



量子の世界

No. 12, 2020年 春号 (2020/5/11 発行)

- 目次 -

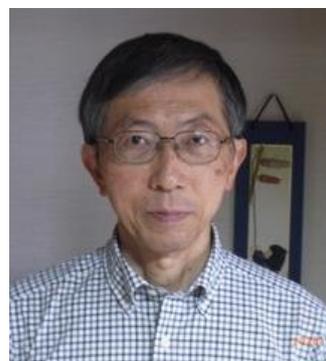
	ページ
1. 会社での研究 —計算機シミュレーションによる研究— 牛尾 二郎 (東京都立大学 客員教授)	1
2. 新型コロナウイルスの流行拡大について 福西 快文 (産業技術総合研究所)	4
3. 「第14回 革新的量子化学シンポジウム」のお知らせ (開催日は未定) 講演者: 藤井 啓祐 先生、江藤 正義 先生、中辻 博 先生	9
4. 「第8回 JCS 理論化学シンポジウム」延期のお知らせ	12
5. 認定NPO法人 量子化学研究協会への継続的なご寄付のお願い	13
6. 「量子の世界」へご寄稿のお願い、編集後記	15

会社での研究 —計算機シミュレーションによる研究—

牛尾 二郎

東京都立大学 客員教授
(2020/4/29 受理)

私は33年間電機メーカーに勤め3年前(2017年)に退職しました。入社して30年間の研究所勤務では、材料の電子状態計算(主に分子軌道計算)と計算機シミュレーションによる研究をしてきました。学生時代からのべ36年間で計算機シミュレーションとともに過ごしたことになります。その経験をもとに会社での研究について少し書きたく思います。「会社での研究」と「企業での研究」のどちらを題名にするか迷いましたが、ひとつの電機メーカーでの勤務経験しかありませんので、私が働いていた会社という意味で「企業」でなく「会社」を使うことにします。



牛尾 二郎 先生

この記事が掲載された「量子の世界」を皆さんが読まれるころは、新型コロナウイルス(COVID-19)の感染が少し下火になっているものと期待します。原稿を書いている時点



(2020年4月)で全国の感染者数はまだ日毎に増え続けています。その状況下4月10日(金)の朝日新聞朝刊に、国の新型コロナウイルス感染対策を提案する感染症や公衆衛生学の研究者を話題にしたコラムが載りました(「新井紀子のメディア私評」)。国の対策に提言する役目を担って、今メディアに頻繁に顔を出している国立の大学や研究機関の研究者たちが、平時はその存在を大半の人に知られることなく、企業や他国の研究者に比べ安い給料で「したい仕事」をしている不思議な研究者集団であると述べています。緊急時に備えて理系、文系を問わず、平時には不要と思われるこの研究者たちを、公金で守ってゆかねばならないというのがコラムの結論です。そこで厚生労働省クラスター対策班で働く感染症の数理モデル研究者がとくに大きく取り上げられています。新井氏は数理モデルについて、現実には圧倒的に複雑で未知の要素も数多くあり、(数理モデルは)誤る可能性が常にあるものと述べています。それを重々承知のうえで数理モデル研究者(専門分野は理論疫学: theoretical epidemiology)は、国の感染対策に提言するという重責を引き受けたはずであり、それは「自分の専門性が社会に求められた時、全力を尽くすのは当然の務めだ、と考えるのがプロの研究者だからだ」と記しています。

このコラムを読んで、会社での研究生活の記憶が蘇りました。この数理モデル研究者の置かれた状況は、会社における計算機シミュレーションによる研究の状況に通じるものがあります。計算結果から人の行動を方向付ける何かを提示しなければならない点が似ているのです。ここで人の行動とは、会社の研究でしたら実験研究者が材料を作るあるいは分析することですし、新型コロナウイルスのクラスター対策班の場合は政府の対策決定ということになります。どちらの場合も、これからどうすればよいかの提案が計算機シミュレーション(数理モデル)研究者に求められています。会社で計算機シミュレーションに要求されるのは、実験研究者がそれならこういう実験をしようと思える知見を提示することで、計算結果が次の現実の行動のきっかけにならなければなりません。しかもその行動は実現可能なものでなければなりません。計算結果が学問的には正しくても、現実的でないことしか提案できなければ、不要な研究者として極端な場合は配置転換あるいは解雇されてしまいます。また、計算結果を周囲に正しく評価してもらうには、実験研究者と対等に渡り合わなければならないため、研究対象である材料や現象について実験研究者と同等の知識と問題意識を持つことが必要です。研究対象をいろいろな視点からよく調べ、直面する問題点を十分に認識することで、初めて次の行動につながるシミュレーションを計画し行うことができます。

