



量子の世界

No. 13, 2021 年 春号 (2021/4/21 発行)

－ 目次 －

	ページ
1. 考えてみることの面白さ大切さ 大野 公一 (量子化学探索研究所 研究所長)	1
2. 物質・材料研究機構での研究活動 ～物理と化学のあいだで～ 石川 敦之 (物質・材料研究機構 主任研究員)	9
3. 「第 14 回 革新的量子化学シンポジウム」延期のお知らせ 講演者: 藤井 啓祐 先生、江藤 正義 先生、中辻 博 先生	12
4. 「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」延期のお知らせ	15
5. 量子化学研究協会の活動について: インタビューとラジオ出演 ・ 京都市伏見いきいき市民活動センターのインタビュー ・ 京都三条ラジオカフェ FM797 でのラジオ出演 ・ 京都市民活動情報ポータルサイトに掲載: 「量子の世界へのいざな(誘)い～夢の方程式に挑む～」	16
6. 量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い	19
7. 「量子の世界」へご寄稿のお願い、編集後記	22

考えてみることの面白さ大切さ

大野 公一

量子化学探索研究所 研究所長

中辻博先生との出会いは分子科学夏の学校の勉強会で、私が東大物性研の大学院生だった50年程前のことである。京大には凄い人がいるものだと感じ強い刺激を受けた。いま NPO の量子化学探索研究所で定年後の活動をしているが、量子化学研究協会という恰好の素晴らしいお手本があったればこそこのことで、いまだに中辻先生への畏敬の念は増すばかりである。その中辻先生から「量子の世界」への原稿執筆のお話があった。意に添えるかわからないが光栄なことであり、後期高齢者から若い方々に何か伝えるよい機会としてお引き受けすることにした。



大野 公一 先生



研究・教育で何が大切かといえ、わからないことがあったときの解決策である。次の4つに大別される。(1) 教えてもらう。(2) 調べる。(3) やってみる。(4) 考えてみる。最初の2つは手っ取り早く、後の2つは手間暇かかる。既知のことなら(1)(2)がよいが、誰も知らないことなら(3)か(4)に頼るしかない。(1)と(2)は学問の基本であり、(3)と(4)は研究の基本であろう。

小学3年の頃、雑誌で「時計の針が12時に重なってからその次重なるのはいつ？」という問題に出会った。その雑誌に答えが出ていなかったの、自分で考えてみることになった。分数を習っていたが角度のことは知らなかったと思う。長針が早く回るため短針に追いつき追い越すことを繰り返し12時間後にまた12時のところで重なることは理解できていた。いろいろ考えてみた末「 $12 \div 11$ 時間後 = $(12 \times 60) \div 11$ 分後」という答えを得た。雑誌に答えがないので答え合わせは叶わなかったが、「解けた」という確信はもてた。「自分で考えてみて答えを探り出す」ことの面白さをこのとき初めて知ったのである。些細なことだが、これが今日に繋がっていると思う。

高校1年のとき、休み時間に同級生から「12個の球に1個だけ重さの違う球が紛れている。天秤を3回だけ使って重さの違う球を見つけるにはどうすればよいか？」という問題を教わった。下校するまでは考える余裕がなかったが、帰宅後に考えてみようという気になった。どれだけ時間がかかったか記憶がないが、その日のうちに解くことができた。しかも、球の数が12個より1個多くても、天秤を3回使えば重さの違う球がみつけれらることに気づいた。翌日、学校で、この問題を家庭教師から教わったという同級生に「昨日の問題解けたよ」と伝えたところ、意外にも、その同級生は急に不機嫌になり、こちらの話をまったく聞こうともせず、そっぽを向いてしまった。

大学入学直後の4月末、駒場キャンパスから駅へと歩きながら、数学に進学予定という同級生に「これから解析概論(高木貞治著)を学ぶ積もり」と告げたところ、その同級生から「え！君！まだ読んでなかったの！僕らの高校では皆読んでいたよ！」と言われ驚愕した。GW後、本郷の5月祭で数学科の展示を覗いてみたところ「クイズ」と称し「世界で奇数回握手した人の総数は偶数？」と質問されたので、直に背理法で説明したところ「即座に正答したのは君が最初！是非数学科に進学を！」と勧誘されたが、GW直前に同級生から受けたショックは強烈で、とても数学に進む気にはなれなかった。爾後、哲学書・啓蒙書を読み漁り、悩んだ挙句、クールソン化学結合論やポーリング量子力学序論等に魅せられて化学科に進学した。進学後、化学科学生控室で同級生から「1Lで10km走る車とガソリン200Lがある。車にはガソリンを20Lしか積めないが、積んだガソリンは任意の場所に置き、その場所にきたときに自由に補給できる。この車と200Lのガソリンでどれだけ遠くまで行けるか？」という問題を教わった。情報数理系で話題の難問だという。下宿に戻り考えてみた。与えられたガソリンは全部使い明らかな無駄はせずガス欠にならぬよう注意して考えてみたところ、程なくして無駄や不合理のない解答が得られた。今度は、後味悪い結末を避け、同級生に「解けたこと」は伝えなかった。

大学4年の授業で、「無色のアミン溶液に無色のピクリン酸を加えるとピクラートができて発色する」ということを習った。当時東大ではHOMO/LUMOの講義は皆無だったが、自分で少し勉強していたので、手をあげて教授に「アミンのHOMOは高く酸のLUMOは低い



ので、電荷移動錯体ができ、その HOMO-LUMO ギャップが反応物より大幅に狭くなることが、無色のもの同士を混ぜて発色する原因でしょうか」と質問したところ、その教授から「き！君！そんな難しいこと、考えなくてよい！」と皆の前で一喝されてしまった。高校で私の質問に先生が急に赤面して取り乱したことがあったので、授業では質問を避けてきたが、大学なら大丈夫と思って質問してみたのだが皮肉なことになってしまった。

