

平成20年度 科学研究費補助金（学術創成研究費）  
事後評価結果

研究課題名	量子的化学原理の深化と実現	研究代表者名 (所属・職)	中辻博（京都大学・大学院工学研究科・教授）
-------	---------------	------------------	-----------------------

### 研究課題の総合的な評価

該当欄		評価基準
○	A+	期待以上の研究の進展があった
	A	期待どおり研究が進展した
	B	期待したほどではなかったが、一応の進展があった
	C	十分な進展があったとは言い難い

### 評価意見

本研究課題では、極めて実績が高い研究代表者を核として、実力のある理論化学者を組織し、シュレディンガー方程式やディラック方程式の解法の開発を基礎として、量子化学基礎理論の精密化によって得られる定量的評価を、様々な環境下の分子の電子状態とダイナミクスの解明に適用した。この研究課題の推進によって、小さい分子の正確な波動関数を得る Free ICI 法を開発する一方、巨大分子系の精密な量子化学計算の解法を構築するとともに、研究代表者の編み出した SAC-CI 法を軸に、溶液中の活性分子や生体分子に関する実験データへの適用を可能とし、さらに電子移動やエネルギー緩和などを理論計算できることを示すなど、分子科学のみならず、物質科学全般に対しても量子化学計算の意義と信頼性を明確に示した。これらの研究成果は、一流の国際学術誌に数多く公表されるとともに、国際会議の招待講演を多数受けるなど、国際的に高く評価されている。本研究で得られた量子化学計算の厳密解は数理科学的な波及効果も大きく、次世代計算機の進展により、その意義はさらに高まると期待され、当初の研究計画、目的に照らし、その達成度は極めて高く、学術創成研究費として期待以上の研究の進展があったと判断した。