



量子の世界

No. 14, 2021 年 秋号 (2021/11/19 発行)

－ 目次 －

	ページ
1. 苦しまれ続けた量子化学とその素晴らしさ 青木 百合子 (九州大学 教授)	1
2. 京都市により「認定 NPO」法人の更新が認められました！ 皆様の温かいサポートのおかげです！ ・ 認定の更新と新たな決意 ・ 量子化学研究協会研究所の行動規範 ・ 研究所の主な研究テーマ ・ 研究組織としての NPO 法人 ・ 研究所の活動	5
3. 「第 14 回 革新的量子化学シンポジウム」の開催予定 講演者：藤井 啓祐 先生、江藤 正義 先生、中辻 博 先生	13
4. 「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」暫定的な開催予定のお知らせ	16
5. 量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い	17
6. 「量子の世界」へご寄稿のお願い、編集後記	19

苦しまれ続けた量子化学とその素晴らしさ

青木 百合子

九州大学大学院総合理工学研究院 教授

この度、中辻先生から「量子の世界」への寄稿のお話を頂き、大変光栄ながら気の利いた話題が思い浮かばず戸惑いました。学際的最先端について述べる知識もないので、個人的なエッセイでお許し頂くとして、私なりの拙い研究経験を振り返り、量子化学の素晴らしさについて伝えられたらと思います。曲がりなりにも量子化学を研究の糧に出来たことは感謝の一言に尽きますが、正直 9 割以上苦しいできた思い出しかありません。でも、大抵うまく行かないことが多い中で 1 %でも大きな喜びも味わうことができた経験をもてると、それだけで本分野を選んで良かったと思える、何とも言えない不思議な魔力を持っているのが量子化学であったような気がします。



青木 百合子 先生



量子化学を始めた当時は、小さな分子の構造最適化すらままならなく、遷移状態を一つ見出すと大騒ぎする時代でした。今では信じられない話ですが、課金制だった大型計算機に指導教官から 10 万円納金してもらい、顔以上に大きな磁気テープを複数担いで計算センターに毎日通い、朝データを落として夜バックアップする毎日でした。パンチカードよりはましでも、計算にも体力が要るものだと思います。福井門下生著「量子化学入門」の今村詮先生に師事を受け、良く言えば先駆け、当時としては想定外の高分子の計算法を課題にもらい、学会発表では関心もたれず寂しいものでした。福井謙一先生が仰っていた言葉を間接的に散々聞かされました。「多くの論文を読むな、価値ある一つの論文の行間を深く読み解いてそこから何かを出せ」「人真似はするな、小さくて良いからアイデアを出せ」「流行を追うな、人と異なることをせよ」等々、近年ノーベル賞学者達が言われる格言と似ていたと思います。全く日の目を見ない課題でも、これでよいのだと思い込まされてきた感もありました。

出来が悪かったせいか理論化学の日本の中心である分子研で刺激を受けてくるようにと、諸熊奎治先生の理論研究系第一に受託学生として一年半放り出されました。学生は私一人で、高度な英語ゼミについていけず、当時のスタッフの方々に後光が射して見えたことです。当時頻繁に分子研に来ておられた西本吉助先生の進言もあり、博士研究課題の継続として、Gaussian74（ドイツ国立癌センターDr. Sándor Suhai が G70 に周期境界条件を課したプログラム）に、繰り込み摂動論という新手法導入に手掛けることになりました。

それまでは CPU 課金残額にハラハラしながら JOB を見守り、収束しそうにないと打ち切っていた摂動計算でしたが、分子研計算センター（現、江原先生センター長の自然科学研究機構計算科学センター）では、残額を気にすることなく悠々と見守ることができました。すると一度遠くに発散したあと再び繰り込まれてストーンと収束することが判明し、資金と成果が直結していることに驚いたものでした。私の JOB が走っていないと叱られていて、贅沢なことに大型計算機を使い回すことが義務にも見えたのですが、諸熊先生は理論定式化にも鋭かったのです。ゼミで発表材料がないときは数式展開でごまかそうとしても、目ざとくミスを指摘されて逃げ場がなくなりバツが悪かったものです。いつも厳しい険しいお顔をされていましたが、摂動の代わりに変分処理するアイデアを頂いて形になり、最後には自画自賛の満面の笑顔を頂いたことが懐かしく思い出されます。分子研の他人の釜の飯は辛かったけど、とんでもなく刺激的な環境と良いアイデアも頂いた貴重な経験でした。

博士号取得後は職もなく、オーバードクター研究生として相変わらず繰り込み摂動論と闘っていました。その頃、今村詮先生がドイツ癌研究センターDr. Suhai との DFG 共同研究から帰国され、ハイデルベルグの Philosophenweg（哲学の道）を歩きながら Elongation (ELG) 法のアイデアを思いついたという粋な話をされました。1991 年新技術事業団 (JST) さきがけ 21 第一期に採択され、方向転換することになりました。高分子合成を計算機上で追跡するだけの簡単な発想でも、白紙からのプログラム化は泥沼でした。でも何かしら惹かれるものがあり、以降 33 年も本題とお付き合いするはめとなって現在に至り、未だ思う段階にまで到達しない endless elongation となっています。

