QCRI

量子の世界

No. 5

－ 目次 －

	ページ
1．分子会合系の電子密度エネルギー構造解析とマイクロ波熱触媒効果 柳田 祥三 (大阪大学 名誉教授)	1
2．量子化学の普及 福田 良一 (京都大学 学際融合教育研究推進センター 准教授)	7
3．「第 11 回 革新的量子化学シンポジウム」のご案内	11
4．「第 7 回 JCS 理論化学シンポジウム」のお知らせ	17
5．編集後記 「SAC-CI・1 日講習会」、ご寄付のこと、ご寄稿のことなど	20

分子会合系の電子密度エネルギー構造解析と マイクロ波熱触媒効果

柳田 祥三
大阪大学 名誉教授

分子会合系の電子密度エネルギー構造解析の有用性を述べた解説論文がある。約１年前，初刊の Nature Review の１ページに掲載された “Computational predictions of energy materials using density functional theory”と題する総説である。著者らは表題に，Density Functional Theory(DFT)の語を用い，Walter Kohn らの DFT の偉業に繋がった量子世界の発展を讃えて，次のように書き出されている。

柳田 祥三 先生と Walter Kohn 先生

In 1929, the physicist Paul Dirac wrote, “The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble”

QCRI ©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

一方，量子計算 DFT の信奉者である小生は，Kohn 博士と 2014 年 9 月，Istanbul で開催された Solar Energy for World Peace の国際会議で初めてお話しする機会を得た。写真はその時撮影したものである。原子電磁波分野の物理学者であった同博士は，Fukushima Accident を非常に危惧されたことを思い出す。昨年 4 月 19 日 93 歳の人生を終えられたことに，この紙面を借りて哀悼の誠を捧げる。

上記の Dirac の言葉と Kohn 博士の偉業と逝去に触発されたこともあって，マイクロ波熱触媒効果, すなわち,“化学反応がマイクロ波エネルギーによって急速に加熱されて反応速度論的に進行する効果” の本質を理解するために，密度汎関数理論(DFT)に基づく「分子会合系の電子密度エネルギー構造解析（分子モデリング）」(DFT-based molecular modeling, 略して DFT/MM（Quantum mechanics and Molecular mechanics(QM/MM)と同じ）) を行った。

筆者は，分子間力，すなわち，van der Waals と Coulomb 相互作用(vdW&Clmb)によって会合した分子系に対しても DFT/MM することが可能であり，会合分子系の電子密度のエネルギー構造を精度よく知ることができることを学んできた。すなわち，vdW&Clmb 由来の会合構造を，分子力学計算(molecular mechanics)によって構造の最適化を行い，その構造に対して DFT 計算する。筆者がここ数年，PC に搭載した計算ソフト Spartan で DFT/MM(B3LYP, 6-31G*)計算を，多くの分子系に対して実験感覚で行ってきた。分子間会合体の電子密度エネルギー構造は，会合分子を PC スクリーン上に対峙するように描き，molecular mechanics(Merck Molecular force factor)でその会合構造の最適化を行い，その構造に対して DFT に基づき分子間会合体の電子密度エネルギー構造を求める。分子の会合が発熱的であるかどうか，また，溶解性の尺度である dipole の大小，分子間 Coulomb 相互作用の目安になる分子間の各原子上の Mulliken charge，分子軌道エネルギー，特に HOMO と LUMO 配置と電子準位等を求める。計算ソフト Spartan ではこれらの DFT 計算を PC を用いて迅速に行うことができた。さらに Spartan による DFT/MM では, UV/Vis スペクトル(DFT-UV/Vis)と IR スペクトル(DFT-IR)を計算結果として求められる。DFT-UV/Vis では, 強い吸収波長に対する相対強度とともに軌道間遷移の寄与割合, DFT-IR では 4000～500 cm^{-1}（波長 2μm~50μm）領域に加えて，遠赤外(FIR)領域 500～0 cm^{-1} 波長 50μm~，周波数 THz～MHz）の相対強度と熱吸収振動モードを動画で確認できる。

筆者は DFT/MM によって求めた分子会合構造が信頼に当たるものかどうかを確認するために，benzene，塩素ガス，色素類の DFT-UV/Vis を測定された UV/Vis の実測スペクトルと比較した。DFT/MM を B3LYP-6-31G*code で計算する限り，比較できる範囲で一致することを確認した。特に，低分子では，vdW&Clmb によって会合状態を考慮することで, DFT-UV/Vis の測定スペクトルとの微妙な吸収位置の差を理解した。さらに特筆すべきは，計算ソフト Spartan では，会合分子系の DFT-IR では，500 cm^{-1} 以下の遠赤外領域のスペクトルが得られ，会合分子間の振動による FIR 吸収が確認できることである。

大阪大学名誉教授の松尾隆裕らは cyclohexanol 溶液が 235 KHz から 10.1 MHz のラジオ波領域の電磁波照射による熱の発生を確認・報告している（図１）。特に注目すべき点は，結晶化による発熱後も発熱が観測されたこと，周波数によって結晶状態での発熱が継続することである（*Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 39, 1827 (1966)）。

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

図1. シクロヘキサノール溶液の外部冷却下電磁波(0.2–10MHz)照による熱発生(示差熱分析)(*Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 39, 1827 (1966) より引用)

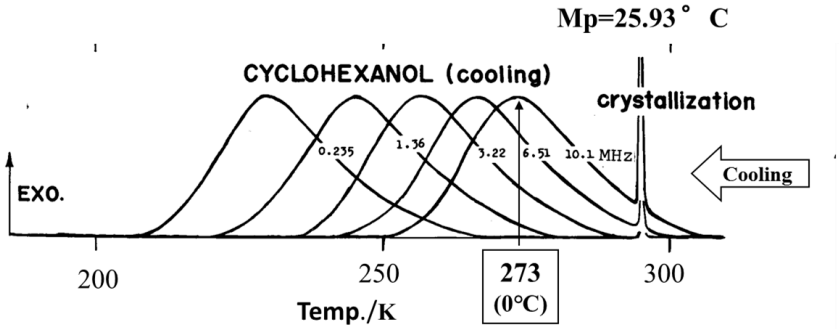
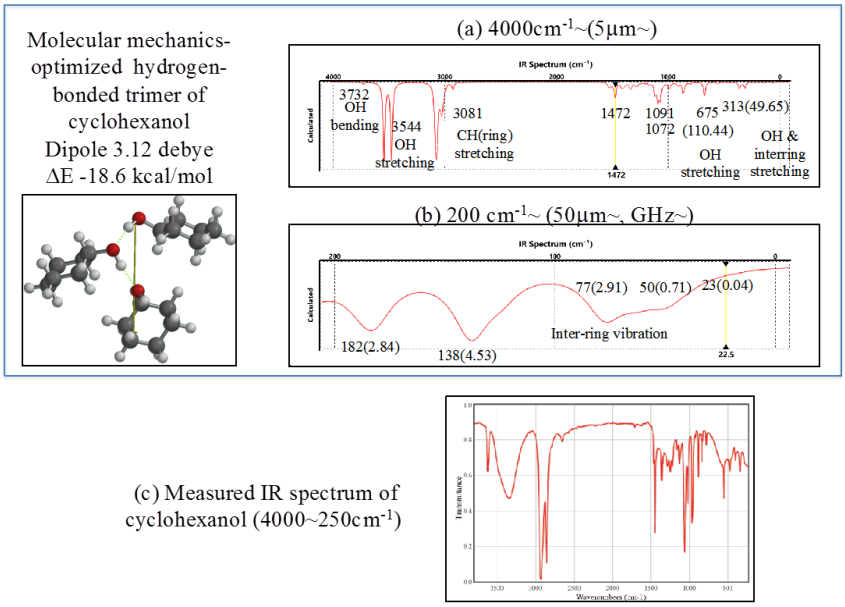


図２. Cyclohexanolの水素結合3量体のDFT-IR/FIR



(c) Measured IR spectrum of cyclohexanol (4000~250cm^{-1})

