



量子の世界

No. 17, 2023 年 春号 (2023/5/9 発行)

- 目次 -

	ページ
1. インドにて願う 齊藤 真司 (分子科学研究所)	1
2. 四つの科学研究のパラダイムを通して私が学んだこと 畑中 美穂 (慶應義塾大学)	4
3. 「第 15 回 革新的量子化学シンポジウム」(5/27(土)) のご案内 講演者: (基調講演)波田 雅彦 先生、杉崎 研司 先生、中嶋 浩之 先生	8
4. 「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」開催予定のお知らせ	13
5. 量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い	16
6. 「量子の世界」へご寄稿のお願い	19

インドにて願う

齊藤 真司
分子科学研究所

3 月初めから 2 週間ほど、インドの IIT Kanpur に客員教員として滞在している。インドには既に 15 回ほど来ており、インドでの生活の心配はない。しかし、家族や研究所のことを考え、今回の訪問には腰が引けていた。実は、気が進まない別の理由があった。数年前から取り組んでいる研究に対する形式的なモデル設定はできているものの、分子レベルでの見通しの良い解析に辿りつけず、そもそも自分の問題設定がおかしいのか、と悩むことも一度や二度ではなかった。ビザに必要な写真を撮るときですら、全く気が進まなかった。しかし、幸いにも、正月一日に一条の光が差し込みはじめ、ようやくカンプールに来ることに踏ん切りがついた。



齊藤 真司 先生



今回、まず、中部空港から羽田、羽田からデリーに飛んだ。「しまった！」羽田を出発し程なくして、コンセントの変換アダプターを持ってくるのを忘れたことに気付いた。2 年半ほど前に病気をし、そのための常用薬を忘れないように何度も確認したが、アダプターのごとはすっかり頭から抜け落ちていた。約 10 時間のフライトを有意義に使うつもりだったが、映画鑑賞、プレゼン準備に全く集中できなかった。デリー到着後、空港やホテル回りでアダプターを探し回り、翌朝、ようやくラクナウに向かうデリー空港の国内線ターミナル内の雑貨屋で見つけた時にはなんと嬉しかったことか。気分も盛り返し、用意してもらっていた車でラクナウの空港から研究所に向かった。インドに来たことのある人はご存知のように、インドのドライバーの車幅間隔はなかなかのもので、いつもスリリングなドライブを楽しめる。もちろん、全てのドライバーが常にスリリングな運転に成功している保証はない。ドアミラーの無い車もたまに見受けられる。

さて、IIT Kanpur はキャンパスが広い。約 4.3 平方キロと北大の札幌キャンパスの 2.5 倍もある。また、キャンパス内には孔雀を始めとする様々な鳥も多く、「Birds of IIT Kanpur」という本まで出ている。また、とある夜にキャンパス内を車で送ってもらっていた時に、とても大きな牛らしき野生動物が悠然と草むらから出てきて怖い思いをした。さらに、数年前には、キャンパスに豹が迷い込んで大騒ぎになったとも聞く。これらは、分子研では、そして、日本の殆どの大学でも体験できないことである。

到着翌日から、化学科などの実験・理論の教員達と駄弁り、研究の話をし、引き籠っていた時にはない楽しい時間を過ごしている。また、ホスト教員の学生居室に、いきなり出向く。僕の突撃訪問に学生達はいつも驚き、インドらしく、みんな丁寧に起立して僕を歓迎してくれる。そして、いつも学生の誰かが研究に関する質問をしてくる。しかし、それもまた嬉しい。

先日、化学科でセミナーを行った。セミナー後は学科全体での夕食会。コロナに加え、冒頭に記した悩みで引き籠り生活を続けていたので、久しぶりに多くの人との楽しいひとときであった。セミナーを行った翌日、ある教授の office に招かれ、セミナー後の質疑応答の議論を続けた。一通り議論が終わった後、「なぜ、こんなに面白い内容を〇〇〇に投稿しなかったのか？」と聞かれた。「〇〇〇の雑誌が好きだから」と即答したが、意表を突く質問であった。今回のインド訪問の少し前に分子研に会いに来てくれた外国人若手研究者も、「△△△の雑誌に投稿するのに、□□□の解析が必要」と投稿先の雑誌を非常に気にしていた。たしかに、一人の研究者が目を通せる論文はごく僅かであるためどの雑誌に出版するかは重要であり、僕のような投稿姿勢は昨今の評価基準からずれていることは承知している。しかし、過度に右往左往させらぬよう、そして、「はだかの王様」の無邪気な子どものように自分で判断・評価することも忘れたくない。

セミナーの数日後、実験研究者達とカンパール市内に夕食に出かけた。アルコールも入り、「若い研究者は育ってる？」との話になった。羨ましいことに、インドではまだまだ（物理化学系を含め）博士課程の学生が増えているらしい。しかし、研究機関の新設ラッシュも一段落し、アカデミックで職を得るのは相当難しいようでもある。博士課程の学生数という点では日本とだいぶ状況が異なるが、若手が職を得る困難、そして、短期間で成果を出にくい基礎科学分野の若い研究者の抱える難境は、現在の日印そして万国に共通のようだ。