奇遇にも、1992 年フンボルト財団でその Suhai 研究室に留学する機会が与えられました。ところが研究内容は、癌細胞に関係する生体分子ニューラルネットワーク解析や DFTB 法が中心で、今思うと、最近国内で流行っている課題が 30 年前にドイツでなされていた感じがします。最先端に関心のない私は独房にて一人苦しむ留学生活となりました。Dr. Suhai



からは、当時としてはまだ珍しかった Salahub らの開発した密度汎関数法 (deMon) と ELG 法との結合を提案され、朝から晩までコードと睨めっこの毎日でした。

帰国 2 年後、JSPS-DFG 二国間共同研究事業にてニュールンベルク-エアランゲン大学の Prof. János Ladik 研究室に長期滞在する機会が与えられ、今度は朝から晩まで AB INITIO でのプログラミングに一喜一憂の日々でした。でもドイツに滞在できたことで、著名な量子化学者 Löwdin, Čížek, Mayer, … や、ナノリボンエッジバンド新理論を提出されたばかりの藤田光孝先生の講演等に感銘する機会も多々ありました。またそこでは、中国量子化学の父として知られる吉林大学学長であった唐 (Tang) 教授の直弟子 Dr. FengLong Gu (現、華南師範大学教授) が、Prof. Ladik のポスドクをしていました。高分子でも周期性境界条件を使わないランダム系用 ELG 法に関心を持ってきて、オタワ大学 Prof. Bishop の下で周期系 NLO-KGB 理論を構築したあとに来日し、多大な貢献をしてもらうきっかけとなりました。

しかしその後、さきがけ研究推進中にまた大きな問題に直面しました。ELG 法の根底になっている領域軌道の作り方です。2×2 法を使っていたので、通常計算の何倍も計算時間を要し、効率を上げる目的が水の泡になってしまうことでした。有難いことに、カリフォルニア大学の Prof. Kirtman と出会う機会があり、凄いアイデアを頂いたことが大きな転機となりました。といっても普通の密度行列の冪等性です。固有値が 2 あるいは 0 である限り occ 内および vac 内では縮重系なので、どのようなユニタリー変換も許されるという当たり前の原理に通じます。でもこの当たり前が領域軌道の飛躍的な改良になり、使えるような手法に様変わりしました。固有値 2 or 0 を保ちつつ、都合の良い固有関数を想定し、ザボアの本にある対称直交化の下で軌道係数を変換する方法で、それこそ「目から鱗」だったのです。量子化学と闘う中で、普通の教科書レベルの原理の物理的意味やその甚大な有効性に初めて気づかされ、量子化学の素晴らしさを実感しました。

これまでの経過を思い起こすと、散々悩み苦しんでいる最中に、たまたま近くにいた方、しかも一世代近く上の方々から問題解決の糸口を導いてもらえた感じがします。斬新なアイデアというより平常ありうる発想の枠内でした。自らの発想は乏しく情けないのですが、長い苦しみがあったからこそ助けてもらえる機会もあったのかなと思ったりします。

日本の大学の雑務多忙三昧の中では、自ら手を下して研究を推進することがままならず、今ですらドイツの独房で散々苦しんだ経験のみを糧としているもっと情けない状態です。

「量子の世界 No.11」に百瀬先生が執筆されていたように、やはり日本と海外の環境の違いは思い知らされます。サバティカル中でも雑務に追われる中、中辻先生から 2011 年ブラハでの JCS 理論化学シンポジウムに講演のお声を掛けて頂いたことは、緊張する新鮮な機会でした。そこでは Fundamental な研究ばかりで久しぶりに刺激を受け、取り残されている焦り感しながら、エクスカッションや雑談での有意義な交流で随分励まされたものです。

そもそもブラックボックスソフトによる応用計算が気持ち悪く、とはいえ難しい電子相関問題には力及ばず、簡単な数学を使った解析法を作ることに苦楽を覚えてきました。ところが最近、プログラミングをしようしない学生達を通じてアプリケーションも楽しむようにもなりました。量子化学計算がこれほど発展する前は、様々な化学現象に対して、そのメカニズムや原因を電子論で解明しようという気運が大きかったと思われます。しかし、AB INITIO MO 法が発展し、DFT 到来により高精度計算が手軽に実行できる時代になると、昔の関心事にはあまり目を向けられず、国主導の流行トピックを追いかける流れとなったのかもしれません。外部資金獲得が深刻な昨今では研究の方向まで制御されてしまいます。



むしろ逆に、私は化石のような掘出物の発掘に楽しみを見出しています。今時の高精度計算を使って、当たり前とされている既存説とは異なる解釈に出会える喜び、ヒュッケル法などを用いてシンプルルールを引き出す楽しさです。半世紀前の概念を、近代量子化学計算で覆せるネタがあるかもしれません。若い頃は天体楕円軌道の「ケプラーの法則」に感銘したのですが、今は量子の世界にて、目に見える化学現象の根底にある、目に見えない想定外のコンセプトに出会えることは実に楽しく素晴らしいと感じます。

近年は厳しいファンドの問題や評価システムに縛られて、古き良き時代の研究スタイルは望めません。便利ソフトが溢れる今さら、新しい理論計算法を構築していくことは難しいと思います。しかし、大規模応用計算による数値合わせばかりでなく、基本的な量子化学によって様々な現象を白紙から見直すことにも目を向けると、もしかして目の前に何か新しいネタが転がっていて思わぬ展開につながるかもしれません。中辻先生の、真に原理的な新手法の創出と予言への展開、その方針を貫ける手腕とご努力には心底頭が下がります。今後量子化学に関わる若い研究者の方々にとって、そのようなゼロからの創出精神こそが科学探求の原点であるという指標であり続けてほしいと思います。



