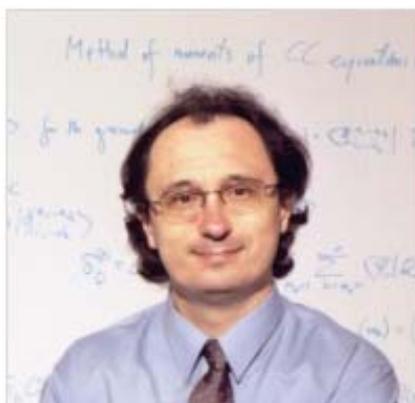




Prof. PIECUCH Piotr

from U.S.A



Piecuch 教授は、平成24年7月13日～8月16日および平成25年2月～3月の合計約三ヶ月間、理論・計算分子科学研究領域系に招へい外国人研究職員として滞在される予定です。Piecuch 教授はポーランド出身で、現在、ミシガン州立大学の University Distinguished Professor であり、2011年には American Association for the Advancement of Science のフェローに選出されている研究者です。研究のご専門は電子状態理論です。

P. Piecuch 教授は、多体問題、電子状態理論、原子核理論の研究分野において国際的に活躍されている研究者で、結合クラスター法 (Coupled Cluster, CC) に基づく理論、新しい計算アルゴリズム、精密なポテンシャル曲面などの最先端の研究を行っておられます。1980年代には Coupled Cluster の創始者でもある J. Paldus 教授や L. Adamowicz 教授らと多配置クラスター展開法 (Multi-Reference Coupled Cluster, MRCC) の研究をされました。その後異動したトロント大学ではノーベル賞学者の J. Polanyi 教授と研究を

されています。1998年に現在のミシガン州立大学に異動され、独自の理論の開発を中心に研究を展開されています。

近年の代表的な研究は、CR (Complete Renormalized) CC 法や Active-space CC 法の開発です。CCSD(T) 法は結合解離領域でポテンシャル曲線が間違っただるまいを与えるのに対し、Piecuch 教授の CR-CCSD(T) 法は正しく記述することができます。また、Active-space CC 法は、多電子過程で記述される励起状態のポテンシャル曲面を極めて高精度に記述します。これらの方法は、世界的にも有用であることが認識されており、そのプログラムは量子化学プログラムパッケージ GAMESS に実装されています。GAMESS の Coupled Cluster 部分の高速なプログラムはそのほとんどが Piecuch 教授のグループによって開発されたものです。さらに最近では、MM (Method-of-Moment) CC 法や CC(P,Q) 法の定式化によって、高次の演算子を階層的に含めていく、効率的で高精度な方法を開発しています。また、大規模系の Coupled Cluster 法の開発も行っておられ、電子相関の局所性を利用した CIM (Cluster-in-Molecule) CCSD 法やその一般化があります。大規模な生体分子系にこれらの CC 理論を適用するなど、大規模系における高精度計算を実現されています。このように、Piecuch 教授は Coupled Cluster に基づく理論開発において世界をリードする研究者の一人と言えます。

Piecuch 教授は、これまで何度か日本を訪れられておられ、JSPS 外国人研

究者招へい事業で京都大学に滞在されたこともあります。Piecuch 教授は日本国内の研究者とも研究交流を行っておられ、所内外の研究交流の活性化にも貢献していただけたと思います。分子研に滞在される期間に、是非、議論をしていただき、研究交流をしていただけますと幸いです。

(江原 正博 記)