



量子の世界

No. 15, 2022 年 春号 (2022/5/17 発行)

－ 目次 －

	ページ
1. 強相関電子系の量子化学－個人的回想－	1
山口 兆 (大阪大学 名誉教授)	
2. 化学反応の予測をめざして	11
前田 理 (北海道大学 ICRéDD・拠点長 教授)	
3. 「量子の世界」第 15 号刊行に寄せて	14
中辻 博 (量子化学研究協会・研究所 所長)	
4. 「第 14 回 革新的量子化学シンポジウム」(6/5(日)) のご案内	15
講演者: 江藤 正義 先生、藤井 啓祐 先生、中辻 博 先生	
5. 「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	18
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	21

強相関電子系の量子化学－個人的回想－

山口 兆

大阪大学 名誉教授

巻頭言では通常量子化学に関する高邁な理念、今後の目標、夢などが提案される場合が多いと思います。恐縮ではありますが今回は量子化学に関する昔の話を振り返ることをもって巻頭言にさせていただきます。量子化学の視点でみると小生の場合は「強相関電子系」の構造、反応、物性、生体機能に関する研究をして来たので上記のタイトルでの個人的回想になります。約 60 年前に大学に入学して北白川に至る道で最初に出会った同級生が現在当研究所の所長をしておられる中辻君(ここでは同級生なので君を使用させていただきます)であった。小生は高校時代、ゴム関係の研究者であった義父から「私の分野では神様と言われる古川教授が京都大学におられる」と伺い、田舎から京都に出て来た直後のことであった。4 年生になって我々は共に古川研究室に配属になったが、中辻君は 笛野先生の化学反応論グループに属し、小生は古川先生のテーマ「合成高分子から生体高分子に橋をかける」グループに属することになった。学部時



山口 兆 先生



代の勉強不足のために研究テーマの背景や学問的意義も理解出来ないまま先輩のお手伝いをするようになった。今でも、ジエチル亜鉛の鮮やかな発火の様子を思い出す。

合成化学科の卒業記念誌に、中辻君は「大抵の人は30歳にして死ぬ。その後はその亡霊にすがって生きるのみである」とのロマン・ローランの言葉を引用し、小生は「本質は現象する」というヘーゲルの言葉を引用している。我々の青春時代は戦後の日本の大転換機にあたり大学では赤軍派の活動が盛んな時期であり何かと騒がしい時期であった。60年の歳月をへて「青春とは人生のある期間ではなく、心の持ち方を言う.....」で始まるウルマンの詩を読み返すとき、中辻君は今なお青春の志を維持し、量子化学の学問の道を開拓し精神的には青春を謳歌していると言っても過言ではない。彼の希有な道程を振り返るとき中辻君は喜多一門の天才の先生方の系譜に属し、学問の方から「京都」に相応しい文化活動をされていることを誇りに思い、また心より嬉しく思う。小生の場合には、古川先生に頂いた光学活性の起源に始まる対称性の破れの概念にすがりついて生きるのみであり、ロマン・ローランの言う大抵の人の人生航路を歩んでいる。それにも関わらず、当研究所の栄えある15周年特集号に巻頭言を書くように学友として依頼されたことは大変光栄なことであると思う。

小生が卒業記念誌に書いた言葉には学部時代「量子力学の形成と論理」などの著書の背景にある武谷三段階理論(現象論的段階、実体論的段階、本質論的段階)の勉強会に出席し、自分のような凡才が研究をする場合の指針を得ようとし、ヘーゲル哲学の現象論、本質論、概念論などとの類似性などにまで興味を持っていたことが背景にある。此の研究会には素粒子論や原子核理論研究の関係者が多く、一度基礎物理学研究所の研究会で武谷先生のお顔を拝見したことがある。このような研究会は小生のような化学徒にとっても広域的大局観を養い天才の世界を覗きみる意味で大変貴重なものであったと思う。さらに、その後湯川研の助教授であった福留先生から複雑極まる化学現象の本質を把握するために分岐理論、群論的構造に関する理論と自然観を教えて頂くことにも繋がっており深い「学縁」を感じる。

今から振り返ると中辻君は数学的能力があるので本質論的段階の研究を推進出来ているが、小生の場合にはそれが欠如しているので実体論的段階(モデル形成)に留まっていることが理解出来る。実際すでに1976年の4次の密度行列の理論の構築から中辻君の厳密解登山口の開拓が開始されている(図1参照)。小生の場合はその後福留先生から「君が名刀のような切れ味のない頭の持ち主と思うのであればナタやノコギリを用いてジャングルを開墾する泥臭い道もあるよ」と教えられた。小生は20年近く助手をしていたので座右の銘として思い出し心休まることがあった。また、金森先生の御書きになった「大阪と自然科学」という本では「ねずみ色の科学」という表現が度々出てくるが大阪では「ねずみ」色の量子化学でも許されると思い安堵した。現在では湯川先生、市川先生が天才の発想と発現を研究し、普通の人、天才のひらめきの無い人はどうしたらよいのかに関して示唆をされており、同定、あるいは等価変換の理論を提案されている。

学部時代は方法論の勉強の時期だったので肝心の光学活性高分子の合成(現象論的段階)には何も成果が出せなかったが、研究室にいと博士課程の先輩による「ホフマン(Woodward-Hoffmann; WH)則」が発見されたという会話が聞こえて来た。今から振り返ると小生が「軌道対称性の保存(WH)則」に関する最初の情報を得たことになるが、当時は群論に関する数学的素養が全くなかったのでその意義を理解出来ないままであった。中辻君はすでに修士時代に米沢先生、加藤先生のところに進学されていたのでその意味するところを理解していたと思うが、この発見に関して議論した記憶は無いように思う。一方、福

井研では藤本先生がおられこの方面の研究を推進されたことが思い出される。さらに、東大では牧島研の平野先生が重合触媒の理論的研究をされていた。牧島先生はパターンダイナミックス理論を展開され古川先生と懇意にされていたが、小生の学力ではその理論は理解出来なかった。チュリングの生体系における対称性の破れの理論(1952 年)の影響があったのかも知れないと思う。

小生は修士時代も古川先生の研究室のお世話になっていたが、その研究テーマは Ziegler-Natta(TN)触媒の重合反応機構の解明であった。小生の場合には立体規則性重合で生成されるアイソタクチック($d-d-d$, $\ell-\ell-\ell$)(ここで d , ℓ は光学異性体)、シンジオタクチック($d-\ell-d-\ell$) 立体規則性高分子構造や右巻き、左巻き螺旋高分子構造の“構造的美しさ”に魅せられていたが、その構造を生み出す配位触媒の構造解明という困難な問題に直面することになった。特に、 d , ℓ の割合を偏らせ(対称性を破り)、光学活性を発現させる機構の解明が問題であった。古川研には企業から数多くの研究者が来られていたが触媒調整は大変な企業秘密(水に注意)であり問題解決は学生の研究レベルを遥かに超えていることが解って来た。さらに、その触媒反応機構の解明には格子欠陥など固体表面の分光測定などが必要であることも判明して来たので物理化学の勉強からやり直すことを考え始めた。また、隣の野崎研の野依先生が 7% の収率で不斉反応を発見したとの情報が博士課程の先輩からもたらされ錯体化学などの基礎化学の勉強の必要性も次第に明らかとなって来た。そこで、身の程も考えずに古川先生のお家に伺い正直に自分の浅学非才の勉学状況の相談に載って頂いた。5 時間ほど先生の学問的展望などを伺い数多くの貴重な教えを頂いたがその最後に「君は笛野君の所で物理化学の勉強からやり直して宜しい」とのお許しを頂けることになった。

