

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築
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

長岡 正隆（名古屋大学大学院情報学研究科 教授）

主たる共同研究者

なし

3. 事後評価結果

○評点：

A 優れている

○総合評価コメント：

本研究では“分子凝集状態”で起こる化学現象、とくに複合化学反応・立体特異性・集合体構造の理解と制御のために、新しい計算分子技術を構築して科学技術イノベーションを図ることを目標とした。

マクロ化学現象解明に向けた新しい計算分子技術として、モンテカルロ(MC)法と分子動力学(MD)法とを併用する Red Moon シミュレーション法（混合 MC/MD 反応シミュレーション法）を用いた適用検討を加速した。二次電池電解液の性質や逆浸透膜の不均一性に関して、実験では得られない、新しいマイクロ情報を得ることに成功した。（Pyridylamide）Hf(IV)錯体触媒によるオレフィン重合の反応制御に向けた研究にも展開した。従来の Red Moon 法シミュレータは、一般利用には高い習熟度が必要であったが、新世代「Red Moon 法シミュレータ」は、より汎用的な利用を可能とするものであり、簡単なテキスト情報で、入力パラメータ（反応条件、化学反応）を与えればよいという簡略化も実現した。

Red Moon 法により、いくつかの実用的な用途において興味深い理解が計算化学で得られたことは大変に素晴らしい。一方、計算科学による実験結果の理解にとどまらず、計算科学から新しい材料や触媒を提案できないのか、など計算分子技術への期待も大きいことから更なる飛躍も期待したい。