会社の研究では研究の打ち合わせが頻繁に(月あるいは半月に1回)あり、そのたびに新しい結果の提示を求められます。そのため研究が始まってから必要な計算方法を考えてシミュレータを作っていたのでは間に合わず、通常は研究を始める前に計算環境は準備しておかなければなりません。したがって、どうしても広く使われていて評価の定まった既存の計算方法での研究が主にならざるを得ません。最先端の計算手法を使うことは避けがちなになり、材料や現象の問題に関する論文を調べることに時間を取られて、新しい計算理論や方法を学び考えることが少なくなります。とくに急を要する研究では、実験研究者が要求するシミュレーションに、その理論的基礎を理解する十分な時間を与えられずに取り組みなければならないこともあります。これは会社での研究の問題点のひとつですが、反面同時に、会社の研究のよい点でもあります。既存の方法でできる計算が大きな利益につながると判断すれば、会社は大きな資金を投じてその計算の実行を支援してくれます。私が携わったわけではありませんが、たとえば発電機のタービンブレードの故障解析シミュレーションが



その例として記憶に残っています。

会社での計算機シミュレーションによる研究で遭遇するもうひとつの問題として、計算に対する偏見、理解不足があります。あるいは計算を実験に付随する飾り程度にしか思わない傾向と言ってよいかもしれません。対象を単純化した計算は現実問題の解決に役立たず不要とする考え方は、近年さすがに会社でも減ってきました。しかし計算機を使った解析が会社の研究で正しく使われ、正しく評価されているとは未だに言い難いように思います。空虚な理想論と見なしての冷淡と無関心、あるいは過大な期待に続く失望のどちらかをもって迎えられることが今でもあり得ます。また、実験研究者や研究統括者が計算結果のうち自分の都合のいい部分だけを使う、特定の条件でしか成り立たない結論を条件にあてはまらない場合でも研究成果を宣伝するために使う、といったことも起こることがあります。会社でシミュレーションによる研究を進めるには技術的な問題以外に、このような人間的、政治的な困難や問題が伴います。

新型コロナウイルス感染の数理モデル研究者に話を戻します。大学の研究者が突然、政策決定に提言する立場に立たされたにもかかわらず、この研究者は、成果をタイムリーに出して期待される役目を果たしているように見えます。しかしやはり会社と同様の問題が国の対策決定でも生じているようです。その研究者は、人と人の接触を8割削減することを提言しましたが、総理大臣は緊急事態宣言で、最低7割、極力8割削減を国民に要請しました。これに対してその研究者は4月15日に個人的に会見を開き、7割と8割では大きな違いがあり7割でもよいと言ったことはないと表明しました。7割減は官僚あるいは政治家が後から付け加えたものということになります。専門家に意見を求めながら、その意見を政治的判断で勝手に変更して使う政府の姿勢に異議の声を上げるのは、専門家、研究者として当然しなければならないことです。一方、クラスター対策班あるいは感染症対策専門家会議の他のメンバーが会見について何もコメントを発表せず、支持も反論もしなかったことが気になりました。実験や調査で研究する研究者と数理モデル研究者の間に溝があるからだろうか、と老婆心ながら余計な憶測をしてみます。

新型コロナウイルスの国内感染対策で活躍する数理モデル研究者の話題から、会社の研究について思い付くままに書きました。私は今、東京都立大学の波田先生にお願いして大学の机をお借りし、量子化学計算の基礎理論を学び直しています。学生時代から約40年間行ってきた計算ですが、今では本格的な計算をする前の味見程度のものでしか思われなくなりつつあるHartree-Fock法(いわゆる分子軌道法)計算でさえ、その理論的背景は奥深く、計算の原理を十分には理解していなかったことに気付かされました。

納得ゆくまで理論を学び味わいながらする計算には、会社でいうところの「役に立つ」計算とは全く異なる喜びと楽しみがあります。都立大の正門から研究室のある建物に向かう途中、大学図書館の外壁に"VERITAS VOS LIBERABIT"の文字が掲げられています。もともとは聖書(ヨハネ福音書)の中の言葉で、この文だけ切り取られて「VERITAS(真理は)」も「LIBERABIT(自由にするだろう)」も宗教的意味でなく世俗的な視点で解釈され、世界の大学や図書館に掲げられています。真理はあなたがたを自由にする。研究室への行き帰りこのラテン語の言葉を見るたびに、理論を学び考え計算する大学での研究に喜びを感じます。また同時に、新型コロナウイルスが蔓延する今、個人だけでなく社会が大切にすべきものもこの言葉が示しているように思えます。



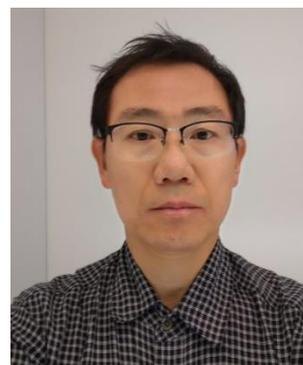
新型コロナウイルスの流行拡大について

福西 快文

産業技術総合研究所

(2020/3/19 受理, 5/3 改稿)

2020年5月現在、新型コロナウイルスの感染は治療薬もワクチンもないままに拡大し続けている。中辻研を卒業して25年たった今、自分は臨海副都心にある研究所で低分子～中分子の創薬化学の基盤技術の研究開発をしているが、屁のつかいにもならないままに多数の犠牲者が生じたことに自分の無力さを感じる。観光立国日本では、今後、世界中の人々と共に世界中の感染症が正体不明のまま参集する可能性が考えられる。感染症は技術的には解決可能だろうが、感染症問題が大局的な地球環境や高齢化の問題を覆い隠し、これらの対策が遅れることも危惧される。



