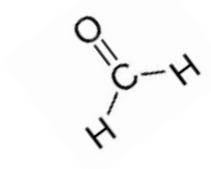


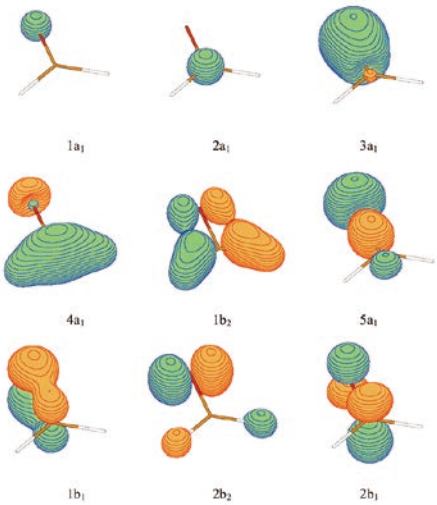
原子軌道（雲のようなものが、
1つ1つの電子の存在しうる範囲を表す）

b　分子軌道法とは？

分子の中の電子の存在状態も、波動方程式を解くと得られるが、原子よりも計算はずっと複雑になる。このため、分子を構成している原子の原子軌道を足し合わせて「分子軌道」をつくり、これを利用して、計算を行う。

（例）ホルムアルデヒドの分子軌道





炭素原子（C）の1s、2s、2p軌道、酸素原子（O）の1s、2s、2p軌道、水素原子（H）の1s軌道をさまざまに足し合わせてつくったもの。エネルギーはそれぞれ異なる。これらを出発点として計算を行い、軌道の形とエネルギーの値を精密化していく。
電子はエネルギーの低い軌道から順に1個ずつ入っていく。どのような形で、どのぐらいのエネルギーをもつ分子軌道に電子が入っているかによって、分子の形や性質、反応の仕方などが決まる。

図1　量子力学に基づく原子や分子の姿

化学ときくと、反応や分析の実験を思い浮かべる人が多いことでしょう。
しかし、中嶋さんは、フラスコや分析装置ではなく、スパコンを使います。
理論に基づいてシミュレーションを行い、
さまざまな分子の性質や反応の仕方を予測しているのです。
このような研究は、優れた材料を合理的に設計するのに役立ちます。

分子を扱う理論の基本は量子力学

私たちの身の回りには数え切れないほどの種類の物質があります。そして、多くの物質の基本単位は分子です。天然の元素は90種類ほどですが、それらの元素の原子が結合することで、多様な分子ができあがっています。分子の形と性質はどのように決まるのか――化学者は、昔からこの問題に取り組んできました。

この問題を理論的にきちんと扱えるようになったのは、1920年代に量子力学が誕生してからです。原子や分子のように小さなものの振る舞いは、量子力学に従うからです（図1）。量子力学に基づいて原子や分子を研究する学問分野を「量子化学」と呼びます。

「理論的には、分子について量子力学の方程式（波動方程式）を解けば、分子の形や性質、さらには反応までも明らかにできるはずです」と中嶋さんは説明します。しかし、分子の波動方程式を正確に解くことができるのは特殊な場合だけである上に、解くための計算は非常に複雑です。そこで、この困難を乗り越えるため、量子化学の研究者はさまざまな方法を考案してきました。

その1つが、「分子軌道法」です（図1b）。「この方法は、アメリカのロバート・マリケンらによって1920年代後半から30年代前半にかけて考案されたもので、分子を構成する個々の原子の原子軌道を足し合わせた『分子軌道』というものを考えます。分子軌道を利用することで、正確さをある程度保ちながら、比較的簡単に波動方程式を解くことができるのです」

分子軌道法は長年にわたって研究されて

中嶋 隆人 理化学研究所 計算科学研究センター
量子系分子科学研究チーム チームリーダー

撮影：古末拓也

きましたが、「ここ15年ほどの間に、計算手法とコンピュータが非常に進歩し、計算できる分子の大きさも、計算の信頼性も飛躍的に向上しました」。そう語る中嶋さん自身も、この間の進歩に貢献してきた研究者の一人です。