4thJCS 理論化学シンポジウム:チェコ・プラハ 2011 年 5 月 21 日 Liblice 城およびエクスカーシオンにてスメタナの「モルダウ」で知られるヴルタヴァ川に架かるカレル橋にて「AB INITIO」という文字を発見



京都市により「認定 NPO」法人の更新が認められました！ 皆様の温かいサポートのおかげです！

今から5年前の2016年3月24日、量子化学研究協会は、京都市より「認定 NPO 法人」として初めて認定されました。申請から6か月以上にわたる厳格な審査を経ての決定で、私たちの喜びもひとしおでした。その時の決意を「量子の世界」No.3, 2016年春号に書いています。この[認定]の期間は5年で、5年ごとに更新を申請し認定の有効性が審査されます。今回、この認定の継続申請を行い、**継続して、2021年3月24日～2026年3月23日までの5年間の更新が認められました。これも、ひとえに、皆様から頂いた温かいサポートのおかげです。ここに深く感謝申し上げます。**

この5年間の認定 NPO 法人としての活動を通じて、私たちは非営利活動法人(non-profit organization)として、何とか私たちの研究上の夢と根底にある好奇心(curiosity)を守り育てる活動を続けることができました。その経験と成果を踏まえ、来る新しい5年間、これらを更に発展させ、真に世の中の幸福に役立てることができる成果に繋げるべく努力し、皆様の温かいサポートにお応えできるよう活動していく所存です。その決意を込めて、この「量子の世界」No.14、2016年秋号を、その記念号と位置づけ、この第2章を特別に使わせていただくことといたしました。ご一読いただけますと幸いです。

非営利活動法人(non-profit organization : NPO)は、我が国では、阪神・淡路大震災の際に示された一般市民による non-profit な善意の活動の大切さが背景にあり、このような活動を国として支援しようと制度として誕生したのが始まりです。しかし欧米ではずっと歴史も古く、寄附文化も発達しており、優秀な若者が営利というより、教育・文化などに貢献したいという動機で、優れた NPO 活動法人に就職する流れができており、我が国とは格段の差があります。その様な例は、「量子の世界」No. 13 で少し触れたところです。

「認定」NPO 法人の制度は、我が国の非営利活動(NPO 活動)をより一層支援するため、個人や企業による NPO 法人への寄附を促すことを目的として、税制上の優遇措置を含めて設けられたものです。数ある NPO 法人の中でも、条件を満たし認定される法人は僅かで、京都府では NPO 法人 523 のうち認定 NPO 法人は 11(2%)、東京都では、9238 に対して 298 (3%)、大阪府では 1790 に対して 12(0.7%)です。認定されるには、事業や財務が健全であることはもちろんのこと、その活動が社会に貢献し社会から認められていることを社会一般からの寄附による被支援実績として判断されます。そのため、毎年 100 名以上から 3,000 円以上の寄附がある場合は、「絶対値基準」として認定 NPO 法人が認定されます。私たちも、皆様から多くのご支援をいただいておりますが、毎年 100 人という数には届かず、今回は「相対値基準」によって継続が認められました。ただ、2020 年度のご寄附につきましては、皆様からの熱心な「相互呼びかけ」を頂いたりしたことあって、実に百名を超える方々から総額 100 万円を超えるご寄付を頂きました。心より厚く御礼申し上げます。この実績から、私たちがもっと努力すれば、量子化学研究協会も「絶対値基準」をクリアすることも可能であるとおもわれます。私達も、これを目指して鋭意努力する所存です。

認定 NPO 法人になるための一定の要件とは、次の基準のことです。

1. パブリック・サポート・テスト(PST)に適合すること。PST については下で説明します。
2. 事業活動において、共益的な活動の占める割合が、50%未満であること
3. 運営組織及び経理が適切であること
4. 事業活動の内容が適切であること



5. 情報公開を適切に行っていること
6. 事業報告書等を所轄庁に提出していること
7. 法令違反、不正の行為、公益に反する事実がないこと
8. 設立の日から1年を超える期間が経過していること

認定 NPO 法人の認定継続の場合、過去 5 年間の実績から、まず 2-8 に照らし合わせ事業・財務・NPO としての報告公開義務や公益性などが正しく行われてきたか綿密に審査されます。その上で、1. パブリック・サポート・テストにおいて「絶対値基準」とされるものが、上に述べた、実績判定期間内の各事業年度中の寄附金の額の総額が 3,000 円以上である寄附者の数が年平均 100 人以上であること、を求める基準です。この「絶対値基準」に適合すれば、それだけで要件を満たしますが、そうでない場合は「相対値基準」で判定されます。

「相対値基準」では、事業活動に係る経費や寄附金、国からの補助金等から総合的に判断して適合が審査されます。実際、今回私たちも、色々な質問や書類の提出を京都市より求められ、それに応えることなどに 3 か月以上かかりました。「認定が認められました」との通知を京都市から受けた時には、ほっとするとともに、久方ぶりの感激を覚えました。この経験からも、今後はパブリック・サポート・テストの中の「絶対値基準」をクリアすべく、我々の活動の質を高め、量を増やし、世間一般へのアピールも増やして、感動を共にできるような質の高い活動ができるよう努力していく所存です。