そこで、阪大基礎工の教授に昇進された笛野先生の許可も頂けることになり博士課程は笛野研で物理化学の勉強をさせて貰えることになった。古川先生が定年近くになり古川研の地下にある倉庫から本を一冊頂けることになったが其の本はド・ブローイ「新力学に於ける量子化の理論」(堀伸夫訳、昭和 19 年(1944 年)に購入されている書き込みがある)であった。小生は昭和 18 年の生まれなので当時の学問的雰囲気は解らないが、喜多一門の基礎重視の哲学を伺うには十分な遺産であると思い今も大切に保存している。1990 年に小生は北大理の面接を受けることになったが、「君は工学部の出身なので理学の授業が出来るのかね」との質問を頂戴した。其のとき、「君は元々工学部出身ではあるが、理学部以上に理学的であるとの噂のある京都の工学部化学の出身だね」という発言があり大笑いになった。面接が終わり宿舎に帰ると「神様の学風」の有り難さが身にしみて来たことを今も思いだす。小生の場合、工学→基礎工学→理学と通常とは異なる道筋を歩むことになった。最近になって、科学史家の古川安氏に呼ばれて京大会館で幾つかの質問を受けたが古川先生に頂いた本をお見せしたところ大変驚かれ喜多一門の先生方への敬意を深められたご様子であった(古川安「化学者たちの京都学派」という本がある)。

基礎工の博士課程に進学し、5 階の部屋に落ち着くとそこには別世界が広がっていた。5 階のフロアには坪村教授、又賀教授の研究室があり、たまにトイレでお目にかかる気さくに話をさせて頂ける雰囲気であった。両先生ともに東大の水島先生の門下生であり日本における最良の物理化学の伝統を担っておられる先生方であった。水島先生が 1972 年にお書きになった[A history of physical chemistry in Japan]というエッセイを読むと櫻井->片山->水島(敬称略)と続く日本の物理化学の黎明期とその後の発展が理解される。幸い、



当時最も信頼性の高かった Cary10 紫外分光機を坪村研の山本助教授の御指導のもとに使用させて貰えることになった。小生の場合には光学異性体に至る前の構造異性体であるシス、トランス型 1,2-置換オレフィンや 1,4-置換ジエンの分離から始めて、その電子吸収スペクトルの観測実験を行い、その結果を PPP(Pariser-Parr-Pople)法による理論計算により解析することから博士課程の研究を開始した。また PPP 法の理論的基礎として Sinanoğlu の電子相関理論や Löwdin の密度行列理論や配置間相互作用(CI)理論などの電子状態理論の勉強も始めた。Rev. Mod. Phys. や Adv.Chem.Phys.を借りてきて、当時は現在のようなコピー紙はなく青いインク紙であったがコピーを取った。又賀先生に Sinanoğlu の pair correlation(coupled-cluster(CC)法に繋がる)について教えて貰う事もあり小生は電子相関から量子化学の分野に関係することになった。又賀先生が定年に成られ記念誌が発行されるときに「又賀先生の思い出」を書き先生にお礼と感謝を述べ先生の真摯な理学的学習スタイルに敬意を表すことになった。

幾何異性体の電子スペクトルの結果は予想に反してシス型の方が長波長側に吸収極大があり、従来スチルベンなどで知られていた結果とは逆になった。そこで其の原因を究明するために HOMO と LUMO のエネルギー差(ΔE_{HL})を求めてみるとシス体でも平面性が保持されているので幾何異性体間で殆ど差がないが、電子間反発相互作用(U_{HL})の項がコンパクトなシス体の方が大きいため励起エネルギー($\Delta E_{HL} - U_{HL}$)が小さくなる事が理解出来た。 β 置換スチレン系でもフッ素置換体(此の合成には牛を殺す薬剤を原料に使用するので当局の許可が必要であった)のように立体反発が小さい場合には同様の結果を得たので一般性のある結論になった。このように、小生の場合には最初の論文から U_{HL} 項が無視出来ない現象に遭遇することになり後から振り返るとその亡霊にすがりながら歩むことになる。一方、構造異性体を用いる共同研究者の方の光学活性高分子の合成の実験は成功しなく「橋をかける」困難さと有効な配位触媒の開発の重要性が理解された。現在、人工光合成水分分解触媒の開発が望まれているが同様の困難に直面されているようである。従って、その分子設計は今なお量子化学分野の挑戦的課題の一つと言えよう。

1,2-置換オレフィンの吸収極大は 200nm 近辺にまで短くなるので山本先生に坪村・マリケン(TM)両教授による電子供与体(D)と酸素分子の電荷移動(CT)スペクトルの論文(1960年)を教えて頂き測定系の窒素置換によりその寄与を排除して測定することになった。さらに、スペクトルの掃引速度も極端に遅くする必要があり山本先生の御指導を頂けなければとても成功する見込みが無かった。TM 論文を読んで酸素の電子状態の勉強をすると酸素は磁性を示す基底三重項状態である事や小谷先生らがその電子状態の計算をされていることを知った。小谷先生は 50 歳代に生物物理に興味を持たれ東大の物理学科から 1965 年に基礎工の生物工学科に移られ 1969 年まで研究室を持っておられたので、図書館の BBA(Biochim.Biophys.Acta)の書棚の前で顔を拝見したことがある。当時はヘモグロビンなどヘム鉄の低および高スピン状態の温度平衡の問題に取り組まれその変貌自在の振る舞いを楽しんでいたようである。坪村先生は太陽光を用いる水の分解反応による酸素および水素発生の問題に御自身の電荷移動反応の視点から色素増感太陽電池を構築し Grätzel (1991 年)らより 10 年以上早く 1976 年にその成果を報告(Nature)されている。坪村先生は研究の独創性を極めて重視されておられたので小生が研究の意義を見直す時に先生のお顔を思い出す。さらに、水島先生が書かれた前述のエッセイにも東洋と西洋の考え方(thinking ways)の相違や自然観(対称性の破れ)について含蓄の深い考察がある。ところ



で、酸素の問題を勉強するとその重要性は呼吸一つを考えても自明の事となり、小生の場合には一重項酸素による酸化反応の理論的研究(1973 年)から始めて、高原子価オキソ錯体(1984 年)、最近の天然光合成系の水分解酸素発生反応の研究(2004 年)に至るまで酸素との“学縁”は生涯続くことになった。当時の基礎工における学科や研究室の壁のない学際的雰囲気と、正田先生の高邁な設立理念の重要性を最近になって再認識し、その結果このような昔話を回想した所以である。