中嶋さんは、分子軌道法を、より大きく、より複雑な分子に適用し、より深く（より精度よく）計算することを目標として研究を行っています。この目標に向けて、新たな理論を構築し、その理論に基づいて計算を行うためのソフトウェア「NTChem」を自分たちの手で一から開発してきました。NTChemは、扱う原子の数が増えても計算速度が落ちにくいという特徴を備えており、「京」を使った計算でさまざまな成果をあげています。

ここでは、その一部をご紹介した後、ポスト「京」に向けて中嶋さんが新たに取り組んでいる研究もご紹介しましょう。

大きなフラーレンの性質を予測

サッカーボール型の分子として有名なC_{60}フラーレン。半導体の材料や、ドラッグデリバリーへの応用（薬を体内で目的の場所に運ぶ際の入れ物とする）に向けてさかんに研究が行われています。また、60個よりも多い炭素原子が、C_{60}と同様にかご状につながった高次フラーレンも次々に合成され、さらに応用が広がるものと期待されています。

中嶋さんたちは2016年に、C_{60}と9種類の高次フラーレン（C_{70}、C_{76}、C_{78}、C_{84}、C_{90}、C_{96}、C_{180}、C_{240}、C_{320}）の生成熱を計算しました。例えば、C_{60}の生成熱とは、ばらばらの炭素原子60個と、C_{60}フラーレン分子がもつエネルギーの差のことです。生成熱はフラーレン分子がどれだけ安定かを示す指標となるので、応用を研究する際にも重要な情報となります。

生成熱は実験でも求めることができますが、精密な測定は難しく、また、炭素原子が100を超えるようなフラーレンはまだ合成されていません。一方、これまでの量子化学計算では、原子数が多い上に特殊な形状をとっているフラーレンの生成熱を正確に計算することは困難でした。中嶋さんたちは、NTChemを使ってこの計算に取り組んだのです。

計算の結果、フラーレンをつくる炭素原子の数が増えるほど、生成熱は低くなることがわかりました（図2）。「フラーレンの五角形をつくっている炭素どうしの結合は不安定なため、五角形の割合が多いC_{60}フラーレンの生成熱は高いのですが、炭素原子の数が増すと五角形の割合が下がるため、生成熱は下がっていくのです」と、中嶋さんはその理由を説明します。

中嶋さんたちは、炭素原子が増えていけば、グラフェン（炭素原子が六角形の網目のようにつながった平面状の分子）の生成

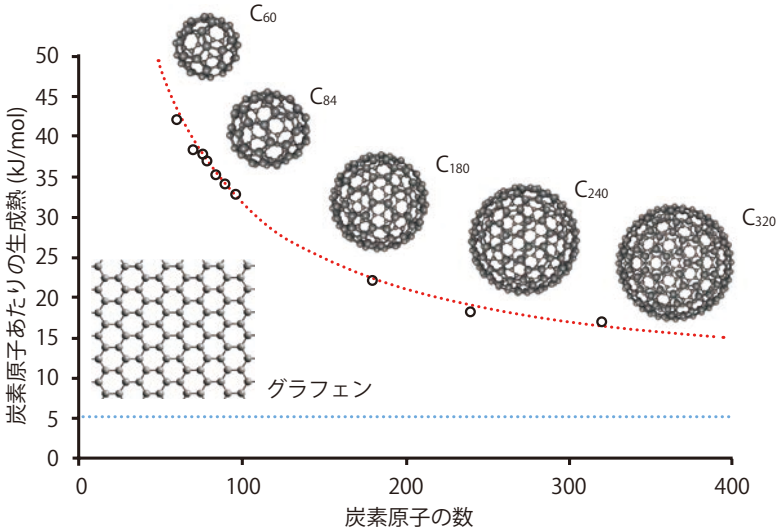
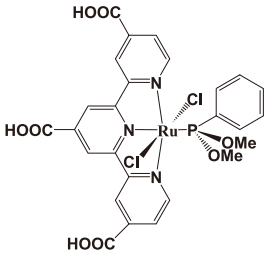


図2　さまざまなフラーレンの生成熱

C_{60}、C_{70}、C_{76}、C_{78}、C_{84}、C_{90}、C_{96}、C_{180}、C_{240}、C_{320}の生成熱を計算した。計算結果を○で示してある。○をつなぐように求めた赤い点線を用いると、さまざまなサイズのフラーレンの生成熱を見積もることができる。青い点線はグラフェンの生成熱。赤い点線の先が青い点線に近づくには、フラーレンの炭素数がかなり多くなる必要があることがわかる。
Chan, Kawashima, Katouda, Nakajima, Hirao, JACS, 138, 1420 (2016).



