平成２３年度 科学研究費補助金（特別推進研究）
研究進捗評価 現地調査報告書

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）

【評価コメント】

本研究は、d-電子複合系の理論化学について、ハイブリッド型大規模高精度電子状態計算法の開発に着手し、既に置換基有効ポテンシャルの開発を進め、遷移金属錯体へ適用可能なRISM-SCF法の提案及び弱い相互作用の高精度近似計算法の開拓と大規模周期系MP2計算の高速化を開始しており、方法の開発は着実に進んでいる。また、4項目の研究対象、(1) 遷移金属を含む複合電子系の構造と結合性の理論的研究、(2) 複雑な電子状態を有する多核金属錯体の構造、結合性、電子状態の解明、(3) 高周期ヘテロ元素や遷移金属元素を含むナノカーボン化合物の構造と機能の電子状態との関連の理論的研究、及び、(4) 遷移金属錯体による触媒反応の理論的研究と予測、への具体的な取り組みにおいても着実に計画が進展していると認められた。計画された設備整備も順調に進んでおり、本研究計画は所定の期間内に十分な成果を挙げるものと見込まれる。開発を進めている置換基有効ポテンシャルを拡張し、π電子系なども含む多様な応用をさらに進めるなど、実用性の向上に努めるとともに、開発した計算手法を市販のプログラムに組み込み、一般の使用に供するところまで、さらなる進展に期待がもたれる。ただし、研究内容が、方法論の開発から、上記の4項目にわたる具体的対象への取り組みへと、非常に多岐にわたっており、これを遂行するために、多くの博士研究員の採用とその効果的な働きが、本研究遂行上極めて重要である。博士研究員の採用状況は、現地調査時点において問題があるとは認められなかったが、今後も順調に研究が進展するためには、採用される博士研究員の量と質の確保が、特に重要である。

平成23年度の研究費配分において、平成23年3月に発生した東日本大震災の影響を受けて分割払いとなり、当初配分額が7割といった状況にあるため、残り3割の送金の状況によっては、博士研究員の大量採用を前提としている本研究には重大な影響が出ると懸念される。また、本研究は、数百アンペアの電源供給を必要とする高性能の計算機群に支えられており、電力供給面でも、大規模の節電が進められると、研究計画のスムーズな進展に支障が出る恐れがある。こうした社会情勢の影響については、本研究を遂行する研究機関のみならず日本学術振興会側にも、極力研究計画の支障とならないよう、格別の配慮を行うことが必要であろう。

なお、本研究の波及効果をより一層高めるためには、開発する方法論の応用を固体にも展開し、様々な物性への効果的な適用を進展させることが望まれる。