

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）：

研究代表者

中井 浩巳（早稲田大学理工学術院 教授）

主たる共同研究者

波田 雅彦（首都大学東京大学院理工学研究科 教授）

中嶋 隆人（理化学研究所計算科学研究機構 チームリーダー）

長谷川 淳也（北海道大学触媒化学研究センター 教授）

平田 聡（イリノイ大学アーバナ・シャンペン校 教授）

青木 百合子（九州大学大学院総合理工学研究院 教授）

森 寛敏（お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A+ 期待を超える十分な成果が得られている

○総合評価コメント：

本研究課題は、希少元素や規制元素の多くを占める重元素を対象に相対論的量子化学理論を確立することによって、周期表上のあらゆる元素からなる物質・材料を取り扱うことが可能な理論的基盤の構築を目指すと同時に、理論に基づき、革新的な機能を有する物質・材料の設計を進めてきた。

理論的基盤構築の点では、無限次ダグラスロール法に局所ユニタリー変換（LUT）を適用した2成分相対論法的高速化および分割統治法（DC法）による大規模化を実現した高精度・高効率な相対論的量子化学計算法（DC-LUT-SF-IODK/IODK法）を完成させ、その解析的微分法も含め、世界で標準的に使われている汎用量子化学計算プログラムGAMESSに実装されたことは高く評価される。また、本研究で開発された全ての理論基盤を実装した次世代相対論的量子化学計算プログラム RAQET（Relativistic And Quantum Electronic Theory）が研究期間内に開発され、最終年度中に公開まで至ったことは、本領域全体から見ても特筆すべき成果である。

物質材料設計の点でも、情報科学的手法も取り入れて鉛フリーのペロブスカイト太陽電池候補材料を10000種以上の中から50種程度を選択・提案したこと、常温・常圧にてアンモニア合成可能な触媒開発の支援や有機ホウ素化合物の燐光現象の解明など、目標を超えて達成した優れた成果が数多く存在している。さらに、CREST「元素戦略」領域内のチーム間連携を積極的に展開しており、領域内唯一の理論チームとして戦略目標への貢献だけでなく、領域全体の研究マネジメントにおいても核となる貴重な役割を果たしている点も高く評価できる。また、本領域内で唯一、定期的にニュースレター「相対論的電子論NEWS」を発行し、相対論的電子論の普及に努めるなど、そのリーダーシップは特筆に値する。

プログラム公開を前提としている点などから特許出願の件数は少ないが、論文発表189件、および170

件に上る国内外の学会での招待講演数も高い評価として付け加えたい。

今後もRAQETプログラムは更新体制、プログラムを使った効果の検証などが継続的課題として残るものの、触媒設計、電磁気特性評価、電子機能材料設計、生体高機能材料設計、機能性高分子設計などへの応用展開に今後も期待したい。