DX1色素の構造

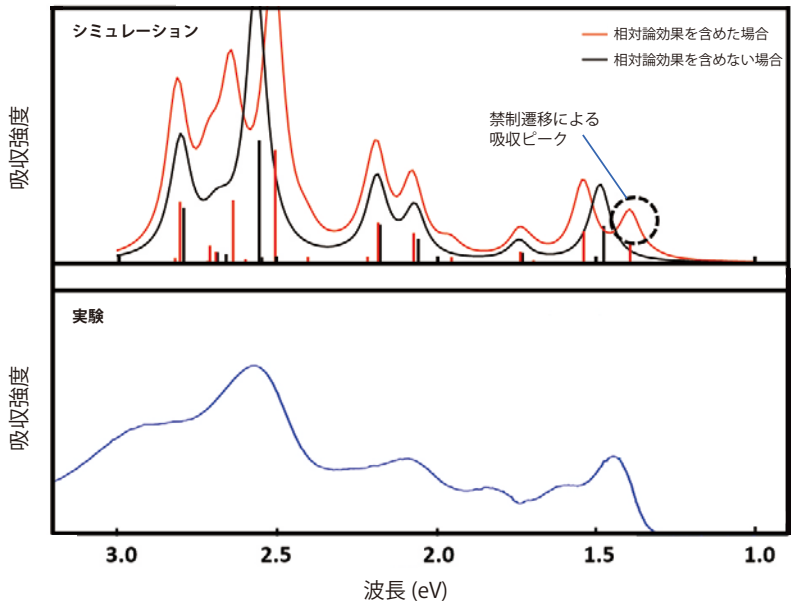


図3　DX1色素の光吸収メカニズムの解明
グラフは、DX1色素の光吸収スペクトル（光の吸収強度を、波長ごとに測定したもの）。横軸は、3.0eVが約400nm、2.0eVが約600nm、1.5eVが約800nmに相当する。相対論効果を採り入れたシミュレーションで得られたスペクトルには、禁制遷移による吸収ピークが現れている。このピークは実験で得られたスペクトルでも、ほぼ同じ波長のところに見られ、実験をよく再現している。このことから、DX1色素の長波長側の吸収は、相対論効果によるものであることが明らかとなった。この結果から、新たな色素分子を設計するときには、相対論効果をうまく利用できる構造を考えるとよいことがわかる。
Imamura, Kamiya, Nakajima, CPL 635, 152 (2015).

熱に近づくのではないかと予想していましたが、C_{320}フラーレンでも、グラフェンよりずっと生成熱が高い（不安定である）ことがわかりました。「このように、まだ合成されていない分子の性質もきちんと予測できることが、私たちの計算の強みです」

太陽電池に用いる色素を合理的に設計する

中嶋さんたちは、色素増感太陽電池に用いる色素の分子についても、計算を行いました。色素増感太陽電池は、色素を塗った酸化チタン電極に太陽光をあてて電子を発生させ、その電子を外部に取り出すしくみの電池で、発電効率向上のためには、太陽光をできるだけ効率よく吸収する色素の開発が必要です。

中嶋さんは、東京大学の瀬川浩司教授が開発したDX1という色素に注目しました。DX1色素は、ルテニウム（Ru）原子の周りに有機分子が集まった「金属錯体」の1つで、従来の色素よりも長い波長の光まで吸収することができます。

一般に、色素が光を吸収するときは、色素中の電子が、エネルギーの低い分子軌道から、高い分子軌道へと移ります。これを「遷移」と呼びます。実は、DX1色素が長波長の光を吸収するのは、遷移のうちでも「禁制遷移」が起こるためだと考えられています。「禁制」とは、「量子力学のルールにより、電子が移れない分子軌道の組み合わせ」であることを意味しますが、実際には遷移が起こります。