TM 理論に刺激されて小生も CT 相互作用に興味が出て来て、1,2-置換オレフィンと酸素間の CT スペクトルの測定は難しいので電子受容体(A)を TCNE(tetracyanoethylene)にかえて CT スペクトルを測定することにした。これらの混合溶液を作ると最初美しい色が付くのであるがすぐに消えてしまい(現象論)CT スペクトルを室温では測定することが出来なかった。そこで低温にして実験するなどの計画をしている最中に基礎工学部の全面封鎖が起り一年間研究室に入ることが出来なかった。現在では想像もつかない事態であり東大の入試が出来なかった時代である。封鎖が終わり冷蔵庫を開けると分別して保存していたモノマーが重合しており全てをやり直すことが必要になった。封鎖中は時間が出来たので夏の学校の復習を兼ねて種々の理論の論文を読むことになった。やはり、ワトソン・クリックの DNA 二重螺旋構造の発見による量子化学への影響は大きく Ladik(1964 年)は Hückel モデルで DNA のバンド構造の計算をしていた。さらに、Little(1964 年)が DNA の主鎖を C-C 二重結合に置き換えて電荷励起(エキシトン)の容易な側鎖を導入した室温超伝導高分子の理論を発表していた。Atherton(1965 年)は高分子超伝導体が脳の機能発現に関係しているという提案をしていた。また、素粒子論分野から生物物理に転向された福留先生が生体高分子における電子相関の重要性を検討しておられた(1965 年)。さらに、ポリエンの電子状態(1968 年)で SDW(spin density wave)状態の出現条件(stability condition)を充たせば磁性状態が可能になることも指摘されていた。然し、これらの論文は小生の場合眺めるだけで当時は理解する素養が欠如していたことを思い出す。その後小生も斉藤烈先生のお手伝いで DNA の電子移動の研究や伊藤先生に触発されて磁性高分子の研究を行う“学縁”に恵まれることになった。両先生には大変お世話になり深く感謝している。

一方、CT スペクトルの色の消失の原因を考えていると、WH 則では禁制であるが、TCNE と 1,2-置換オレフィン間で(2+2)型の付加反応が起こるのではないかというモデル(実体論)を思い付いた。実際、基底状態でも CT 配置の寄与が無視出来なくなると HOMO(D)と LUMO(A)に電子が一個ずつ入るので、HOMO(D)-HOMO(A), LUMO(A)-LUMO(D)間相互作用が可能になるので、対称許容になることが解る。このモデルを博士論文(1972 年)の第二章に書いたのであるが、同年に Epiotis が同様のモデルの論文を JACS(J.Am.Chem.Soc.)に発表したので間に合わなかった。T 教授が 1971 年に Letter でよいのですぐ論文にした方がよいと言われたのであるが小生にはその力量が不足していた。その後、長倉・田仲両先生の CT 反応理論も知ることになり勉強不足を実感した。しかし、この経験から WH 則にも例外があることが解ったので WH 則の世界、CT イオンラジカル反応の世界、イオン反応の世界、ラジカル反応の世界を統一する理論モデルは何かという発想を得ることが出来、その後の研究に生かすことが出来た。また、失敗の原因を探ると結局は自分の実力不足、勉強不足に起因することが多いことが自覚出来たので大変良い経験になった。

1971 年に基礎工学部の笛野研の助手にして頂けたが自分の勉強不足を痛感していたので学部時代の方法論勉強を再開したが幸い当時の基礎工には学科間の壁が無い状態であっ



たので、隣の棟を訪問すると永宮研があり物性分野の最新の話題を知る事が出来た。そこでは、P. W. Anderson 先生の主タイトルが [More is different]で副タイトルが[Broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of science]というサイエンスの論文(1972 年)が話題になっていた。要点は素粒子論が第一サイエンスで物性物理などは第二サイエンスであるとの当時の論調に反論した論文である。この視点に立つと量子化学などは”第三サイエンス”でしかないのかなどの思いがしたが、自分の能力を考えればそれでも量子化学理論は高嶺の花に思え勉強が必要であった。その後、金森先生のご好意で高等研にこられた Anderson 先生におめにかかり、先生の超伝導の著書にサインをして頂いたが、「Be careful Much of these is wrong!」と書かれている。強相関電子系の高温超伝導の理論の現状を知るとこの文章の深みを思い知る事になる。前述のように 1964 年にすでに電荷ゆらぎに基づく室温超伝導高分子の提案が Little によりなされているが未だ実現していない。さらに、永宮研を訪問して驚いたのは螺旋(ヘリカル)スピン構造の研究をされており、前述の螺旋高分子の置換基 R をラジカル基 R $\cdot$ に置き換えた構造をしていることから、スピンの構造に大変興味を持つ事になった。今から振り返ると”Broken symmetry(BS)”という英語を知り、またスピン構造の興味に目覚めたのも此のときであったので、今でも専門分野の異なる先生方の話を伺う機会を大切にしている。

小生は PPP 計算をしていたのであるいは三重項状態に関する知識はあったけれども(Heisenberg)Spin Hamiltonian に関する知識が欠如していたのでその勉強を始めた。スピンは古典的には軸性(角運動量)ベクトルなのでその反転には時間反転(Time reversal; T)が必要となり、点群(Pn)と T 変換から構成される磁性群なるものが存在することを知った。そこで、螺旋高分子のアナロジー(等価変換)で有機スピンの螺旋を巻いている奇数員環やコーン、正四面体構造を考え、其の磁性群論的表現も考察した。現在ではこれらのスピン構造は Non-Collinear スピン構造として量子化学でも馴染み深くなっている。さらに、3 角スピン系はその後 TTF(tetrathiafulvalene)系列の分子集合系で実現され、現在ではスピン液体や量子相転移との関連で数多くの研究がある。更に、伊藤先生が背骨(backbone)型の強磁性高分子を考えておられたので、小生は前述の立体規則性高分子のアナロジー(等価変換)で側鎖にスピン源を持つ側鎖(pendant)型強磁性および反強磁性高分子の分子設計に進み、主鎖にホールを導入して強磁性金属やスピン揺らぎ超伝導の構築を夢見たが今も実現していない。当時はまだ分子磁性の分野はロマンチックな時代であったのでこのような speculative な論文(実体論)も受理されたと思う。一方、真に長距離秩序を実現するには有機ラジカル結晶が必要と考え、ニトロキシド基を持つ分子結晶も検討したところ、配向次第では強磁性相互作用が可能になることが理論的に判明したので可能性予測の論文を書いた。ニトロキシド基より構成される有機強磁性絶縁体結晶はその後種々発見されることになった。さらに、有機磁性金属も数少ないが実現している。化学の分野では継続は力なりと思い幸運に感謝している。酸化反応の関連で尊敬してやまない早石先生が研究には運・鈍・根が必要といわれているので先生の書かれたエッセイに触れるのは有意義と思う。

永宮研から 5 階にある原子核理論の高木研(高木先生は京大の湯川・小林先生の御弟子さんの一人)を訪問すると大坪先生がおられて変形核の研究の話を伺うことになった。驚いたことに原子核の分野ではすでに 1950 年近辺で原子核が球形($\beta=0$)構造からラグビーボールのようなプロレート($\beta>0$)やオブレート($\beta<0$)構造に変形し、核分裂も起こるが、Bohr(Bohr の子息)、Mottelson, Reinwater(AMR)がその基礎理論として「回転対称性の破



