



量子の世界

No. 16, 2022 年 冬号 (2022/12/23 発行)

- 目次 -

	ページ
1. 広く学ぶ心 山下 晃一 (横浜市立大学 特任教授)	1
2. 21 世紀, 激動の計算化学 山中 秀介 (大阪大学 准教授)	3
3. 大野公一先生を偲んで 前田 理 (北海道大学 ICR/DD・拠点長 教授)	6
4. 量子化学探索研究所・大野公一先生のこと 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)	9
5. 「第 14 回 革新的量子化学シンポジウム」のご報告	11
6. 「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」開催予定のお知らせ	13
7. 量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い	14
8. 「量子の世界」へご寄稿のお願い	17

広く学ぶ心

山下 晃一

横浜市立大学 特任教授

福井謙一先生のフロンティア電子論に関する論文が 2021 年米国化学会「歴史的化学論文大賞」に選出された。人類の科学史に残る、アボガドロ、パスツール、メンデレーエフ、キュリー夫妻、ワトソンとクリック、らによる歴史的な化学論文と並び称せられることとなり、日本の理論化学コミュニティにとっても大変誇らしい。

某学会誌から、この賞についての原稿依頼があり、福井先生のノーベル賞受賞当時の出版物を渉猟していたところ、ノーベル賞授賞式後のバンケットでの福井先生のスピーチの言葉、“科学の研究の応用における善、そして一もしあるとすれば悪—の区別をもっと



山下 晃一 先生



もよく見分けるのが、科学の先端的な領域に働く研究者としてすぐれた人たちなのです。”、に目がとまった。確かに当時、この言葉に出会っていたのだが、学生であったこともあり、言葉の意味するところについてあまり深く考えなかったし、その後40年におよぶ研究者生活のなかで、頭の片隅にかすかに記憶していたのであろうが、必ずしも私自身の研究活動に反映させてきたとは言えず、大いに反省するところである。

福井先生のスピーチは英語で行われたが、この個所だけは、微妙なニュアンスを日本人に直接伝えたいとのことで、日本語でなされている。後日、福井先生ご自身は、「なぜ学ばなければならないか、なぜ創造しなければならないかを自分自身に問うた時の、数学でいう「解」のようなものである」と回想されている（「学問の創造」佼成出版社 1984 年）。「科学技術のめざすべきところは、「地球の遺産の保全と人類の持続的な生き残り」にあり、それを目標とする科学の創造にこそ、科学者は身を粉にして努めなければならない」と科学者の責務を明確にし、「科学技術の世界では、何が善で何が悪かをみわけるのが非常に難しくなっている現状、科学の最先端にいる研究者はこの判断を誤らないように、よく「学び」、よく「思わ」なければならない」と警鐘を鳴らされたわけである。特に若い人に期待して、「科学者が好奇心だけで学問をする時代は過ぎて、自分がやっていることは、社会的に意味があるのか、人間に対してどういう影響があるのか、ということを考え、こじんまりとまとまらずに、「広く学ぶ心」、すなわち鋭い先見性と広い視野」、を持った研究者になって欲しいと、この言葉を残されたのである。

「古希」を迎えた筆者には、自分自身の学問人生を振り返ってみても、耳の痛い言葉である。人生100年時代といわれる現代日本で、長寿を実感するのが「古希」であると、「七十にして己の欲する所に従えども矩を踰えず」と「枯れて」いては、福井先生の言われる「科学者の責務」を全うできないであろう。福井先生は“物質変換”における電子の特質を発見されたのであるが、それでは筆者は、これからの後半生、“エネルギー変換”における電子の織りなす「量子の世界」を、もちろん「広く学ぶ心」をもって、探検したいと表明して巻頭言を結びたい。



21 世紀,激動の計算化学

山中 秀介

大阪大学理学研究科 准教授

中辻先生から本原稿執筆のご依頼をいただきお引き受けはしたものの、実際に書き出すと、私は他の先生方のように披露できる人間的・学術的深みもなく、この種の文を書くのも慣れていないため、ただ愚直に自分の研究生活で経験したこと考えてきたことを書くこととしました。ただ歯切れ良くするために詳細・正確性はかなり落としました。ご容赦いただければと思います。