「禁制遷移が起こるのは、相対論効果によるものです。ルテニウムのように重い原子は相対論効果が大きく、相対論効果を考えないときは禁止されている遷移も起こるようになるのです。これを、スピン・軌道効果と言います」。中嶋さんたちは、NTChemで相対論効果を採り入れた分子軌道法の計算を行い、禁制遷移による吸収が起こること、その波長は実際の吸収波長に近いことを確かめました（図3）。

「この結果には2つの意味があります。1つは、長波長の光吸収のメカニズムを理論的に明らかにできたので、それに基づいて、よりよく長波長光を吸収する色素を設計することが可能になったということです。そして、もう1つは、相対論効果を採り入れることで、重い原子の入った分子の電子状態を精密に計算できるようになり、分子軌道法の適用範囲が広がったということです」と、中嶋さんは解説してくれました。

多数の組み合わせの中から目的に合ったものを選び出す

中嶋さんは「シミュレーションによるスクリーニング」にも取り組んでいます。

ある機能をもつ化合物が知られている場合、その化合物の中の元素を、周期表の上下にある元素や、左右にある元素と置き換えることで、さらに機能の優れた化合物が生まれる可能性があります。しかし、実際に化合物を合成してその機能を確かめるのはとても大変です。そこで、中嶋さんたちは、元素を入れ換えた化合物をスパコンの中でたくさんつくり、それぞれの性質をシミュレーションで調べて、有望な候補を見つけることにしました。

適用例の1つは光触媒です。光触媒は光を吸収し、そのエネルギーで水を酸素と水素に分解する働きをします。太陽光を用いて、水から、クリーンなエネルギーである水素をつくりだせれば、エネルギー問題や環境問題の解決につながることから、研究開発が精力的に進められています。しかし、太陽光で水を効率よく分解できる光触媒はまだ見つかっていません。

「私たちは、ペロブスカイトという種類の化合物をもとに、元素の入れ替えを行い、29,160個の化合物をスパコンの中でつくりました。そして、それらの化合物のさまざまな性質を計算し、太陽光で水を分解するのに必要な条件を満たすものを選び出しました。候補として残ったのは42個の化合物でしたが、さらに、安価な元素を含むという条件を加えたところ、候補は6個に絞り込まれました（図4）。これらの化合物は、まだ合成されていませんが、一部は既存の化合物と似た構造をもつことから、合成は比較的容易だと思われます」

材料設計を合理的に進めるための画期的な方法に見えますが、中嶋さんは、これで満足しているわけではありません。この方法では、光触媒の候補は見つかります

が、その候補がどのぐらいの効率で水を分解するかはわからないからです。このため、中嶋さんたちは、シミュレーション結果だけでなく、実験結果も加えたデータベースを構築し、人工知能（AI）を活用して、目指す効率をもつ化合物を選び出す方法を開発中です。

「この方法の精度を高めるためには、シミュレーションをもっと活用することが必要になると思います。AIを用いて、理論と実験とシミュレーションを一体にすることで、これまでよりずっと実効性の高い材料設計が可能になると期待しています」と中嶋さんは展望を語ります。こうした材料設計手法の開発は、ポスト「京」の利用を視野に入れてのものです。もちろん、ポスト「京」に向けて、NTChemをさらに発展させることにも、中嶋さんは注力しています。

