

平成23年度 科学研究費補助金（特別推進研究）
追跡評価結果

研究課題名	リアル系のシミュレーションとダイナミクス
研究代表者名 (所属・職)	平尾 公彦（理化学研究所・計算科学研究機構・機構長）

評価意見

物質の新しい利用法の開拓を理論計算で先導することができれば、既存の科学や技術を超えたイノベーションのきっかけになると期待され、リアル系の予測を広範に行うことを可能にする大規模計算法の開発が望まれている。本研究は、大規模分子計算に向けた「次世代分子理論」の開発を目標に、

- (1) 新しい電子状態理論・計算法の開発
- (2) 大規模分子計算に向けた新しい密度汎関数理論の開発
- (3) 相対論的電子状態理論の開発を主要なプロジェクト

として進められたものである。研究課題の「リアル系のシミュレーションとダイナミクス」を進めるには、計算精度の向上と計算所要時間の短縮が決定的に重要であり、本研究の開始時点では、その要件を満たす理論・計算法が十分に確立しているとはいえない状況にあったため、その解決に向けての着実かつ重要な基礎的貢献を成し遂げたものといえる。

具体的には、本研究期間内に提案され、研究期間終了後に飛躍的な発展を遂げて、世界中の理論化学者の注目の的となっている LC-DFT 法の開発による計算精度の飛躍的向上、大規模高精度計算で障害となっていた多電子積分を $O(N)$ で行う GFC 法の開発による計算速度の飛躍的向上を成し遂げ、世界中で使用されている汎用の計算プログラムに搭載され、社会的に多大な貢献を与えつつあり、本研究の成果とその効用・波及効果は、十分に傑出した高さにあるものと評価できる。