福西 快文 先生

新型コロナウイルスの発見

2019-nCoV (SARS-CoV-2)は、2019年12月にカナダの世界の感染症を監視するベンチャーBlueDot (<https://bluedot.global/>)によって発見された。BlueDotは、2003年のSARSのアウトブレイクをWHOに報告したことで有名である。彼らの手法は、インターネットで航空機の座席のキャンセル状況を統計解析することで、感染症のアウトブレイクを見出す。個人の書き込むSNSの情報は、株価予測システム(株ロボット)などでは使うが、噂や嘘が大きなノイズとなるため医療系では余り使われない。医療訴訟が生業となる現代、故意に作られる薬害まである。嘘や争いは人の心の中から生じるのだから、心の中に真実の城壁を築けば防げるはずだが、堅固な城のために硬いレンガを積むのは難しい。

カナダのアルバータ州では20年も前から、住人は全てデフォルトでElectric Health Record(電子カルテシステム)に登録され、医療情報は共有されており、どこのクリニックに行っても、医者の机には2台のモニターがあって、1台はEHRの情報が、もう1台には現在の患者の検査結果が表示されているという。患者名は秘密とされるが、検査や診察、投薬等のデータの70%は、カナダの企業が自由にアクセスして利用・解析でき、こういう政策が先端的な感染症コントロールの素地なのだろう。

2020年1月11日、中国とカナダが協力して新型コロナウイルスのゲノム配列29000塩基対を解読し、暫定的に2019-nCoVと命名されてGenBankに登録された。この遺伝子はウイルスとしては、やや大きめな印象で、ヒトの遺伝子30億塩基対に比べると小さいが、インフルエンザウイルスの1900塩基対に比べて大きい。

新型コロナウイルスのタンパク質立体構造

ゲノムが解読されると、遺伝子配列間の距離は数学的に定義されていて(初出は:Sellers, P. H. (1974) SIAM J. Appl. Math. 26,787-793) 既知の遺伝子や蛋白質の配列と類似性を比較することで、どういう蛋白質が作られるのかが予想される。SARS-CoV-2は、1本のRNAを遺伝子として持つ、SARSに近いウイルスであった。全部で20種類程度の蛋白



質をコードしているが、最初の10個くらいの蛋白質は、最初に1つの長大な蛋白質として作られ、後に、蛋白質分解酵素により10個の蛋白質に分割されて機能するようである(図1)。自分の興味を引いたのは、この酵素であり、RNAの配列はSARSとは余り似ていないがアミノ酸配列ではSARSのC30 main proteaseと96%同一であった。一般に2つの蛋白質においてアミノ酸配列が50%以上同じなら立体構造は、ほぼ同じであるためSARSの蛋白質を元にして立体構造は予測できる。なお遺伝子解読から2か月経過した現在、図1に示すようにいくつかの蛋白質の立体構造が実験的に得られている(Protein Data Bank, <https://pdj.org/>)。