実際、この 5 年間、非常に多くの皆様から、温かいご寄附を何度も頂きました。このことが、私たちの活動が社会からサポートされている確たる証となり、私たちの大きな励みとなるとともに、認定の更新という形でも実りました。この場を借りて、厚く御礼申し上げます。この認定 NPO 法人更新という区切りに際し、量子化学研究協会メンバーと研究所一同は、決意を新たに、研究活動・事業活動を展開していきたいと考えています。何卒、これまでに変わらぬご支援を継続していただけますようお願いいたします。

ここで、私たちの活動趣旨や理念、主な活動内容について改めてまとめます。

量子化学研究協会研究所の活動理念（行動規範）

まず、量子化学研究協会研究所では、次ページに示す「**行動規範**」を 2008 年に掲げています。これは私たちの活動の原点を定めるもので、科学者として夢を追求し、社会一般ひいては人類の幸福に貢献する研究所の在り方を目指す基本理念です。研究所では、これを所員全員が心に刻むよう、目に付くところに掲げて、研究しています。

量子化学研究協会研究所の主な研究テーマ

1. シュレーディンガー方程式の正確な解法とその実用化

私たちの身の周りの物体や宇宙の惑星の運動は、“りんごが木から落ちる”をヒントに考案したと言われるニュートンの方程式、 $F=ma$; F は物体に働く力、 m はその質量、 a は加速度、に従って運動しています。例えば 2010 年 6 月に小惑星探査機「はやぶさ」が、小惑星イトカワに着陸してその砂を地球に持ち帰り、自身は地球の大気に赤い炎の筋を残して燃え尽きた、あの時の感動を覚えておられると思います。筆者もその感動もあり、その計画を遂行した科学者にじかに伺ったのですが、あの探査機の打ち上げの軌跡の計算はほぼ 100% ニュートン力学に基づき計算され、アインシュタインの相対論補正はほとんど必要ないという事でした。この短い方程式の威力をまざまざと感じた次第です。



特定非営利活動法人量子化学研究協会研究所 行動規範

平成二十年一月

量子化学研究協会研究所会議制定

はじめに

本研究所は、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します。

一、研究推進

私たちは、自由の学風を尊び、個人の持つアイデアやオリジナリティを尊重するとともに、研究チームとして互いに協力することによって、高水準の世界に冠たる研究を生み出し、展開し、新たな知識と技術を提案します。

二、成果の公表と普及

私たちは、得られた研究成果を社会へ還元するために、学会や学術論文等を通じて積極的に発表し、必要に応じて講習会なども行います。また大学や企業等との交流を通して、量子化学に基礎をおく科学技術の普及に努めます。

三、研究交流と人材育成

私たちは、国内外の大学や機関等からの研究者や研究生を積極的に受け入れ、研究交流や人材育成を通じて、科学技術の発展に努めます。

四、社会貢献

私たちは、人類の幸福に寄与することを目的として、科学と技術の研究に努めます。

五、責任ある行動

私たちは、本協会の目的を効果的に遂行できるよう、自己の資質の向上や、職場環境の整備に積極的に取り組みます。また、研究データの取り扱いにおいては、その正確性に関して科学者として細心の注意を払い、研究資金の取扱いにおいては、その本来の目的の達成に努め、その使用に際しては法を遵守し、環境や安全に配慮した高い倫理観を保ちます。

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

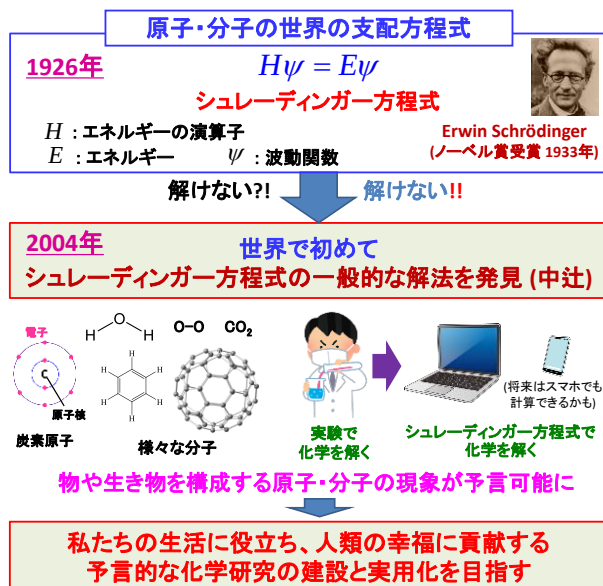


他方、この世の物質も私たちも、原子・分子から成り、それらは原子核と電子からできています。これらの極微の粒子は、量子と呼ばれ、それを支配する運動方程式はニュートン方程式ではなく、1926年オーストリアの Erwin Schrödinger が発表した「シュレーディンガー方程式」であると言われています。これにさらに相対論効果を取り入れた方程式はディラック方程式と呼ばれ、これらの力学体系は「量子力学」と呼ばれています。私たちの小紙の「量子の世界」という名前は、この量子の世界の研究にちなんでつけられた名前です。従って、このシュレーディンガー方程式という原理方程式を正確に解くことができれば、原子と分子が関与するあらゆる現象を予測することができるはずです。例えば、大学で有機化学のいろいろな分子や化学反応を勉強された方もおられると思います。またいろいろな分子の合成ルートも試験にでて、様々な思いをされたことと思います。これら化学反応の最適なルートなどは、このシュレーディンガー方程式を正確に解くことができれば、電子計算機を使って正確に予測できる筋合いのものです。このように、シュレーディンガー方程式を正確に解くことができれば、“経験”ではなく“根本原理”から、原子・分子の世界の諸現象を正確に予測することができるようになります。その意味では、シュレーディンガー方程式は、いわば神様が使っている方程式のように見えます。

