

科学研究費補助金（基盤研究（S））研究進捗評価

課題番号	18105001	研究期間	平成18年度～平成22年度
研究課題名	ボルン-オッペンハイマー描像を超えた動的分子理論と新しい化学の展開	研究代表者 (所属・職)	高塚 和夫 (東京大学・大学院総合文化研究科・教授)

【平成21年度 研究進捗評価結果】

評価	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
	B
	C

(意見等)

核と電子のダイナミクスを同等に取り扱う枠組みを作り、化学反応の動的過程に新しい描像を打ち立てる野心的な研究を行っている。これは、従来のボルン-オッペンハイマー近似またその延長に基づく反応理論を大きく変えるものであり、新しい理論的枠組の構築、実際の計算可能な方法論の開発、そのプログラム化など、難しい問題に対して着実な成果を上げている。本研究で開発された理論的方法により、原子核の変位と電子の変化が絡み合うプロトン移動反応など重要な反応のダイナミクスの正確な解析が可能となった。さらに、この方法は最近の強力なレーザー場の元で起こる多様な反応過程の記述できるものであり、強い場によって引き起される全く新しい反応機構を提唱していくものと期待される。

以上のように、本研究は従来のボルン-オッペンハイマー近似を越えた化学反応に対する新しい理論的方法の基礎を確立し、その応用を行っているものであり、期待通りの成果を上げている。さらに多自由度の系へ拡張を行うことで、生体高分子反応など多くの重要な反応機構の解明に大きく貢献することを期待したい。

【平成23年度 検証結果】

検証結果	<p>電子と原子核の運動学的カップリングを表現する量子論と古典論を混合した新しい表示法を確立し、当初の目的であったボルン-オッペンハイマー近似を超える新しい理論の枠組みを完成させた。この理論に基づき、非断熱相互作用や強レーザー場中の化学反応など、実験的に強い興味を持たれている分子系の理論解析を行った。その結果、2重プロトン移動反応など具体的な化学反応にもその成果を波及させつつある。今後さらに研究を発展させることによって、理論化学の分野で大きな学術的成果を挙げることが期待できる。</p>
A	