東大の駒場で文部教官（助手）として学生に教える立場になったとき、学生からどんな質問を受けても答えられるようにしようと肝に銘じた。当時の1・2年生の化学実験は物化・有機・無機・定量各3種目、合計12種目あった。自分が学生するとき「丸底フラスコに液体を入れ沸騰石を加えて加熱すると沸騰石から小さな泡が多数出ながら穏やかに蒸留が続く。ここで加熱をやめて放置し、冷えた状態から再び加熱して蒸留を継続させようとするとき、前の沸騰石は死んでしまって機能しないので、新しい沸騰石を入れる必要がある。それは一体どうしてなのか？」まったくその理由がわからなかった。少し調べてみたが「沸騰石の死」の理由の説明は見つからなかった。このことを学生に質問されて答えられないと困るので、真剣に考えてみることにした。まず、沸騰石から泡が出続けるのは、最初は閉じ込められた空気が膨張して出始めるが、次第に沸騰する液の蒸気が沸騰石の細孔の中に満ちてくる。蒸留が続いているときは、蒸気の補給が続くので、泡が途切れてしまうことはない。が、もしも温度が下がり冷えてしまうとどうなるか。蒸気が凝縮し細孔の中は液体だけになってしまう。そうすると温度が上がってももはや細孔から泡は出てくることがない。沸騰石が死してしまう理由は、意外と単純であることがわかった。本気で考えてみると案外答えが見つかることの醍醐味を知り、以後やみ付きになった。

物理化学や比色定量の実験で、溶液に光を通じると濃度 C や光路長 L によって透過光の強度が変わることを示す法則（Lambert-Beer の法則：吸光度 $= \epsilon CL$ ）が出てくる。なぜこの法則が成り立つのか、学生るときはまったく分からなかったし、教える立場になって調べてみても、微分方程式による減衰現象の型通りの説明はあるが、光を吸収する分子の存在が照射光の透過率とどう関係するかの分子論的説明はどこにも見当たらなかった。そこで考えてみることにした。光が分子に当たると照射光が分子に遮られて分子の影ができる。光が進むにつれて分子の影は増えるが、影の中に入った分子は影の増殖に寄与しない。そこで、分子が影と重なる確率を考慮して影にならない部分の割合を求めるモデルを考えたところ Lambert-Beer の法則を導くことができ、指数関数の底(Napier 数 e)を実測できることが示された。

物理化学実験に、水素放電管の発光線（輝線）の波長が Balmer の公式に従うことを確かめる新種目を導入することとなった。Balmer の公式は有名だが、可視光の領域にある4本の輝線の波長から、どうやって、その公式が出せるのか。分数をいろいろ操作して出てきたという説明もあるが、納得できないので考えてみることにした。輝線の間隔が徐々に狭くなるので0に収束する数列として2次式の逆数の形を想定すると、未知数の数は、間隔が0になる極限波長と2次式の係数3つを合わせ、合計4つになる。4本の輝線の波長を使うと4元連立方程式が得られ、それを解くと4つの未知数が決まり、すんなりと Balmer の公式が得られ、可視光の領域内には観測できない極限波長も求められた。

東大の駒場で化学実験の指導任務を解任され講義を担当することになって、まず大変だったのは熱力学（熱化学）だ。学生時代に理解不能な疑問点（不変な平衡状態を保つ変化？



同温の物体間の可逆的熱移動?等々)が山積み、いくら調べても真つ当に答えてくれる本に出会わなかったからである。数ヶ月間考えてみることで疑問点に逐一答えを出し、無事教壇に立つことができた。その詳細を具体的に披露することは差し控えるが、私の「熱化学」の授業を受けた学生が、その後、物理の「熱力学」の授業で先生に(熱心に?)質問するらしく、その質問に答えられない物理の若手教官が続出しパニックになっているという噂が伝わってきた。考えてみることの波及効果として、他人の面目を潰すことに繋がりがねないことは要注意だが、真理の追究には何ら憚るに及ばないであろう。

どの大学でも教えられている「化学結合論」にも大きな問題がいくつかある。その1つは、希ガス(貴ガス)の反応性である。高校では「希ガスの電子配置は特別に安定で反応しない。」と習うが、なぜ希ガスの電子配置が「特別に安定」なのかの理由が不明確で、とても納得できるものではない。大学の一般化学でも、希ガスの反応性が乏しい科学的根拠の説明は十分なされていない。ここでも、教えるに当たって考えてみる必要に迫られた。いろいろ調べてみても、希ガスの反応性が乏しい理由を明快に説いている本には出会わなかったが、この問題を解く鍵は、福井謙一先生の本の中にみつかった。軌道(間)相互作用の原理とHOMO-LUMOの原理である。反応性は、軌道相互作用による結合性軌道と反結合性軌道の形成と相互作用前後の電子配置に依存する。その結果、「空軌道どうし、電子対どうしは、反応しない。一方に不対電子があれば、相手が、空軌道でも、不対電子でも、電子対でも、つまり、相手が何でも反応しうる。不対電子がなくても、空軌道と電子対の間で反応することができる。」ということが、明快に示される。ここで、不対電子がないときは、不対電子がある場合と比べて、反応性が低い。これには、不対電子をもたない基底状態では、電子対と比べ空軌道はエネルギー的にかなり高いところにあることが関係している。軌道相互作用の原理によると、軌道間のエネルギーの格差が小さいほど相互作用は強く、格差が大きくなるほど相互作用は弱くなる。そのため、不対電子を持たないものどうしの反応性は低く、不対電子を持たないものは、通常、安定に存在する。ただし、HOMOが高く相手に電子を与えやすい(イオン化エネルギーが小さい)物質とLUMOが低く相手から電子を受け取りやすい(電子親和力が大きい)物質が出会うと、一方の電子対と他方の空軌道の間のエネルギー格差が小さくなるため、空軌道と電子対の間の軌道相互作用によって反応が起きる。つまり、希ガス原子の反応性が乏しいのは、反応性を弱める次の3条件がすべて揃っているからであるといえる。

- (1) 不対電子をもたない。
- (2) イオン化エネルギーが大きく(HOMOが低く)相手に電子(電子対)を与えにくい。
- (3) 電子親和力がなく(LUMOが高く)相手から電子(電子対)をもらいにくい。

これらの条件のどれか1つでも破れると、希ガスといえども反応するようになる。(2)の条件は、HeからArまでは万全だが、Krから怪しくなり、XeではOやHよりイオン化エネルギーが小さくなるため化合物をつくる。HeやNeでも、イオンや励起原子になると、化合物をつくったり、相手をイオン化したりするなど、非常に反応性に富む。このことは、日本初のノーベル化学賞受賞者の偉業と関係しており広く伝承されるべきものである。化学結合論のもう一つの問題については最後に述べることにする。