量子化学の研究が始まってから約90年。理論とスパコンが、画期的な機能材料を生み出す日は、もうすぐそこまで来ているのです。

（取材・執筆：サイテック・コミュニケーションズ 青山聖子）

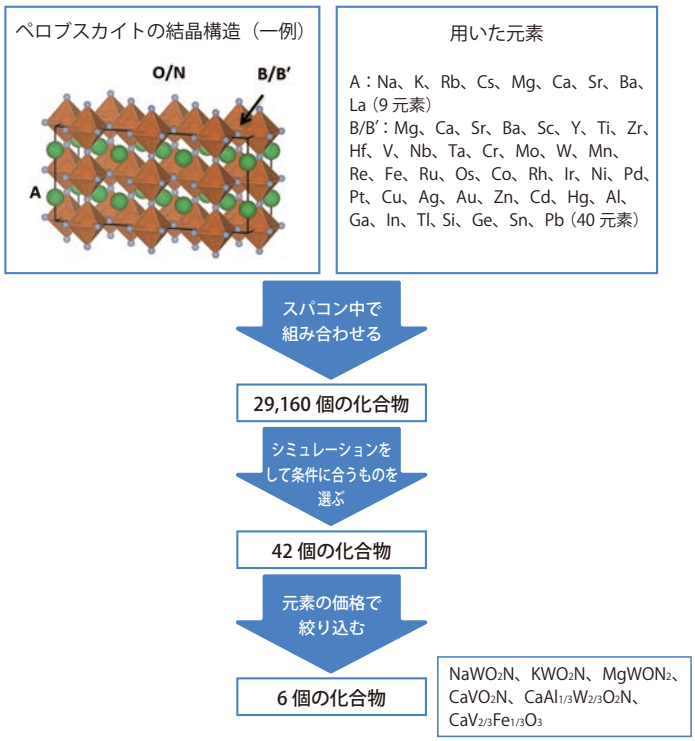


図4　シミュレーションによる光触媒のスクリーニング
ペロブスカイト型の結晶のA（緑の●）、B/B′（茶色の八面体の中にある赤の●）の位置の元素を、右の表にあるものに置き換えた化合物をスパコンの中でつくる。得られた29,160の化合物についてシミュレーションでさまざまな性質を求める。その性質が光触媒としての条件に適しているかで、候補化合物を選ぶ。こうして得られた42個の化合物のうち、34個が新規化合物であった。42個のうち、バナジウムよりも安価な元素を含むものを選ぶと、候補は6つに絞られた。

まだまだ気になるQ&A　教えて中嶋さん！

Q　高校生のころから化学が好きだったのですか？

A　はい。有機化学の反応を覚えるのが好きで、大学は化学科に進みました。でも、大学では反応がたくさん出てきて覚えるのがいやになり、実験も同じ班の人に任せっきりでした。3年生になって量子化学に出会い、反応を系統立てて理解できることを知って「これだ」と思い、量子化学の研究室に入りました。

Q　研究者になろうと思ったのはいつごろですか？

A　流れのままに研究者になった感じですね。学部4年生のときも、修士のときも、就職活動はまったくしませんでしたから。修士課程では反応を計算するのがおもしろく、博士課程で別の大学に移ってからはプログラミングを鍛えられ、ついには、自分でソフトウェアをつくって計算するまでになりました。

Q　研究のモチベーションはどんなところにありますか？

A　シミュレーションの結果に関しては、これまでわからなかったことがわかるようになったり、できなかったことができるようになったりするのが、やはりうれしいです。ソフトウェアの開発では、「これをつくればみんなが喜んでくれる」ということがいちばんですね。NTChemは、「京」や名古屋大学などのスパコンで公開していて、今後も使えるところを増やしていく予定です。より多くのユーザーに利用してもらえるように、公開の際の環境も整えているところです。

研究室へようこそ！

玲香（れいか）　大地（だいち）

神戸大学 大学院
情報科学技術イノベーション研究科／システム情報学研究科

天能研究室

http://www.gellan.scitec.kobe-u.ac.jp/index.html

神戸大学 大学院
情報科学技術イノベーション研究科／
システム情報学研究科

天能 精一郎 教授

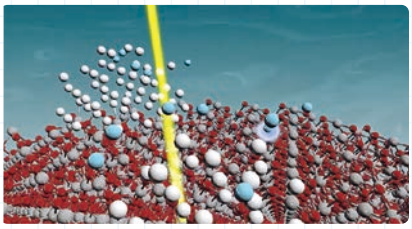
先生はどんな研究をしているのですか？

私は大学4年生のとき、触媒の研究室で実験をしていました。しかし、実験では、どんな物質がどれぐらいできたかという「結果」しかわかりません。反応条件を変えていい結果が出たとしても、どうしてそうなったのかは想像するしかありません。しかし、計算なら、反応の途中もわかるし、なぜいい結果が出たのかという理由もわかります。それで、大学院では計算科学を専攻し、研究者になりました。現在は、物質の性質や反応をシミュレーションするための、さまざまな手法を開発しています。