山中 秀介 先生

量子化学

私は学生時代からポストク時代の前半まで、ながらく大阪大学で山口兆先生のご指導の下研究をしていました。その時のいくつかのテーマのうち代表的な分子磁性体の研究は、分子もしくはその集合体のスピン配列が、強磁性(磁石)的/反強磁性(非磁石)的どちらになるか、その 2 つの状態のエネルギー差(～磁石となる転移温度の目安)がどれくらいになるかを予見することがミッションでした。分子の磁性は、我々が日頃使用している磁石よりはるかに繊細で、分子構造が歪んだりすれば、強磁性/反強磁性すら変わる微妙なものです。そのため、第一原理計算にも色々ありますが、正確を期すためには、DFT は使わず膨大な数の展開項からなる CI 波動関数でもってその電子状態を記述する必要があります。しかし CI は計算コストが高すぎて、巨大系ではすぐに計算不能になります。この CI を、絵のアナロジーで言えば、細かいディテールの線を膨大に描くようなものです。しかも分子を大きくしていくと、必要なディテールの線の本数は指数関数的に増加し、すぐに人生の時間全てを使っても描ききれなくなる、そういったイメージです。さらに都合の悪いことには、絵ならラフスケッチで描こうとも大抵は判別できる絵になりますが、第一原理計算で描く分子の磁性は繊細で、下手にディテールの線を削っていくと途端に何を描いているのかすら分からなくなるのです。

この事情は磁性に限ったことではありません。私は一時期磁性の研究と並行し、高田俊和先生(当時 NEC)が代表であった CREST 研究課題の研究者として、光合成の反応中心中のクロロフィル 6 量体のスペクトル計算をミッションとしていた時期があります。そこでも CI の展開項を削っていくと、クロロフィルに特有の赤と青の吸収波長が紫外の吸収波長となる散々な結果となりました。つまりラフスケッチで描く世界は植物の葉の緑すら失ってしまいます。この「正確な描写」と「簡便な描写」のトレードオフは、MR-DFT という方法の縛りの中で貧弱な CI を DFT で補正しても全く解決できず苦しみました。その時期考えていたことを今思い起こせば次のようなことだったと思います。

磁性やスペクトルにおけるトレードオフを根本から克服するためにはシュレーディンガー方程式に挑み続ける必要があります。それはまさに中辻先生の「量子の世界」そのもので、



人類が今後も探求し続けるべき課題であると思います。ただし、そこで生き残れるのは才能に恵まれた人達だけであるのも事実です。本誌 2022 年春号にも記載されていますが、山口先生はしばしば量子化学の理論研究をシュレーディンガー山の登山に例えられています。いくつも登山道があるのですが、例えば中辻先生はじめ量子化学研究協会の先生方のように、free-complement 法のような新しい理論を開発するか、山口先生のように異なる分野を平然と往来しその理論を援用する馬力のある研究者でなければ、先が見えず険しい道に、普通は遭難するか滑落するかが関の山です。少なくとも私の凡才では、山口先生に連れられ 1,2 合目までは登ったもののそこで引き返すのが精一杯でした。

分子動力学

ポスドクとして所属していた阪大蛋白研中村春木先生の研究室では、分子動力学(MD)の分野でも同じであることを知ります。MD では擬ニュートン方程式で分子群を動かし統計的な構造サンプリングをすることが絵を描くことに対応します。そして、ラフスケッチ(簡便な MD)では(ボルツマン分布が 0 近くになる)遷移状態には到達せず、その描く世界は化学反応の起こらない死の世界になります。無論、中村研究室の先生方は精密な画法マルチカノニカル MD(高精度 MD)で詳細に世界を描画され、しかしやはり、「正確な描写」と「簡便な描写」のトレードオフに奮闘されていました。私も量子化学的な視点からのラフスケッチ方法はないものかぼんやりと考えていましたが当時は手も足も出ませんでした。今から振り返ると高精度 MD もちゃんと理解をしていなかったのが当然ですが。

大阪大学理学部(奥村研究室)に戻った後、私が指導していた満田祐樹君(現大阪公立大学助教)が開発した自由エネルギー版 GRRM は、中村研時代の自問への 1 つの解答と言えます。詳細は省きますが、それは平衡点—遷移状態—平衡点という量子化学(GRRM)的経路だけを描く、つまり、ディテール・輪郭問わず量子化学的経路近傍なら残しそうでないなら省略する、という画法です。複雑な(高次元反応座標の)化学反応の描画を可能にする、自分の中ではヒット作と言えます。しかし、現行では各点で通常の MD と同等の計算コストを要し「簡便な描写」とは言い難く、今後さらなる改善が可能でしょう。「正確かつ簡便な描写」は分子動力学でもいまだ未踏峰の山と言えます。