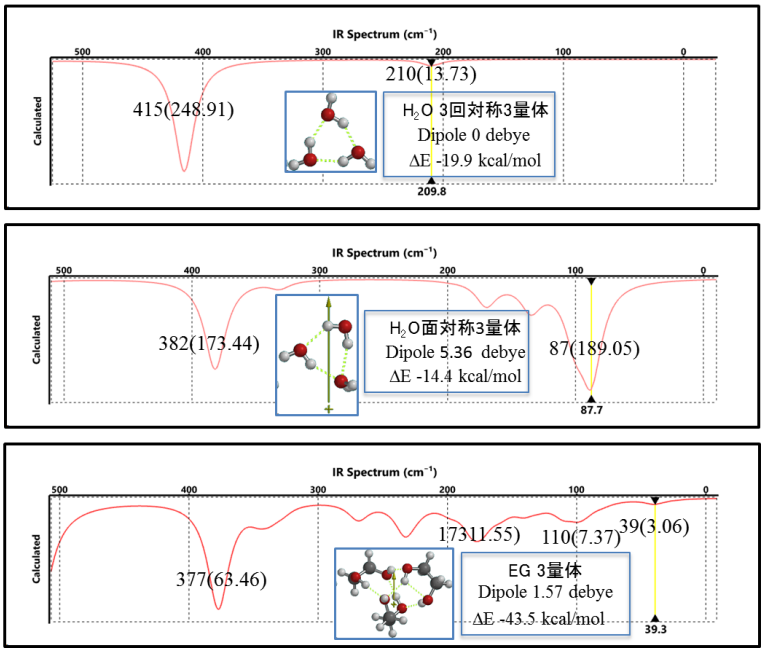
図 2 は Cyclohexanol の水素結合による 3 分子会合体の DFT/MM 結果である。DFT-IR/FIR における吸収シグナルの極大波数に対してその伸縮振動の帰属を示した(図 2 (a))。図 2 (b)は 200cm^{-1}～(GHz)にまで領域を拡大して示した。実測 IR スペクトルとおおよその吸収波数は一致する(図 2c)。特に，FIR 領域において，もっとも低波数の 23cm^{-1} 吸収は，水素結合を含む 3 分子全体の振動(ring vibration)と確認できる。熱振動のエネルギーが放射(emit)する過程で吸収波長領域 50, 77.138, 182cm^{-1}（cyclohexane ring 間の vibration）での FIR エネルギー吸収とその放射(emission)につながり，ラジオ波が熱に変換されて発熱現象を伴うと理解した。なお，cyclohexanol 分子単独の DFT/MM では DFT-FIR は表示されない。したがって，cyclohexanol は水素結合による会合によってラジオ波エネルギーの吸収・emission を可能とし，FIR 領域のエネルギー吸収・emission を経由して会合分子そのものに熱エネルギーを付与すると理解した。フェムト秒レーザで発光分子を 2 段階励起して波長の短い光を発光させる長波長光の短波長光への変換を，photon upconversion という。ラジオ波エネルギーの FIR 領域のエネルギーの吸収・emission を経由してエネルギー差の僅少の熱エネルギーに変換することは，thermo-upconversion と表現できる。

マイクロ波（MW）熱化学反応における瞬時の発熱も，MW エネルギーの熱への

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

thermo-upconversion である。図 3 には，MW で瞬時に加熱される水分子と ethylene glycol(EG)の各水素結合 3 量体について DFT/MM で得た DFT-FIR スペクトを示した。

図3．水分子環状3量体（2種）とエチレングリコール最安定3量体のDFT−FIR



生成熱(ΔE)が最も大きく Dipole の大きな H_2O の面対称 3 量体と EG 3 量体の DFT-FIR において，MW から FIR 間の吸収・emission が大きく，効果的な thermo-upconversion による迅速な温度上昇を引き起こすと理解した。すなわち，電磁波エネルギーである MW の吸収・emission が，より高い熱エネルギー（赤外線）への thermo-upconversion (MW-thermo-upconversion)経由の emission,すなわち発熱を理解した。特に，沸点の高い EG では蒸発による熱の消失が抑制される結果, EG 溶液は MW によって短時間に高温になる。

MW による遷移金属錯体の迅速合成を世界に先駆けて報告した松村竹子と筆者は，マイクロ波を熱源に用いる迅速な速度論支配反応を，MW 熱触媒反応と表現してきた（「化学を変えるマイクロ波熱触媒」，化学同人 2003 年）。マイクロ波エネルギー(MW)を吸収した反応基質に発生する熱によって反応速度論支配の反応，すなわち遷移状態の反応基質への活性化エネルギーの付与（加熱する)が MW 吸収と同時に開始され，反応が触媒的に進行するとの判断である。最近 Chemical & Engineering News は,“MICROWAVES STAY FAST AND MYSTICAL” (C&EN, January 27, 26, 2014)との見出しで MW 熱触媒効果を紹介し，MW 加熱反応の特徴を“extra-temperature thermal effect”と表現している（J. Org. Chem. 2014, 79, 7437−7450）。

MW 照射で一瞬に反応が終わる Cyclopentadiene (PD)と Maleic anhydride(MA)の Diels Alder 反応を，図 4 では Woodward-Hoffman 則の 4+2 付加反応を想定して表示した。反応式は Endo 付加体の cis-endo-5-norbornene-2,3-dicarboxylic anhydride のみを与え，異性体の Exo 付加体等の副生成物を与えない「非の打ち所のない完璧な反応」，すなわち「Mona Lisa Reaction」であることを示す。この反応は，福井謙一先生が Frontier Orbital theory でノーベル化学賞を受賞された 1985 年頃, 具体的反応例としてよく用いられた。

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

図4. Frontier Orbital theoryの説明に福井先生が採用されたDiels-Alder反応

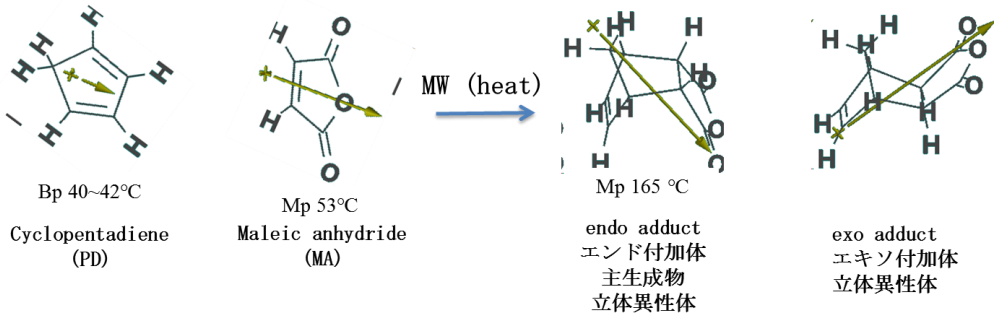
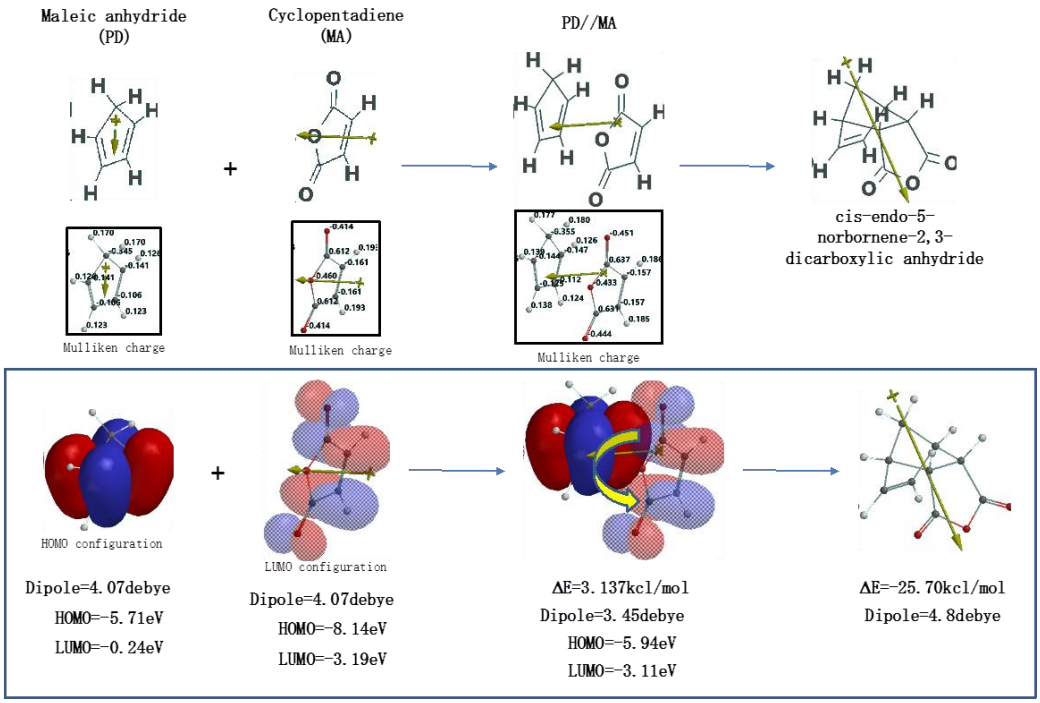


図 5 には AM//PD の DFT/MM 結果を考慮して，反応分子 PD と MA を並べ，図 4 記載の反応を改定して表示した。理解を深めるためである。分子間会合体 MA//PD の DFT//MM は MMFF に基づき PD//AM 構造の最適化を行った後，その single point 構造の電子エネルギー構造を示した。