しかし、ニュートン方程式と比べて「シュレーディンガー方程式を正確に解くこと」は、とても難しく、1926年に「シュレーディンガー方程式」が提唱されて以来、多くの科学者が試みましたが成功せず、この方程式は「解けない」、「不可能」とすら言われました。しかし、2004年、量子化学研究協会・研究所長である中辻（当時、京都大学教授）によって、この方程式の正確な一般的解法が発見されました。その結果、原子・分子から成る物質の科学（化学）を、実験でなく、そのシュレーディンガー方程式を正確に解くことによって研究するという「先験的」「予言的」な研究に大きな道が拓かれました。

「シュレーディンガー方程式の正確な解が実際に容易に解けるようになること」は、科学者の大きな夢であり、この研究の成功により人類が享受する利益はとても大きく、科学の研究に大きなパラダイムシフトを引き起こす可能性があります。たとえば、

- ・ 様々な物質の特徴や化学反応などを正確にシミュレーションすることができるようになれば、私たちの身の回りで役立つ化学産業の製品開発や、病気の有用な治療薬の開発などを、論理的にスムーズに行うことができるようになる。
- ・ 高価な物質や、危険な爆発物などを、直接実験で扱う必要がなくなる。
- ・ 今迄知られなかった新物質を、コンピュータを使って作り出すこともできるし、その性能もコンピュータを使って予測できるので、有用な物質のみ、計算で示された合成法を用いて作ることができる。



このように、「シュレーディンガー方程式の一般的解法の発見」というテーマは、基礎的でありながら、化学・工学・生物学などの全てに関わる大きな重要性があり、世界的に見ても当研究所がオリジナルに推し進めている独創的なテーマです。まさに、不可能を可能にするかのごとき面白さがあります。このように純粋な科学的好奇心をもとに、上のような夢の実現に向け、また、その実用的解法がもたらす人類の幸福への道に貢献すべく、日々その基礎研究に励んでいます。確かにシュレーディンガー方程式の一般的解法は分かったのですが、これを、我々が今現在使うことのできる計算機を使って、誰もが、容易に、かつ正確に、解く道を見つけることは、やはり難しいです。かなり見通しを立てることができるようになった昨今で、今一段の道も見えており、その先を楽しみに開拓しているところです。

2. 光が関与する化学現象や固体触媒反応の研究

量子化学研究協会研究所では、上の研究テーマの他に、分子と光との相互作用によって生じる分子の励起状態が関与する様々な現象を、1978 年に提案した SAC-CI 理論という量子化学理論を使って研究しています。この理論プログラムは、量子化学プログラムとして世界最大シェアを持つ「Gaussian」プログラムパッケージに搭載され、世界中の大学・企業等の研究者によって活用されています。

この SAC-CI 理論を使っていろいろな研究をしてきました。例えば、植物は光エネルギーを使って水と二酸化炭素から糖類を合成し、酸素を放出します。私たち人類も、この糖類を食べて生きながらえています。この光合成反応のメカニズムを研究するため、紅色細菌というバクテリアの光合成反応組織の光化学プロセスをすべて SAC-CI 理論で研究しました。また、人間の目は光だけでなく色を識別することができますが、これは目の中に赤・緑・青の 3 原色を識別する錐体を持っているからです。その中でレチナールという視覚物質が、化学修飾を受けることによってうまくこれらの 3 原色の色に対応する光で励起するよう構造補正されているのです。私たちはそのメカニズムを SAC-CI 理論によって見事に解明することができました。これらは、京大時代の研究ですが、研究所になってからも、遺伝情報の継承と発現を担う二重らせん構造を持つ物質 DNA のラセン構造の光化学的研究や、脊椎動物の光受容器細胞に存在する色素 ロドプシンにおけるイオン伝達のメカニズムなどを研究しました。

また、化学の中でひととき重要な研究対象に、触媒反応の研究があります。「触媒」は化学反応の魔術師のような側面があり、「化学の華」と言えるのではないのでしょうか。例えば二つの化学物質を混ぜておいても普段は何も反応が起こらないのに、ある物質をこの中に入れるとその表面で 2 つの物質が反応して別の化学物質になるという現象があります。これをその物質の触媒作用といいます。例えばエチレンと酸素を混ぜておいても特に反応は起こりませんが、ある条件下で作った銀をこの中に加えると、この 2 物質は反応して、エチレンオキシドというとても有用な物質になります。このような固体金属の表面が誘起する触媒反応を研究するための触媒作用のモデルを 1987 年に Dipped Adcluster Model と名付けて提案し、これを上記の触媒反応やいろいろの表面触媒反応の研究に応用してきました。

ただ、最近ではシュレーディンガー方程式の正確で容易な解法の実現というテーマに割く時間が多く、上に述べたテーマは、その重要性和私たちの興味にもかかわらず、後回しになってしまっています。しかし、これではいけないので、これらのテーマももっと取り上げていこうと考えています。