れとその回復」の概念と定式化を行なっているとのことであった。此の言葉を聞いた時 Löwdin 先生(1953)の Alternant MO (AMO)とそのスピン射影によるスピン対称性の回復の方法を思い出したが原子核構造の複雑さも知らずにやはり原子核の方が先に進んでいたかとも思った。さらに、「最近京大の福留さんが化学反応でも UHF 理論を展開しているよ」と言う話も出て来た。その後、原子核分野では 1975 年に AMR の 3 先生方がノーベル賞を授賞することになった。また、物性物理学では 1972 年に Bardeen, Cooper, Schrieffer (BCS)の 3 先生方が超伝導の理論で、1977 年には Anderson, Mott, van Vleck の 3 先生方が磁性や金属-非金属転移で同賞を授賞した。このように、1970 年代は対称性の破れの初期の概念と原理が物理分野では定着した時期であったように思える。1973 年に福留先生から「小林・益川君(敬称略)がコーク 6 個を予測する理論(荷電共役反転(charge conjugation; C))と空間反転(parity symmetry; P)対称性の破れ」を Progress に発表した」ことを伺った。さらに、南部先生が BCS 理論を素粒子論の分野で深化・発展させられたので、2008 年には小林・益川・南部の 3 先生方が同賞を授賞され素粒子論の分野でも対称性の破れが定着した。一方、量子化学の分野では前述の WH 両先生による「軌道対称性の保存則」の展開が精力的に行なわれた時期であり、対称性の破れの方は明後日のテーマに留まっていた。

早速、上記先生方の論文を勉強すると、1)「独立粒子モデル(Hartree-Fock(HF)、Hartree-Fock-Bogoliubov(HFB)、etc)では相関の強い場合には有限量子多体系であっても対称性の破れが起こる」2)「しかし、有限多体系では真の相転移がないので破れた対称性の回復が必要である」の 2 点が重要であることが理解出来た。前述の三段階論的に考えると、1)はモデルの段階であるので、化学の場合には HF, HF-Slater(HFS)などの独立粒子モデルにより得られる一電子軌道を考え、対称性の保存の場合は WH 則にその破れの場合にはビラジカル状態に対応させれば良い事が理解された。特に、ビラジカル状態の出現を可能にする不安定性条件は近似的には前述の HOMO-LUMO gap (ΔE_{HL})が小生が縋り付いて来た電子反発項(U_{HL})より小さい場合に相当するので、定性的には前者が小さくなる場合に HOMO-LUMO Mixing が起こり対称性の破れが発現することが理解された。実際、前述の CT 型の電子移動ビラジカル(1976 年)では分子(D-A)間の ΔE_{HL} が、WH 則禁制のホモリティックビラジカル(1975 年)では分子内の ΔE_{HL} が小さくなることが解る。此の様に軌道概念を拡張すれば前述の 4 種類の反応機構が定性的に記述出来ることが判明した。現在では BS 法として定性的考察に使用されている。

しかし、1970 年代は Löwdin 先生の影響が強く 1)の段階で留まらずに 2)の対称性の回復の段階に進み量子力学的に正確な解の構築が要求された。そこで、各自由度に対応する射影演算子を使用して対称性の破れを回復する手法を H_2 , H_3 , H_4 系の Hubbard-Model に適用し解析解を求めて解離曲線を書いてみると BS 解でも解離極限で妥当な結果が出る事が解り、静的電子相関は定性的に取り込まれている事が判明した。特に BS 解では $S=0$ の状態でもスピン密度(Q)が出現するがその意味を理解するために 2 次の密度行列より電子(P2)及びスピン(K2)相関関数(1978 年)を求めたところ Q の二乗が on-site クーロン孔に相当し、K2 はサイト間の Q の積で近似的に表現できることが判明した。そこで、大きい系では BS 解の自然軌道(Natural Orbital; NO)解析をおこない、その占有数から不安定性の原因になっている UNO(=UHF NO)対を拾い出し種々の化学結合指数を定義すると同時に、それらの軌道群を参照にした Multi-reference(MR) UNO CI(CC)を実行する手法を 2)

の段階の解決法として提案することになった。2) の段階では中辻君が UHF 解の一般理論を展開しており有益な議論をして頂いた。小生の場合には BS 法の応用領域として遷移金属クラスター系の UHFS 計算(1979 年)が念頭にあり、その UNO(=UHFS-NO)の利用も簡便法として考えた。この手法は現在 BS 型 Hybrid DFT(density functional theory)、UHDFT、を用いて 1) のモデル的考察を実行し、2)の段階で UNO(=UHDFT-NO)を求めて MR CI(CC), DMRG (density matrix renormalized group)、MR DFT 計算を行なう手法に発展している。しかし、原子核のようにスピン-軌道相互作用が強い場合には基底状態が HFB 解になるので分子系でもそのような系の第一段階では HFB 解を使用することが必要になると思われるが小生の研究は未だそこまで到達していない。神戸理研の中嶋先生に期待しているところである。此のように、小生の場合には三段階理論との対応で自分が今どのような現象に興味を持ち、その問題解決のためにどの段階にいるのかを自省することが多くこの回顧の文章もその一例である。

有り難いことに 1980 年代に入ると高原子価遷移金属オキシ結合による水素引き抜きラジカル反応が Groves 先生により発見された。早速、BS 法に基づき $d\pi-p\pi$ 結合に対応する HOMO-LUMO Mixing で oxyl-radical 性の出現を確認し、そのラジカル反応性を説明することが出来た。さらに、 $M=O$ 結合の解離極限では三重項酸素原子が生成するので、perfect pairing (PP) Generalized Valence Bond(GVB)法が適用出来ないことも判明した。同様に、 $M-OO$ 系でも解離極限では三重項酸素分子が生成するので一重項結合が 2 個の三重項分解物を与える事情は同じである。その結果、小生は 1980 年代には BS 法の優位性が生かせる酸化反応の理論的解析を行なうことになった。その結果、二核遷移金属錯体 $M-X-M$ ($X=O, O_2, S_2$, etc.) の磁氣的相互作用(J_{ab})を BS 法と近似射影(AP)の方法を組み合わせで求める手法も開発した。此の時代にすでに Brudvig らは天然光合成の水分解触媒サイトとしてキュバン型の Mn_4O_4 やアダマンタン型の Mn_4O_6 クラスタを提案していた。さらに、理学部の中村研の上山先生との関係から鉄-硫黄錯体の重要性を知ることになり Fe_4S_4 クラスタの電子・スピン構造の理論(1990)に取り組むことになった。これらのキュバン骨格を持つクラスタは 1970 年代にモデルとして考察していたコーンや 4 面体スピン構造を持つ事が解り大変感動した。