NCBI Reference Sequence: NC_045512.2

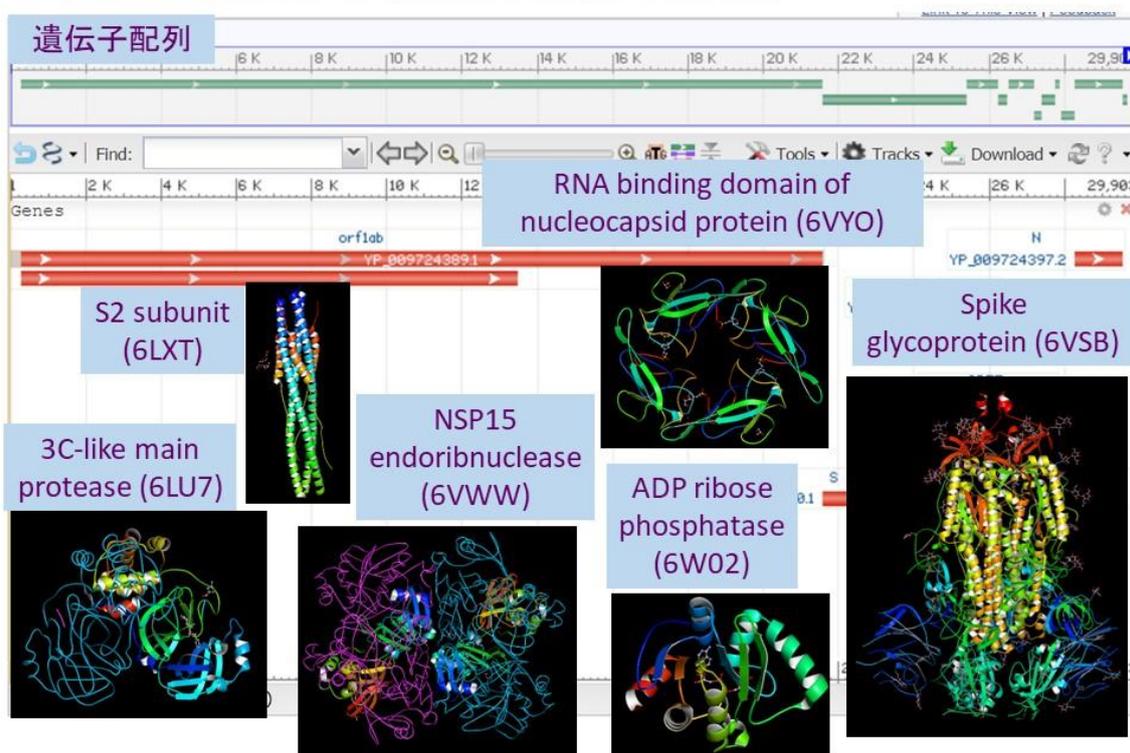


図1 SARS-CoV-2 のゲノムからできる蛋白質の例。緑の横線が一度にアミノ酸配列に翻訳される単位で、それらは適宜、切断されて図の下のような立体構造をとる。()内の4文字はProten Data BankのID。

標的蛋白質の構造解析

予算はないものの、我々はC30 main protease ($3CL^{pro}$)蛋白質構造の予測と薬物探索に取り掛かった(図1—2)。 $3CL^{pro}$ は、自分で自分の蛋白質を切断して、自己を完成させるだけでなく、ヒト細胞内でユビキチンという小さい蛋白質を切断する。細胞は、細胞内の蛋白質に、時々ユビキチンを結合することで、その蛋白質の消費期限を測る時計とし、ユビキチンがたくさん連結されたものから順次、分解する。分解したときのペプチド断片を、細胞の膜表面にばかりと浮かび上がらせることで、体内を巡回している免疫細胞に、自分の細胞内にどんな蛋白質があるのかを提示する。自分本来のペプチドしかなければOKで、見たことのないペプチドがあれば、免疫細胞が攻撃して細胞ごと破壊、また発熱によってウイルス増殖を抑えることで、病気の蔓延を防ぐ。つまり、 $3CL^{pro}$ を持つウイルスは、抗原の提示を



抑制することで感染してから免疫での感作を回避し発症が遅れ、重篤化しやすく、治るのが遅い原因と想像される。ウイルスのすべての蛋白質が創薬標的となりうるが、我々は特に危険性の原因として標的を 3CL^{pro} とした。

SARS の 3CL^{pro} を鋳型にして SARS-CoV-2 の 3CL^{pro} の構造をホモロジーモデリングで作成し、分子動力学シミュレーション計算で構造の安定性を確認した。反応機構は、システインプロテアーゼであり、システイン残基の-SH 基とヒスチジン残基の=N-が、H⁺を受受することで基質となる蛋白質のアミド結合を加水分解する。そこで、反応中心の溝状のくぼみを狙って市販化合物 200 万件、天然物、既存の市販医薬品などのドッキング計算による探索を myPresto(<https://www.mypresto5.jp>)を用いて行った。1月22日に遺伝子配列を入手し、1月29日には製薬企業数社に薬物スクリーニング計算の結果を配給した。