研究組織としての NPO 法人

このように量子化学研究協会研究所で行っている活動は、大学で行われている研究活動と基本的に同じです。もともと科学的好奇心に端を発する研究活動は、時と所を選ばない自由なものです。ヒューレット・パッカーがそのアイデアを実らせるために、ガレージで活動を始めたのと、共通するものがあります。我が国の「和算」という「学問」もお茶やお花と同列に、江戸の文化人のたしなみとして発展した側面があります。その時代（17世紀中頃）の世界最高峰の数学者、関孝和の「関流」もそのような形で引き継がれてきました。私たちの誇るべき文化ではないでしょうか。

量子化学研究協会研究所は、NPO 法人として、大学とは異なる形で量子化学の研究に携わり、私たちが「これは」と思う重要な研究を、時間をかけ、自由に、進めていきたいと考えています。この組織は NPO 法人であるため、そのような活動形態が許され、また、文部科学省より公的な科学研究費を受けて研究活動を行うことのできる機関としても認定されています。2007 年の実質的な設立以来約 15 年になりますが、文部科学省の日本学術振興会（JSPS）の科学研究費を主な研究費として活動を続けて参りました。近年、電子計算機については、分子科学研究所の計算機センターの共同利用という形で、多大のサポートを頂き、私たちの理論的アイデアに基づく計算を実行させていただいています。また、ドワンゴの川上量生さんには長年にわたって研究所の研究活動を支援していただきました。**この機会に、日本学術振興会、分子科学研究所の計算機センター、川上量生様に対し、これらのサポートについて、心より御礼申し上げます。**

石の上にも3年と言いますが、それをはるかに上回る時が過ぎました。研究所を開いてから得られた重要な研究成果も数多くあります。この事は、ある一面、日本における研究活動の形態としてのひとつの「実験」と言えるかもしれません。私は多くは知りませんが、私たちに近い分野では、大野公一先生が理事長をしておられる非営利活動法人量子化学探索研究所も活発な活動をしておられます。それぞれ特徴があると思いますが、このような自由な形で我が国の学術文化の発展に少しでも貢献出来たら、それに勝る喜びはありません。また、我が国においても、このような NPO 法人という活動形態で、自由に、文化の創造活動ができるという事は、後に続かれる方々への大きな発信であると考えています。**そのためにも、この灯(ともしび)を守り、発展させ、「量子の世界」をともし大きな「明かり」にしていきたいと念じています。**

他方、目を世界に向けますと、もっと発展した形での NPO 活動がみられます。我が国の NPO 法人は、どちらかといえば善意でボランティアレベルの活動を行っているという印象が強かったのですが、例えば、アメリカの NPO 組織は、その数・事業規模・寄附金額などが桁違いに大きく、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、TED 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。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、寄附という形で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。近年日本でも、多彩な活動で存在感を増す NPO が増え、確固たる理念に基づく事業型 NPO も増えてきており、NPO へ就職し仕事として社会貢献を求める若者が育っています。これらにつきましては、「量子の世界」No.13 で触れましたので、ここでは省略させていただきます。



我が国の NPO も、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。その理由の一つに、認定 NPO 法人への寄付は、ほぼその半額が税控除という形で返金され、国と地方自治体がその分を負担してくれるということがあります。この税制度の詳細は、本号の 18 ページ、「認定 NPO 法人に対する税制上の優遇措置」に説明されています。この認定 NPO の制度は、実際、大口の寄付をして頂くためにはなくてはならない制度です。研究所は、常々、研究費の不足に悩まされています。現在、研究所への大口の寄附はありませんが、今後そのような寄附をして頂くためには、①「シュレーディンガー方程式の一般的解法の発見」と、それを基に、化学現象の正確な予言能をもつ理論と計算プログラムを整備し、誰もが・容易に、使えるようにすること、②このような研究の重要性をもっと知っていただける機会を増やすことが、だいじです。さらに今後、そのような計算プログラムを「商品」として頒布することもありかもしれません。いずれにせよ、**私たちの研究をどのように色々の方々に満足して使っていただければ、社会で役立つものにすべく、日々努力しているところです。**

研究所の活動

本研究所の研究は、純粋な科学的好奇心(curiosity)に基づく基礎的なものですが、福井謙一先生がいつも言っておられたように、「基礎的なもののほど、真に有用で大きい」という側面もあるかもしれません。我々研究所では、「シュレーディンガー方程式の一般的解法とそれを誰もが容易に行える方法の開発」という大それた研究を、少人数でチマチマやっています。そこで、これをさらに発展させていくためには、若い方・歳をとってしまわれた方、どなたでも、多くの皆様の積極的な参加がとても大きな助けになる可能性があります。まさに、「好奇心」による参加です。研究はナイーブな感性でするものです。実際、私たちの研究は、世界広し・といえどもここにしかない研究で、その完成の暁には「すごい研究」であることも、間違いありません。それだけに困難も多く、(私たちの力不足もあって) 時間がかかっていますが、理論的には可能であるという道も確保しています。つまり、やるっきゃない、という側面もあるのです。**NPO 法人の強みは、興味さえあれば、老若男女・誰でも参加できる、という点にもあります。**読者の皆さんで、面白そうだから参加してみようか、という方がおられましたら、是非、門戸をたたいてみてください。大学のような入学試験もありません。メールでしたら、office@qcrl.or.jp に送ってください。