東大で助手をしていたときに、文部省在外研究員として英国に2年間留学する機会(英国内ではRamsay Fellowとして)に恵まれ、Chem. Phys. Lett誌の初代編集長をされていたHoytink教授の研究室に在籍することとなった。Hoytink先生は、体調を悪くされて



はいたが、すぐに研究テーマをくださった。多環芳香族炭化水素 (PAH) の電子スペクトルを観測・解析し新奇な電子遷移機構を立証せよというものであったのだが、先生の構想は、渡英前に既に私が物性研で行っていた極低温高分解回転偏光子分光実験による振電相互作用 (vibronic coupling) 解析の結果で完全に否定されてしまったため、そのプロジェクトは敢え無く頓挫してしまった。同じ研究室に在籍していた Cambridge 大出身の博士研究員と一緒に、設置予定のレーザー装置で行う研究の準備を1年間進めた。ところが、実験室の改築 (強力なレーザー実験のため安全設備が厳重) に想定外の時間がかかり、その上搬入予定の機器の製造がメーカーの事情で遅れてしまい、私の滞在期間の2年目になっても、いつ実験が始められるか見通しすらつかないピンチに陥った。結局、実験は断念し、大型計算機がかなり自由に使えることがわかったので、急遽、教授の意に適う計算テーマを考えてみることにした。キュリー夫人が研究テーマをみつけるため論文を読みまくったという話にヒントを得て図書室に籠り、理論化学の専門誌 *Theoretica Chimica Acta* の第1巻の最初から読みはじめた。すると数日後、第3巻に、Hoytink 先生にも興味を示してもらえそうなテーマで、しかも、その論文の著者達が勘違いし間違ったやりかたをしている論文がみつかった。その論文は、ナフタレン・アントラセンなどの PAH の電子スペクトルの振動構造を計算で出そうとしたもので、電子状態は n 電子遷移なので半経験的方法で扱い、分子振動は結合の長さだけが変わるとして簡略な基準振動計算で扱っていた。振動プロGRESSIONを示す振動は、その振動モードに沿う分子構造の電子遷移に伴う変形が大きいものなので、結合次数の変化で結合長の変化を見積もり、それを用いて基準振動モードに沿う変形を算出し、振動構造の強度を与える Franck-Condon 因子を求めるという処方箋である。この論文のどこがおかしいかというと、まずは計算結果、PAH の実測スペクトルの振動構造で一番顕著なのは $1300\text{--}1400\text{ cm}^{-1}$ なのだが、この計算では波数の大きい $1500\text{--}1600\text{ cm}^{-1}$ 付近が強くなっていて強度分布が合わない。これは、ベンゼンの b_{2u} 振動の 1309 cm^{-1} が分子力場の設定が悪いと 1600 cm^{-1} 付近に跳ね上がってしまうのと事情が似ている。そこでこの論文の基準振動の求め方を精査すると、案の定 CC 結合の伸縮の力の定数として非対角のメタの関係の CC 結合間の相互作用が無視されていた。 n 電子系では、共役効果のため、1つおいて隣の CC 結合が同時に伸縮しやすいことが、すでに知られていたのだが、この論文ではそのことが無視されていた。 n 電子系は、核と電子の集団運動が強く相関するので、それを考慮すれば、PAH の分子振動計算の新手法を創出できそうである。こうして英国滞在の2年目に、勉強しながら半経験的電子状態計算と基準振動計算のプログラムを書き、核と電子の集団運動の相関を考慮した PAH の基準振動計算法を開発し、PAH の電子スペクトルの振電バンド構造を驚くほどよく再現する計算ができるようになった。Hoytink 先生から long standing problem をよく解いたとお褒めいただくことができ安堵しつつ留学生生活を終えたのだが、先生は翌年持病がもとで鬼籍に入られてしまった。

自分で考えることが大切なのはもちろんだが、いろいろ学ぶことも重要である。私が学んだ中で、やはり福井謙一先生が書かれたもののの中に一際光るものがある。その一例は、1976年に書かれたもので「電子の軌道そのものを直接観測することは難しいが、軌道の性質から導かれる現象の中には、観測に結びつくものもある。」というもので、これに基づけば、「電子軌道の観測」が、あながち不可能ではなく、実験で「電子軌道を観測する」ことがあっても不思議ではないことになる。筆者が1980年から取り組むことになったペンギンイオン化電子分光と原子衝突イオン化過程の観測・解析では、まさに、希ガスの励起



原子をプローブとして、標的分子の分子軌道の形状が実験的に調べられるようになり、さらには、原子衝突の速度を制御した実験法の開拓と解析法の開発によって、原子が分子に衝突する現場である分子表面の形状の異方性や硬軟粘着性まで調べられるようになった。これらの研究の新展開は、意を決して東大から東北大に移り、いろいろな人たちとの出会いの中で進めることができ、さらに Dyson 軌道の観測にまで発展させることができたのは、福井先生の慧眼に励まされてのことであった。

「原子衝突イオン化過程の観測」には、実験上の技術的困難が多々伴った。周囲に「それは不可能」という人さえいた。というのも、観測対象の電子の運動エネルギー分析（電子分光）に加えて、衝突する原子の速度選別まで行おうとすると、通常のやり方では5桁程度信号強度が落ちてしまう。当時1回の電子分光実験に3時間かかっていたので、特に工夫せずに速度選別をすると 3×10^5 時間 $\div 34$ 年も測定に時間がかかってしまう。測定が終わらないうちに装置や実験者がお陀仏になりかねないのだから、不可能（馬鹿な？）といわれてもいたしかたない。そこで考えてみることにした。測定効率を何桁も上げなければならぬ。ここで役立ったのは「無駄の徹底回避」で、それは以前に「重さの違う球」や「車がどこまで行けるか」などの問題を解いたときの思考体験である。実験技術の各要素を厳しく吟味してみると、無駄（非効率）なところが多々みつかった。詳細は省略するが、無駄な点を探り出し、冒頭の解決策の4手法を駆使して、逐一その改善策を練り実践を繰り返して、10年程の期間に信号検出効率を10桁以上向上させることができ、不可能とさえ思われた多次元観測を種々実現することができた。