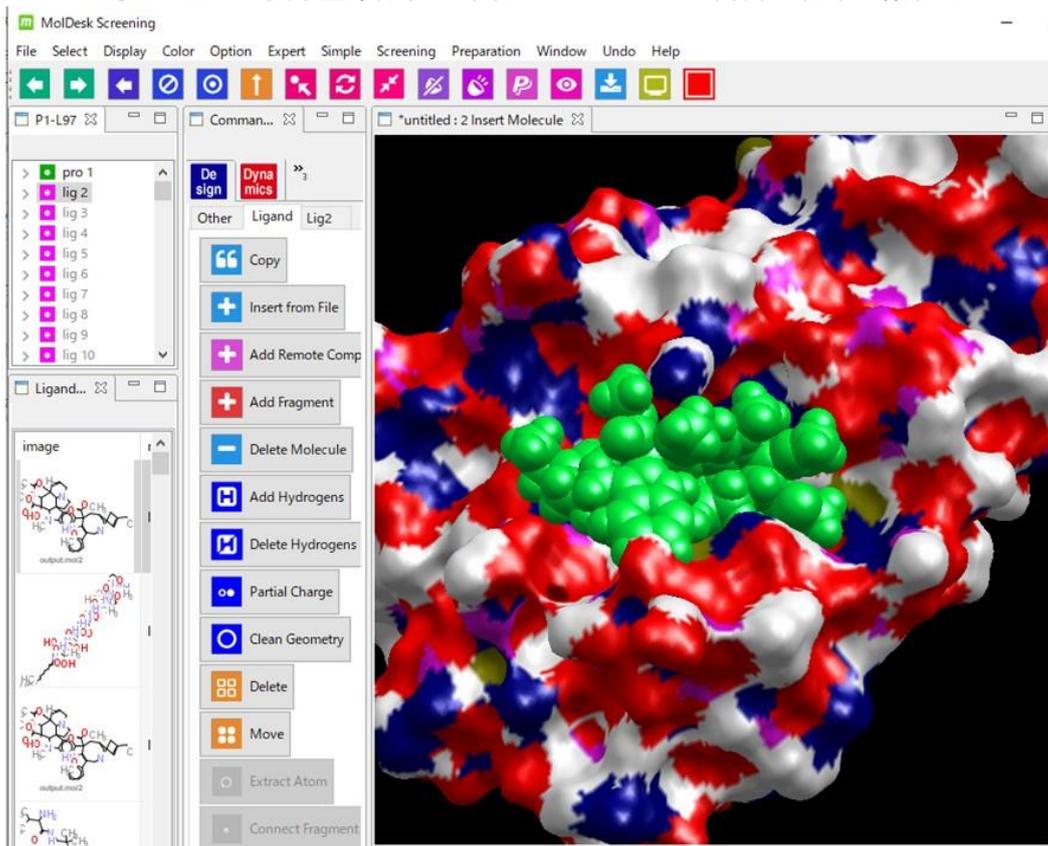


図2 SARS-CoV-2 の 3CL^{pro} への薬物ドッキングスクリーニングの結果。表示は MolDesk screening (IMSBIO)

一部の結果を図2に示すが、多くはダメな結果である。酵素や受容体に対する低分子阻害剤の発見は、さほど難しくないとされるが、それは、標的蛋白質の天然の基質が神経伝達物質などのメッセージを担う単一の分子であって、酵素が選択的に特定の分子を強く結合するように進化している場合だと思っている。3CL^{pro} は、蛋白質の異なるアミノ酸配列を10か所以上も切るため、消化酵素ほどではないが基質認識が甘い。

なお、量子化学が創薬化学で最も役に立っているのは、これらの計算をするときの力場パラメータの決定である。原子間の化学結合の強さ、角度、原子部分電荷は、かつては赤外線分光法で決定されていたが、今では量子化学計算で決められている。現在、最良とされる力場は AMBER ff14 SB (J. A. Maier, et al. J. Chem. Theory Comput. 2015, 11, 8, 3696-



3713)だが、真空中の量子化学計算で、電子相関は MP2 である。どうして真空中の計算で、水中の力場が高い精度で作られるのかは、原著論文にて「分からない」と記されている。

現在試みられている医薬分子でのアプローチ

SARS-CoV-2 のゲノム解析から1か月後には、既に 80 種類の医薬品の臨床試験が行われていた(Therapeutic options for the 2019 novel coronavirus (2019-nCoV). Nature Reviews drug discovery. <https://www.nature.com/articles/d41573-020-00016-0>)。いくつかをかいつまんで紹介する。

古典的なアプローチ：

最初に患者の検体から電子顕微鏡でウイルスの粒子が見えた時点で、その形状から、このウイルスは RNA を遺伝子として持つウイルスであると分かる。このタイプのウイルスは RNA の複製に RNA ポリメラーゼを使うので、アビガンなどの核酸類似物が抗ウイルス薬になりうる事が分かる。酵素のリガンド結合部位は、酵素が必須であるほど変異が入りにくいので、核酸アナログであるこれら薬剤は、多くの新規ウイルスの場合に優先的に使われてきた。

現代的なアプローチ：

今回は、細胞のメカニズムから理論的に効果が想定されている既存薬も医学誌に案として掲載され、いくつかが実際に試されている。通常、抗がん剤として使われるキナーゼ阻害剤によって細胞内の情報伝達を変動させ、細胞表面に現れる蛋白質の量を減らして、ウイルスの侵入を遅らせる、というものもある。

最も近未来的と感じられたのは核酸医薬である。これは、開発に着手して 42 日間で臨床試験入りした。通常の新規医薬品だと平均 13 年かかるので、42 日はかなり速い。いくつかの国では、新興ウイルスの発生を検知してすぐにワクチン製造の入札があり、1 月半ばには既に落札した企業は決まっていた。今回、臨床試験入りした核酸医薬は、ウイルスのゲノム配列から、殻に当たる蛋白質をコードする配列を選び、この配列を合成してリン脂質のミクロな粒子に詰め、筋肉注射で投与するという斬新なものだった。このミクロな粒子はヒトの筋肉細胞に入り、中でウイルスの殻を作成、これが筋肉の表面に浮かび上がって抗原提示し、免疫を賦活化することで、ワクチンとして機能する。上記のインターネットの監視による感染症の検知、シーケンサーとオリゴ DNA 合成機と組み合わせると、あらゆる感染症に対して（プリオンを除く）任意のワクチンを最短 1 日でも作成できなくはない。見事でありノーベル賞になるのではないかと思う。

最後に

感染症は、現代の複雑な製造業においてサプライチェーンを切断し経済を停滞させることで国を破滅させる危険をはらんでいる。しかし、いくつかの良い点もあると期待している。第一に、大量のヒトが地球上を移動する不自然な行為の危険性を気づかせる。第二に、不要不急の産業は打たれ弱く、製薬企業や自然エネルギー関連など本質的に必要とされる産業が強いと認識させることができる。第三に、細く狭いサプライチェーンの危険性を知ること、日本の中小企業が新たな取引先や市場を見出し、長期的には成長する機会があること。



