

熊本大学との共同研究

理学系研究科物理学専攻 博士2年 山田俊介

2015年10月16日から同30日までの2週間にわたって、熊本大学大学院の下條冬樹教授のもとを訪れ、共同研究を行った。

下條研究室は長年にわたって分割統治密度汎関数法の開発に取り組まれており、その知見を私の研究分野であるLS3DF (Linearly Scaling 3-Dimensional Fragment) スペクトル計算法に取り入れたいと考えていた。特に、本手法の電荷移動を伴う系への適用を可能にするためには、従来のLS3DF法に替えてより洗練された分割統治法の技術を取得する必要があるがあった。

今回の共同研究において、下條研究室で開発された分割統治法を基にスペクトル計算可能な手法を新たに提案し、試験的な実装を行った。この手法によって、これまで不可能だった電荷移動のある系への適用が可能になり、併せて計算コストの削減も可能になると見込まれる。今後はコードの汎用化と現実的な系での実証を行う予定である。

滞在を快く受け入れて下さり、またディスカッションに応じて下さった下條先生と下條研究室の皆様に厚くお礼申し上げます。