研究テーマ1

植物を超える人工光合成を

複雑な分子の電子状態（個々の電子の広がり方やエネルギー）を、「量子モンテカルロ法」（確率の考え方を利用して、計算精度を高める計算方法）で計算するための手法を開発しています。これにより、例えば、光合成の活性中心（反応が起こる場所）が高い信頼度で計算できます。植物より効率の高い光合成を起こすには、この触媒物質をどのように変えればよいかを、計算によって探っています。

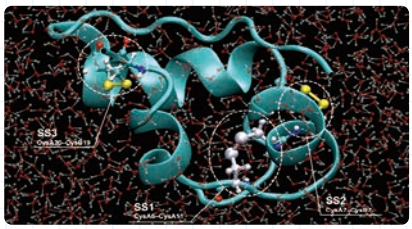


▲半導体表面での水分解反応もシミュレーションしている。

研究テーマ2

分子の反応は環境で決まる

生体中のタンパク質は、水溶液の中で働いています。タンパク質が示す性質や起こす反応を知るには、周囲の水分子の動きも取り入れたシミュレーションが必要です。タンパク質の電子状態は量子力学、水分子の動きは統計力学に従うので、両者を結びつけた計算方法（ハイブリッドシミュレーション）を開発し、タンパク質の性質や反応を計算しています。



▲水溶液中でインスリンが示す性質を、ハイブリッドシミュレーションにより計算した。特に、インスリン分子中のS-S結合（硫黄原子どうしの結合）に着目した。

研究テーマ3

ソフトウェアを一（いち）からつくる

分子の電子状態を計算するには、「原理」（物理学などの理論）に基づいて「数式」を立て、それを解くための「アルゴリズム」を考え、それを「ソフトウェア」の形にしなければなりません。私の研究室では、これらをすべて行って、超並列スパコン用のソフトウェアをつくりあげています。2002年から開発してきた量子化学計算ソフトGELLAN（ゲラン）は、「京」で、世界最高水準の高精度計算を、高い実効効率で実行できました。

教えて！先輩！（Q&Aコーナー）

Q. 数学が苦手でも、計算科学の研究室に入れますか？

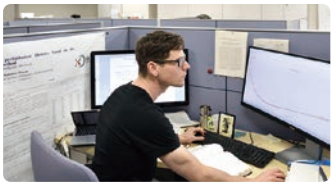
A. 大学受験の数学と、大学で習う数学は違います。計算科学の基礎になる線形代数や微積分は大学でちゃんと習うから、大学でしっかり勉強すれば大丈夫です。

Q. 高校生のときにやっておけばよかったと思うことは？

A. プログラミングを教えてもらえていたらよかったと思います。あと、英語ももっと真面目に取り組むべきでした。高校生のときのほうが単語も覚えられるし、発音も身につきますからね。部活をしっかりやっておくのも大事。研究室に入ってから、研究の気分転換になることがあると、研究もうまく行く気がします。

研究室プロフィール

天能研究室のある神戸大学の六甲台第2キャンパスは、阪急神戸線六甲駅またはJR六甲道駅からバスで10分程度。商店や住宅の間のけっこう急な坂を登ったところにあります。自然科学研究棟4号館にある天能研究室のメンバーは、20名以上。外国人の助教、ポスドク（博士研究員）、学生さんもいます。客員教授、客員准教授も外国の方だし、外国からしょっちゅうお客さんが来るんですって。だから、ゼミも、学生さんの発表は日本語だけど、先生たちが話すときは英語。学生さんたちは、ずいぶん鍛えられてるみたいです。
天能研究室は、「情報科学技術イノベーション研究科（科学技術イノベーション）」と「システム情報学研究科（システム情報）」という2つの専攻に属しているので、学生さんはどちらを専攻しているかで、やっている研究の内容が違うそうです。詳しくは「一日の過ごし方」を見てね。



ハンガリーから留学しているラドーツキさん。真剣に研究してる！

一日の過ごし方〜研究室に入ったら〜

修士2年 システム情報
下里 健介 さん

天能研で独自に開発した理論に基づく量子化学計算ソフトウェアの並列化に取り組んでいます。並列化は難しく、プログラムにバグがたくさん入るので、それを見つけては取り除き、研究室の計算機で計算してみて、プログラムが速く動くか、正しい結果が出るかを調べます。毎日、コードの文字と数式を見ている感じです。このようなプログラム開発の際には、もとになっている数式まで戻る必要もあるので、数学の勉強は必要です。就職活動では、研究内容が評価され、修士課程修了後、スパコンをつくっている電機メーカーに入社予定です。