原子衝突イオン化過程の理論解析でも、いろいろ考えることで、不可能と思われることを実現することができた。多数あり、ここに逐一披露できないのは残念だが、ひとつだけ紹介させていただくことにする。原子と分子の衝突過程の理論解析では、いろいろな初期条件からトラジェクトリ（飛跡）を走らせて衝突過程をシミュレーションする。それには、原子・分子間の相互作用ポテンシャルが必要となる。希ガスの励起原子と分子の相互作用ポテンシャルは、イオン化の閾値より高エネルギーの超励起状態なので、その量子化学計算は非常に困難で、高度な技法を駆使して行っても十分な精度で信頼できる結果が得られるとは限らない。このため、モデルポテンシャルを利用し、十分な統計量のトラジェクトリ計算で得られた結果を実験結果と比較して、実験に合うようモデルポテンシャルを最適化することにした。こうしたポテンシャルの最適化を行うとき、衝突散乱過程では、ルジャンドル（多重極）展開を用いることが多い。だが、それは対称性のよい粒子間の相互作用にはよいとしても、非常に異方性の強い分子に通用するわけがない。そこで考えることになった。分子との相互作用は、HOMO/LUMO などいくつかの分子軌道に支配されることは、福井先生の理論から明らかなので、分子軌道の形状をポテンシャル最適化の補正に利用することを試みることにした。前例ない試みに挑んでくれたのは、現在北大教授の前田理氏で卒研のときであった。この試みは、ルジャンドル展開では収斂しそくない系のポテンシャルの最適化を実現し、原子衝突イオン化過程のステレオダイナミクスの解析・解明に威力を発揮した。

もうひとつ、前田氏がチャレンジしてくれたことに、反応経路自動探索法の開発がある。それは意外なことをきっかけにして始まった。前田氏は、卒研から大学院に進学した頃、前述した相互作用ポテンシャルの最適化を進めていた。最初は小さな系だったので、何万



本もののトラジェクトリを走らせても、それほど時間はかからなかったのだが、次第に大きな系を扱いはじめたため、計算結果を数ヶ月単位でひたすら待つしかない手持ち無沙汰の状況になった。そこで、異例のことだが、教師と学生1対1の輪講が始まった。テキストは、Jensen 著の Introduction to Computational Chemistry の初版本であった。かなり読み進んだところに奇妙な記述が現れた。平衡点を中心とする球面上のエネルギー極小点を、球を拡大しながら追跡すると低エネルギー経路を通じて TS がみつかり IRC がわかるという。いつも、私から論評や感想を伝えていたが、このときは、「低エネルギーの経路は、振動のソフトモードで、内部回転や環の変形に繋がるだけで、結合の組換えには繋がるはずがない。」と批評し、さらに、原子・分子間ポテンシャルの研究で、結合的相互作用があるとポテンシャルが下方に歪むことがわかっていたので、「振動モードの個性を振動固有値でスケールして消せば、ポテンシャルの下方歪みが検出でき、反応経路の糸口が見つかるはずだ。」と呟いた。このときの着想は、新学期から夏休みまで4ヶ月続いた輪講の最後の総括で最も重要な収穫として再確認し、それが以降の前田氏の研究テーマとなり、不可能とされていた TS 自動探索の新手法が誕生して福井先生が導入した固有反応座標 (IRC) を初めて網羅的に探索できるようになった。そして、反応経路自動探索という新分野が切り拓かれ、その発展は現在も続いている。

最後に、化学結合論の重大な問題にふれることにする。『量子化学の多くの教科書で、位相をそろえて波動関数が重なると原子核間の電子密度が増加し、静電的に引き合うため結合が生じると書かれているが、この説明は正しくない。2つの正電荷をもつ原子核から引力を受け、電子の存在確率分布が原子核に近づき、ポテンシャルエネルギーが低下し、化学結合が生じるのである。』という主張をご存知だろうか？『量子化学の教科書はほぼすべて間違っている』という。この発端は、『Heitler-London の水素分子の理論や LCAO-MO による化学結合論は、正しい量子力学計算で満たされるべきビリアル定理が成立しないので、間違っている』という指摘にはじまる。ビリアル定理を満たす計算をすると、分子の形成に伴い、原子核近傍に電子密度が集まる特徴が見られることから、上記のような主張がなされている。ビリアル定理というのは、運動エネルギーの期待値 $\langle T \rangle$ と位置エネルギーの期待値 $\langle V \rangle$ の間に、 $2\langle T \rangle + \langle V \rangle = 0$ の関係があるという定理であり、原子はもちろんのこと、分子でも平衡構造で成り立つことが知られている。平衡構造では、 $\langle T \rangle$ は正で運動エネルギーが増加し、 $\langle V \rangle$ は負で $\langle T \rangle$ を大きく打ち消し安定化（結合エネルギー）に貢献する。化学結合の物理的描像は、原子核近傍での運動エネルギーの上昇と位置エネルギーの下降に結び付けられているが、それは、多くの偉大な化学者の業績を踏まえて普及している化学結合の認識とは相容れない。はてさて、どう考えたらよいのだろうか。結合力を「エネルギー」で考えることに問題がありそうだ。エネルギーで考えると、最大の寄与は、確かに原子核近傍の電子分布なので、『上記のような結論』になりかねない。「力」で考えるとどうだろうか？原子核近傍の電子密度がいくら増えてもほぼ等方的なら原子核を特定方向に引っ張る結合力にはならない。「結合力とは何か」を電子密度と結びつけて最初に明らかにしたのは、Feynman の静電定理である。1939年に、R.P. Feynman がまだ MIT の学部生であったときに出した論文に書かれている。その定理によると、個々の原子核に働く静電気力は、他の原子核からの斥力と空間に分布する電子密度からの引力を全部足し合わせた合力に等しい。Feynman の静電定理に基づいて化学結合の本質を調べることは、筆者が東大に居たときに、当時博士課程の院生であった石田俊正氏の研究テーマと