BS-AP 法で $M-O-M$ 系の J_{ab} 値を計算すると $Cu(II)-O-Cu(II)$ の場合には異常にその絶対値が大きく計算間違いをしたのでは無いかと思い分子研の北浦先生に相談に行ったことがあった。ところが、驚いたことに当時酸化反応触媒として開発されていた銅酸化物にホールを導入すると高温超伝導体になる事が発見(1986 年)された。さらに、この銅酸化物は通常の拡張 Hückel 法や密度汎関数(LDA)計算では金属に相当するバンド構造を持つのに反して反強磁性絶縁体になることが中性子散乱の実験より判明した。そこで、超伝導の本質論は物理の理論家に任せるとして、実体論的モデルは量子化学でも構築出来ると考え、超伝導転移温度(T_c)が J_{ab} 値に比例すると仮定してみた。此の仮定では $M=Cu$ で T_c が最高になるが、 Ni, Fe などの場合にも転移温度は低い超伝導が発現してよいことが予測された。小生の J-model では $M=Ni$ の場合も 2 番目に T_c が高くなると予測されたが長い間そのような系が発見されなかったが最近になってやっと Ni 系酸化物の超伝導が発見された。 Fe の場合には酸素(O)架橋の場合は J_{ab} 値が小さいので T_c は低く見積もられたが酸素をヒ素(As)に入れ替えば J_{ab} が大きくなるので $Fe-As$ 系で T_c が高くなることも理解出来た。J-model を超伝導の本質論にまで進めることは小生には出来ていないが最近 Chan 教授が DMRG 法を用

いて挑戦しているので期待している。このように、遷移金属酸化物などの強相関電子系では物性物理と量子化学の壁は消失しているようにも思える。

1970 年代からみて 20 年後(明後日)に近くなると、量子化学の分野も化学の広汎な分野で有用な方法論として定着していたが東大の西村先生、住友化学の吉田さんに誘われて「コンピュータはいい化学者」(1989 年)というタイトルの本を出版することになり、4M(Molecular Mechanics(MM)、Molecular Dynamics(MD)、Molecular Information (MI)、Molecular Orbital(MO))手法の解説をすることになった。其の本では図 1 の Schrödinger 山への登山口として MO,VB 登山口だけでなく中辻君の厳密解登山口も紹介してある。

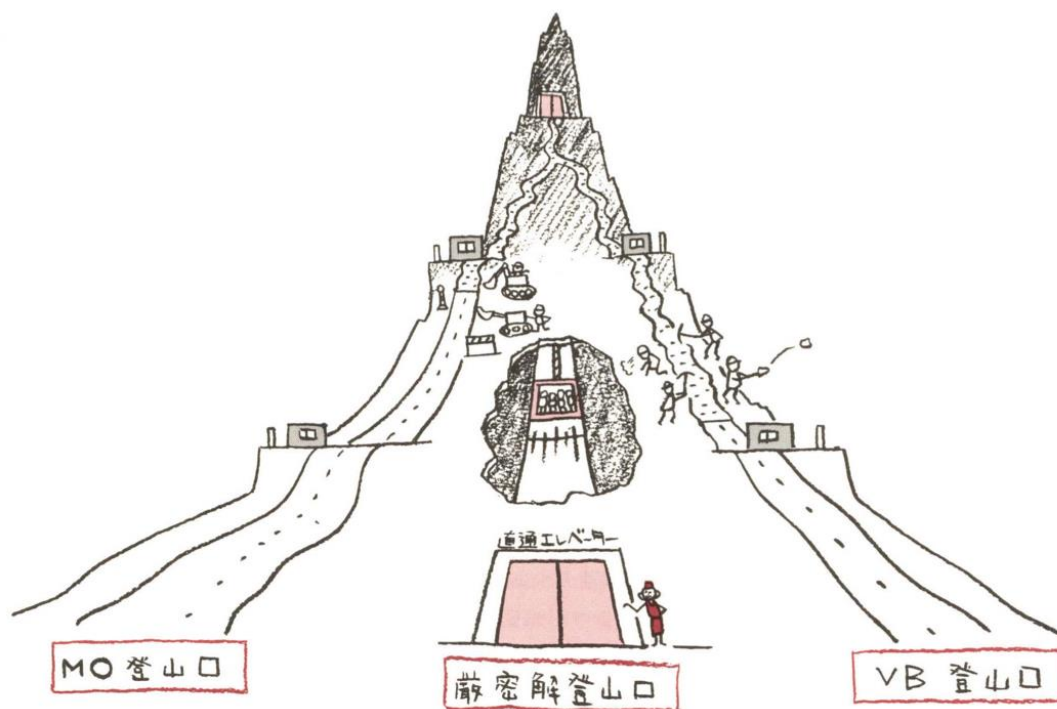


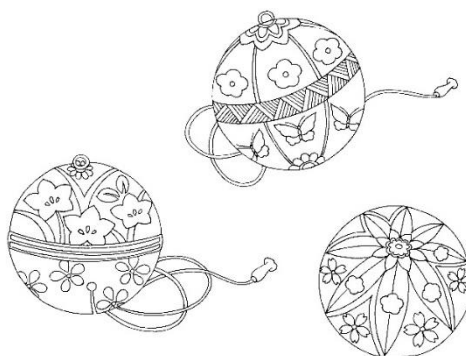
図 1 Schrödinger への登山口 (コンピュータはいい化学者(1989)より引用)

此の図より中辻君の方法論が完成すれば化学分野のみならず他分野の人も Schrödinger 山への登山が可能になることが理解されよう。さらに、1990 年代になると強相関電子系の量子化学にも日があたるようになり小生も理学部に量子化学研究室を持つ状況になったので研究の基本方針を既成の 4 M から、将来を見据えた 4Q (Quantum Mechanics(QM)、Quantum Dynamics(QD)、Quantum Information (QI)、Quantum Computation (QC)) 路線に変更して研究・教育を実践して行く事にした。量子化学基礎理論は実験系の人達にも必修として将来の成長の糧とした。

そこで、当時分子研にいた中野さんに「君が QD に興味があるなら阪大に戻ってこないか」とお願いしたところ快諾して貰えた。その後中野さんは QD の分野でも最先端の量子位相や、スクイーズ光、そのための非線形光学材料など量子光学の分野の研究を精力的に進める事になるが、光計算機など今後の発展が展望出来始めた最中に突然研究を中断せざるを得ないことになり小生としては大変なショックを受け、彼の努力に心よりの感謝をこめてこの原稿を書く動機の一つになった。さらに、若い時にお世話になっていた青野先生のお弟子さんである長尾さんが職員となってくれたので、小生は場の理論を教えて貰えることに

なり超伝導の南部表示などの本質論にも触れることになった。今から振り返ると J_{ab} 値の大きさも酸素ジアニオンから遷移金属イオンへの CT 励起の寄与で決まるので、超伝導発現における電荷のゆらぎを永年考慮して来た事になる。さらに、吉岡さんが会社から研究室に戻ってこれ生体量子化学の分野を再開された。その御陰で小生は定年後沈先生、神谷先生のお手伝いで光合成水分解 CaMn_4O_5 クラスターの研究をすることが出来た。現在の量子化学研究室では小生の時代には到達出来なかったメソスコピックサイズのクラスター触媒の研究を奥村さんが進めている。小生のような普通の人間が量子化学分野の研究を進めて来られたのは優秀な研究スタッフや院生の努力があったからであると心から感謝している。そこで、還暦の記念として 2004 年に「物性量子化学入門」という本を出版して研究の纏めと将来展望を書くことにした。此の本では現在話題の量子計算(QC)についても触れてある。

