

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用

2. 研究代表者： 矢花 一浩（筑波大学計算科学研究センター 教授）

3. 中間評価結果

計画どおり順調に進捗している。

開発の成果である計算ソフトウェア SALMON のウェブページでの公開という目標を達成した。論文とは異なる新たな形で学術的貢献を評価する。また SALMON のハンズオンチュートリアルや国際シンポジウムを主催し SALMON の普及に尽力した。

論文は質量ともにやや物足りないが、投稿中の論文が多数あり今後に期待できる。これまでにない評価の尺度が必要である。ソフトウェアのダウンロード数以外にも、使用実績として出版された論文数など統計情報の取得を検討されたい。

2018 年 1 月に主たる共同研究者を病のため失ったがリーダーシップを発揮し、新たに QST 関西光科学研をメンバーに加え体制を再構築しダメージを最小限に止めた。海外の博士課程学生を含め多くの若手研究者の指導・育成に熱心に取り組んでおり、世界における第一原理計算に基づく計算機科学のメッカになることが期待される。

今後は新たに参画した新メンバーによるスピン励起ダイナミクスやピコ秒ダイナミクスの SALMON への実装などの貢献が期待される。SALMON を世界標準の汎用第一原理計算ソフトウェアにするため、内容の充実とさらなる積極的なアウトリーチ活動を期待する。例えば、ハンズオンチュートリアルのビデオを動画共有サービスで公開するのも一案である。また CPS 用ツールとして、レーザ加工、シリコンデバイス設計等々の産業への応用展開にも目を向けたコラボレーションにも期待したい。