この研究の背景や面白さ、それがもたらす意味や社会が受けうる恩恵などを、一般の方々に知っていただくための「お話会」(講演会と言うより、双方向の会)を開きたい考えています。また、もっとしっかりした「講習会」も必要かもしれません。しかし、コロナ禍がまさに禍いしています。ワクチン接種の広まりと共に鎮静してくれたらと、心から祈っています。その折には、是非、ご参加をお願いいたします。

量子化学研究協会研究所では、その研究活動の他に、次のような活動も継続的に行っています。

- ・機関誌「量子の世界」の刊行(ホームページで閲覧できます)
- ・革新的量子化学シンポジウムの開催(例年 4,5 月頃開催, 誰でも参加できます)
- ・JCS(日本・チェコ・スロバキア)国際シンポジウムの開催("Friendship is our principle, science will follow with us.": 研究者同士の国際的フレンドシップの育成を重視)



- ・講習会：シュレーディンガー方程式を正確に解く方法の講習会、SAC-CI 法を使った分子の励起状態の研究のための講習会、など

これらの活動の一部が、コロナ禍により大きな制約を受けていることはとても残念です。

昨年度、私たちの NPO としての研究活動に関するインタビューやラジオ出演などの依頼がありました。これらは、「量子の世界」No.13 や量子化学研究協会ホームページにも掲載していますが、ここに併せて紹介させていただきます。

- ・京都市伏見いきいき市民活動センターのインタビュー(2020 年 7 月 30 日)

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

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

研究所の活動を簡潔に説明したスライド: <http://www.qcri.or.jp/activity.pdf>

- ・FM797 京都三条ラジオカフェのラジオ出演(2021 年 1 月 24 日)

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

(途中に挟んでいる曲は、中辻が敬愛するシューベルトの即興曲 (Impromptu, D899 No.3、Alfred Brendel) です。これだけでも、是非お聞きください。)

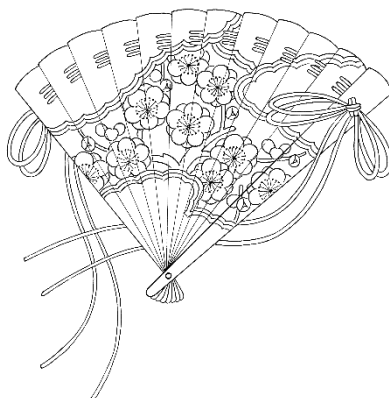
- ・NPO スポットライト(14 回)「量子の世界への誘 (いざな) い〜夢の方程式に挑む〜」取材と掲載(2021 年 3 月 4 日): <https://shimisen-kyoto.org/spotlight>

- ・京都市民活動情報共有ポータルサイトに掲載(2021 年 3 月 26 日)

ポータルサイトホームページ: <https://shimisen-kyoto.org/>

今後、先にのべたような、私たちの研究に興味を持たれる方と一緒に、適当なテーマを研究する活動や、量子化学関連の様々なコンテンツを整理・集約する場所を提供する活動なども目指し、今までより具体的な形で貢献していきたいと考えています。

以上に述べました活動にご興味のある方は、是非ご一報ください。**私達は NPO 法人です。一緒に深めていけるかもしれません。**



「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～

コロナ禍収束後 開催予定

日時: 未定

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)

にお願いしています。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、早速にご講演を再度お願いし、皆で講演会と懇親会の場となれど存じます。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 凜」
(京都テルサ内、西館1階)

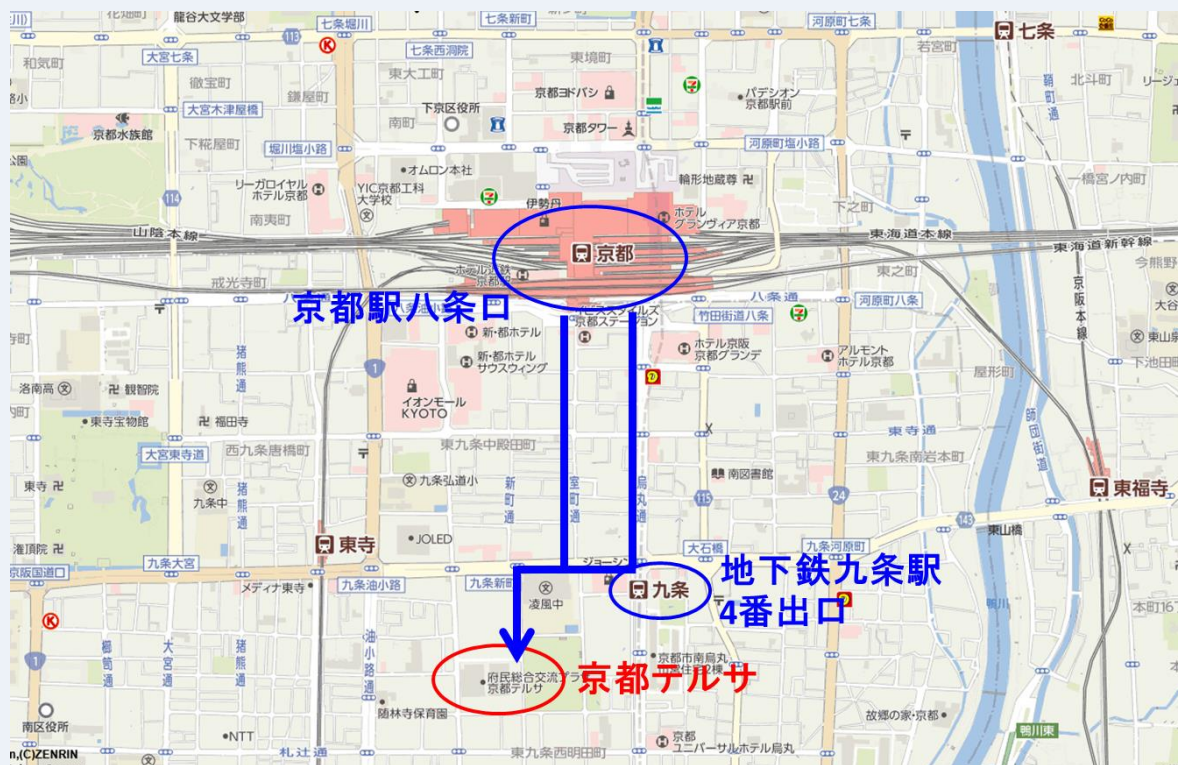
参加費: 5,000 円 (着席ビュッフェ形式)