機械学習

それと前後して、今度は学習理論という大波が分子シミュレーションの分野に押し寄せてきました。特にここ数年の展開は凄まじく、例えば、2020 年 DeepMind という企業が、外国語翻訳に使われていた深層学習の技術を転用し、蛋白質のフォールディング問題のコンテスト CASP で、圧倒的な成績を叩き出し、フォールディング問題の勢力図を塗り替えました。当然、その大波は計算化学も飲み込みます。昨年、人工知能系企業 Preferred Networks(PFN)と、あの Facebook (現「メタ」)が独立に、深層学習を使った力場(機械学習ポテンシャル)を公開・発表したのです。これは要するに、犬の写真を入れると「犬」と返す巷の人工知能と同様、分子構造を入れるとそれがどう動くかを返してくる人工知能です。何が「大波」かというと、量子化学計算と同等の計算がほぼ MD の計算時間で可能になり、これまでのように基質と触媒だけではなく、担体金属や溶媒を含め全系が量子化学レベルで一瞬で計算でき



るのです。つまり有限温度で凝縮系化学反応をシミュレートする全系量子化学 MD, という分子シミュレーション研究者の 1 つの夢が現実になりつつあります。

ただ残念なことに, この方向の理論開発は, いかに膨大な数の系に対して正確な教師データを用意し深層学習器に喰わせるか, で成否が決まってしまう。そのため上記 PFN やメタのように潤沢な計算機と優秀な機械学習系研究者を擁する企業がメインプレイヤーになっているのです。汎用的な機械学習ポテンシャルが発表されてまだ日が浅いにも関わらず, この手の機械学習系計算化学の研究は, 我々のような大学の 1 研究室ではもはや手が出せないものになりつつあるのです。

ただ残された重要な課題が 2 つあると考えています。奥村研究室では, 林亮秀君が ANI-1 という有機物専用機械学習ポテンシャルを白金表面の水素分子吸着に特化し拡張し, 2021 年学位を取得しました(現在は PFN で機械学習ポテンシャル開発に従事)。他にも, アドバンスソフトの西原慧径氏らが開発している Nanolabo は, 理研永野佑紀先生の自己学習ハイブリッドモンテカルロ法が搭載されるなどユーザーが追加学習機能を利用できるソフトを意識して開発が進められています。学習理論でも学習結果転用を行う転移学習と言われる手法が注目されていますが, 今後計算化学でも各研究グループが各々得意な系に特化し(秘伝のタレのように継ぎ足し継ぎ足し)独自に鍛え続けた深層学習器を武器に研究を進めるスタイルが, 応用計算の研究スタイルの 1 つになるでしょう。

そしてもう 1 つが理論化学としてはより本質的な課題です。既存の計算化学の方法を圧倒しつつある学習系理論ですが, その本体である深層学習器は, 膨大な数の非線形変換ユニットからなる層を何層も並べ層間を線形結合で結んだ, 化け物のような関数です。入力に対し正しい出力は返してくれるけれども, 使用者が関数を覗き込んで「なぜそうなるのか」が分かるしろものではありません。そこから情報を抽出し新しい「化学」を導き出すのが, 学習系理論の時代の理論化学者の重要な役割になるでしょう。思えば, 偉大な理論化学の先人達は, 本来 $3N$ 次元波動関数がゴールだった量子力学に「化学」を見出してきました: 福井謙一先生のフロンティア軌道理論はいわば, $3N$ 次元波動関数 $\rightarrow$ 1 電子近似 $\rightarrow$ HOMO/LUMO という形で, 化学のツール(言葉)にしたものですし, 山口先生の CI に対する種々のラジカル指数は $3N$ 次元波動関数に磁性を見る理論, 中辻先生の Free Complement Chemical Formula Theory など $3N$ 次元波動関数と化学の対応を見る理論です。人工知能の分野でも, 「説明可能な人工知能」と言う副分野も形成されつつもあります。それに対応する「学習系理論の理論化学」という分野もまだ始まったばかりと言えるでしょう。ここに書いてきたように, 私は時代のうねりに翻弄され続けた研究生活ではありますが, 本文に挙げた西原氏, 満田氏, 林氏ら, 私よりはるかに優秀な山口研・奥村研出身者の活躍を楽しみにしつつ, それを励みにわずかでも理論化学の発展に寄与したいと思っております。

本原稿の執筆中に大野公一先生の訃報が飛び込んできました。満田君の自由エネルギー版 GRRM 開発の御縁もあり, 阪大で開かれた「化学反応経路探索のニューフロンティア 2020」でも大変お世話になりました。前田理先生とともに反応経路自動探索, GRRM という「分野」を切り拓き牽引されてきた先生の訃報は残念でなりません。