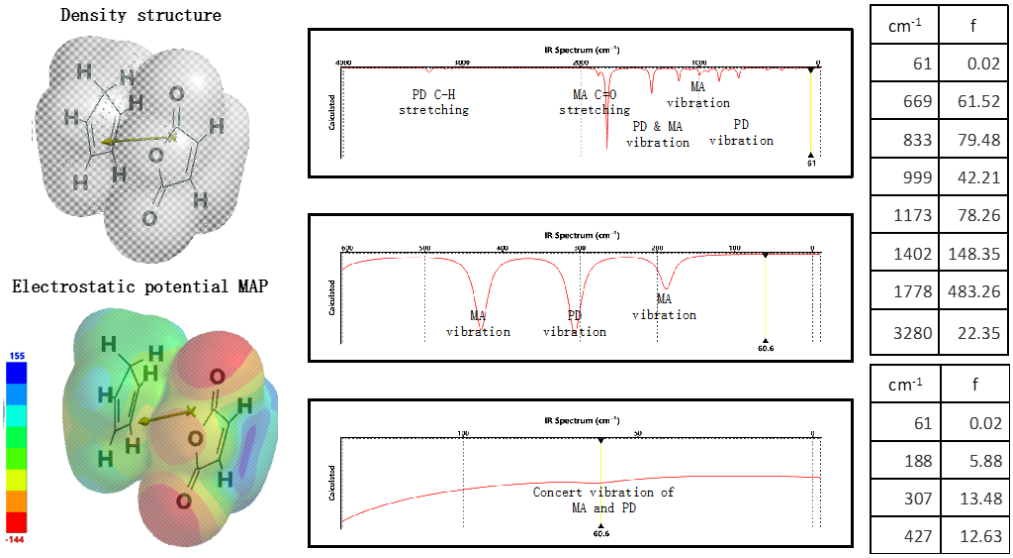
各分子と会合体の Mulliken charge を調べたところ，PD//MA 会合体では Coulomb 相互作用が優先的に寄与していることが検証できた。また，PD の HOMO，MA の LUMO の配置は，会合体 PD//AM における HOMO と LUMO に保持されていることが確認された。さらに，PD//MA 会合体において，MA 上の LUMO を左側（黄色の方向）に少し回転させると，PD 上の HOMO と同位相の重なりが可能となり，結合性軌道を作ることができること，すなわち，endo 付加体を与えることが検証できた。PD//MA の HOMO と LUMO の energy gap は 2.83eV(λ=438nm)である。MA 上の HOMO と PD 上の LUMO の同位相の重なり回転が熱的に起こることで，energy gap は小さくなり，結合軌道を作る HOMO/LUMO 間の電子移動が可能となると理解した。

図 5．DFT/MMに基づくDiels-Alder 反応のモデリング



©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

図６ maleic anhydride (MA) と cyclopentadiene (PD) の分子間会合体(MA//PD)の DFT-IR



cm^{-1}	f
61	0.02
669	61.52
833	79.48
999	42.21
1173	78.26
1402	148.35
1778	483.26
3280	22.35

cm^{-1}	f
61	0.02
188	5.88
307	13.48
427	12.63

図６には会合体 PD//AM の電子密度構造(density structure；DFT における結合表示)と electrostatic potential map(Coulomb 相互作用を可視化)と共に，DFT-IR 解析結果を表示した。0cm^{-1} 以上の低波数の電磁波を吸収すると共に，FIR 領域に強い吸収を示す。特に，61cm^{-1} の吸収は，PD と AM 分子間の concert vibration に基づくことが Spartan の動画表示で確認され，PD//AM 会合体で熱的に HOMO/LUMO の位相の重なりで endo 体への結合性軌道ができることを確証した。PD//AM 会合体の生成熱(ΔE=3.137kcal/mol)は会合が吸熱的であることを示した。Density 構造と electrostatic potential map と考え合わせると，PD//AM 会合体状態は，反応の遷移状態と言える。

分子間力で会合した分子集合体に対して DFT/MM することは，有機化学反応のモデリングにもとづく反応機構の理論的解明に止まらず，機能電子デバイスの界面構造の電子物性の解析に大きく役立つ。筆者は色素増感太陽電池や水の光分解に関係する分子界面の DFT/MM に関する研究を２年前に報告している。Key word を”Shozo Yanagida”, “DFT”, “Spartan”として Website で検索して論文３報を download してお読みいただければ幸いである。

分子会合系の電子密度エネルギー構造解析は「量子の世界」の新しい幕明けになると申し上げたい。

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

量子化学の普及

福田 良一
京都大学 学際融合教育研究推進センター 実験と理論計算科学の
インタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット 准教授

福田 良一 先生

昨春、およそ８年ぶりで大学に職を得ました。あらためて量子化学を教育する立場となり、量子化学の普及・教育活動について考える契機となりました。正確には、私は前職の分子科学研究所（分子研）においても総合研究大学院大学(総研大)の教員を兼務しておりました。いわゆる教育機関価格などの恩恵も受けていました。そのため、実は、ずっと大学教員でもあったわけですが、総研大には学部学生はおりませんし、研究室に来る学生は、量子化学研究の道を既に選択した研究者ですから、量子化学の普及活動の対象外でしょう（彼らはすでに、普及をすすめる立場です)。「量子の世界」への寄稿の機会を得て、この一年の大学教員生活で感じたことと、分子研での共同研究やアウトリーチ活動の経験をもとに、量子化学の普及についての思いを書いてみます。読者の皆様が、量子化学と社会とのかかわりについて考えるきっかけとなれば、と思っております。

量子化学研究協会では、「量子化学の普及」をその活動内容に掲げております。それは、非常に骨の折れることではありますが、認定 NPO として重要な活動のひとつであります。さらには、こうした普及活動が、いずれは学術研究活動を支える基盤を作ることになるはずです。私も、量子化学への理解とその普及が進むことを願っており、そうした活動を続けて行きたいと思っております。なお、ここでいう量子化学とは、計算機を使って化学系のシュレーディンガー方程式を解く、いわゆる計算量子化学のことです。実験的なアプローチは除外します。

研究者への量子化学の普及

私がここで改めて述べるまでもなく、量子化学を専門としない研究者の間にも、量子化学計算はそれなりに普及しています。例えば、実験研究と量子・計算化学との関係や、企業研究における量子化学については、本研究所誌ですでに、波田雅彦先生や松崎洋市先生が書かれております（「量子の世界」2015 年秋号、2016 年秋号)。ただし、その普及の度合は、分野によって、はなはだしい差があると感じています。量子化学があまり普及していない分野は、私の考えでは２つに分けられ、すなわち、

i) 量子化学が役に立つと思われていない分野。
ii) 適当なモデルや計算手法が見出されていない領域。

であると思います。i) としては、伝統的に原子論的な描像を取り入れていないような、例えば身近な処では、化学工学のようなマクロな現象を対象とする分野が当てはまると思います。こうした分野では、実際にも量子化学があまり役に立たない事がほとんどであると思います。しかしながら、新しい学問は学際領域から生じるものですから、最も可能性を秘めている科学のフロンティアであることは疑いないところです。こうした分野に対して、特に積極的に打って出て量子化学の普及活動を行う必要はないと思っていますが、ごく稀

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

にあるかもしれない貴重な出会いを見逃さないよう、「構えのある心」“the prepared mind”（Louis Pasteur, 1854）は持ち続けたいところです。

量子化学の多くの研究者は、ii) の領域で挑戦していると思います。私もそうです。新しいモデルや計算方法を開発することで、これまで望まれつつ計算対象にできなかった現象が研究できるようになることは、まさに量子化学研究の醍醐味であると思います。そうした研究に対して、実験科学者等から反響があると、量子化学の普及や拡大に貢献しているという実感を得ます。こうした領域はたくさんあります。困難な挑戦である場合も多いですが、やりがいのあるテーマの宝庫であると思います。そして、新たに開発された手法やモデルが量子化学界全体にフィードバックされ、全体のレベルが上がることがこの研究分野としての理想的なサイクルでありましょう。このように、研究そのものの進展と合わせながら、少しずつ最前線を拡大することで、量子化学の領域を広げて、その普及と深化を図るのが王道なのであろうと思います。このように、研究者の世界での普及活動と研究活動は、上手くかみ合うことで一体として回ってゆくものだと思います。では、その研究者を育てる、あるいは研究の理解者やサポーターを育む教育現場ではどうでしょうか。

大学教育での量子化学の普及

京都大学工学部工業化学科では、物理化学実験の一部にて量子化学計算を行っていて、学部３回生を中心に、Gaussian を使った課題に取り組ませています。他の課題（熱力学、分光学、反応速度論）と比べると、量子化学計算と材料物性の課題は、教える側にとっても学ぶ側にとっても相当難しいと感じました。後に挙げた２つの課題は、いまだ学問的に未完成であるためであろうと思います。波田雅彦先生が書かれているように（「量子の世界」2015 年秋号）、量子化学計算が分光測定や熱測定のような「道具」として完成してしまえば、量子化学は完成された閉じた学問体系として、例えば、熱力学や古典電磁気学のように、教科書に従って学ぶ「教科」になるのでしょうか？私には、その「完成形」がどのような物になるのか全く想像がつきませんし、そのような「完成形」が存在する事自体に懐疑的であるのですが、いずれにせよ、それはまだまだずっと先のことだと思います。

