

## 「量子化学講習会：SAC-CI 理論を中心に exact 理論の展開もまじえて」

量子化学講習会開催のご案内です。この機会にぜひご参加ください。

開催日時:

- ・ 2026 年 3 月 7 日 (土) 10:00~17:00: 基礎
- ・ 2026 年 3 月 14 日 (土) 10:00~17:00: アドバンス

(セットでの講習がベストですが、どちらか一方のみの受講も可能です。)

会場: 京都技術科学センター(会議室 B)、<https://qcri.or.jp/lab/ja/access>  
(京阪出町柳駅より鴨川沿い南へ徒歩 10 分位)  
(量子化学研究協会研究所のあるところ。)

講師: 中辻 博 (Exact 理論、SAC-CI 理論等の創始開発者)

会費(各会):

- ・ 一般: 25,000 円
- ・ 学生: 15,000 円

**受講希望の方 受付中!**

(会費は、研究所の運営と研究開発に充てさせていただきます。)

また、ご寄附などのご支援を頂けると幸いです。)

持ち物: ノートパソコン (講義資料や入出力ファイルの閲覧等に必要です。)

申込方法: [office@qcri.or.jp](mailto:office@qcri.or.jp) に以下の返信フォームをお送り下さい。

---- 返信フォーム ----

御芳名:

連絡メールアドレス:

所属:

住所(ご自宅):

受講: 基礎,アドバンス両方 or 基礎のみ or アドバンスのみ

---- ここまで ----

一両日中に必ず受け付け記録をお送りいたします。もしその送信がなければ、届いていないためですので、再度ご送信ください。

ホームページ: <https://qcri.or.jp/>

量子化学研究協会研究所では、上記要領で分子の基底・励起状態の理論・SAC-CI 理論やシュレーディンガー方程式の正確な解法に基づく量子化学理論など、色々の理論の創始・開発者であるの本研究所の所長、中辻による「量子化学講習会：SAC-CI 理論を中心に exact 理論の展開もまじえて」を開催します。3 月 7 日(土)に基礎編、3 月 14 日(土)にアドバンス編、のセットでの講習となりますが、どちらか一方のみの受講も可能です。

SAC-CI 理論は、分子の基底状態をクラスター展開法の完成形 SAC 理論で解き、その励起、イオン化、アニオン化状態等を SAC-CI 法で解く理論であり、かなり正確な理論です。世界最大シェアの量子化学プログラム Gaussian にも搭載されています。



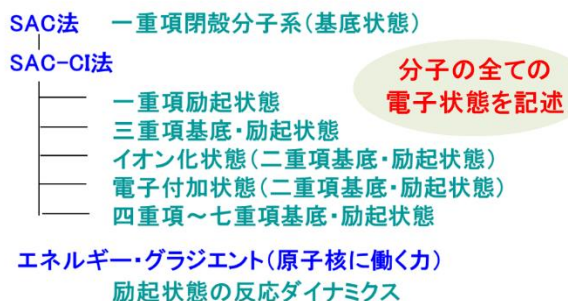
光と分子が織り成す化学には、光による植物の光合成を始め、目の視覚の科学など、科学者として研究し深めなければならない様々な分野があり、とても重要です。SAC-CI 理論はこのような分野を量子化学的に研究する上で、とても優れた理論です。その分野の化学現象を理論的に解析し、究明し、ひいては予言を行う上で、とても有用なツールとして活用される事をお勧めいたします。その構造は、右の図にまとめたようなものです。まず、ふつうの一重項の分子の基底状態を、SAC 法というクラスター展開法で解きます。この展開は非線形な展開ですので、展開の構成関数は symmetry adapt にしておかなくてははいけません。これがその名前の由来です。あらゆるクラスター展開は、以後その形になっています。SAC 理論では変分的な方法を使ってその関数空間をベストにするのですが、それを行うと、同時にその補関数空間が作られます。その補関数は、基底状態と直交・ハミルトニアン直交する空間を張っていることになり、まさに励起状態の空間なのです。これに気がつき、これを使って励起状態を作れるはずだ、というのが SAC-CI 理論です。実際、この空間を使って、分子の励起状態、イオン化状態、アニオン状態を計算すると、SAC の基底状態とバランスのとれたそれらの状態の波動関数が得られます。これが SAC-CI 理論です。SAC を解くと、そのおまけに、これらの多くの状態が一度に得られるのです。「子供時代のそれ」のように、おまけのほうはずっと面白いですね。実際、励起状態の研究の時には、そのおまけを求めるために、SAC/SAC-CI 計算をします。これらの研究が面白く、Gaussian の Mike Frisch は Gaussian に是非、と誘ってくれ、Gaussian にも搭載しました。この理論で植物の光合成のメカニズム、人の目の視覚の問題、蛍の光などいろいろ研究しましたが、蛍の光がまさに「蛍の光」の研究になって、その頃に京都大学をようやく卒業し、いまの研究協회를皆で立ち上げました。