心より哀悼の意を表します。



大野公一先生を偲んで

前田 理

北海道大学 化学反応創成研究拠点(ICReDD)・拠点長 教授

大野公一先生ご逝去の報に接し、いまだ信じられないという思いが強い。この度、中辻先生より是非にとご依頼いただき、気持ちを整理する意味も込めて、本稿を執筆しようと思う。大野先生との思い出の中で特に鮮明に記憶している出来事が二つある。一つ目は、筆者が学部4年の夏のことである。筆者は、当時所属していた大野先生の研究室にて、直後に控えていた大学院入試の勉強をしていた。東北大学化学科では、学部3年の10月に研究室配属が行われる。筆者の研究テーマは、 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ 原子と分子との衝突過程における、 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ —分子間相互作用ポテンシャルエネルギー曲面 (PES) の研究であり、3年生の年度末には日本化学会春期年会にて発表もさせていただいていた。 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ と分子の間の PES は分子の多数の励起状態に埋もれており、そのような高励起状態の量子化学計算は、現代の量子化学計算法とコンピュータを用いたとしても容易ではない。そこで、 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ を、価電子の配置が同一の $\text{Li}(2^2\text{S})$ で代



前田 理 先生

用し、 $\text{Li}(2^2\text{S})$ —分子間 PES を用いて $\text{He}^*(2^3\text{S})$ 原子と分子との衝突過程を議論する、というのが大野研の伝統的なやり方であった。筆者に与えられた課題は、 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ —分子間 PES (ここでは原子座標 $\mathbf{R}$ を用いて $F_{\text{He}^*}(\mathbf{R})$ と表す) を、 $\text{Li}(2^2\text{S})$ —分子間 PES (ここでは $F_{\text{Li}}(\mathbf{R})$ と表す) に補正項 (補正項のパラメータ $\mathbf{P}$ を用いて $D(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ とする) を追加した $F_{\text{He}^*}(\mathbf{R}) = F_{\text{Li}}(\mathbf{R}) + D(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ とし、 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ と分子との衝突実験結果を参照しながら回帰によって正確な $F_{\text{He}^*}(\mathbf{R})$ を決定する、というものであった。 $F_{\text{Li}}(\mathbf{R})$ は量子化学計算によって容易に得ることができるので、 $D(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ をどう決定するかが課題である。平たく言うと、記述子を上手に選んで、実験値を教師データに回帰をする、という課題である。筆者は、ルジャンドル展開で $D(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ を表現し、実験結果と $F_{\text{Li}}(\mathbf{R}) + D(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ に基づく MD シミュレーション結果の残差二乗和を最小にするよう展開係数を最適化する非線形回帰のコードを作成、いくつかの分子について、実験結果を再現する $D(\mathbf{P})$ を決定することに成功していた。しかしながら、このやり方で得られる展開係数に物理的な意味はなく、単に実験結果を再現する PES が得られた、というだけの成果に終わっていた。

筆者が院試勉強をしていると、大野先生がとてもうれしそうな様子で話しかけてきた。出張で移動中の新幹線の車内で画期的なアイデアを思いついたのだという。大野研のゼミ室に呼び出され、1対1でそのアイデアの説明を受けた。そのときの大野先生の様子は研究者としての喜びに溢れていて、筆者の心に今でも鮮明に残っている。大野先生のアイデアは、 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ の2s軌道と分子の価電子帯の複数の分子軌道との重なり積分で $D(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ を展開してはどうか、という内容であった。つまり、3Dの分子軌道の形状を記述子とする回帰を

