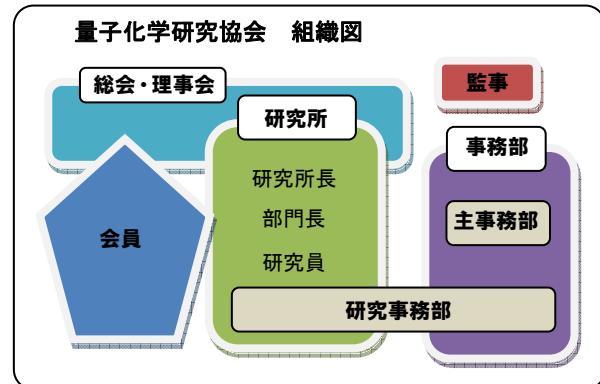


組織

量子化学研究協会

量子化学研究協会は、総会及び理事会により運営されています。



研究協会役員（平成 20 年 6 月現在）

| 職 | 氏名 | 所属等 |
|------|--------|------------------------|
| 理事長 | 中辻 博 | 量子化学研究協会 |
| 副理事長 | 波田 雅彦 | 首都大学 |
| 副理事長 | 江原 正博 | 自然科学研究機構 計算科学研究センター |
| 理事 | 中井 浩巳 | 早稲田大学 |
| 理事 | 杉本 学 | 熊本大学 |
| 理事 | 長谷川 淳也 | 京都大学 |
| 監事 | 牛尾 二郎 | 日立製作所 |

研究協会研究所

（研究所長 中辻 博）

量子化学研究協会研究所は、真に予言的で有用な革新的量子化学を建設しその普及を図ることを目的として、量子化学研究協会の研究活動の中核として、専任の研究員を中心に活動しています。

研究所研究部門（平成 20 年 6 月現在）

| | |
|-------|---|
| 第一部門 | 中辻 博 |
| 研究テーマ | ・量子的化学原理の発見と深化 ・正確な予言学としての量子科学の建設と確立 |
| 第二部門 | 福田 良一 |
| 研究テーマ | ・相対論的量子化学の建設 ・SAC-CI 法の開発と応用 |
| 第三部門 | 宮原 友夫 |
| 研究テーマ | ・巨大系の量子化学 ・光誘起相転移 |
| 第四部門 | 中嶋 浩之 |
| 研究テーマ | ・シューレーディンガ方程式とディラッカー クーロン方程式の解析的一般解法 |

量子化学研究協会へのアクセス

研究協会研究所



〒615-8245

京都市西京区御陵大原 1-36
京大桂ベンチャープラザ北館 106 号室
TEL : 075-634-3211
FAX : 075-634-3211

阪急電鉄桂駅より

- 桂駅西口よりバス（約 15 分）
 - ・京都市バス（西 6 系統）
 - ・京阪京都交通（桂坂中央行き）
- 「桂イノベーションパーク前」にて下車
バス停から徒歩 1 分（坂を下る）

研究協会事務所

〒612-8029

京都市伏見区桃山町三河 58 番地の 8

特定非営利活動法人

量子化学研究協会

Quantum Chemistry Research Institute

協会案内



<http://www.qcri.or.jp/>

世界に冠たる研究を！

研究協会の概要

 設立目的

この法人は、量子化学の研究とその普及に関する活動を行いその成果を国際的に公表することによって、科学技術の発展と人類の幸福に寄与することを目的とする。(定款第3条)

事業 (定款第4・5条)

この法人は、次に掲げる特定非営利活動を行う。

- * 学術、文化、芸術又はスポーツの振興を図る活動
 - * 科学技術の振興を図る活動
 - * 社会教育の推進を図る活動

特定非営利活動に係る事業:

- * 量子化学研究推進事業
 - * 量子化学研究成果公表・出版事業
 - * 量子化学計算プログラム開発・普及事業
 - * 量子化学の普及・啓発事業
 - * ホームページ作成事業

主な公的研究費の受入

JST(科学技術推進機構)CREST(戦略的創造研究推進事業)平成19年採択
研究領域:マルチスケール・マルチフィジックス現象の

統合シミュレーション

研究課題：超精密予測と巨大分子設計を実現する革新的量子化学と計算科学基盤技術の構築

研究代表者：中辻 博

会員・職員数

專任職員數 6名 (研究職4名 事務職2名)

会員数 17名

(平成 20 年 6 月現在)