量子化学の中でも分子軌道法は、相当に完成された概念であり、現代化学を理解する上で欠かすことができないアイデアです。シュレーディンガー方程式から、分子軌道法（ハートリー＝フォック方程式）を導出するのはそれほど容易な事ではないと思いますし、それを十分に理解している学部学生はそれほど多くないと思います。一方で、分子軌道法から得られる概念（軌道エネルギーや、結合性／反結合性、フロンティア軌道、配位子場理論など）は直感的に理解しやすく、なじみ易いと思います。しかし、私はここに、量子化学の普及や教育の難しさを感じました。

原子論的な描像に基づいた研究を行っている研究者や学生で、分子軌道法を知らない人はいないと思います。Gaussian などのプログラムを使って、分子軌道（コーン＝シャム軌道）計算を日常的に行っている実験化学者はたくさんおります。しかしながら、分子軌道法の限界を認識し、それを超えようと（理論・実験手段を問わずに）考えている方や、最新の解析手法を用いようとしている方は非常に少ないようです。つまり、思うような計算結果が得られなかった場合や、計算結果の解釈が難しい場合にどうすべきかが問題になります。ともすると、分子軌道法の描像に固執し、自らの実験手法を縛ってしまっているような研究すら見受けます。分子軌道法という概念が便利で直感的に理解しやすく、数学的な導出が面倒であるため、「量子化学≒分子軌道法」との誤解を発信してしまっているので

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

はないかと危惧しています。特に教育現場では、分子軌道法が上手くいく場合を中心に教えています。成功例を教えるのは容易ですが、その限界を教えるのは難しいと感じています。

一例として、量子化学計算の演習で、２原子分子のポテンシャル曲線を計算し赤外吸収波数との比較をするような課題を与えます。すると、ハートリー＝フォック計算でモースポテンシャルの大域的なフィッテイングを行おうとして、解離極限が出ずに頭を悩ます学生が少なからずおります。分子軌道法を基に、このやり方の問題点を説明するのは大変です。すっきりと説明するには、原子価結合法を持ち出すのが良いと思います。量子化学の教育・普及という観点からも、原子価結合法の再評価が必要だと感じます。小分子の簡単な計算でよいので、パソコン上で大学生が原子価結合法の計算を実行できて、分子軌道法との違いを確認できるような計算プログラムは無いものでしょうか。また、軌道エネルギーとイオン化・電子付加エネルギー、光吸収波長（励起エネルギー）との関係も直感的には非常に理解しやすいのですが、実際には、数値的に合わないことは良くご存じだと思います。分子軌道法のレベルでなぜ数値的に合わないのか説明するのは難しいです。

最近では、インターネット上で、量子化学の講義に関するドキュメントや動画を多数目にすることができます。日本語の物は少ないですし玉石混合ではありますが、現在の大学生はこうした物を見ながら、興味を持ったり、学んだり、誤解したりするのだと思います。この研究所誌「量子の世界」もインターネット上で公開されており、量子化学に興味を持った学生が目にするかもしれません。クオリティーには気をつけたいと思います。このように、大学教育の現場では、カリキュラムや教員人材の制約から、量子化学の普及教育は最低限度に限られているように思います。ただし、学ぶ機会は講義や演習に限られるものではありませんから、意欲ある学生に本物の量子化学に触れる機会を提供できないか考えていきたいです。こうした、オープンな環境を提供することは、学生にとどまらず広く一般社会への量子化学の普及にも役立つはずです。

一般社会への量子化学の普及

量子化学（さらには分子シミュレーション等を含む計算化学）の大きな利点として、特殊な装置や大型施設を必要としないという点があります（もちろんスーパーコンピューターのような大型施設を使う研究もありますが、今日のスーパーコンピューターは内容的にはパーソナルコンピューターと大差ありません）。これを読んでいる量子化学者のほぼ全員が、自宅からネットワーク越しに計算を行う事をしていると思います。このように、場所に縛られずに研究できるという事は、実験研究では難しいことです。

無料で配布されている量子化学プログラムを、中古 PC やレンタルサーバーで動かすことができますから、理論計算ならば、場所や資金の制約を大きくは受けずに（ゼロではないでしょうが）研究を行う事が出来ます。こうした点で、量子化学は非常にオープンな学問であると、私は考えています。我々量子化学者が公表した研究結果は、世界中の誰でもが検証可能であるという点は肝に銘じておく必要があります。

さて、こうした面から、量子化学はもっと多くの「科学好きな人々」から注目されても良いように思います。最近は、男の子がなりたい職業として「学者」が人気だそうですが（第一生命保険「大人になったらなりたいもの」アンケート調査より）、そうした夢をかなえ、誰もがコンピューター内に自分の「研究室」を持つことができる、というアイデアは十分に魅力的であると思います。しかし、実際には、プロの研究者以外で量子化学に興味をもって実践している人はほとんどいないのではないでしょうか。計算プログラムの使いにく

QCRI ©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

さが、研究者への普及も含め、量子化学の普及の大きな障害になっているように感じます。

私は、これまでに、自作の物も含めて二十種類ほどの量子化学計算プログラムを使って研究を行ってきましたが、新しい計算プログラムの使い方を習得するのは、相応の負担でありました。特に、インストールとコンパイルから始めるとなると、ちょっとした「覚悟」が必要です。また、最も頻繁に使用している Gaussian プログラムでも users' reference を手放すことができません。専門研究者でもこのありさまです。専門でない研究者や、ましてや一般社会人にとっては、たとえタダで手に入れたプログラムであっても使ってみようという気にはならないのかもしれません。こうした現状は何とかならないものでしょうか。最近は、データ科学と自然科学との統合の動きがあり、計算に関わる情報を統合しようという動きが出てきたようです。

一方で、「京」コンピュータープロジェクトのような大きなプロジェクトの共通資産として作られたはずのソフトウェアに於いてでさえ、相互の互換性がありません。自然現象の階層性をいっておきながら、プログラム階層間に互換性が無いのはおかしなことです。「ポスト京」プロジェクトでは、原子レベルでの自然現象の計算情報を統合的に扱えるようなフォーマットづくりを、ぜひ考えていただきたいものです。

最近私は、Materials Studio という統合シミュレーションプログラムを使う機会を得ました。特定のプログラムを宣伝するつもりはありませんが、非常に良く設計されたインターフェイスを持っており、量子化学、バンド計算、シュミュレーションやモンテカルロ計算まで統合したフォーマットで扱えるようになっており驚きました。説明しにくいのですが、一貫した設計思想に基づいたインターフェイスになっていて、例えば、高校生でも少し習えば、色々なレベルの計算を実行できると思います。(しかし、たいへん高価なソフトウェアであり、量子化学の普及への貢献度は推し量りにくいです。) これは想像ですが、プログラムの設計に情報学や言語学などの分野の知識が生かされているように強く感じました。私も、色々と量子化学の計算プログラムを書きましたが、データ構造やインターフェイスには、ほとんど注意を払ってきませんでした。しかしながら、成功した理論であるほど、そのサイエンスが広がってゆき、多様なインターフェイスを後から継ぎはぎのように重ねた物になってしまいます (SAC-CI と PCM をつなぐのには苦労しました)。量子化学が一般に持っているデータ構造を、そろそろゼロから見直す時期なのかもしれません。プログラムや情報といった知見から自然現象を見つめ直すことで、新しい理解が生まれるかもしれません。

量子化学の普及の難しさは、

i) 新しくて発展途上にある分野であること。

ii) 社会的な成果や応用例が具体的に見えにくいこと。

にあると、私は思いました。i) については、それが逆に大きな魅力であることも確かです。そこを上手く伝えていきたいと思います。ii) についてですが、近年わが国においては、「ものづくり」ということが強調されています。私も、ものづくりの重要性を否定するつもりはありませんが、それが、社会的、経済的な応用面でのみ語られ、理論や原理の軽視へと向かっていくことを危惧しています。結局、理論が現実に役に立つことを示してゆく事が肝要であり、そのためにも量子化学が広く社会に普及するよう微力ながらも活動してゆきたいと思っております。

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

「第 11 回 革新的量子化学シンポジウム」

～量子的自然の叡智と美～

日時: 2017 年 5 月 13 日 (土) 13:00～16:40
場所: キャンパスプラザ京都 (京都駅前北西すぐ)、第 1 会議室(2 階)
参加費: 無料