その大分前ですが、1999 年それまでいろいろの角度からトライしてきたシュレーディンガー方程式の正確な解法が、あたり前の方法で解けそうな気がして、「正確な波動関数の構造」という研究を始めました。そして色々の角度から面白い研究を発表しましたが、ついに最も素直な、今までの研究のどれとも両立し、しかも全く新しい視座に立つ、シュレーディンガー方程式の正確な解法が 2004 年誕生しました。今回は、この研究もアドバンスで入りたいと思っています。それで、今までの講習会では、SAC-CI 講習会としていたものを、量子化学講習会とし、それらしき副題もつけています。

exact 理論というのは、シュレーディンガー方程式の正確な解を、まさにそれを求めるこ

## SAC-CI理論

### SAC-CIプログラム



対象: これらの状態が関与する化学と物理

## FC(SAC-CI,ESF)理論

- 自由完員関数(FC)理論: シュレーディンガー方程式の正確な解
- SAC-CI理論: 様々な分子の様々な電子状態の精密計算
- ESF理論: Hellmann-Feynman定理を満たす正確な化学理論

これらの長所を兼ね備えた複合理論



とができる理論です。この理論はそれ自身、理論の最も優れた形でもありますので、他と妥協しないところもあり、また全ての方法を包容する大きさも持っています。こう言えるのは、中辻自身がその生みの親であり、その成長を見まもる立場であったからこそいえるのだと思います。

Exact 理論はシュレーディンガー方程式の正確な解法ともいえますが、それは Full-CI で、既にあるではないか、といわれる方もおられるかもしれません。しかしそうではありません。Full-CI はあってないような理論であり、荒い基底関数で Full-CI をしたところで、できたとしてもたいしたものではありません。完全な基底関数などないのですから。別の言葉で言えば、今ある量子化学理論で、真に exact な理論と言えるほどの汎用性を持ち、計算機さえ許せば、ずばり exact な解を出せる理論は、中辻の理論を除いてありません。

中辻の exact 理論はどのような関数から出発しても真に exact な波動関数を作り出す理論です。その行程の中に、あるいは現在の計算機では時間がかかるかもしれないプロセスがあるかもしれませんが、不可能なプロセスはありません。

そのような方法の一つとして福音があります。それはこの exact 理論は荒い波動関数から出発してそれを exact にするだけではなく、近似的な理論に応用して、理論そのものを exact にしていくこともできるということです。その一例として、この exact 理論を SAC/SAC-CI 理論にアプライする理論もこの講習会で紹介しようかと思っています。

分子の計算では、exact 波動関数の一つの必要条件でもある Hellmann-Feynman 定理を満たすことも必要であると考えています。それにより、計算されるエネルギーだけでなく、一つ一つの原子核に働く力も容易に計算されるようになり、中辻の静電力(ESF)理論という exact 概念に立って化学を考え予測する考え方が生きてきます。これも面白い理論ですので是非使ってみてください。波動関数が exact になると難しくて何も分からなくなるのではないかと思われる向きもあると思いますが、決してそうではなく、静電力(ESF)理論という直感的で化学が面白く好きになる考え方が、自在に使えるようになるのです。

この講習会の一つの目的として、私たちの研究所本来の考えもあります。それは化学理論を通じて、世のため人のためになることをするということです。私たちの化学理論は、決してアカデミックだけではなく、世のため人のためになることを目的としています。NPO 法人としての目的です。もしこの量子化学講習会を通じて生まれる交流によって、世のため人のためになるチャンスが生まれるのであれば、是非教えてください。

さらにご興味のある方は、状況に応じて、ご研究内容に照準を合わせた共同研究への発展も可能です。お気軽にお尋ねください。

**皆様のご参加をお待ちしております。**

会場は、量子化学研究協会研究所のある京都技術科学センターです。京阪電車の出町柳駅を下車、鴨川沿いに南へ10分ほどの京都技術科学センターの1階、玄関から近いB会議室です。静かな場所で、密なディスカッションが可能です。稔りある講習会になることを願っています。この機会にふるってご参加ください。