以上のように駆け足で小生の場合の量子化学への関わり方を振り返ってみた。量子化学の王道の研究室に入り王道の道を極めて来られた中辻先生とは全くことなる生き方もあることを紹介させて頂くことになった。温故知新という言葉があるが小生の昔話も今後の量子化学の広がりを考える参考資料になれば幸いである。北大におられた大野先生の解説を拝見すると、パウリ(敬称略)のところにいた Löwdin 先生は素粒子論の分野に深入りせず量子化学の分野に転向して大成功した事が解る。現在でも超弦理論に困難を感じる素粒子論分野の院生に量子化学、量子計算の分野にも楽しめる材料が沢山あると申し上げたい。実際、中辻先生のような数学の達人な人たちに興味に持てるテーマもあるし、小生のように物質の多様な振る舞いを楽しむテーマもある。さらに、小谷先生のように生命現象に関係するテーマもあるし、最近の中辻先生のように宇宙における星の生成に関係するテーマもある。本稿での光学活性種の起源に関しても宇宙に於ける対称性(前述の CP など)の破れと関係するとの提案や磁気キラル二色性が原因との説もあり未だ混沌としている。巻頭言としては極めて異例なスタイルになったが 80 歳に近い年寄りが量子化学分野の若い人達に自分の好きなスタイルを見つけて、各自の研究を楽しんで欲しいという願望が少しでも伝われば望外の幸せである。小生の場合には古川先生に頂いた「合成高分子から生体高分子に橋をかける」テーマにまだ橋桁一つも完成していなく楽しみながらナタとノコギリでその部品を構築している状況である。最後になりましたが中辻先生の類い稀なる知性と高潔な人柄に敬意を表し、量子化学の分野への献身に心からの感謝を申しあげたい。さらに、中辻研の出身者が数多く量子化学の分野で活躍されていることに敬意を表し、若い時期に偉大な先生に基礎理論を学ぶことの大切さを再認識し、巻頭言の終わりにしたい。

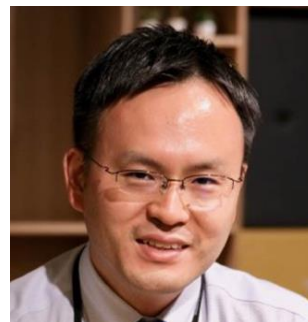


化学反応の予測をめざして

前田 理

北海道大学 化学反応創成研究拠点(ICReDD)・拠点長 教授

化学反応は現代社会のあらゆる場面において用いられる。例えば、安価な原料物質から有用な材料を作り出す、単純な分子から薬剤分子を生み出す、有害な汚染物質を無害な分子へと変換する、生体内での機能を制御する、などが挙げられる。その量子化学計算に基づく予測は、化学者の夢の一つであると言っても過言ではないだろう。言うまでもないが、任意の複雑さの系においてシュレディンガー方程式が解けるなら、この課題は完全に解決する。しかしながら、その難しさは、ロンドン王立協会誌においてディラックがコメントしているとおりである（ディラックのコメントの日本語訳については量子化学研究協会 HP 参照: http://www.qcri.or.jp/res_al.html）。



前田 理 先生

現在、これまでの多くの量子化学者の努力により、電子のシュレディンガー方程式の近似解は、ルーチン的に得ることができる。しかしながら、近年最も広く用いられるコーン・シヤム方程式に基づく密度汎関数計算には、汎関数依存性や多配置効果の欠如など、致命的な欠陥も多い。中辻先生らによるシュレディンガー方程式を正確に解析的に解く方法の発見は、この課題を完全に解消する素晴らしい成果であり、今後の複雑系への展開に強く期待している。

本稿では、電子のシュレディンガー方程式の近似解が得られることを前提に、それらを用いてどのように化学反応を予測するかについて、筆者らの取り組みをご紹介します。中身は、中辻先生をはじめとする量子化学者たちの崇高な理論を前提として、その成果を化学反応へと展開していくかなり泥臭い手法構築の話であるが、その点ご容赦いただきたい。それでも、本手法により、実験と同様のインプット（反応物の組、添加物、反応温度、および、反応時間）と計算レベルの入力から、何が、どのような割合で、どのように生成するかまで、量子化学計算に基づいて予測することが可能となった。さらに、実験とは逆のインプット（生成物、添加物、反応温度、および、反応時間）と計算レベルの入力から、その生成物が、どんなものから、どのような収率で、どのように生成し得るのかを予測する、逆問題のシミュレーションも可能となっている。もちろん、適用できるシステムサイズに限界があることも申し添えたい。また、本稿では手法の詳細ではなく、開発の道のりや経緯についてのみ記載することとする。

化学反応の経路（反応経路）は、系の核配置を変数とする電子エネルギーの関数、ポテンシャルエネルギー曲面（PES）を調べることで求めることができる。筆者が PES 上での反応経路自動探索の世界に入ったのは、東北大学での恩師である大野公一先生のお導きによる。筆者が修士 1 年のとき、大野先生に Frank Jensen 著の Introduction to Computational Chemistry という専門書を輪読していただいたことがそのきっかけである。その中には、PES 上での反応経路の全面探索が如何に難しいかが述べられていた。その専門書でほぼ不可能とまで言われていたテーマにその後挑戦したわけだが、今になってそのテーマでの博士号取得までの勝算を考えるとゾッとする。



大野先生と開発した超球面探索法（別名、非調和下方歪み追跡法）により、3~8 原子程度からなる小分子の PES 上において、異性化と分解の反応経路を全面探索することができた。やはり難易度は非常に高く、研究開始から最初のフルペーパーを出すまでに 3 年の月日を要した。その後は、適用系を変えたり、同じ手法を限定探索のコンセプトで再利用したりして、複数の論文を書くことができた。難しい課題にチャレンジした甲斐があったというわけである。

その後、学振 PD としてエモリー大の諸熊奎治先生の下で、超球面探索法の更なる展開を進めた。諸熊先生は 1980 年代に、有機金属触媒の触媒サイクルの解明を世界に先駆けて実現されていて、有機合成の世界への貢献が顕著な理論化学者である。しかしながら、諸熊先生からは、有機合成反応への応用は提案されなかった。これは、諸熊先生が超球面探索法の限界を十分に理解されていたからであろう。その代わりに、3~8 原子程度からなる小分子の電子励起状態の PES への展開を勧められた。この采配は正しかった。最初半年程度は多配置理論の自動制御に苦しんだものの、その後は励起状態特有の予想外の反応機構を自動探索によって次々に明らかにすることができ、やはり複数の論文を書くことができた。

筆者に有機合成反応への応用を本格的に考えさせてくれたのは、東大薬の内山真伸先生であった。内山先生は有機合成化学者でありながら、早くから諸熊先生の下で研鑽を積んで量子化学計算も自らされてきた先鋭的な研究者である。パッセリーニの 3 成分連結反応という、最も基本的な多成分連結反応を題材に、超球面探索法によって反応機構を明らかにする研究に取り組まれ、うまくいかなかったというのである。筆者自身でも同じ系を計算してみたが、限定探索オプションなどを工夫してもどうしてもうまくいかない。これは、筆者にとっては大きな挫折であった。