プログラム

13:05 挨拶・司会 中辻 博
尾崎先生は本年春、日本化学会賞を受賞なさいました。先生のご研究の真髄をご披露くださるものと期待しています。

13:05 – 13:50 尾崎 幸洋 (関西学院大学)
「量子化学と分子分光学」

13:50 – 14:30 奥村 久士 (分子科学研究所 計算科学研究センター)
「アミロイド線維のシミュレーション
－構造サンプリングと非平衡分子動力学－」

14:30 – 15:20 休憩

司会 中井 浩巳

15:20 – 16:00 畑中 美穂 (奈良先端科学技術大学院大学)
「自動反応経路探索を用いる不斉触媒反応の機構解明と機械学習による解析」

16:00 – 16:40 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)
「原子・分子のシュレーディンガー解による予言的量子化学の設計」

懇親会

日時: 2017 年 5 月 13 日 (土) 17:15～19:30
場所: 京都駅ビル東側 セレマビル 5 階「花の舞 京都中央口店」
参加費: 5,000 円

シンポジウムと懇親会の会場の地図は 16 ページを参照して下さい。

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

講演要旨

量子化学と分子分光学

尾崎　幸洋
関西学院大学 理工学部

1. 量子化学と分子分光学

筆者はこの 40 年ばかりの間分子分光学の研究に従事してきた。最初の 20 年は量子化学とは縁遠い研究生活であった。しかしこの状況は約 20 年前あたりから少しずつ変わってきた。分子分光学と量子化学の急接近が始まったのである。本講演では分子分光学者の立場から、分子分光学と量子化学の関係について議論したい。

90 年代の半ばまで振動分光学や電子分光学の研究はまさに実験中心であった。筆者の場合を例に挙げると、赤外・ラマンスペクトルを測定し、そのスペクトルをいかに解析し、必要とする情報を得るか、というのが研究の中心であった。古典力学に基づく、基準振動の計算を行うというのが常道であった。1990 年代以降量子化学の進歩とともにこの状況が大きく変わった。最初は赤外・ラマンスペクトルを量子化学計算で再現するという研究が主であったが、今では近赤外スペクトルやテラヘルツスペクトルにも量子化学計算が広がっている。さらにはタンパク質の赤外円偏光二色性、ラマン光学活性など複雑なスペクトル解析にも量子化学計算が用いられている。振動スペクトルに関していえば、もはやすべての分光法が量子化学と切っても切れない関係にあるといえる。

電子分光法についても状況はおおよそ同じである。本講演では、近赤外分光法、テラヘルツ分光法、遠紫外分光法への応用を例に挙げて、最近の分子分光学の最先端とそこにおいて量子化学が果たす役割について議論する。

2．近赤外分光法と量子化学-非調和性を考慮に入れた計算

筆者は近赤外分光法を発展させるために、実験と量子化学計算によって分子振動の倍音、結合音の振動数と吸収強度の研究を行った。それにより、今まで赤外スペクトルの延長では再現できなかった近赤外スペクトルの分子間相互作用による変化について、分子振動の非調和性や振動ポテンシャルを量子化学計算に組み込み、理論的に求めることに成功した。また非調和性を考慮した量子化学計算を用いて多くの分子の近赤外スペクトルを再現した。図 1 は 1-ブタノールの実験スペクトルと量子化学計算（TD-DFT）の結果の比較である。1－ブタノールには回転異性体があるが、計算にはそれも考慮している。実験結果と計算結果の一致は非常によく、非調和性を考慮した量子化学計算の威力を示している。図にはそれぞれのバンドの帰属も示した。今後もっと複雑な分子の量子化学計算も可能となるであろう。

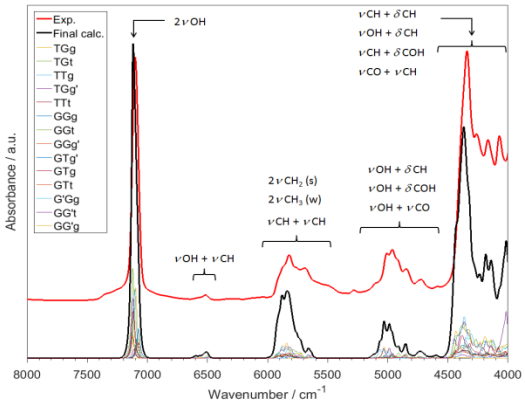


図 1　1-ブタノールの近赤外スペクトルとバンドの帰属（実験スペクトルと非調和性を考慮した計算スペクトルの比較）J. Grabska, K.B.Bec, Y. Ozaki, C.W.Huck. *J. Phys. Chem. A*, 2017, *121*, 1950−1961

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

3．高分子の低波数振動（テラヘルツ分光と低波数ラマン分光）－分子断片化法の利用

最近、テラヘルツ分光のほかに低波数ラマン分光が注目されている。筆者らは、テラヘルツ分光と低波数ラマン分光に量子化学計算法を組み合わせて高分子の低波数振動の解析に挑戦した。この場合問題となるのは、分子量が大きいということと、いかにして分子間相互作用を計算に組み入れるかということである。そこで筆者らは分子断片化法と呼ばれる方法を用いた。この方法では高分子を数ユニットからなる断片にする。それぞれの断片で量子化学計算を行い、またそれらを合体する方法である。Poly(3-hydroxy-buryrate) (PHB)について図 2 にテラヘルツ（遠赤外;FIR）スペクトルと低波数スペクトルの実験結果と計算結果を示した。テラヘルツ、低波数スペクトルとも偏光スペクトルの結果も含めて非常に良い一致を示した。さらに山本らは、量子化学計算を用いて熱によるテラヘルツ、ラマンバンドのシフトの原因は結晶格子の熱膨張によるということを明らかにした。このような知見は通常の赤外・ラマンスペクトルでは得られないものであり、低波数分光に特有の情報である。

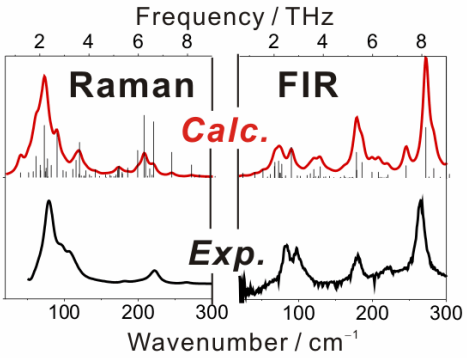


図 2 PHB のテラヘルツ（遠赤外;FIR）スペクトルと低波数ラマンスペクトルの実験結果と計算結果の比較 S. Yamamoto et al. *J. Phys. Chem. B* 2013, *117*, 2180−2187

4．遠紫外分光法と量子化学

最近、遠紫外分光法が注目されている。通常の紫外域に吸収を全く示さない多くの物質、例えば水やアルカン、アルコールなどが遠紫外域にはバンドを示す。これらのバンドの中にはσ電子や Rydberg 遷移によるものも多い。したがって遠紫外領域はσ電子や Rydberg 遷移に関する電子スペクトルの領域といえよう。遠紫外域に観測されるバンドは非常に強く、通常の透過法では観測が難しい。そこで筆者らは全反射吸収(ATR)分光法をこの領域に導入し、ATR-遠紫外(FUV)分光法を確立した。

図 3(a)は *n*-アルカン(C_nH_{2n+2}, n = 5–9)の ATR-FUV スペクトルである。どのアルカンも 150 nm 付近に強い吸収を示す。この吸収はアルキル鎖が長くなるにつれて長波長側にシフトし、しかも強度が強くなる。このスペクトルを解析するために、森澤らは量子化学計算を行った。計算スペクトルは、アルキル鎖の

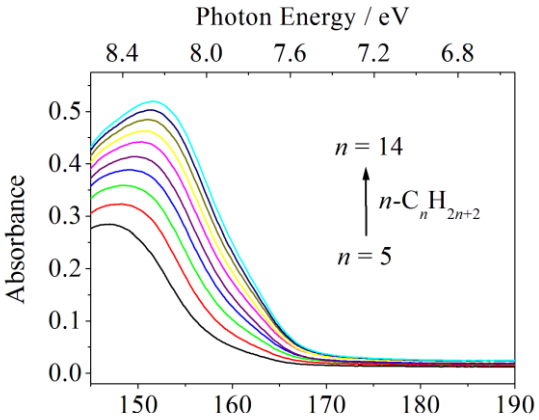


図 3(a) *n*-アルカン(C_nH_{2n+2}, n = 5–9)の ATR-FUV スペクトル

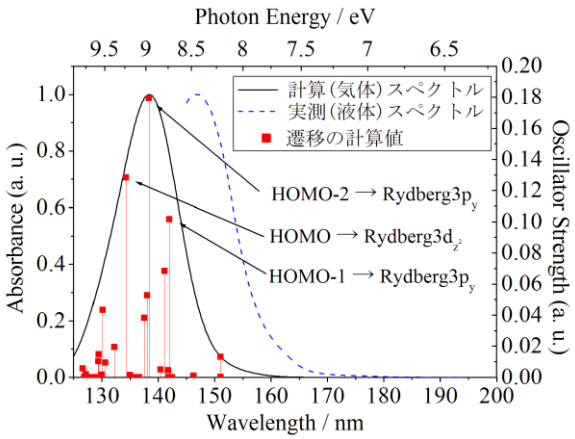


図 3(b) TD-DFT/aug-cc-pVTZ 法を用いた量子化学計算の結果 Y. Morisawa, *J. Phys. Chem. A*, *116*, 11957 (2012).