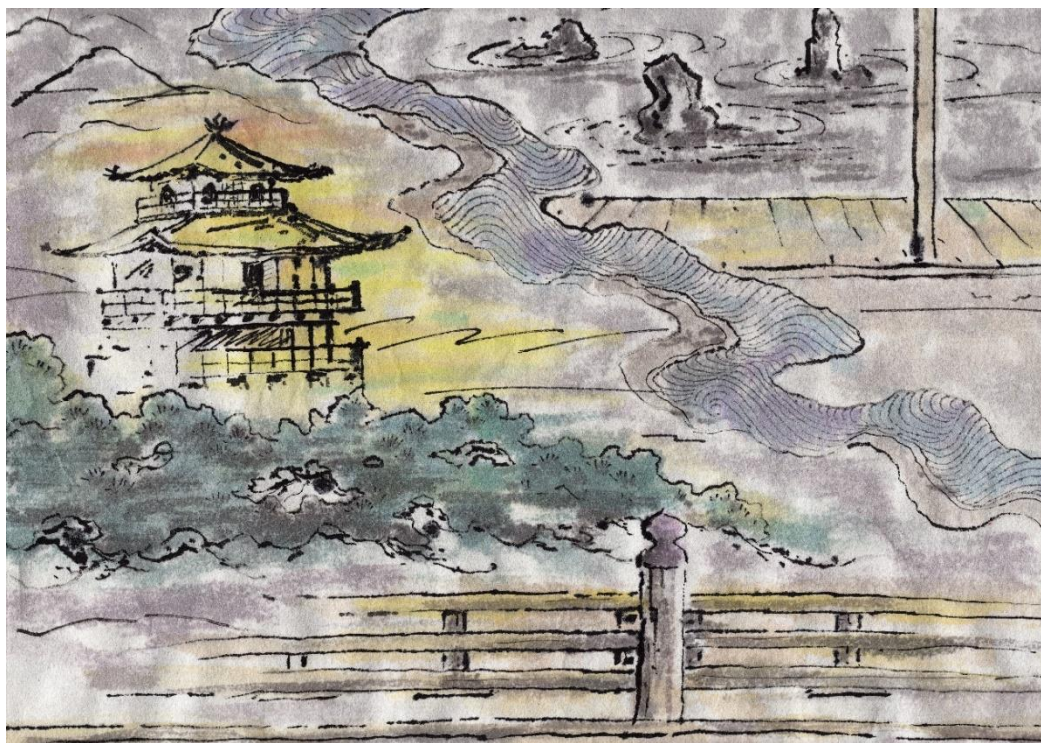
提案された。院試も終わり、そのときにご提案いただいた重なり積分展開法のコードを作成し、窒素分子や一酸化炭素分子といった小分子に対して適用を進めたところ、大変うまくいった。実験結果を再現する $D(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ が得られたばかりか、重なり積分展開のパラメータが、 $\text{He}^*(2^3\text{S})$ の 2s 軌道のエネルギー準位と $\text{Li}(2^2\text{S})$ の 2s 軌道のエネルギー準位の相違に由来する相手分子との軌道間相互作用の大きさの変化によってばっちり説明できたのである。つまり、記述子をルジャンドル関数から分子軌道に変更することで、解釈可能なモデルを構築することができたというわけである。この成功は、筆者にとって大きな自信となった。また、そのきっかけとなった学部 4 年の夏の出来事は、アイデアを練ることの楽しさを筆者に教えてくれた。

二つ目は、筆者が修士 1 年の春から秋にかけての輪読会である。修士に上がった直後、大野先生に呼び出され、明日から読みたい本があるので一緒に読まないかと誘われた。上記の研究は、一度コードが完成してしまうと、その後はひたすらコンピュータに MD シミュレーションを伴うパラメータ回帰をさせるのみであり、筆者は暇を持て余していた。大野先生は、それを不憫に思ったとおっしゃっていた。後で聞いたのだが、その年は科研費が当たらなかつた大野先生にも時間があり、新しいネタ探しをと考えられたのだそうだ。月曜から土曜まで毎朝 8 時からだというので参加したくはなかったが、教授主催の輪読会を断れるわけもなく、参加するとお返事した。翌朝、筆者は他にも参加者がいるものと思っていたのだが、筆者と大野先生の 1 対 1 の輪読会であることが判明した。大野先生が「先輩にも声をかけた」というようなことをおっしゃっていたので、筆者は先輩方が断ったのかと思っていたのだが、後に先輩に伺ったところ、筆者のみに声をかけてくれていたそうである。その日から秋ごろまで、Frank Jensen 著の Introduction to Computational Chemistry という有名な教科書の第一版を二人で毎朝輪読する日々が続いた。筆者の英文読解力と大野先生のそれとの間には大きな乖離があったが、紹介されていた計算法それぞれに対して大野先生が、改善や更なる革新があり得ないか議論してくれたため、分からないなりに全体像を把握することができた。

その中で、構造探索に関する章にあった超球面上のエネルギー極小点を追跡して遷移状態を見つける手法に関する議論を良く覚えている。大野先生曰く、超球面上の極小点は安定平衡点付近ではソフトテストモード上に存在するものであり、そんなものを追跡しても遷移状態に辿り着くはずはない、というのである。そこから議論は弾み、各振動モードの振動数を用いて座標をスケールし、モード毎の振動数の違いを消してしまえば、超球面上のエネルギー極小点として遷移状態への道筋が現れるはずであると、大野先生は提案された。一方、安定平衡点から遷移状態へと向かう道筋は多数あるので、スケールした超球面上には複数のエネルギー極小点があるはずで、それら全てを見つけ出すアルゴリズムが必要であろう、というところで議論は終了した。そのときの大野先生も、上記の重なり積分展開法のときと同様、とてもうれしそうであったのをよく覚えている。数か月後、このときの議論をもとに超球面上の全てのエネルギー極小点を見つけ出すアルゴリズムに思い至り、筆者は反応経路自動探索の世界へと足を踏み入れていくことになったわけである。