プログラムのバグを探す。バイト前にジョブを投入し、バイトが終わったら、結果を確認することを繰り返しています。

ゲームをすることが多く、ついつい夜更かしも。

6:00 起床 / 7:00 アルバイト / 12:00 昼食 / 13:00 研究 / 18:00 19:00 アルバイト / 22:00 夕食 / 24:00 自由時間 / 就寝

スポーツジムでアルバイト。年齢の高い利用者が多く、会話を通じて得るところも多いです。

デパートの広告系の仕事。同じ学科の仲間もいるので、情報交換しながら。

就寝前にもジョブを投入。

修士1年 科学技術イノベーション
川崎 あすか さん

ゲームが好きで、学部は情報知能工学科に入りました。修士に進むとき、高校時代に好きだった化学にかかわれる天能研を選びました。人工光合成の触媒の開発に向けて、光合成の活性中心にあるマンガンクラスタに似た分子の構造を少しずつ変えながら電子状態を計算しています。天能研で開発した高度なプログラムを使って「京」で計算していますが、思うような結果が出ないことも多いです。だから、苦労した末、いい結果が出たときはうれしいし、その分子がかわいく思えてきます。私の研究では、数学よりも、プログラムを使いこなす力が必要です。

昼食は、授業の仲間とおしゃべりしながら。

研究室のコアタイムに集中して研究。

学部1年生のときからカフェチェーンでアルバイトしています。週3回ですが、研究時間はちゃんと確保しています。

9:00 起床 / 10:30 通学 / 授業 / 12:00 昼食 / 13:00 研究 / 16:00 / 18:00 アルバイト / 24:00 入浴など / 2:00 就寝

バイトに行く前にジョブを「京」に投入。

帰宅したら、計算結果を確認。

第10回 研究者に聞いてみよう!

「京」の守り人、語り部として

庄司さんは「京」の開発プロジェクトに初期から携わっており、始まりから現在までずっと「京」のそばで働いてきました。現在は運用技術部門の部門長および利用環境技術ユニットのリーダーとして、ユーザーがより簡単に「京」を使えるように環境を整えるのが仕事です。「京」だけではなく周りの設備を管理する役割もあります。その努力によって「京」は高い稼働率を保っています。初代「京」、そしてポスト「京」と二代にわたりスパコン開発に携わる庄司さんにお話を伺いました。

運用技術部門 部門長
庄司 文由（しょうじ ふみよし）

山形県立鶴岡工業高校卒業後、山形大、金沢大院、七尾短大（講師）、広島大（助手）、理研（研究員、（中略）、部門長）とその場しのぎで過ごし、今に至る。趣味は車、サッカー観戦、猫観察。

兵庫県立三田祥雲館高等学校 科学部有志

Q 施設の仕組みを教えてください。

A「京」は世界トップクラスの計算性能を持っていますが、同時に大量の電力を消費します。消費された電力はすべて熱に変わります。なので、この施設の役割は、「京」が消費する大量の電力を安定して供給することと、「京」から出る膨大な熱を冷却することです。また、地震が起きた時にも耐えられるように、免震装置を設置しています。停電時には安全にデータを保存できるよう、電力会社から電力を直接供給するほかに、ガス会社から供給されたガスを使って発電する方法も使っています。

Q 「京」を運用するうえで大変なことは何ですか？

A「京」は巨大なシステムで、関連する電力設備、冷却設備も巨大で複雑なので、それらを安定的に運用することはもちろん大変なんですが、同時に、「京」を使う人に、いかに使いやすいサービスを提供できるかという点も重要です。その意味で、我々の仕事って実は接客業でもあると思っています。例えば、運転のスケジュールや障害情報など、「京」を使ううえで重要な情報、知らせるべき情報を適切な言葉で過不足なく伝える必要があります。うまくやらないと、言葉足らずで誤解を招いたり、知らせるタイミングが遅れて混乱を招いたりするので、実はとても大変で難しい仕事なんです。