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

鎖長の増大に伴うピークの強度増大やシフトなどの点において実験スペクトルと良い一致を示した。図 3(b)に *n*-ヘキサンのバンドの帰属を示した。

この図から多くの遷移が 155 nm 付近のバンドに寄与していることが分かるが、最も強い強度を与える遷移は、HOMO-2(σ) から Rydberg $3p_y$ (以下 T1 と名付ける)への遷移である。 計算したいずれのアルカンもヘキサンの T1 に相当する吸収ピークを示すが、HOMO-2(σ)のエネルギー準位は鎖長とともに上昇し、*n*-ヘプタンで HOMO-3(π)と入れ替わる。HOMO-1(π)から Rydberg $3p_y$ への遷移は２番目に強いピークを与える（T2）。量子化学計算の結果から、アルキル鎖が長くなるとともに、155 nm のピークがレッドシフトするのは σ 準位が不安定化するとともに Rydberg 3*p* 準位が安定化するためと分かった。

アルカンは単結合のみで形成される分子であり、非共有電子対も持たないことから、この遷移がアルカンのσ電子の状態を反映していることがわかる。さらに江原、森澤らは TD-TDF と SAC-CI 両方を用いていろいろな有機分子の電子遷移を比較している。彼らによるとアミドの電子遷移を SAC-CI PCM 法も用いて計算した場合、TD-TDF に比べて SAC-CI が明らかに実験結果により近い結果を与えた。

結語

分子分光学にとって量子化学はなくてはならない存在になっている。分子分光学者が自ら計算を行うことも容易になってきているが、やはり分子分光学者と量子化学者との共同研究が新しい分野を切り開くのに欠かせない。

参考文献

1） J. Grabska, K.B. Bec, Y. Ozaki, C.W. Huck, *J. Phys. Chem. A*, 2017, *121*, 1950–1961.
2） S. Yamamoto, M. Miyada, H. Sato, H. Hoshina, Y. Ozaki, *J. Phys. Chem. B*, 2013, *117*, 2180–2187.
3） S. Yamamoto, M. Miyada, H. Sato, H. Hoshina, Y. Ozaki, *J. Phys. Chem. B*, 2017, *121*, 1128–1138.
4） Y. Ozaki, S. Kawata, “Far-and Deep-Ultraviolet Spectroscopy”, 2015, Springer.
5） Y. Morisawa, S. Tachibana, M. Ehara, Y. Ozaki, *J. Phys. Chem. A*, 2012, *116*, 11957.
6） Y. Morisawa, S. Tachibana, A. Ikehata, T. Yang, M. Ehara, Y. Ozaki, *ACS Omega*, 2017, *2*, 618–625.

アミロイド線維のシミュレーション －構造サンプリングと非平衡分子動力学－

奥村　久士
分子科学研究所 計算科学研究センター

アミロイド線維はタンパク質やペプチドが間違って折りたたんで凝集した不溶性の線維状物質である。アミロイド線維は４０種類以上の病気の原因と考えられている。例えばアルツハイマー病はアミロイドβペプチドが凝集してできたアミロイド線維が原因と言われている。我々のグループではアミロイド線維の生成過程および破壊過程を分子レベルで解明するべく分子動力学法による理論研究を進めている。アミロイド線維の形成過程を明らかにするためには様々な構造を効率よくサンプルする必要がある。これまでこのような問題を解決するためにレプリカ交換法などの手法が用いられてきたが、我々は最近、それよりも効率の良いレプリカ置換法を提案した。この手法では２つのレプリカ間だけで温度を交換するのではなく、３つ以上のレプリカ間で温度を置換する。さらに従来用いられてき

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

たメトロポリス・モンテカルロ法ではなく諏訪・藤堂法を用いる。この手法をアミロイド線維形成過程に適用した結果を紹介する。さらにアミロイド線維を破壊する過程を明らかにするために、水中のアミロイド線維に超音波をかけた非平衡分子動力学シミュレーションを行った。その結果、キャビテーション（気泡生成）により破壊されるメカニズムを明らかにすることができた。

自動反応経路探索を用いる不斉触媒反応の機構解明と機械学習による解析

畑中　美穂

奈良先端科学技術大学院大学 研究推進機構・物質創成科学研究科・JST さきがけ

計算化学による反応経路の探索は、化学反応の機構解明や、生成物の選択性・立体選択性の発現機構の解明に大きく貢献してきた。従来の計算化学における反応機構の解析では、反応経路上の中間体や遷移状態(TS)の構造を「決め打ち」で求め、その安定性について議論していた。しかし、近年、柔軟な構造を持つ触媒の反応や、複数の化合物が協働的に作用する反応などの機構解明が求められており、従来の決め打ちによる計算では、解析が困難になっていた。この問題を解決するのが自動反応経路探索(Global Reaction Route Mapping: GRRM)[1]である。GRRM の中でも、最も成功を収めている方法の一つに、人工力誘起反応(Artificial Force Induced Reaction: AFIR)法[1]がある。この方法では、反応に関与する原子(または原子群)の間に人工的に力をかけることで、反応経路上の中間体や TS を網羅的に探索することができる。つまり、化学反応の「矢印」の情報があれば、反応物の接近方向やコンフォメーションが異なる中間体・TS を(ほぼ)自動的に調べ上げることができる。

例えば、青木らは、酵素を模倣した亜鉛錯体を触媒として用いることで、水中でのアルドール反応が高収率・高立体選択的に進行することを報告しているが[2]、亜鉛錯体がどのように生成物の立体選択性を制御しているのか、明らかになっていなかった。そこで、立体選択性を決める段階である炭素－炭素結合生成段階に着目し、AFIR 法を用いて反応物をランダムな方向から接近させた時の反応経路を探索することで、炭素－炭素結合生成段階の TS を網羅的に調べ上げた。

さて、上記の方法を用いることで、自動的に TS を集めることは可能になったが、同時に新しい問題も生じる。それは、得られる TS 構造が多過ぎるという問題である。特に柔軟な構造を持つ反応系の場合は、少しずつ構造の異なる TS が多数得られるため、(現実的な計算時間に収めるために) ユーザーが重要な TS が全て得られたと判断した時点で、計算を停止する必要がある。これまで、得られた構造の解析はユーザーに委ねられていたが、機械学習の一つである教師なし学習を利用することで、構造の解析が簡便に、効率よく行えるようになった。講演では、教師なし学習を利用することで、どのような情報が得られるのか詳しく解説する。

[1] (i) S. Maeda, K, Ohno, K. Morokuma, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 3683 (2013).

(ii) S. Maeda, Y. Harabuchi, M. Takagi, T. Taketsugu, K. Morokuma, *Chem. Rec.* **16**, 2232 (2016).

[2] S. Itoh, T. Tokunaga, S. Sonoike, M. Kitamura, A. Yamane, S. Aoki, *Chem. Asian J.* **8**, 2125 (2013).

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

原子・分子のシュレーディンガー解による予言的量子化学の設計

中辻　博
量子化学研究協会研究所

2004 年に原子・分子のシュレーディンガー方程式の正確な解を計算できる一般理論、自由完員関数理論(FC 理論)を発見して以来、この理論に立脚して、真に予言能のある量子化学を建設することを目指して、色々な方と一緒に研究を進め、本シンポジウムでもその進展を報告してきた。昨年の本シンポジウムでは、自由完員関数理論の理論的な解析に基づいて、その夢が実る可能性を考察した。即ち、自由完員関数理論は小さな分子にだけ適用可能な理論ではなく、分子サイズに対して基本的にオーダーN 的な構造を持つこと、さらに巨大分子系に対しも、私達の化学的直観と合致する理論構造に滑らかに変質しつつ、化学精度を維持できる内的理論構造を持っていること、等を証明した。その後、QCRI 研究所では、現在の計算環境で、化学精度を維持しつつ原子・分子に応用して行ける exact な理論計算法の実現に努力した結果、実際的なアイデアと工夫による色々の進展があり、「原子・分子のシュレーディンガー解を常に化学精度で求める」という前人未到の理論計算法の確立に、数歩近づくことが出来るようになった。この様な最近の進展について述べる。

シンポジウム会場と懇親会会場

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

「第 7 回 JCS 理論化学シンポジウム」
7th JCS (Japan, Czech, Slovakia) Symposium on Theoretical Chemistry
のお知らせ