京都大学の白眉プロジェクトに採択いただいた際に、それまでとは全く違うアイデアで取り組んでみよう一念発起した。白眉になって約一月が経過した 5 月初旬、現在の成果の源泉となる人工力誘起反応（AFIR）法というアイデアを思い付いた。そこで思いついた AFIR 関数の形が非常に重要なのだが、その詳細は割愛する。そのときは非常に興奮し、睡眠を削ってコーディングと論文執筆に取り組んだ。アイデアをまとめたコミュニケーションタイプの論文初稿は 5 月 6 日に完成し、諸熊先生に送付した。興奮して書いたこともあり、諸熊先生からは、非常に分かりにくいと、たくさん注文が付いた。それでも 5 月 19 日には Journal of Chemical Physics 誌に投稿、6 月 7 日にはノークレームでアクセプトという速さで世に出すことができた。

その後、データ処理や探索過程の自動化を進め、AFIR 法による小分子系の PES の全面探索を実現した。アルゴリズムの簡便さから、小分子のみならず、有機合成反応や表面反応などへも展開することができた。また、光反応についても、諸熊研時代に扱っていた小分子系を越えて、蛍光分子の無輻射失活過程探索などへも応用することができた。これら様々な反応系への展開は、一緒に研究を進めてくれた研究室メンバーの成果である。また、山本尚先生がメンターを務める CREST の研究領域に入れていただいたことが、以下も含め、その後の展開を大きく促進してくれた。

AFIR 法をもってしても、全面探索を実行できる系は十数原子系程度に限定されていた。これは、反応パターンの組合せ爆発に起因する。一方、実際の化学反応では、有限の素過程を経て、反応が完結する。つまり、PES 上のすべての反応経路が重要なわけではない。その絞り込みを実施するにあたり最も有望なのは、化学反応速度論の利用であろう。そこで、



2013 年ごろから、当時学部生として加わった住谷陽輔博士と共にこの問題に取り組み始めた。しかしながら、これもまた、非常に高難度な課題であった。特に、反応経路自動探索によって得られる速度式の速度定数行列には、桁が 16 以上も異なる要素が混在し、その数値的な取扱いには困難を極めた。

当時、北大電子研の小松崎民樹先生の研究室の永幡裕博士が反応経路ネットワークのグラフクラスタリングという課題に取り組んでおり、その研究が参考になった。その後、住谷博士と共に、速度論に基づくファジークラスタリングである速度定数行列縮約 (RCMC) 法を開発、反応経路ネットワークの新しい解析法として小松崎先生らとの共同論文を出版することができた。当時は解析法として提案したが、クラスタリングにおける縮約という操作において分布の伝搬を積算することで、速度式自体の数値解を超簡便に得られることが分かった。さらに、縮約後の各安定構造の生成物構造への寄与率から、各安定構造を反応物とした場合の生成物の収率を、全安定構造に対して一発計算できることも明らかになった。これらにより、順探索と逆探索による化学反応予測が実現した。

つまり、AFIR 法と RCMC 法を用いた化学反応予測はこうである。まず、AFIR 法によっていくつかの反応経路を得る。得られた部分反応経路ネットワークに RCMC 法を適用し、順探索では反応物から速度論的に到達し得る範囲を、逆探索では生成物に速度論的に戻り得る範囲を絞り込む。絞り込まれた範囲から AFIR 法による探索を継続し、部分反応経路ネットワークを拡大する。そこに再度 RCMC 法を適用し、絞り込みを行う。これらを、終了条件を満たすまで繰り返すことで、順探索では速度論的に可能な生成物を、逆探索では速度論的に生成物を与え得る反応物を予測することができるのである。順方向・逆方向それぞれの探索パフォーマンスについては、関連論文をご参照いただきたい[順方向: <https://doi.org/10.1246/cl.200092>; 逆方向: <https://doi.org/10.1021/jacsau.2c00157>]。AFIR 法の開発のきっかけとなったパッセリー二の 3 成分連結反応は、今やその生成物の入力のみにから予測することができる。あれから約 10 年、その道のりを考えると感慨深い。

現状、対象となるのは 30 原子程度以下からなる系である。AFIR 法では、結合組み換えに関与する原子を限定するオプションがあり、それを用いて結合組み換えに関与する原子数を 30 以下に限定できれば、さらに大きな系も適用対象となり得る。この制限を緩和するには、更なる開発が必要である。情報科学の利用が、その一つの手立てとなろう。

最後に、電子のシュレディンガー方程式の解法についても高速化が望まれる。現状、自動探索時は、ハイブリッド汎関数に古典的な分散力補正を加え、基底関数はダブルゼータ (第二周期までは分極関数なし) という、かなり精度を落とした計算レベルを採用している。ここまで精度を落としても、定性的には正しい速度論に系が従ってくれる場合が多い。一方、もし半経験的な計算法が利用できれば、適用限界は大幅に改善する。しかしながら、どの半経験法を用いても、定性的に正しい速度論に系が従ってくれることはなかった。つまり、上記の手法を適用すると、半経験法に基づく間違っただけの速度論に導かれ、実際には生成しない化合物ばかりが予測されてしまう。密度汎関数計算と半経験法では計算コストに 1000 倍程度の差がある。一方、計算コストの改善は 10 倍でいいので、定性的に正しい速度論を再現してくれる計算法があればいいのに、と筆者はいつも思っている。究極は、精度を気にせず上記の予測計算が実行できることである。そこで、誠に勝手ながら、中辻先生の方法への期待を述べさせていただき、本稿を締めくくらせていただければと思う。



「量子の世界」第 15 号刊行に寄せて

中辻 博

量子化学研究協会・研究所 所長

「量子の世界」の創刊号が 2015 年 4 月 10 日に刊行されてから、ほぼ 7 年になる今日、その第 15 号を、2022 年春号として刊行できることを、とても喜んでいます。その創刊号に記したように量子化学研究協会が設立されたのは 2006 年 8 月であり、それから本年で 15 年と 9 か月になります。不思議と 15 という数が重なるのですが、、、いずれにせよ 15 号という一つの区切りを迎えたことを、皆さまとともに慶ぶとともに、その間、尊いご貴稿をお寄せいただいた多くの執筆者の皆様に、深く感謝の意を表したいと存じます。この「量子の世界」を読むことを楽しみにいただいている読者の方も次第に増えていることも、皆様とともに、喜びたいと思います。

本号では、大阪大学の名誉教授の山口兆先生に「強相関電子系の量子化学—個人的回想—」と題して、先生の学生時代から今日この頃にいるまでのご研究の発展の経緯と、それを支えてきた背景の思想をご披露いただきました。実は私は山口君とは 18 歳の春以来の友人であり、彼の研究の進め方について深い敬意を抱いている一人です。彼の発案で将来の科学研究を進めるための「哲学的」支柱となる（と山口君が言う）弁証法的科学理念を学ぶため、ヘーゲルの本や武谷三男の理論などを互いの下宿で勉強したことなど、懐かしい思い出です。その勉強の成果は、私にはまったくどこへ行ったのやらですが、山口君の研究の中ではしっかりと生きていて、それであのような大きなご研究をなさったのだと、感じ入りました。また、福留先生のお話も、私も折につけご指導いただいた恩のある大先生でしたので、感じ入りました。山口先生の広きにわたる大きなご業績は、先生の広いご交友や人的関係にも基礎があることもお書きになっています。大きなご研究の学問的・精神的支柱として、今後にも夢のある若い学徒の方にも深く味わってほしいご貴稿と思います。この場をお借りして、山口兆先生に、長時間をお取りしたであろうご執筆に深く感謝いたします。