最後に、驚異的な能力を持つ病原体の能力を発見することである。

ウイルスは脅威であるが、遺伝子を運ぶ自然界で最も優れた道具でもある。遺伝子治療においてヒト細胞の細胞膜は外界の遺伝子を透過させないのが最大の問題であるが、ウイルスの殻に治療用の遺伝子を詰め込めば、特定の細胞に対して選択的に速やかに遺伝子を導入できる。人体はおおざっぱに分けても200種類の細胞からできているので、全ての細胞に対して核酸医薬を運ぶには多種のウイルスが必要であり、また一度注射すると免疫ができてしまうので、殻の表面のアミノ酸配列を少しずつ変えていく必要もあるだろう。

ゲノム解読が20年前に済み、トランスクリプトーム・プロテオーム解析の進む今、ウイルスは、治療用・研究用の遺伝子を運べる道具に使われている。老化とは、癌(肉腫を除く)、痴呆、糖尿病、動脈硬化、高血圧、白内障、変形性膝関節症の総称だと思っている。医薬品は1つ上市するのに平均13年、開発費2000億円で臨床試験の合格率は90%に過ぎない。一方、これら1つの疾患のみでも人のQoLを大幅に損ない、死に至らしめる。個々の症状に対する薬を10種類作るより、抗老化の薬を1つ作る方が、経済的だと思っている。

2009年~2010年にサーチュインやmTORのマウスでの延命・若返りの効果の発見から、セネッセンスは長歩の進歩を遂げた。哺乳類では、個々の細胞の老化の速度はバラバラで本来は急速に進む老化を、老化細胞のアポトーシスやオートファジーによって恒常性を保っていることが明らかとなり、遺伝子導入による抗老化治療の試験が行われ、有効性が示された。2019年には、遺伝子をアポトーシス誘導剤や蛋白質パスウェイの阻害剤の組み合わせで代用し老化細胞を取り除く戦略が動物実験で実証され、臨床試験がいくつも始まっている。僕は、西暦2116年、皆さまと僕の150歳の誕生日を祝えることを心待ちにしています。



「第14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: 未定 (2020年 秋ごろ を予定)

場所: 京都テルサ (京都駅南) (予定)

参加費: 無料、申し込み・問合せ: office@qcri.or.jp

新型コロナウイルスの感染拡大に伴い、「第14回 革新的量子化学シンポジウム」の開催日は、現状では決定できる状況にないため未定ですが、2020年秋ごろに開催できれば、と考えています。ご講演いただく先生方と、演題・要旨は、以下の通りです。開催日程が決まりましたら、また改めてご案内いたします。世界的なこの危機を脱し、皆様と集う場となればと存じます。奮ってご参加ください。

プログラム (予定)

13:00 挨拶・司会 中辻 博

13:05-13:55 藤井 啓祐 (大阪大学 教授)
「量子コンピュータと量子化学計算」

13:55-14:30 休憩

14:30-15:20 江藤 正義 (兵庫県立大学 名誉教授)
「健康寿命 100歳を目指す健康管理 - 偉大な科学者たちに学ぶ -」

15:20-15:50 休憩

司会 波田 雅彦

15:50-16:40 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)
「正確で有用な予言的量子化学の開発」

懇親会 (予定)

日時: シンポジウム後 17:00~19:30

場所: カフェ ラウンジ リン「Cafe Lounge 凜」
(京都テルサ内、西館1階)

参加費: 5,000円 (着席ビュッフェ形式)

例年、講演者、参加者同士の交流が活発に行われる、和やかな雰囲気での懇親会となっています。シンポジウムと併せて是非ご参加ください。



会場(京都テルサ)へのアクセス

- ・ JR 京都駅(八条口)より南へ徒歩 15 分
- ・ 地下鉄(烏丸線)九条駅 4 番出口より西へ徒歩 5 分



講演要旨

量子コンピュータと量子化学計算

藤井 啓祐

大阪大学 大学院基礎工学研究科 システム創成専攻 電子光科学領域 教授

Google や IBM などの巨大 IT 企業が量子コンピュータの開発をすすめている。まだ、50 量子ビット程度の規模であり、直ちに役に立つ問題を高速で解くことができるシステムではない。しかし、量子コンピュータそのもののシミュレーションはスパコンを用いても難しい領域に入りつつある。このような現在実現している量子コンピュータは、ノイズを含んだ小・中規模の量子コンピュータとして、NISQ (noisy intermediate-scale quantum computer) と呼ばれている。現在、世界的に NISQ をうまく活用し、物性物理計算や量子化学計算に応用しようという試みが始まっている。また、長期的に考えると、大規模な量子コンピュータが実現すれば量子多体系の計算に対してこれまでとは全く異なったアプローチが可能となるだろう。まさにファイナマンが指摘したように、量子系を量子力学の原理で動作するコンピュ