Q 「京」が終わろうとしている今のお気持ちは？

A電源を切った後は泣くかもしれません(笑)。「京」の開発プロジェクトの最初から関わっているメンバーの中で、今でも「京」に関わっているのは私だけになってしまったので、語り部のような気持ちでもいます。「京」はまだまだ世界の中でも最高水準で、もっと長い間使ってほしいという気持ちもありますが、スパコンの世界では6～7年も経つと、故障が増えてきたり、交換部品が入手困難になったりして、実際のところ動かし続けることが難しくなります。人間で言えばかなりの「お年寄り」なので、このあたりで現役引退して次の世代に道を譲るのも仕方ないですね。残り少ないですが、電源を落とす時まで、しっかり動かして、しっかり使ってもらいたいと思います。

Q プログラミングを学ぶメリットは？

A学ぶ上でいいなと思うことは、プログラムを書くと論理的思考が養われるということですね。頭の中のぼんやりしていたイメージ（論理の流れ）を明確化してくれる、ある種の道具のようなものです。それを実際に動かしてみると、うまくいったかどうか分かるんですよ。そういった意味で、プログラミングを学ぶと論理的思考が養われるのではないかと思います。論理的に考えられるということは、考えを前に進めてくれます。そのための道具として重要ではないかと思います。

Q 大学卒業後に学んだことは？

A私が以前、大学で働いていた時、本当は素粒子物理学をやりたかったんですけれど、なかなかそんな時間が取れませんでした。その時に「自分の理想を追い求めるか」、「与えられた仕事を頑張るか」という二択を迫られました。私はどちらかというと「与えられた仕事を頑張る」という方向になりました。私がいたのはコンピュータを使った教育システムの基本的な使い方をトレーニングするようなセンターだったんです。やりたかったことと全く違いましたが、やってみると結構面白かったんです。その中でも、視覚障害を持つ学生さんのために専用の点字のディスプレイなどがある環境を初めて作ったんですけれど、これもやってみると、使って喜んでくれる人がいました。こんな感じで、与えられた仕事であっても、それを頑張って突き詰めてみると、だんだん仕事が楽しくなってくるっていうことをいくつか経験しましたね。

Q やる気を出す方法は？

A上司と呼ばれる立場として、どうしたら部下に頑張って仕事してもらうか、どうしたらポテンシャルを最大限引き出せるかというのは日々考えていますね。わくわくしながら仕事をしてほしいので、どうしたら彼らがわくわくしてくれるかを考えています。例えば、新しいテクノロジーを取り込んでどんな良いサービスができるか考えたりすることですかね。幸いにこの業界は次々新しい技術が出てくるので、本当に有用そうなもの、興味を持ってくれそうなものを選んで、「これやってみない？」と持ちかけます。そうやって、少しでもモチベーションが上がるように心がけています。もちろん、自分自身もわくわくしないとだめですね。

インタビューを終えて

普段、学校で過ごしているだけでは到底できないような特別な体験だったと思います。今まで、このような機会を持ったことは無かったので、とても難しくて理解するのがやっとというようなお話をされるのかと考えていましたが、そのようなことはほとんど無く、庄司さんはスライドも上手く使って分かりやすく説明してくださいました。また、ただ単に技術面についてお話をお聞きするだけでなく、人生の先輩としてのお話も伺うことができました。今回のお話を活かして日々の生活から頑張りたいです。このような機会を与えていただき、本当にありがとうございました。

（取材・執筆　坂田 陽菜乃、太治野 輝、池添 太智、角谷 耕太郎、久保田 空、井上 和奏、藤本 伊吹）

計算科学の世界
K computer Newsletter
March 2019
NO.18

発行日　平成31年3月15日
編集発行　理化学研究所 計算科学研究推進室
〒650-0047　兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26
TEL：078-940-5555（大代表）
FAX：078-304-4964
E-mail：r-ccs-koho@ml.riken.jp

計算科学研究センターのもっと詳しい情報はこちら
https://www.r-ccs.riken.jp/jp/
ウェブサイト版
「計算科学の世界」はこちら
https://www.r-ccs.riken.jp/newsletter/
RIKEN 2019-018