なり、それ以前に発表されていた R.F.W. Bader や中辻博先生の論文を参考にして石田氏の学位論文の一部にその成果が収録されている。電子密度由来の力を原子軌道成分に分割して調べると、原子核近傍の電子密度の高まりや分極による力の寄与より、原子核間の電子密度の高まりによる力の寄与の方が重要であることがわかった。また、分子軌道毎に調べることで、内殻軌道の非対称な変形効果も無視できない程度存在するが、それよりも価電子軌道による結合力の方が重要であることが確認できた。結局、多くの化学の教科書に書かれているように、原子間の軌道の重なりによって生じる結合性軌道の電子密度が、化学結合の成因であると考えてかまわないことがわかった。なお、基底関数に分極関数を追加することで、ビリアル定理をよく満たすようになることは、中辻先生の静電力理論の論文に書かれている。結合エネルギーの精密な算定には、ビリアル定理は重要である。『量子化学の教科書はほぼすべて間違っている』という挑発的批判は、原子核に働く電子密度による力を考えることで払拭できる。

解決不能とさえ思える難題も考えてみることを貫徹することで氷解し未知の世界が切り拓かれることにつながる。読者には「考えてみることを」をお勧めし、筆を置くことにする。



物質・材料研究機構での研究活動 ～物理と化学のあいだで～

石川 敦之

国立研究開発法人 物質・材料研究機構
エネルギー・環境材料研究拠点 主任研究員

この度は、私のような若輩者に「量子の世界」へ寄稿する機会を頂き、中辻先生を初め QCRI の所員の皆様方には大変感謝いたします。これまで QCRI が主催するシンポジウムや JCS シンポジウムなどには多く参加してきましたが、コロナウイルスの状況によりその機会が失われたこと、大変残念に思います。ただ、そのような状況下でもこの「量子の世界」のような活動を通じて意思疎通することは可能と考えますので、このような機会をいただきましたことは特に嬉しく思っております。



石川 敦之 先生

この場をお借りして簡単に自己紹介させていただきますと、私は中辻先生のところで修士課程の研究を行い、その後分子工学専攻の榊茂好先生のところで博士課程にてお世話になりました。その後、QCRI に所属して中辻先生と再び仕事をしたのち、同窓の大先輩であります早稲田大学の中井浩巳先生の研究室にお世話になりました。早稲田大学で4年勤務したのち、中井研 OB の袖山 慶太郎先生(現所属 物質・材料研究機構(NIMS))のご紹介で茨城県つくば市の NIMS に移り、現在に至るまで勤務しております。【写真1】今は NIMS の館山 佳尚グループリーダーの元、触媒や電池に関わる理論シミュレーション研究に従事しております。上記のようなキャリアパスを眺めてみますと、いろんな先生方のご縁に導かれて今に至っているということに改めて気づきます。やはり、研究室の同窓というのは非常に強い絆であると感じますし、そのような場をこれからも一層大切にしていきたいと感じます。

【写真1】物質・材料研究機構 並木地区 WPI-MANA 棟



NIMS は、国立研究開発法人(国研)として文部科学省の所管にあります。もともとは金属材料技術研究所と無機材質研究所という2つの研究所でしたが、2001年に合併され現在に至ります。こちらに移るまでは、NIMS という名前だけは聞いたことがありましたがあまり親しみがなく、どういうところかあまり見当が付きませんでした。どちらかというと言総研のほうが馴染みがあり、似たようなものかと思っていました(この理解は大まかには合っていると今でも思います)。実際に NIMS に着任してみると、あまり化学の研究者、特に量子化学の人はおらず主に物理をバックグラウンドとする人が多いことがすぐにわかりました。特に、理論計算では固体物理・物性物理の研究者が非常に多く、NIMS において強固なコミュニティを形成しています。そのため、量子化学の研究者はマイノリティ扱いされることが多いように感じます(例えば、ベンゼン環が出てきそうな研究テーマになるとどこからか声を掛けられる、というような感じかと思います)。

このような職場環境ですので、物理と化学の違いという点について考えさせられる場面が多くあるように感じます。物理と化学の違いは、我々のように物理化学分野に所属している人間にとっては特にはっきりと回答がしにくく、どのようにアイデンティティを確立すべきかぼんやりと考えることが多かったように思います。

そのように感じていた折に、中井先生から早稲田大学での化学(1年生向け)の講義をやらなにかというお誘いを受け、講義を担当する機会をいただきました。内容は物理化学分野を中心とした基礎化学ということになりますが、個人的な趣味も加味してできるだけ歴史的発展に沿って化学の進歩をレビューするという形をとらせていただきました。その中で、QCRI 主催のシンポジウムにもたびたびご参加頂いております廣田 襄先生の「現代化学史」などは大いに参考にさせていただきました。これらの授業の担当を通じて感じたことは、歴史的に化学者と呼ばれる人たちは何かを「作る」ということに大きなこだわりを持っていたのでは、という点です。思い返してみると、現代でも物理分野の研究者より化学分野の研究者の方が、物理的な実態のある何かを作るということにより強いこだわりを持っているように思います。量子化学を含む理論化学の研究者にとっては、何か実体のあるものを作るというのは少しハードルが高いようにも思えますが、しかし自分の知る多くの先生方がそこにフラストレーションを抱いておられる、という印象もあります。その意味で、理論化学の研究者も物を作りたいという要求は小さくないのでは、と思います。

最近では、デジタル技術や人工知能(AI)が急速に進歩しており、毎日のようにデジタル・トランスフォーメーション(DX)という言葉を目にします。このような動きには様々な感想を持つ先生方もおられるでしょうが、少なくとも理論計算で得られるような仮想的な実態を物理的な実態に移すという意味では有利な流れのように自分は感じています。少し前と比べますと仮想現実(VR)技術や 3D プリンターなどが格段に手に入りやすくなり、またその使い勝手も大幅に向上しています。また、AI 技術への対応やコロナウイルスによる在宅期間をきっかけとして、以前よりもプログラミングに興味を持つ学生・研究者が多くなっているように見受けられます。したがって、これらの DX 的潮流を追い風として、より理論計算と実験もしくは産業との距離が縮まっているように感じます。このことをチャンスと捉え、新しい技術を積極的に習得してシミュレーションの結果をできるだけ実体化していきたいと個人的には感じています。

新しい技術、特に不慣れな分野の技術の習得は時間コストが非常に大きく、なかなか踏み出せないことも事実です。幸か不幸か、私が所属している NIMS は国研であり(インター