一タでシミュレーションする時代が近づいている。本講演では、このような量子コンピュータの現状について紹介し、その量子化学計算への応用について最近の研究を紹介する。

健康寿命 100 歳を目指す健康管理 – 偉大な科学者たちに学ぶ –

江藤 正義

兵庫県立大学 名誉教授

21 世紀に入り、人類は新型コロナウイルスなどの凶悪な病原体による感染症に翻弄されています。この解決には現代科学の知識と技術を期待しています。

一方、大半の人々は生活習慣病で亡くなっています。生活習慣病は、火事に例えられます。火の不始末(生活習慣)から火事(病気)は起こりますが、自然発火(遺伝的要因)はまれです。火(病気)を消し(治)していただくのは消防士(医者)の皆様です。今、新型コロナで病院も逼迫しており、生活習慣病(たとえば、「がん」)の治療は後回しにされています。自ら病気を予防すれば、お医者さんにもお世話にならず、幸せな人生を送ることができるでしょう。

本講演では、どのような原因で病気が起こるか、人類の進化(ダーウィン医学)から考えます。また、ライナス・ポーリング、アルバート・セントジェルジー、ジョー・ヒルデブランド、ハンス・フォン・オイラー、鈴木梅太郎、山藤一雄などの偉大な科学者を取り上げ、その業績の一部と、健康管理の指針について述べます。次に、最近急増している糖尿病や男性の前立腺癌などについて、予防・治療法について述べます。最後に、老化の原因と結果および防止法について考え、皆様とともに健康寿命 100 歳を目指したいと思います。



正確で有用な予言的量子化学の開発

中辻 博

量子化学研究協会・研究所

理論の目指すところは、正確な予言をすること、それをできるだけ容易にすること、それによって化学概念を作っていくこと、この3つにある。量子力学の原理が化学を支配している以上、その原理方程式を正確に解く理論を整備し、それを容易にし、さらに量子力学原理が教えるところを化学概念に昇華できるようにすることが大事である。2004年にシュレーディンガー方程式の正確な一般解法を発見して以来、量子化学研究協会の研究所では、この3つにこだわって研究を続けてきた。紆余曲折した道をたどってきたが、最近ようやくその道が見えてきた感じがする。その一端をお話したい。



「第8回 JCS 理論化学シンポジウム」
8th JCS (Japan, Czech, Slovakia) Symposium on Theoretical Chemistry
延期のお知らせ

2021年(詳細日程は未定) 北海道大学・学術交流会館、札幌 (予定)

ホームページ: <https://www.cat.hokudai.ac.jp/jcs8/>

2020年7月6-9日に北海道大学にて開催を予定しておりましたが、ほぼ1年延期して、2021年の適当な時期に開催を延期することになりました。開催日が決まりましたら、ご連絡いたします。

新型コロナウイルスの流行が拡大する状況を見まして、組織委員会で協議致しました。研究交流を通して三か国の理論化学者の親睦を図ることを趣旨とするシンポジウムでありますので、安心安全な環境下で開催することを重視いたしました。

2021年の開催時期につきましては、決定次第案内致します。

JCS シンポジウムは基本的に全員ご招待の形で行いますが、若手の参加を歓迎し、機会を提供していきたいと思っております。また、invited poster を充実させて、広く参加を呼び掛けたいと思っております。発表をご希望の方は、jcs8@cat.hokudai.or.jp まで御連絡下さい。

皆様の御来札をお待ちしております。

第8回 JCS 理論化学国際シンポジウム
オーガナイザー代表 長谷川 淳也
名誉オーガナイザー 中辻 博



認定 NPO 法人 量子化学研究協会への継続的なご寄付のお願い

量子化学研究協会は、2016年3月24日に京都市より「認定 NPO 法人」に認定され、約3年9か月が経過しました。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。

認定 NPO 法人を維持する必要要件の一つとして、毎年 100 名以上からのご寄付(3,000 円以上)が法で定められています。まだご寄付いただいていない方だけでなく、前年度までご寄付を賜りました皆様におかれましても、本年度も少額でも継続的にご寄付を頂けますと大変ありがたく存じます。それが、私たちの活動が社会からサポートされている一つの証となります。

私達は、今後とも、皆さまのご好意やご寄付、ご期待に応えられるよう、不断の努力を続けていく覚悟です。

ご寄付頂きました御心ざしは、量子化学研究協会の活動を通じて、研究所の活発な研究活動に使われ、それにより化学理論を飛躍的に進歩させ、科学・技術の進展を促し、ひいては人類の幸福に寄与すると考えています。

認定 NPO 法人へ寄付をすると、その寄付額に対して寄付者は、所得税、相続税、法人税から、40-50%の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。詳細は、量子化学研究協会・研究所のホームページ、<http://www.qcri.or.jp/>や次のページをご覧ください。皆さまの、温かいサポートを、お願い致します。

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

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)： ○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



認定 NPO 法人制度による税の優遇措置

(京都市ホームページより抜粋: <https://www5.city.kyoto.jp/chiiki-npo/npo/nintei.php>)