夕食から宿泊先に戻る車の中、彼の質問に対して、これまでの自分を振り返った。約 25 年前、凝縮系分光研究の世界では多次元非線形分光という新しい研究分野が始まるころ



であった。分光理論・実験の大御所とともに、多くの若者がそれぞれの個性を発揮し、躍動感に溢れていた。そして、僕自身においても、その時に獲得した知的体力は現在の研究の礎として生きており、僕なりの個人主義に大きな影響を与えてくれた。さらに、その時の友人・知人との関係は現在でも続いており、幸せな研究者人生の一コマ・めぐり合わせだと感謝する。

基礎科学は生き物と同じである。連綿と続く生き物は多様な進化の所産である。しかし、進化がいつ起こっているのか当事者は知る由もなく、ただ後になって進化していたことに気づくだけである。そして、進化の過程は生物にとって決して容易なものではないであろう。しかし、進化後の生物は、何らかの点で一段高いレベルに到達している。我々を含め多くの身近な例に見られるように、進化のレベルが高くなると、採餌し独り立ちできるまでの時間も長くなり、その間、親や集団に見守られる必要がある。

古代ギリシアに端を発する科学の発展にも、世代を越えた思想・発想の継承・発展と進化が不可欠である。生物進化の例に見られるように、次の世代が成長し新たな問題を乗り越えその次の世代へと続いていくためには、個々人が自分の感性を磨き、他者に奪われることのない知的体力を養い鍛えることがまず必要である。それに加えて、我々が前の世代の人達に守り育ててもらったように、若い人達に対し、近視眼的・浅慮な評価制度や本末転倒と思われる競争的資金獲得競争への過度な暴露を避けつつ、だからこそ可能となる自立した価値観に基づく研究に没頭でき、健全にもがくことのできる環境を維持することも必要である。戦中・戦後から続く日本における基礎科学の輝きは、これらのことが満たされていたこともあるのではなからうか。夕食での質問に笑って答えられるよう、今後もこのような環境が日本に受け継がれていってほしいと願う。

「(前略) しょせん学問はただ年月長く、うまずおこたらずに、はげみつとめることが肝要である。まなび方はいかようにしてもよいだろう。(中略) それだから、オのとぼしいこと、まなぶことの晩いこと、暇のないことなんぞによって、こころくじけて、やめてはならぬ。なににしても、つとめさえすれば事はできるとおもってよい。すべてこころのくじけるのは学問では大いにきらいなことである」(本居宣長、責任編集 石川淳、中央公論社の中の「宇比山踏」から一部抜粋)



Chandra 教授(左)と Sen 教授(右)とのホーリーフェスティバルでの一コマ。

町に出歩くと、色のついた粉や水をかけられるので、キャンパス外には出ない方が良いと忠告されるほどのインド全土での盛大なお祭り。

四つの科学研究のパラダイムを通して私が学んだこと

畑中 美穂

慶應義塾大学

科学研究は、ジム・グレイ氏が提唱した第1～4のパラダイムを経て発展してきました。

第1のパラダイムは実験と観測から経験的な知識を得るという研究方法です。第2のパラダイムは理論科学で、科学現象の一般化・モデル化する式を構築することで知を得ます。第3のパラダイムは計算科学・コンピュータシミュレーション、第4のパラダイムはデータ駆動型の科学で、近年大流行の機械学習を用いる研究がこれにあてはまります。私の研究者としてのキャリアパス（といってもまだ20年にも満たないのですが…）を振り返って



畑中 美穂 先生

みると、第1～4のパラダイムに沿って、少しずつ研究分野を変更・拡張してきたことに気がきました。中辻先生から『量子の世界』への執筆の機会をいただきましたので、これから新しいことに挑戦する若手研究者の皆様の参考になればと思い、筆をとらせていただきました。

第一パラダイム：実験系研究室の研究生生活

私が最初に所属した研究室は、有機化学の研究室（慶應義塾大学山田徹研究室）でした。第一パラダイムとの出会いです。日々、楽しく実験していたのですが、高収率・高選択性を達成するための触媒や反応条件を見つけることが自分の仕事なのだと頭では分かっているものの、心はいつも「何故このような現象が起きたのか？」という理由を考えることに向いていました。実験を繰り返しても、なかなか現象の理解が深まらない日々を過ごしていたところ、突然、第三のパラダイムとの出会いがありました。同じ研究室に所属していた岩倉いずみ先輩（現神奈川大学工学部教授）が、私が研究していた触媒反応の遷移状態(TS)の計算結果を見せてくれたのです。この触媒反応は、塩素系の溶媒でしか生成物の選択性が発現しないという問題があったのですが、TS構造を見て、はじめて溶媒分子が配位子として機能していることが示唆されました。そこで、配位溶媒の代わりになりそうな添加剤を加えた実験を行ったところ、無事に塩素フリーの溶媒中でも高い生成物選択性を達成することができました。この経験がきっかけで、自分の興味がメカニズムを明らかにすることに向かっていることを再認識し、修士課程から理論化学の研究室（藪下聡先生の研究室）に進みました。