上記二つの出来事がなければ、筆者の研究者人生は始まっていなかったであろう。筆者が大野研に入ったのは、ジャンケンで研究室配属が決まっていた当時の東北大学化学科での数合わせの偶然であった。また、当時の筆者はアカデミア志望ではなく、修士で就職するつもりであった。そんな筆者に大野先生が目をかけ、重要なアイデアを授け、さらには、アイデアを創出する過程や楽しさまで見せてくださったことに、この場を借りて深く御礼申し上げたい。近年は、量子化学探索研究所の運営と GRRM プログラムの普及にご尽力され、お亡くなりになるつい二週間前にも一緒にチュートリアルを開催したばかりであったので、まだまだ現役でご活躍されるものと思っていた。あまりに突然のご逝去に、筆者含め、多くの関係者が愕然としているところである。大野先生の生前のご厚意に心より感謝申し上げるとともに、ご冥福をお祈りしたい。最後になるが、この度、大野先生との思い出をまとめる機会をいただいた中辻先生に感謝を申し上げ、本稿を締めくくりたい。



量子化学探索研究所・大野公一先生のこと

中辻 博

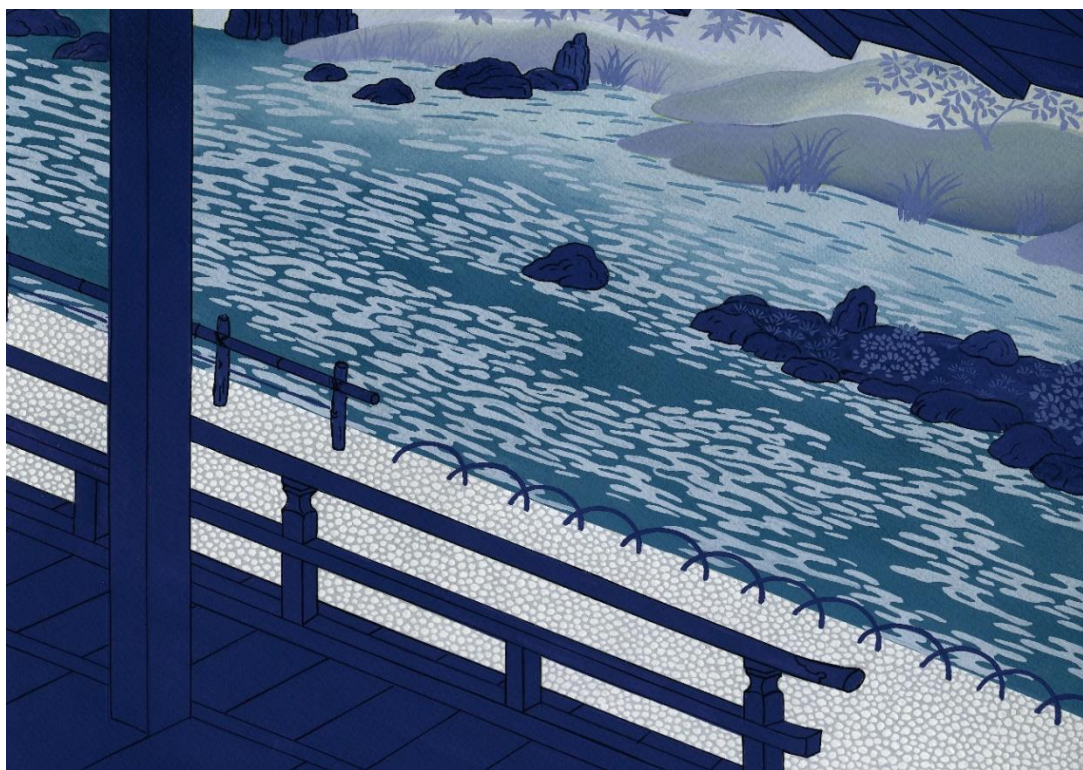
量子化学研究協会研究所

11月の初め頃、お手元の「量子の世界」第16号の編集に関連する仕事を行っていたところ、大野公一先生が10月31日に急逝されたという知らせを、大野先生に近い山門英雄先生から頂いてびっくりした。それを聞いて直ちに10月31日深夜に入るはずのIQCE-Newsを探したが見当たらない。どうされたのだろうと、とてもショックで、山門先生に再度お尋ねしたところ、親族の方にとっても全く不意の出来事であったとのこと伺い、事実と受け止めなければならないことを悟った。大野先生は理論化学などの共通の学問をとoshieの古くからの友人で、彼の東大時代から存じ上げていた。その後仙台に移られてからも、討論会なども通じて良くお会いした。また、私の研究室を卒業して東北大学に移り彼の研究室のメンバーに加わった岸本直樹さんも通じて色々交流があり、招かれて講演をし、夜通し話し合ったこともある。その後あるとき東北大学の彼の研究室に立ち寄ったところ、セミナーか何かの真っ最中で、分厚い洋書を見せて、この本をこの君と輪読しているのだと言って紹介してくれた初々しい学生さんが、前田理さんにお会いした最初であった。今から思うと、前田さんがこの「量子の世界」16号にお寄せくださった「大野公一先生を偲んで」と題する文の中で触れておられる「Introduction to Computational Chemistry」という本がそれであったことはほぼ間違いなさそうだ。その後二人だけになった時、前田さんの事を随分とほめておられたことも思い出す。そうしたお二人の活動が後に、大野 - 前田のGRRM理論に発展したことは、皆ぞ存じの通り。東北大学を定年退職後、放送大学のお仕事もされていたと思うが、それもあって、京都の私たちの研究所を訪ねてくれたことがあった。その折、一緒に京都の幾つかの有名なところをご案内したが、確かその頃、NPO法人を自分も立ち上げようと思う、とお話しになっておられ、立ち上げに際しての必要なことなど話題になったように記憶している。「立ち上げたよ」という知らせを頂き、またその後お祝いの文章を寄せた記憶もある。このようにNPOの道においても同道の頼もしい友であった。彼の量子化学探索研究所IQCE (Institute for Quantum Chemical Exploration) の活動は活発で、IQCE-Newsの発行は毎月、大変だろうな、大野先生にしてできること、と尊敬してきた。