ンシップ生などを除くと)学生がほとんど所属していません。ですので、自分が研究して結果を出さなければデータとしては何も出てこない状況にあります。しかし、逆に大学にいた頃と比べると自分の時間はふんだんにあるように感じます。このような環境ですと、上述したような新しい技術を習得して、作業を効率化するためのモチベーションが大きくなります。自分の場合ですと、優秀な学生が多かった早稲田大学から単身 NIMS に移りましたので、これまで学生に頼んでいた計算を自分で実施する必要があり、それならばと計算を自動的に実施してくれるようなコードを書くことが最初の仕事になりました。これは必要に迫られてやむを得ずとった処置ですが、大変良い経験になったと思います。このように、国研は大学とは大きく違った環境にありますので、研究者一人一人の心構えも大学とは多少異なるように思います。この点をポジティブに捉え、大学とは一味違った研究機関として特徴ある研究結果を算出できればと日々思っています。

最後にはなりますが、自分は榊研に所属している時期には均一系の触媒反応、QCRI・中井研では不均一系での触媒反応を中心的なテーマとして、現在でも触媒反応の理論シミュレーション研究を続けています。もし研究結果にご興味がある先生方がいらっしゃいましたら、遠慮なくご連絡いただけますと幸いです。

長文雑文になり恐縮ではございますが、以上をもちまして「量子の世界」への寄稿とさせていただきます。まだまだコロナウイルスの感染拡大が続く昨今ですが、皆様方のご健康・ご多幸を祈念しております。



「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～

延期のお知らせ

日時: 未定 (コロナ禍収束後 早期)

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@qcrl.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」の開催を延期します。

このシンポジウムは、JCS シンポジウムと同様に、“friendship is first, science will follow with us”という心が底流にあるため、on-line は避け、実空間で講演者・参加者共に楽しみ、感動し、質問をするという立場を維持したいと考えております。

講演者は、当初の予定通り、

藤井 啓祐 先生 (大阪大学 教授)

江藤 正義 先生 (兵庫県立大学 名誉教授)

中辻 博 先生 (量子化学研究協会研究所 研究所長)

をお願いしています。藤井 啓祐 先生には、近年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、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たと思います。

コロナ禍収束後、早速にご講演をお願いし、皆で講演会と懇親会の場となれと存じます。その際は、奮ってご参加ください。

懇親会 (予定)

日時: シンポジウム後

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

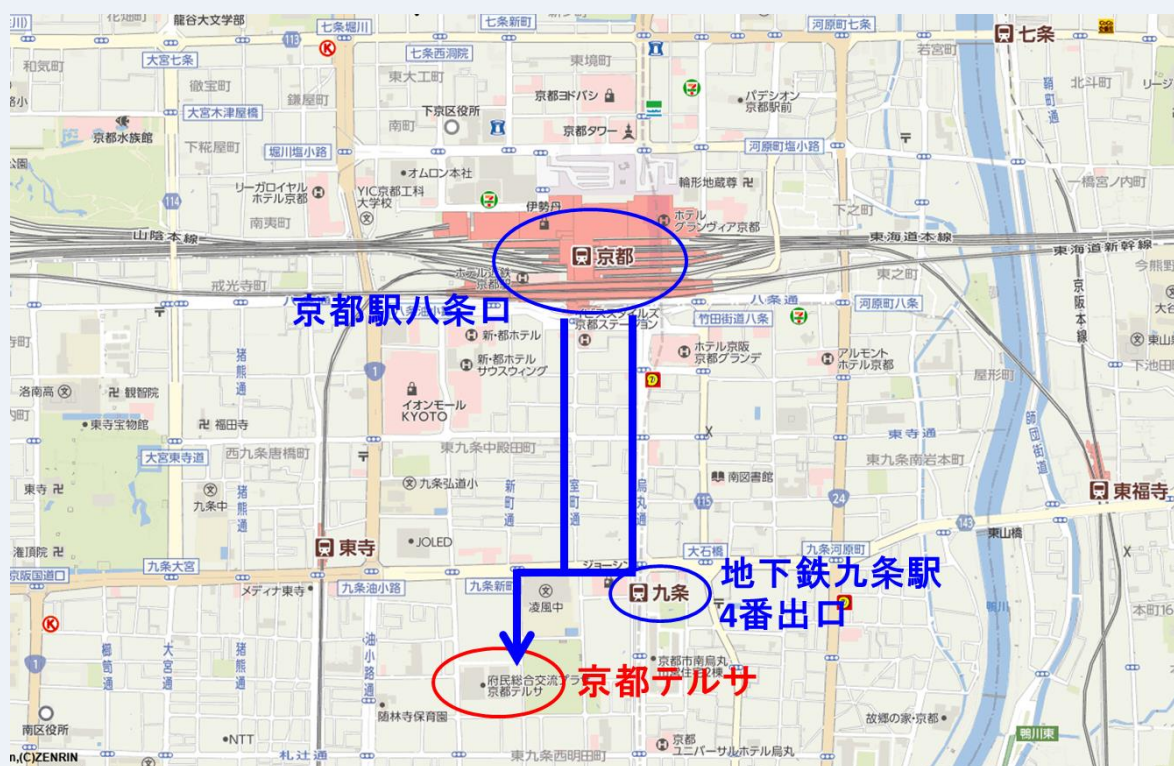
参加費: 5,000 円 (着席ビュッフェ形式)

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



コンピュー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気がする。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

日時: 未定

場所: 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/>

2021年の適当な時期の開催を計画しておりましたが、新型コロナウイルスが未だ猛威を奮う中、現状では開催日時を決定することが困難な状況です。開催日が決まりましたら、改めてご連絡申し上げます。

このシンポジウムは、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、実空間で参加者が集い、安心安全な環境下で開催することを重視します。

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います。また、invited poster を充実させて、広く参加を呼び掛けたいと思います。発表をご希望の方は、jcs8@cat.hokudai.or.jp まで御連絡下さい。

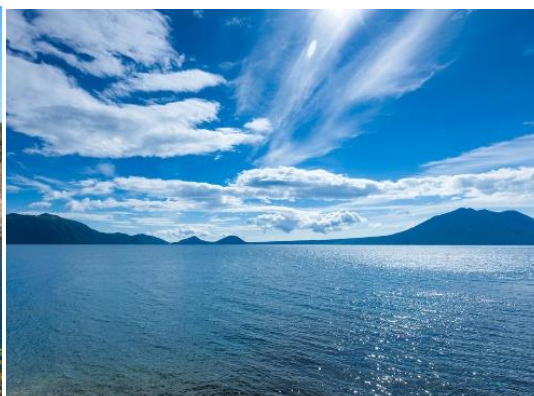
皆様の御来札をお待ちしております。



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



黄金岬 (エクスカーションの候補地) 支笏湖



量子化学研究協会の活動について ～ 一般向けインタビューとラジオ出演 ～

量子化学研究協会の活動について、京都市伏見いきいき市民活動センターや京都市市民活動総合センターより、中辻博研究所長に対して、インタビューとラジオ出演の依頼がありました。量子化学を一般に広め普及する良い機会だと捉え、これらに応えました。以下にその概略を掲載します。詳細はホームページや以下のリンクをご覧ください。

