

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 反応経路自動探索法を基盤とする化学反応の理論設計技術

2. 研究代表者： 前田 理（北海道大学大学院理学研究院 教授）

3. 中間評価結果

量子化学計算を用いた反応予測に期待が寄せられているが、反応機構を計算者が予想、それを量子化学計算に基づいて確かめる、いわゆる「決め打ち解析」が一般的である。そのため、複雑な多段階反応を理論予測することは困難であった。本研究では、この状況を打開するために反応経路自動探索法の開発に取り組んでいる。

研究代表者が開発してきた人工力誘起反応法を基盤とし、それを高度に汎用化する手段で開発を進めた。本研究を通して、光反応や電子移動反応を取り扱うための無輻射失活経路自動探索技術の導入、結晶や表面を扱うための周期境界条件の実装、複雑反応経路ネットワークを扱うための新たな速度論解析法の開発とそれを用いた自動探索の高速化、量子古典混合計算で酵素反応を扱うための多構造マイクロ反復法の実装などを行い、当初予定していた汎用化のほとんどを完了している。

今後、我が国の計算科学技術・分子設計技術の基盤の一つとして、本研究課題をさらに成長させる価値があると判断される。基礎研究にとどまらず、反応に関わる技術開発において産業界にも価値の高いものになると期待している。

以上、本研究課題は戦略目標達成への研究計画に従って、順調に研究を推進させているものと認められる。