また、研究面でも、GRRMを前田さん、諸熊先生などとともに大きく発展されたのも、皆さんぞ存じの通り。IQCE-News105を2022年9月30日(金) 21:54に大野さんから直々に受け取っているが、そこにIQCE研究所は、来年(2023年)2月に10周年を迎えますと書かれている。また、GRRM情報として、GRRM商用版、GRRMの利用申請等々、また、IQCE事業予定・報告など、その活動の大きな広がりが見えられている。大野先生におかれては、もっともっと活動され、さらに大きな大きな花を咲かせてくれるはずであったのに、突然の終わりを迎えられ、



ご本人が誰にもまして残念でおられるに違いないと思う。また愛する夫・父を急に失われたご家族の悲しみはいくばくか計り知れない、心から哀悼の意をささげたい。先生は東北の山野で多くの花や木々、その実りをめでておられた。先生から送られた IQCE-News105 の中から、先生ご自身が載せられた草花のお写真をここに転載させていただいて、先生に捧げたいと思う。

(量子化学研究協会研究所よりの哀悼の意もこめて)



— ご報告 —

「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～」

開催日時: 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

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

日時: 2022 年 6 月 5 日 (日) 17:00～19:00 頃

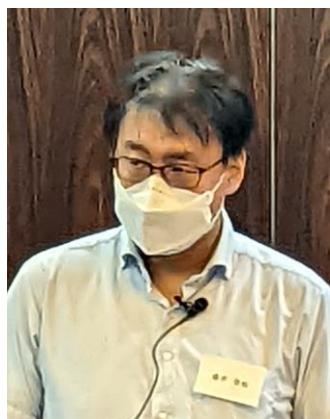
場所: キャンパスプラザ京都(4 階) 第 4 講義室

コロナ禍のため 2 年のブランクを経て、「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～」が、2022 年 6 月 5 日(日)に以下のプログラムで、対面形式で開催されました。ちょうどその頃は感染拡大も下火になり、多くの皆様にご参加頂くことができました。厚く御礼申し上げます。

対面形式でのシンポジウムは、オンライン形式の講演とは異なり、講演者の先生方の白熱した生のお話を聞くことができ、とても良かったと思います。参加者と共に活発な議論が展開されました。懇親会は、シンポジウムと同じキャンパスプラザ内で開催しました。お酒は抜きでしたが、参加者全員にご近況などお話し頂き、とても和やかで楽しい会となりました。



講演して頂いた先生方



藤井 啓祐 先生



江藤 正義 先生



中辻 博 先生

シンポジウムの様子



懇親会の様子



HPC システムズ(株)
代表取締役 小野 鉄平 様より
乾杯の御挨拶



その他の写真はこちら

http://www.qcri.or.jp/imgs/qcrisymposium/2022_0605_symposium/photo.html

「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) (エクスカーション)
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。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