京都市伏見いきいき市民活動センターのインタビュー

京都市伏見いきいき市民活動センターの川崎安弥子様から、量子化学研究協会の認定NPO 法人としての活動について 2020 年 7 月にインタビューを受け、その記事が以下のブログや Facebook にアップされました。

ブログ: https://www.ikik243.com/post/for-local_volume6

Facebook: <https://www.facebook.com/ikik243>

また、量子化学研究協会研究所の活動を簡単に説明したスライドは以下よりご覧頂けます。

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

【For Localプロジェクト】認定NPO法人 量子化学研究協会研究所 所長の中辻博 さんにインタビュー

認定NPO法人量子化学研究協会研究所は、14年前の2006年に設立されました。所長は、理論化学の第一人者である中辻博さん。2004年に“シュレーディンガー方程式”の一般解法を世界で初めて発見され、その功績により2016年、WATOC(Word Association of Theoretical and Computational Chemists)よりシュレーディンガー・メダルを授賞されています。現在、研究所では、研究員のみなさんと化学現象を正確に予測できるような理論展開とそれを実現するための計算プログラムの構築に注力されています。



(2020 年 7 月 30 日: 記事掲載)



京都三条ラジオカフェ FM79.7 でのラジオ出演

京都市市民活動総合センターより、量子化学研究協会研究所の活動について、広く一般向けに、ラジオ取材をしたい旨の依頼がありました。2021年1月20日に京都三条ラジオカフェ FM79.7 で、京都 NPO 事業コーディネーターの吉田智美さん、アナウンサーの雅ふみこさんの質問に、研究所長の中辻が答えする形で、30分の番組収録があり、1月24日(日)の朝10時-10時半まで放送がありました。その放送の記録は以下よりダウンロードできます。

http://www.qcri.or.jp/lab/wp-content/uploads/2021/04/sanjo_coffee_radio.mp3

量子化学や研究所の最近の研究について分かりやすく説明されています。ぜひ、お聞きください。尚、放送途中で流れている音楽は、シューベルトの即興曲(Impromptu) D899 No3 で、中辻の選曲によるものです。



The screenshot shows the website for 'FM 79.7 京都三条ラジオカフェ' (FM 79.7 Kyoto Sanjo Radio Cafe). The header includes navigation links like 'ホーム' (Home), '番組表' (Schedule), '放送利用料・番組制作' (Broadcasting fee/Program production), '京都三条ラジオカフェについて' (About Kyoto Sanjo Radio Cafe), and 'お問合せ' (Contact). Below the header is a banner for '毎月3日 京都三条ラジオカフェの日' (Every 3rd day of the month, Kyoto Sanjo Radio Cafe Day) with a '15分番組放送券' (15-minute program broadcast coupon). The main content area features a program titled '2021-1-24OA 世界最先端の研究をNPOから発信！～認定NPO法人量子化学研究協会研究所～' (2021-1-24OA World's cutting-edge research broadcast from NPO! ~Designated NPO Quantum Chemistry Research Association Research Institute~). It includes details about the program name 'KYOTO HAPPY NPO!', genre '地域・まちづくり' (Local/Machi-zukuri), broadcast time '日曜日 10:00-10:30', and producers '協力：近畿労働金庫、きょうとNPOセンター'. There are also social media links for Facebook and Twitter, and a photo of three people (two women and one man) wearing masks and holding a document.

(2021年1月24日(日)10:00-10:30 ラジオ放送)



京都市民活動情報ポータルサイトに掲載 「量子の世界への誘い～夢の方程式に挑む～」

1月20日に京都三条ラジオカフェ FM797で収録したラジオ番組の際に司会をされた京都市民活動総合センターの吉田 智美さんが、その司会を通じて当研究所の活動に大変興味を持たれ、京都市のポータルサイトに掲載するための取材をさせてほしいとの依頼がありました。3月4日(木)に量子化学研究協会研究所にて、量子化学やNPO法人としての活動についての吉田 智美さんによるインタビューに、研究所長の中辻が一般の方にも分かりやすいよう説明しました。その内容は市民活動情報共有ポータルサイトに掲載されています。

ポータルサイト:

<https://shimisen-kyoto.org/>

NPO スポットライト(14回)「量子の世界への誘い(いざな) い～夢の方程式に挑む～」:

<https://shimisen-kyoto.org/spotlight>



NPOスポットライト 第14回

量子の世界への誘い(いざな) い～夢の方程式に挑む～

◎ 掲載日: 2021年3月26日

量子をご存知でしょうか？

女性の名前ではありません。「りょうし」と読みます。

量子というのは、粒子(りゅうし)と波の性質をあわせ持った、とても小さな物質やエネルギーの単位のこと。原子や分子を構成している電子や原子核といったナノサイズ(1メートルの10億分の1)あるいはそれよりも小さな、目に見えない世界です。

それらは目に見える世界を支配しているニュートン力学(万有引力の法則で知られる古典力学)とはまったく異なった「量子力学」の法則に従って動いています。私たちの体の仕組みや、植物の光合成といった生命に関わるものから、さまざまな薬品のような化学物質まで、あらゆるものが量子力学の支配下にあり、非常に大きな可能性を秘めている分野です。

NPO 法人を選んだ理由

それではさっそく、シュレーディンガー方程式とは何か？というお話に入りたいところですが、その前に、いったいなぜ、化学研究者の方々がNPO法人として活動されているのか、というところが気になってしまう職業病……。まずはNPO法人を選んだ理由をお聞かせしてみました。

【中辻先生】量子化学研究協会研究所は、京都大学の教授であった私が退官することになった際、じっくり研究を続けられるようにと教え子たちが協力してくれて設立されました。

