

科学研究費助成事業（基盤研究（S））研究進捗評価

課題番号	23225001	研究期間	平成23年度～平成27年度
研究課題名	密度汎関数理論の新展開	研究代表者 (所属・職) (平成29年3月現在)	平尾 公彦 (理化学研究所・計算科学研究機構・機構長)

【平成26年度 研究進捗評価結果】

評価	評価基準	
A+	当初目標を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる	
A	当初目標に向けて順調に研究が進展しており、期待どおりの成果が見込まれる	
○	A-	当初目標に向けて概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である
	B	当初目標に対して研究が遅れており、今後一層の努力が必要である
	C	当初目標より研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である
(意見等)		
<p>研究代表者が開発した長距離補正一時間依存密度汎関数法(LC-TDDFT)に、新たにスピン・軌道相互作用を導入し、光化学反応理論の開発に成果を上げるとともに、非断熱相互作用の評価、軌道エネルギー計算の高精度化、バンドギャップ計算の高精度化、分散力の高精度の計算に成功している。これにより、DFT法の適用対象を拡大したことは、大きな進展と言える。しかし、当初に計画した多配置DFTの開発においては基本的な問題が生じており、解決の方法が見つかっていない。また、LC-DFT計算のOrder-N化アルゴリズムの開発についても達成の見通しが明確になっていない。よって、今後一層の努力が必要である。</p>		

【平成29年度 検証結果】

検証結果	当初目標に対し、概ね期待どおりの成果があったが、一部十分ではなかった。
A-	<p>本研究は、長距離補正一密度汎関数法(LC-DFT)を基礎に、二電子励起効果を取り込んだ時間依存密度汎関数法(LC-TDDFT)や各種の励起状態を包括的に取り扱うLC-PR-TDDFT法の開発を行うとともに、フラーレンや固体などへの応用研究も進め一定の成果を得ている。LC-DFTの深化・高度化として設定した多配置DFTの開発や交換積分高速計算アルゴリズムの開発が研究期間内に十分達成できなかった点は惜しまれるが、今後も研究を継続してブレイクスルーを実現することに期待したい。</p>