2018 年 5 月 21 日～5 月 24 日
IOCB(Institute of Organic Chemistry and Biochemistry), プラハ, チェコ共和国

第 7 回 JCS 理論化学シンポジウムは、来年の 5 月、つまり 2018 年 5 月 21-24 日、チェコ共和国・プラハ・IOCB にて開催されることになりました。このシンポジウムは、チェコの理論化学者 R. Zahradnik 教授、Z. Havlas 教授と日本の中辻が、相互の尊敬と友情を基礎に始めたもので、第 1 回(2005)は日本とチェコの 2 国間で、第 2 回からスロバキアも参加して、JCS (日本、チェコ、スロバキア) 3 国の理論化学者の温かい友情のもとに企画されています。これまで、プラハ(2005)、京都(2007)、ブラティスラヴァ(2009)、プラハ(2011)、奈良(2013)、ブラティスラヴァ近郊(Smolenice 城)(2015)で開催されました。「Friendship is our principle, science will follow with us.」という理念のもと、学術的なレベルの高さと、研究者同士の温かい研究交流を育むことを最も重視しています。これまでのシンポジウムと同様、今回もこの理念の元、素晴らしい会になると思われます。参加ご希望の方は、office@qcri.or.jp まで、お問い合わせ下さい。

主催者の Zdenek Havlas 教授
チェコアカデミーの最高メダルを受章されました

■シンポジウム会場:

第 7 回 JCS シンポジウムは、チェコの首都プラハにある IOCB(Institute of Organic Chemistry and Biochemistry)で開催されます。IOCB はチェコ科学アカデミーの機関で、大学卒業生を対象に学位取得のための基礎研究が行われています。

開催場所(IOCB メイン棟)

IOCB に新しくできた有機合成棟

■過去の JCS 理論化学シンポジウムの報告・写真等は、以下の Web サイトをご覧ください。
http://www.qcri.or.jp/ja/event_ja/jcs1105

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

プラハについて

世界で最も美しい街に数えられる街、プラハ、街の中央をヴルタヴァ(モルダウ)川が南北に流れ、その両岸に見どころがあります。中でもプラハ城は、ルネッサンスやゴシック、バロック様式といった様々な建築様式で建てられているのが特徴。近くには、バロック様式の建築物として名高い聖ミクラーシュ教会や、ストラホフ修道院などもあります。ユダヤ人街では、歴史あるシナゴーグ（ユダヤ教の会堂）も多くみられ、新市街にはプラハ随一の繁華街ヴァーツラフ広場があります。スメタナ、ドヴォルザークを生んだ音楽の都でもあるプラハは、チェコ・フィルハーモニーの本拠地としても知られ、多くのホールや劇場があり、毎年 5 月にあるプラハの春音楽祭は有名。また、絵画やポスターで有名なミュシャの美術館もあります。

(JTB プラハの観光情報より (http://www.jtb.co.jp/kaigai_guide/e.europe-russia-c.asia/czech_republic/PRG/))

チェコ共和国の首都 プラハ (Google map より)

プラハの旧市街

またチェコと言えば、ビールが世界的に有名。ビールの国民一人当たりの年間消費量は世界一です。すっきりとした飲み口のピルスナービールはヨーロッパでは珍しい軟水のチェコで生まれ、日本人の口にもピッタリです。

(阪急交通社のページより (http://www.hankyu-travel.com/heritage/czech/prague.php))

京都市の姉妹都市: 1960 年（昭和 35 年)、プラハ側から京都市へ姉妹都市提携の申し込みがありました。それ以来、1991 年（平成 3 年）にチェコスロバキア大統領・プラハ市長が京都を訪問，京都市長がプラハを訪問し，次第に姉妹都市提携の話が具体化していきました。 1996 年（平成 8 年)，京都市長がプラハを訪問し，姉妹都市盟約を締結しました。

(京都市のページより (http://www.city.kyoto.lg.jp/sogo/page/0000067528.html))

■気候： プラハの 5 月の平均気温 13.6 度，降水量 77mm
(平均最高気温 18.8 度，平均最低気温 8.4 度)
(参考) 東京の 5 月の平均気温 18.2 度，降水量 138mm

■通貨：チェコ・コルナ(CZK) (1CZK=約 4.4 円)

■時差：3 月 4 週目～10 月 4 週目(サマータイム期間中)は時差 -7 時間

■公用語：チェコ語 (Wikipedia より)

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

主催者の Zdenek Havlas 教授より
Invitation letter

JCS Symposium 2018

Dear Japanese colleagues and friends:

It is my privilege and honor to invite you to the 7th JCS Symposium, which will be held in Prague on May 21 to May 24, 2018.

The JCS (Japanese-Czech-Slovak) Symposium series has already a long tradition, suggested first by the prominent Czech quantum chemist Prof. Rudolf Zahradnik, during visit of Prof. Hiroshi Nakatsuji to the institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences. It is always a meeting with excellent atmosphere among friends.

The Symposium topic is quantum chemistry, from methodology to applications in organic, inorganic, biochemistry and material sciences.

The Symposium venue will return to the Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, where the first symposium was held. Comparing to the first Symposium, the institute is currently completely renovated, and it offers a pleasant atmosphere. More pieces of information you will find at the Symposium web pages www.JCS2018.cz.

The month of May is one of the most pleasant months in Czech Republic, with fresh green and blooming. During the Symposium there will be also time to show the participants beauties of historical city of Prague, connected with famous Czech beer testing and scientific discussions.

Please, do not hesitate and join us for the Symposium.

With the best wishes, looking forward to meeting you in Prague,
Zdenek Havlas

Chairman of the 7th JCS Symposium
Vice-president of the Czech Academy of Sciences

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

編集後記

1. 「SAC-CI・1 日講習会」のご案内

6 月 25 日(日)にキャンパスプラザ京都(京都駅前)にて、「SAC-CI・1 日講習会」を計画しています。最近、光と分子が主役を成す化学と工学の重要性がとみに高まっています。その中で、信頼性の高い SAC-CI 法は、そのような化学現象の中で意味のある予言や解析を行う上で、ますますその価値を発揮しています。SAC-CI 法は、世界最大のシェアを持つ量子化学プログラム Gaussian に組み込まれ、光と分子が織りなす様々な励起状態が絡む幅広い科学をカバーすることのできる理論です。本講習会では、Gaussian 搭載の SAC-CI 法の正しい計算方法とノウハウを、実際の演習と共に、1 日で伝授しようというものです。

- 日時: 2017 年 6 月 25 日 (日) am 10:00 – pm 5:00
- 場所: キャンパスプラザ京都 (京都駅前北西すぐ)
- 費用: 実費

参加ご希望の方は、席に限りがありますので、下記内容を office@qcri.or.jp までなるべく早くご連絡ください。

- 氏名
- 所属
- 役職または学年
- e-mail アドレス
- 電話番号
- 連絡先住所

QCRI では、今後、SAC-CI の講習会、量子化学の基礎的な講習会、シュレーディンガー方程式を正確に解く理論(Exact 理論)の講習会、なども計画しております。これらについて興味のある方は、どのようなテーマの講習会を希望するかなども含めて office@qcri.or.jp までご連絡ください。

2. 認定 NPO 法人 量子化学研究協会へのご寄付のお願い

量子化学研究協会は、昨年の 2016 年 3 月 24 日に京都市より「認定 NPO 法人」に認定され、1 年が経過しました。認定 NPO 法人は、行政府により、NPO 法人の中でもその活動・財務等が優秀な法人のみを厳格な審査のうえ選んで認定されるものであり、社会に認められ社会に貢献する活動を継続するには、認定 NPO を今後も維持することが重要です。そこで、この 3 月 24 日、次のような文書を皆様にお送りさせて頂きました。

量子化学研究協会の目的は、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です。

中でも私達が力を入れているのは、化学の世界を支配している方程式、シュレーディンガー方程式を正確に解く一般的な方法を創り上げて、化学を予言可能な学問に発展させる道をつけることです。ご存じの通り、1926 年の量子力学の誕生以来、その基本原理であるシュレーディンガー方程式 $H\psi = E\psi$ を正確に解くことは、不可能であるとされてきました。しかし、2004 年に中辻により、シュレーディンガー方程式を正確に解く一般理論が

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

発見され、科学者の夢の実現に道が開かれました。この理論を発展させて、量子化学を、飛躍的に正確な、予言的科学に発展させる夢を実現すべく、私達の量子化学研究協会が 2006 年夏に作られ、その研究所の活動は 2007 年春にスタートしました。この前人未踏の夢が実現できれば、量子化学はシュレーディンガーレベルにまで引き上げられ、様々な化学現象を正確に予測する「真に有用な予言的量子化学」を作り上げることができます。研究所の開設以来の、この夢の実現に向けた私達の絶え間ない研究と、文字通りの悪戦苦闘の結果、最近、この夢の実現に向け、かなり大きな進展が得られつつあるとの実感を、私たちは持っています。