(口座番号入力後に表示される口座名義(カナ)が正しいことをご確認ください。)

口座名義： 特定非営利活動法人 量子化学研究協会

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

預金： 普通預金

口座番号： 1453553

(口座番号入力後に表示される口座名義(カナ)が正しいことをご確認ください。)

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



郵便振替での振込の方法

ゆうちょ銀行(郵便局)に設置されている青色の「払込取扱票」にご記入頂き、ゆうちょ銀行 ATM または窓口にて払込をお願いいたします(恐縮ですが、手数料はご負担下さい)。

ご記入例: 黒文字の所(口座番号, 加入者名)はそのまま書き写し、さらに赤文字の箇所(寄附金額, ご住所, お名前, 通信欄に e-mail(お持ちの方))をご記入ください。

払込取扱票									
口座記号・番号はお間違えのないよう記入してください。									
口座記号		口座番号(右詰めで記入)				金額			
00		009106				332225			
加入者名 特定非営利活動法人 量子化学研究協会						料 金		備考	
通信欄 E-mailアドレスをお持ちの方はここにお書きください。									
ご住所とお名前を必ずご記入ください。						様			
(ご連絡先電話番号)						様			
ご依頼人欄に、おところ・おなまえをご記入ください。 これより下部には何も記入しないでください。									

振替払込請求書兼受領証									
口座記号番号									
009106									
加入者名									
特定非営利活動法人 量子化学研究協会									
金額									
左と同じ金額をご記入ください。									
おなまえ									
お名前をご記入ください。									
様									
(消費税込) 日 附 印									
料 金									
円									
備 考									

この受領証は、大切に保管してください。

銀行でのお振込

銀行からは、窓口または ATM(現金でのお振込も可能)、インターネットバンキングでお振込頂けます。口座番号を入力すると振込先が自動的に表示されます。依頼人(ご芳名)、振込先、寄附金額が正しいことをご確認ください。

毎年の継続的なご寄附: 自動継続送金(口座振替)

毎年継続してご寄附をお申し出頂ける方には、自動継続送金(口座振替)によって毎年の振込の手間を省くことができます。この方法をご希望の方は、次の所までご連絡ください。

中辻 博 e-mail address, h.nakatsuji@qcri.or.jp

または

〒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



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。

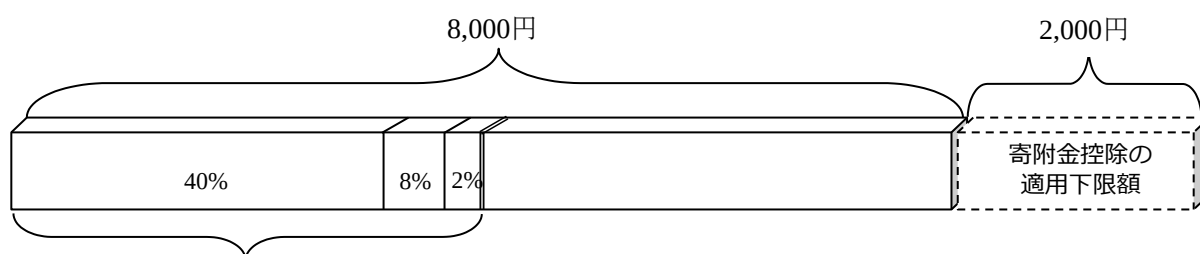
（参考）京都市民の方が認定NPO法人に 10,000 円寄附した場合の例

（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。）

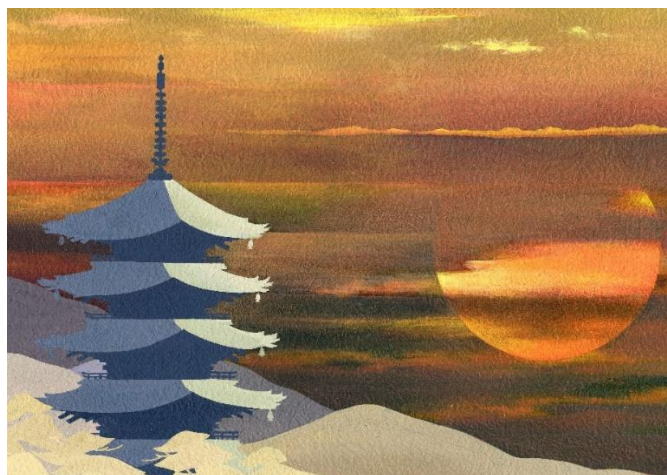
（京都市ホームページより転載：

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.16, 2022 年(令和 4 年) 冬号

2022 年 12 月 23 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。