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



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

暫定的な開催予定のお知らせ

日時: 2022年6月13日(月)-16日(木)

場所: 北海道大学・工学部フロンティア応用科学研究棟(鈴木ホール)、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世界中で猛威を奮っています。現状では開催日時を決定することが困難な状況ですが、とりあえず上記の日程で会場を確保しています。コロナ禍が収束し、安心して開催を決めることが出来ましたら、改めてご連絡申し上げます。

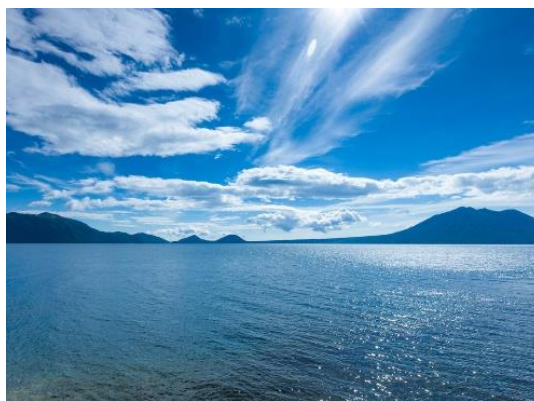
このシンポジウムは、研究交流を通して三か国の理論化学者の親睦を図ることを趣旨とするシンポジウムでありますので、実空間で参加者が集い、安心安全な環境下で開催することを重視します。

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



量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い

量子化学研究協会への継続的なご寄附について改めてお願い申し上げます。私たち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「絶対値基準」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る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。

私たちは、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 法人へ寄附をすると、その寄附額に対して寄附者は、所得税、相続税、法人税から、40-50%の税の控除が受けられます。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。

ご寄附お振込先： 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、定められた様式の寄附金受領証明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附人名をお書きください。この寄附金受領証明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法人に対する税制上の優遇措置の概要

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

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。

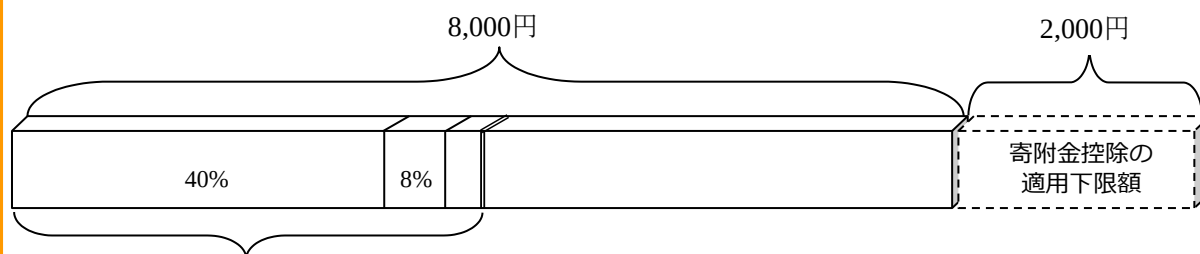
(参考) 京都市民の方が認定NPO法人に 10,000 円寄附した場合の例

（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

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

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。）

（京都市ホームページより転載：

https://www5.city.kyoto.jp/chiiki-npo/images/npo/file/gaiyo/gaiyo_3_2017_5.pdf）



「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「ご意見の広場」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

昨今、我が国の新型コロナウイルスの猛威は落ち着いた兆しが見られますが、皆様におかれましてはいかがお過ごしでしょうか。

さて、ここに、「量子の世界」第14号(令和3年秋号)をお届けします。

青木 百合子 先生の巻頭言では、「苦しみられ続けた量子化学とその素晴らしさ」というタイトルで、研究の貴重なご経験談と未来へのメッセージの貴重なご寄稿を頂きました。

このたび、量子化学研究協会は、京都市により、認定 NPO 法人の更新が、正式に認められました。これを機に本号をその「記念号」と位置づけ、第2章を特別にその記念記事に使わせていただくことといたしました。

例年春の「革新的量子化学シンポジウム」や 2020 年から延期の「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重視していますので、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。今後、コロナ禍のリバウンドがないことを切に祈念し、これらのシンポジウム等で皆様とお会いし、楽しい時を共に過ごせることを希求いたしております。

「量子の世界」 No.14, 2021 年(令和3年) 秋号

2021 年 11 月 19 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 © 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.qcricri.or.jp/>)にてご覧になれます。

