

## 研究課題別中間評価結果

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： 中井 浩巳（早稲田大学先進理工学部 教授）
3. 中間評価結果

希少元素や規制元素の多くは重元素であり、これらを含む物質・材料の化学的性質を正しく理解するためには重元素の相対論的効果を考慮する必要がある。本研究課題は、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ものである。また、相対論的量子化学理論に基づいて、革新的な機能を有する物質・材料の設計に取り組んでいる。

理論的基盤構築においては、無限次ダグラスロール法に局所ユニタリー変換（LUT）を適用した高精度・高効率な相対論的量子化学計算法（LUT-IODK 法）を完成した。LUT-IODK 法およびその解析的微分法が、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特筆される。また、本研究で開発された理論基盤の全てが実装され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)の開発も順調に進み、完成が待たれる。機能材料設計においては、触媒活性・電磁気特性・電子機能材料・生体光機能・機能性高分子の5つの物質・物性を研究対象として設定し、次世代色素増感太陽電池材料の理論設計を始め、着実に成果が得られている。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期待以上の役割を果たしている点は高く評価したい。

既に本研究チームは量子化学計算分野において世界のトップを走っているといえるが、今後は理論基盤の構築はもとより、開発したプログラムの有効性を多くの応用例で示すことによって、国際的な評価を獲得することを期待する。また、チーム間共同研究の範囲を拡大し、CREST「元素戦略」領域を理論面から支えると共に、応用展開の幅を広げていくことが望まれる。さらに、マテリアルズ・インフォマティクスなどの手法を取り入れることで、従来にない機能をもつ新材料の予測・設計にも挑戦してもらいたい。高速かつ精密な理論予測が可能になれば、科学技術の発展とともに、社会・経済への貢献も計り知れない。革新的な機能材料設計の指針を示すべく邁進して欲しい。