私たちの研究は非常に大きな可能性を秘めており、将来的には化学をはじめとしたさまざまな分野に恩恵をもたらすものです。けれども、方程式が完全に解けていない現時点では、直ちに利益につながるような「商品」がありません。そうすると、株式会社はむずかしい。さまざまな法人格を比較検討した結果、選んだのがNPO法人でした。2016年からは、寄付の税制優遇を受けることができる認定NPO法人となって活動を続けています。



(2021年3月26日: 記事掲載)



©2021 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い

認定 NPO とアメリカの寄附文化

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」に認定されてから 5 年が経過しました。現在、認定の継続について京都市に申請中です。

認定 NPO 法人制度は、我が国において、NPO 活動をより一層支援するために、個人や企業による NPO 法人への寄付を促すことを目的とし、税制上の優遇措置として設けられたものです。寄附文化が定着しているアメリカでは、税金を納める代わりに寄附をすることによって自分が望む活動を支援することができるシステムがあります。アメリカの非営利団体(NPO)は、その数・規模・寄附金額などが圧倒的に多く、NPO の社会的ステータスが企業と同等あるいはそれ以上に高いものもあります。例えば、ハーバード大学、メトロポリタン美術館(世界 4 大美術館の 1 つ)、メイヨークリニック、Teach for America などがあり、これらの NPO 組織は常にアメリカの就職人気ランキングの上位に入っています。特に Teach for America は若者のあこがれの就職先です。これについては次のサイト(<https://diamond.jp/articles/-/34669>、<https://www.teachforamerica.org/>、<https://doors.nikkei.com/atcl/wol/column/15/012900167/012900001/> をご覧ください)。一方、日本の NPO は、どちらかといえば善意でボランティア活動を行っている、という印象が強いですが、認定 NPO 制度によってアメリカ並みに変化することも可能になりました。日本でも多彩な活動で存在感を増す NPO が増え、寄付の増加と共に、その NPO への就職を希望する人が増え、仕事として社会貢献を求める若者が多くなることを期待しています。

NPO としての量子化学研究協会の役割

量子化学研究協会は、科学的好奇心に基づく夢を追求してその実現に貢献し、社会に認められ、更にそれに貢献できる活動を展開することを目指しています。また、そのような夢を共有する若者・研究者とともに、その実現を目指す活動を行うことによって、大学や企業とは異なりますが、わが国では比較的新しい形での研究組織を創り・育てる努力を続けています。そのような NPO 活動をわが国でも育て、それを広め、定着することが出来ればなと、日々、微力ではありますが努力しています。

量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い

これらの活動を継続するためには、今後も認定 NPO を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 名以上からのご寄附(3,000 円以上)が法で定められています。まだご寄附いただいていない方だけでなく、前年度までご寄附を賜りました皆様におかれましても、本年度も継続的にご寄附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附、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。ご寄附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	<対象となる寄附金額は、所得金額の 40%相当額が限度> 所得控除と税額控除の選択制 * 所得控除：(寄附金額－2,000 円) を総所得金額等から控除 * 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
個人住民税	<対象となる寄附金額は、総所得金額等の 30%相当額が限度> * 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

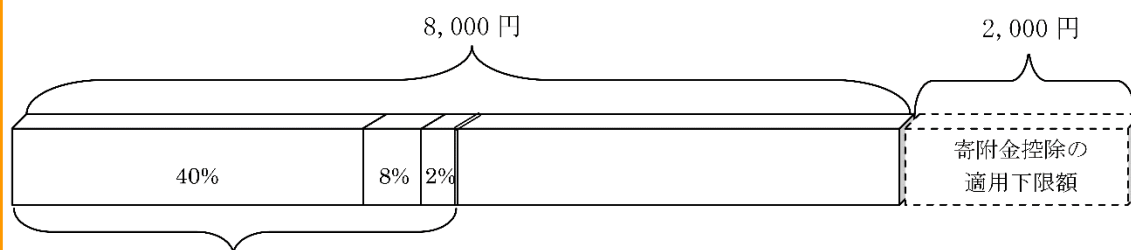


(※) 京都府と京都市がともに条例で当該認定・特例認定NPO法人に対する寄附金を指定している場合。
 なお、平成 29 年 1 月 1 日以降の寄附から、市民税と府民税の割合が「市民税 6%・府民税 4%」から
 「市民税 8%・府民税 2%」に変更された。ただし、指定都市以外に住所を有する方は同日以降も「市
 区町村民税 6%・都道府県民税 4%」から変更ない。

(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

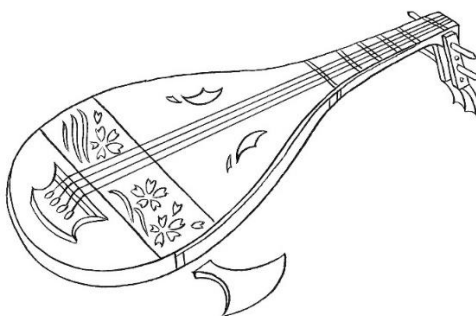
(2) 法人(企業等)が寄附する場合(特例認定NPO法人にも適用される。)

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。

(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ます。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。何卒よろしくお願いいたします。

編集後記

いまだに新型コロナウイルスの猛威は衰えず、皆様におかれましても生活や活動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。研究所員は今の所何とか無事に過ごしております。

さて、ここに、「量子の世界」第13号(令和3年春号)をお届けします。

大野 公一 先生の巻頭言では、「考えてみることの面白さ大切さ」というタイトルで未知の世界を切り拓く研究者に極めて重要な心構えとその実践について貴重なご寄稿を頂きました。石川 敦之 先生には、大学とは一味違った国の研究機関(物質・材料研究機構)での特徴ある研究活動についていきいきとご紹介頂きました。

例年春の「革新的量子化学シンポジウム」や2020年から延期している「JCS 理論化学シンポジウム」は、共に“friendship is first, science will follow with us”という理念に基づき、参加者同士の交流を最も重視したシンポジウムであるため、on-line は避け、実空間での開催が可能になるまで延期する予定です。感染が早期に収束することを祈念し、これらのシンポジウム等で皆様とお会いし、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.13, 2021 年(令和3年) 春号

2021 年 4 月 21 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@qcrl.or.jp

電話・FAX: 075-634-3211

Copyright © 2021 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.qcrl.or.jp/>)にてご覧になれます。

