

科学研究費助成事業（特別推進研究）研究進捗評価

課題番号	22000009	研究期間	平成22年度～平成26年度
研究課題名	d-電子複合系の理論化学：新しい高精度大規模計算法による微視的理解と予測		
研究代表者名 (所属・職)	榊 茂好（京都大学・福井謙一記念研究センター・研究員）		

【平成25年度 研究進捗評価結果】

該当欄		評価基準
	A+	当初目標を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる
○	A	当初目標に向けて順調に研究が進展しており、期待どおりの成果が見込まれる
	A-	当初目標に向けて概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である
	B	当初目標に対して研究が遅れており、今後一層の努力が必要である
	C	当初目標より研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である

（評価意見）

本研究は、研究代表者が開発した新しい高精度大規模計算法による d-電子複合系に関する微視的理解と予測を目的とする理論化学という重要な取組である。当初研究目標に設定した 5 項目の研究課題は極めて順調に進展しており、既に各研究項目に対する重要な研究成果が世界的レベルの学術雑誌などに報告されている。

現在は、ハイブリッド型高精度大規模電子状態理論計算法の開発の一環として、多核遷移金属錯体の電子物性、d-電子複合系の電子励起状態など、難しい課題への挑戦が続いており、本研究期間を通じて当初研究目標に対して重要な研究成果を得ることが見込まれる。さらには、本研究で開発された計算手法を汎用プログラムにも組み込み、一般の使用に供することも期待したい。

【平成27年度 検証結果】

検証結果	本研究では、d-電子複合系の微視的理解と予測を目的として新しい高精度大規模計算法、特に 3D-RISM-SCF 法や分子性結晶のための QM/MM 計算法の開発を行っている。当初、目標として設定した 5 項目の課題への取組みは極めて順調に進展しており、これらの手法と post-Hartree-Fock 法とを組み合わせたハイブリッド型高精度大規模電子状態理論計算法を用いた多核遷移金属錯体の電子物性、d-電子複合系の電子励起状態など、難しい課題に挑戦し、数多くの成功例を得ている。
A	本研究で開発された理論化学的方法は、一部が既に国際的汎用ソフト「GAMESS」に実装されており、今後、触媒開発、元素戦略、エネルギー問題など、当面する諸問題の解決に寄与することが期待される。