認定・特例認定 NPO 法人に対する税制上の優遇措置の概要

1 寄附者に対する税制上の措置

(1) 個人（京都市民）が寄附する場合（特例認定 NPO 法人にも適用される。）

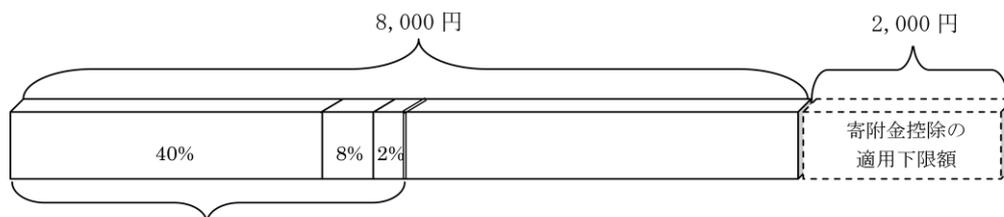
所得 税	<p><対象となる寄附金額は、所得金額の 40%相当額が限度></p> <p>所得控除と税額控除の選択制</p> <p>* 所得控除：(寄附金額-2,000 円) を総所得金額等から控除</p> <p>* 税額控除：(寄附金額-2,000 円) × 40% (所得税額の 25%相当額が限度) を所得税額から控除</p>
個人住民税	<p><対象となる寄附金額は、総所得金額等の 30%相当額が限度></p> <p>* 税額控除：(寄附金額-2,000 円) × 10% (市民税 8%, 府民税 2%※) を住民税額から控除</p>

(※) 京都府と京都市がともに条例で当該認定・特例認定 NPO 法人に対する寄附金を指定している場合。
 なお、平成 29 年 1 月 1 日以降の寄附から、市民税と府民税の割合が「市民税 6%・府民税 4%」から「市民税 8%・府民税 2%」に変更された。ただし、指定都市以外に住所を有する方は同日以降も「市区町村民税 6%・都道府県民税 4%」から変更ない。

(参考) 京都市民の方が認定・特例認定 NPO 法人に 10,000 円寄附した場合の例

(ただし、京都府と京都市がともに条例で当該認定・特例認定 NPO 法人に対する寄附金を指定している場合)

$(10,000 \text{ 円} - 2,000 \text{ 円}) \times 40\% = 3,200 \text{ 円}$ (→所得税から控除)
 $(10,000 \text{ 円} - 2,000 \text{ 円}) \times 8\% = 640 \text{ 円}$ (→市民税から控除)
 $(10,000 \text{ 円} - 2,000 \text{ 円}) \times 2\% = 160 \text{ 円}$ (→府民税から控除)



控除額合計：所得税 (3,200 円) + 市民税 (640 円) + 府民税 (160 円) = 4,000 円

(2) 法人（企業等）が寄附する場合（特例認定 NPO 法人にも適用される。）

寄附した法人（企業等）の法人税の計算において、一般寄附金の損金算入限度額に加え、別枠の損金算入限度額が設けられている。

特別損金算入限度：(資本金等の額×0.375% + 所得金額×6.25%)×1/2

(3) 相続又は遺贈により財産を取得した者が相続財産の一部を寄附する場合

(認定 NPO 法人のみに適用される。)

寄附した人の相続税の計算において、その寄附した財産の価額は、相続税の課税対象から除かれる。(ただし、相続税の申告期限までに寄附する場合に限る。)

「量子の世界」 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す。量子化学研究協会の活動は、それをいかに生き活きと写しだすかを目的に研究していると言えそうです。他方、「量子の世界」はそれを如何にうまく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。これら広い意味での「量子の世界」を皆様の力で築き、長く発展し、魅力的なものに育てていくために、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、その哀歓、それらすべてを対象にしており、自由に発想されたことを是非お寄せください。本誌「量子の世界」が、量子の民たる皆様の、自由闊達な「ご意見広場」となればと思います。皆様、奮ってご寄稿ください。何卒よろしくお願ひいたします。

編集後記

新緑の候 新型コロナウイルスが猛威を振るい、皆様におかれましても生活に大きな影響を受けておられると存じます。また、罹患された皆様には心よりお見舞い申し上げます。

さて、ここに、「量子の世界」第12号(令和2年春号)をお届けします。

牛尾 二郎 先生の巻頭言では、企業(会社)における計算機シミュレーションによる予言的な研究の大切さについてご執筆頂きました。福西 快文 先生には、新型コロナウイルスの流行拡大とそれに立ち向かう分子生物学や創薬の研究についてのご貴稿を頂きました。

また、例年春に開催していた「革新的量子化学シンポジウム」は、秋ごろの開催を計画しております。藤井 啓祐 先生には、最近大きな注目を集めている量子コンピュータと量子化学計算について、ご講演頂けます。江藤 正義 先生には、「量子の世界」第8号(2018年秋号)で大変好評であった”量子化学者と健康-セルフ・ヘルスケアのすすめ”をさらに推し進めたご研究についてお話しいただけます。

今後感染が早期に終息することを期待し、革新的量子化学シンポジウムでは皆様と直接お会いし楽しい時を過ごせることを希求いたしております。

「量子の世界」 No.12, 2020年(令和2年) 春号

2020年5月11日 発行

発行者: 認定 NPO 法人 量子化学研究協会研究所

〒606-8305 京都市左京区吉田河原町 14
京都技術科学センター16

投稿とお問い合わせなど: office@qcri.or.jp

電話・FAX: 075-634-3211

Copyright © 2020 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.qcricri.or.jp/>)にてご覧になれます。