更に、光は、私達の生命の根源であるばかりでなく、理学、医学、生物学のあらゆる分野を支えています。SAC-CI 理論は、この分野の最も信頼される汎用性のある研究手段として、広く利用されています。研究所はその中核の一つとしての研究を進めています。

このような研究の展開は、広く化学の分野に役立つだけでなく、科学・生物学などにも貢献し、産業にも使われるようになれば、製品開発等にも貢献し、NPO の目的である社会の永続的な幸福に繋がるものと期待されます。

そこで、私達量子化学研究協会・研究所は、このような科学上の大きな夢とそれを実現する研究・活動に意義があるとご賛同して頂ける方に、ご寄付をお願いしております。

認定 NPO 法人を維持するためには、その条件として、

1．年あたり 平均して 100 人から 3,000 円以上の寄付 があること (絶対基準)

2．経常収入のうちに寄附金等の割合が 20%以上など、いくつかの条件を満たす事 (相対基準)

のどちらかを満たす必要があり、絶対基準を満たせば無条件で認定 NPO 法人を維持することができます。1 の条件を満たすためには、少額(3,000 円以上)でも多くの方からの毎年のご寄付が大変ありがたく、私たちが社会に貢献していることを示す大きな証となります。現在、60 名以上の皆様からご寄付を賜り、心より感謝申し上げます。ご寄付頂きました御こころざしは、上に述べた夢の実現と、それを通じての科学技術の発展と人類の幸福に寄与する活動に使わせて頂きます。

ご寄付を頂いた皆様には、研究所誌「量子の世界」の配布のほか、研究協会の活動の成果や成果論文の別刷り送付等のリクエストにも随時お答えいたします。また、私たちの研究成果の説明や講演のお申し出にも、出来る限り応じてまいります。

また、認定 NPO 法人へ寄付をすると、寄付者は、所得税、相続税、法人税から税の控除を受けることができます。京都市在住の方は、住民税からも税の控除が受けられます。これらの経済的支援は、政府が認定 NPO 法人に限って認めているもので、我が国の寄付文化が欧米並みに高まることを願ってのことです。行政府による認定 NPO 法人の認可が厳しい事の背景には、このようなことがあります。お振込先は、下記の通りです。より詳細にご関心をお持ちの方は、量子化学研究協会・研究所のホームページ、http://www.qcri.or.jp/ をご覧ください。

皆さまの、温かいサポートを、お願い致します。

量子化学研究協会・研究所　研究員一同
中辻博・宮原友夫・中嶋浩之・黒川悠索

お振込先： 下記のお振込先口座、①、②の内、便利な方をご利用ください。お振込の通知

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

が当方に届きましたら、当認定 NPO 法人から、定められた様式の領収書をお送りいたしますので、それが届きますよう正確な住所と寄付人名をお書きください。この領収書は税の控除を受けるための確定申告の際必要となる重要書類ですので、それまで大切に保管してください。

① 銀行名： ゆうちょ銀行
口座記号番号： 00910-6-332225 番
口座名称（漢字）： 特定非営利活動法人　量子化学研究協会
口座名称（カナ）： トクヒ）リョウシカガクケンキュウキョウカイ
(手数料につきましては恐れ入りますが ゆうちょ銀行ホームページ をご覧ください。)

ゆうちょ銀行以外の銀行からこの口座に振込まれる場合は、下記内容をご指定ください。
店名(店番)： 〇九九（ゼロキュウキュウ）店（０９９）
預金種目： 当座
口座番号： 0332225

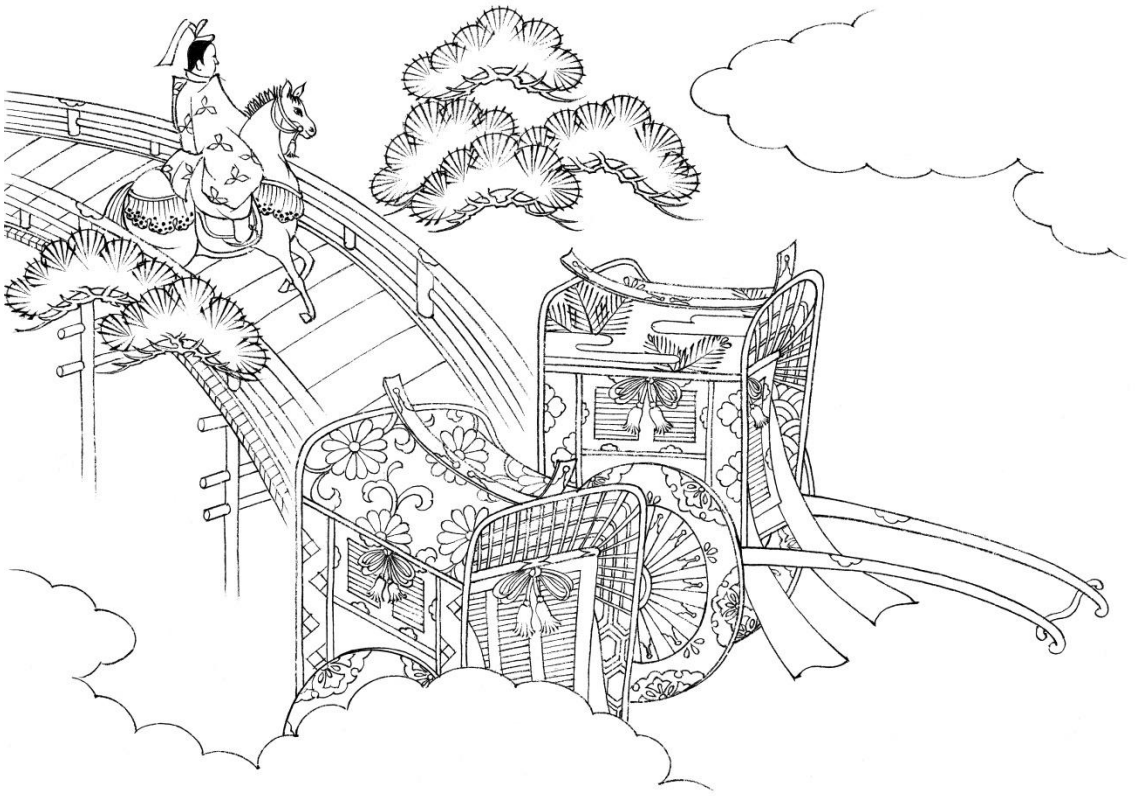
② 銀行名：三井住友銀行
支店名： 伏見支店
口座名義： 特定非営利活動法人量子化学研究協会 理事 中辻博
カナ： トクテイヒエイリカツドウホウジン リョウシカガクケンキュウキョウカイリジ ナカツジヒロシ
預金： 普通預金
口座番号： 1453553

3．「量子の世界」へご寄稿のお願い

「量子の世界」は *quanta* の世界であり、量子論が対象とする電子、原子核、光子その他の粒子の織り成す世界のことで、ここではそれを活き活きと写しだすことです。私たちの大先達の朝永振一郎博士の「光子の裁判」のような歴史に残る作品が思い起されます。量子の運動は現代では大きなスパコンや研究所の古びた計算機のチップの上で計算されるので、また一味違ったものになるかも知れません。また、「量子の世界」はそれを如何に映し出そうかと日々悩んでいる人たちの活動の世界でもあります。

この「量子の世界」は編集委員からのご寄稿の依頼に対して、快くお寄せいただいた貴稿と、それに加えて、その時々の研究協会の活動に関連した内容でした。今後、本誌「量子の世界」が長く発展し、魅力的なものに育っていくためには、science のそれと同様、「領域」の広がりと「自由」な発展とがなくてはなりません。そこで、この広い「量子の世界」を皆様の力で築いて頂くために、皆さまのご寄稿をお願い致します。「量子の世界」の表の世界、裏の世界、それらの相互作用のもたらす様々な人間的な事、非人間的な事、自然と美、そして日々の生活、それらすべてを対象にいたします。この分野の専門家、非専門家、そして何の係りもない方、すべての方が、「量子の世界」の厳然たるルールから逃れて、自由に発想されたことをお寄せください。次号の発刊は 2017 年 10 月ころになる予定です。よろしくお願いいたします。

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.



「量子の世界」No.5, 2017 年春号

2017 年 4 月 11 日 発行

発行者: 認定 NPO 法人 量子化学研究協会 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 107 号室

投稿とお問い合わせなど：office@qcri.or.jp

電話・FAX: 075-634-3211

©2017 量子化学研究協会・研究所

過去の「量子の世界」は、量子化学研究協会・研究所ホームページ (http://www.qcri.or.jp/)にてご覧になれます。

©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.