入会案内

協会ホームページ、<http://www.qcri.or.jp/> にて、詳しい案内を
いたしております。

沿革

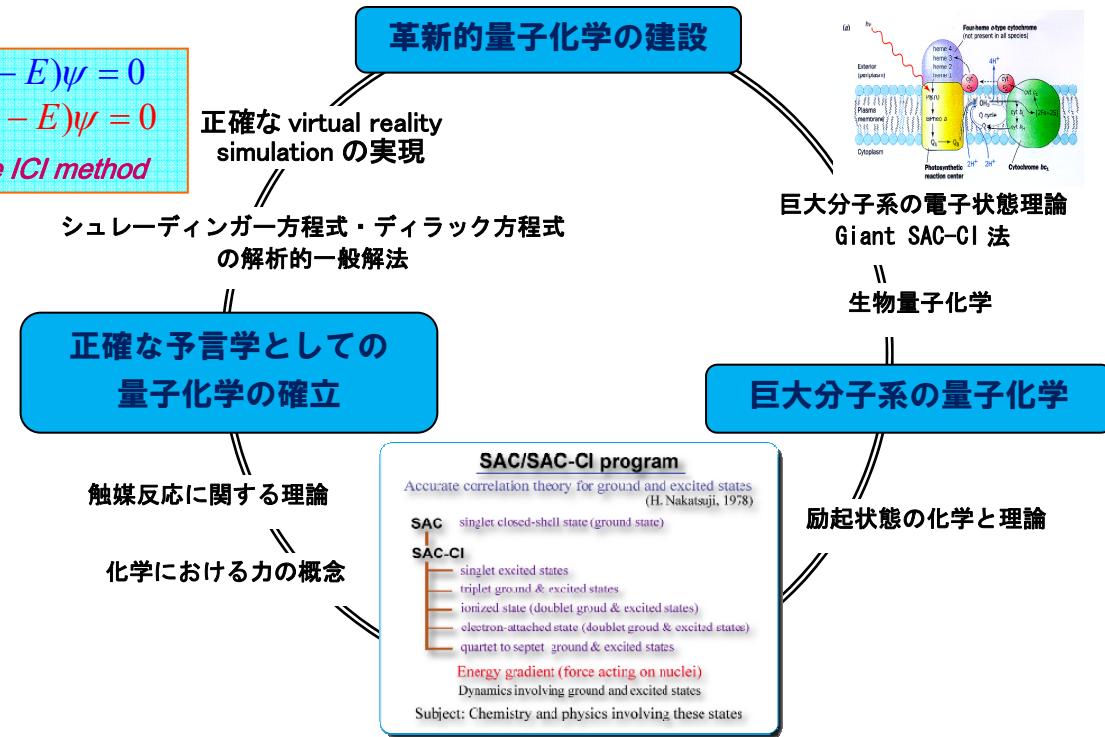
| | | | |
|-------|-----------|------------|---|
| 2006年 | 4月 8月 | 29日 14日 | 量子化学研究協会 設立総会 量子化学研究協会設立 活動開始 (創立記念日) |
| 2007年 | 3月 10月 | 29日 | 京大桂ベンチャープラザに研究所移転 協会を中心とした研究課題が、戦略的創造研究推進事業(CREST)に採択される |
| 2008年 | 5月 | 31日 | CRESTとの共催でシンポジウム「革新的量子化学に向けて」を開催 |

研究の概要

私は、量子化学の研究グループであり、「革新的な量子化学理論と科学概念の創造・展開」を最重要テーマとしています。その目的は、多くの化学現象の根底に潜む普遍的な原理を明らかにすること、またそれに基づき、新たな化学現象を予言することです。

そのためには「自由な発想でオリジナリティーの高い理論を作ること、自然を真摯に見つめること」が肝要であり、本法人を拠点とする研究者や会員が、親しく楽しくディスカッションをしながら研究を進めています。

理論の良いところは、実験とは異なり、作成できる試料の制限や実験装置の制約等にとらわれることなく、自由な発想で多くの物質の様々な現象をそのエッセンスにおいて扱うことができる点にあり、自由こそ研究の原点であります。



私達の理論による化学現象の解明と予言

私達の研究のテーマは、上の絵に示した通りです。Schrödinger方程式の持つ莫大かつ超正確な予言力を科学的研究に生かすための方法論の構築とそれによる「正確な予言学」の確立や、すでに定評のある私達のSAC-CI理論により励起状態の化学を深め、生命現象の根底に潜む原理を明らかにすること、さらにこれを巨大分子系に拡張し、結晶や触媒、生物をそのままで研究することです。これらの研究は世界の学会で極めて高い評価を受けています。

私達が開発した理論を実際の複雑な反応系に応用するために、効率の高い計算アルゴリズムやソフトウェアを開発し、コンピューターの能力を最大限に駆使した計算も進めています。