

平成22年度 特別推進研究 審査結果の所見

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	榊 茂好
審査の所見	<p>本研究は、d-電子複合系に対する有効な量子化学的計算法の開発に関するものである。d-電子に対する量子化学的計算は特に大規模な計算となるため、実験と比較できる精度で行うには適切な方法の開発が必要であるが、応募者の提案は、近年多用されるDFT法の問題点を指摘し、波動関数をともに扱おうとする意味でこの課題に正面から挑戦するものであり、これを為しうる最有力なグループである。また、実験との対応を重視しており、その結果は実験にフィードバックされると期待される。このように、本研究は多くの分野に波及効果のある優れた研究であり、特別推進研究として相応しく、採択すべき課題であると判断した。</p>