

平成27年度 基盤研究（S） 審査結果の所見

研究課題名	電荷分離，プロトン移動，電子伝達，巨大電子状態揺らぎの非断熱電子化学
研究代表者	高塚 和夫（東京大学・大学院総合文化研究科・教授）
研究期間	平成27年度～平成31年度
審査結果の所見	<p>本研究は、ボルンオッペンハイマー（BO）近似を超越する理論を構築し、電荷分離、プロトン移動、電子移動、巨大電子状態揺らぎなどの非断熱電子動力学現象を解明することを目的としている。BO近似が破綻する現象は近年、数多く発見されており、原子核の運動と電子の運動のカップリングの重要性が指摘されてきた。しかしながらこの問題は難しく、真っ向から取り組んだ理論研究は見当たらない。</p> <p>応募者は世界に先駆けて量子化学にBO近似を超える概念を導入し、電子のダイナミクス理論を開拓してきた。本研究はこの超BO理論を更に発展させ、複雑な系への展開を目指す意欲的な研究である。</p> <p>本研究によって世界に誇れる超BO理論が創成される可能性が高く、基盤研究（S）として採択すべき課題であると判断した。</p>