また、前田理先生には「化学反応の予測をめざして」と題して、先生の化学反応経路の予測に関するご研究の発展の後を綴ってくださいました。前田先生には、大分前、私の親しい友でもある大野公一先生を東北大学に訪問した折、多分修士課程の学生でおられたころではないかと思いますが、はじめてお会いしました。丁度、前田さんの御貴稿にお書きになっている英語の本の輪読をなさっている時だったと思います。大野先生から反応経路のご研究についての熱い夢をお伺いしたのをうっすらですが覚えています。またその時、大野先生が前田さんの事をとてもお褒めになっていたことも思い出されます。その後お二人で展開された化学反応の反応経路のご研究は素晴らしいご研究で、現在では多くの方に浸透している大切な理論的方法論になっていることを私は大いに喜んでいます。今回のご貴稿では、前田先生によるその発展の軌跡を示していただきました。その最後に、私達のシュレーディンガー方程式の解法への期待を書いていたと思いますが、山口君のシュレーディンガー山散策への期待と併せて、そのような方法の提供ができるよう、私達も頑張ってます。

「量子の世界」が今後もいろいろの化学者や研究者、そしてその豊かな世界を愛する皆様に支えられ、ますます発展してくれることを祈念して、第 15 号刊行に寄せる言葉とさせていただきます。



「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: 2022 年 6 月 5 日 (日) 13:00~16:40

場所: キャンパスプラザ京都(2 階) 第 1 会議室 (京都駅北西すぐ)

参加費: 無料、申し込み・問合せ: office@qcrl.or.jp

コロナ禍のため 2 年のブランクを余儀なくされましたが、このたび「第 14 回革新的量子化学シンポジウム」を、旧来の対面形式で開催いたします。このシンポジウムには、JCS シンポジウムと同様、“friendship is first, science will follow with us”という理念が底流にあり、講演者・参加者共に実空間で顔を合わせて楽しみたいと考えております。皆様ぜひご出席のほど、ご案内もうしあげます。

プログラム

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 (コロナ感染防止を鑑み会場変更)

日時: 2022 年 6 月 5 日 (日) 17:00~19:00 頃

場所: キャンパスプラザ京都(4 階) 第 4 講義室 (京都駅北西すぐ)

参加費: 4,000 円

コロナ感染防止を鑑み、シンポジウムと同じキャンパスプラザ京都内 4 階の第 4 講義室で、夕食を頂きながら、アルコール抜きで開催することとなりました。講演者・参加者同士の交流が弾む和やかな雰囲気での懇親会を計画しています。シンポジウムと併せて是非ご参加ください。なお、食事の準備の都合上、6 月 2 日(木)までに申し込みをお願い致します。



参加申し込みフォーム

e-mail に以下のフォームを貼り付け、
office@qcrl.or.jp まで、6 月 2 日(木)ま
でにご返信ください。

----- 返信フォーム -----

シンポジウム： 出席 ・ 欠席

懇親会： 出席 ・ 欠席

ご芳名：

メールアドレス：

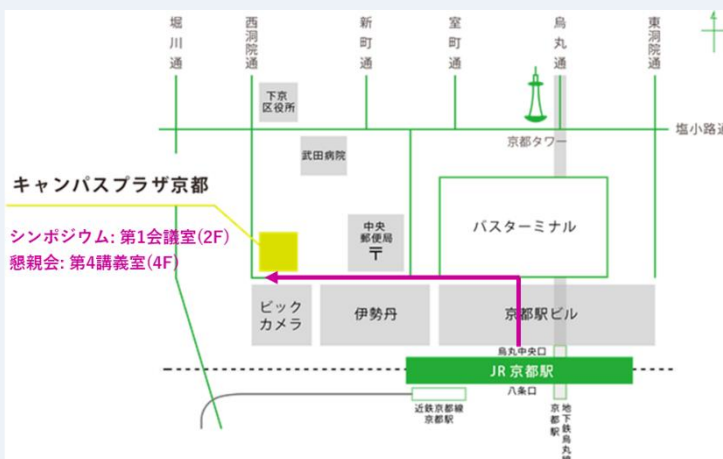
所属：

アドレス：

ご意見：

会場へのアクセス

キャンパスプラザ京都
(京都駅北烏丸口より北西側すぐ)
<https://www.consortium.or.jp/>



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 所長

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

暫定的な開催予定のお知らせ

日時: 2024 年 6 月 17 日(月)-20 日(木), 21 日(金) (エクスカーショ)
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/>

2022 年の開催を再延期し、上記日程での開催を計画しております。コロナ禍が世界的に収束し、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。

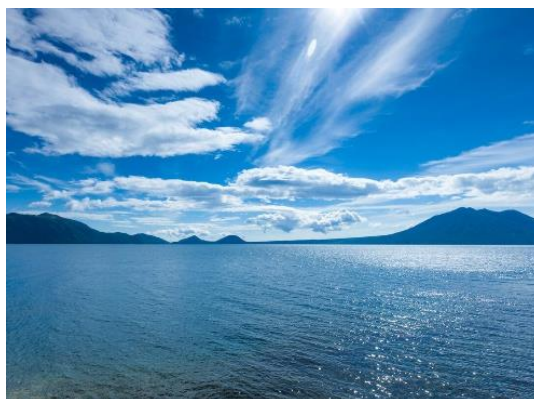
このシンポジウムは、研究交流を通して三か国の理論化学者の親睦を図ることを趣旨とするシンポジウムでありますので、実空間で参加者が集い、安心安全な環境下で開催することを重視します。

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ひます。また、invited poster を充実させて、広く参加を呼び掛けたいと思ひます。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。4 月より新年度となっておりますため、本年度も継続的にご寄附を頂き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)： 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



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。

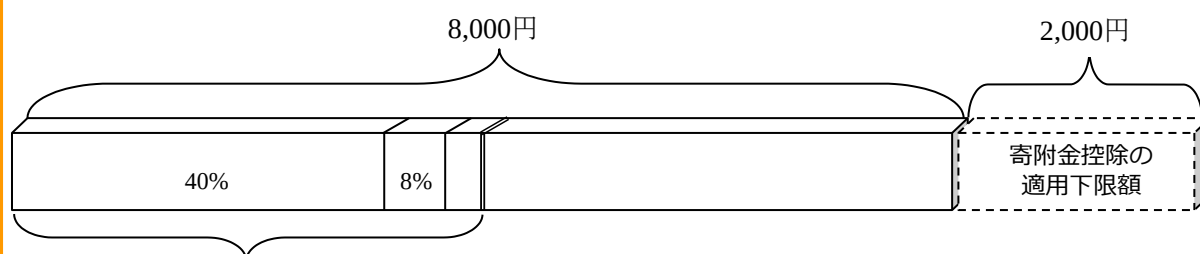
（参考）京都市民の方が認定NPO法人に 10,000 円寄附した場合の例

（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。



「量子の世界」 No.15, 2022 年(令和 4 年) 春号

2022 年 5 月 17 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 © 2022 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。