理論化学の世界に入って、18年が経ちましたが、今でも私の研究者としての根っこを育ててくれたのは、山田徹先生だと思っています。朝9時半から終電に乗れるぎりぎりの時間まで実験する生活を楽しく続けられたことは、大きな自信になりました。（体力もつきました。）また、女性の博士の先輩が身近にいたことも、とても恵まれていた点だと思います。女性の博士の先輩が複数いる環境にいた私にとって、博士課程に進学することは、「特別変わった」選択肢ではなくなっていました。



藪下研究室と第二パラダイム

大学院からお世話になることになった藪下研は、同じ大学・同じ学科の研究室だったため、藪下先生はもちろん、先輩たちのこともよく知っている状態でしたが、実験系研究室とは全く異なる文化圏にきたようで、毎日が新鮮でした。理論系の研究室では当たり前である「1人1テーマ制」は、実験系の研究室では大変珍しいことなので、自分だけのテーマを持てるのが楽しみで仕方ありませんでした。藪下研では、毎年4月に、先生から新メンバーの研究テーマリストが発表されます。私が研究室に入った年の発表の場で配られたテーマリストの中で、一つだけ詳細説明のないものがありました。それが「ユニタリー群の方法を用いる遷移密度行列計算プログラムの開発」でした。響きはカッコいいけれど、内容は何も分らなかったもので、ひとまず藪下先生に詳細を聞いてみたところ、「このテーマに興味がある」と言った学生はいなかったため、是非これを畑中さんのテーマにしましょう」ということになりました。計算化学（第三パラダイム）に興味があって藪下研にやってきたはずでしたが、理論化学（第二パラダイム）色の強い世界に入っていくことになりました。

研究テーマが決まったものの、すぐにプログラムを書き始められる状態ではなかったので、勉強の日々が始まりました。この頃には、博士課程に進学する心づもりでいたので、そんなに焦りを感じることもなく、勉強に励んでいたと思います。右も左も分かっていない私は焦っていませんでしたが、藪下先生は修士論文を書けるような「何か」をさせなければ…と焦っていらっしゃったのかもしれない。修士に入って1年が経とうとした頃、藪下先生から衝撃のお話をいただきます。5月の理論化学討論会で発表するために、スピン軌道相互作用に起因する遷移双極子モーメントの補正項を計算するプログラムを作成しましょうというお話でした。（ユニタリー群はどこへ？）かくして、理論化学討論会の発表申し込み直前に新たなテーマが与えられ、電子状態計算パッケージ COLUMBUS に補正項計算プログラムを実装する日々が始まりました。ちなみに、この時まで COLUMBUS を使った電子状態計算は一度も経験がなかったと思います。もちろん要旨の締め切りまでのプログラムができて…なんてことはありません。要旨には、作成予定のプログラムの説明のみを書き、学会の直前まで黙々とプログラムのデバックに勤しんでいました。学会2日前に、藪下先生から、どうしても間に合わない場合は発表取り下げという手段もあるとお話をいただきました。が、当時の私は何の疑問もなく、「あと2日あるので、2日間頑張ります」と答えたのでした。無知は無敵とはこのことですね。そして、2日でデバックが完了する…ことはなかったため、プログラムの内容だけを発表しましたつまり、結果が何もない発表をしました。PI になった今、当時の藪下先生に大変なご心労をおかけしていたことが分かります。何も結果が出ていない状態の学生が、発表を取り下げる気がないと言い出した時に、腹をくくれるだろうか考えると、正直難しいです。自分の研究室の学生が「だめな発表」をする姿を研究室外の方に見られることを恥ずかしく思う気持ちと、そのような経験も学生の血肉になる（成長の糧になる？）から、どんと構えるべきだという気持ちがせめぎ合っていて、前者の方がちょっと勝ってしまっています。まだ、藪下先生ほど肝が据わっていないかと反省する日々です。

その後も、藪下先生の元で、上記の補正項の研究をまとめ、無事にユニタリー群の方法を用いるプログラムも完成し、後に私のライフワークとなるランタノイド化合物への応用計算にも取り組み…と楽しい博士課程生活を送っていましたが、再び藪下先生から衝撃のお言葉が飛び出す日がやってきます。博士課程修了後の進路について相談しているときでし



た。「今の研究と似たテーマを続けていても日本に就職先はないですよ」と。代わりに藪下先生にすすめられたのが、京都大学福井謙一記念研究センターの諸熊奎治先生の研究室でした。当時の私は、Gaussian を使うのは学部三年生の学生実験以来、構造最適化計算の経験は皆無という状況で、諸熊研でやっていけるのか甚だ疑問でした。が、ここでも無敵の無知ぶりを発揮し、諸熊研に行くことを決意しました。ちなみに、これには後日談があります。私は長年、藪下先生の慧眼に従って諸熊研に行き、本当に良かったと思っていたのですが、薦めてくださった藪下先生は、私が行くと言い出すとは予想していなかったため、大変驚かれたそうです。藪下先生には最後までご心配をおかけ致しました。

諸熊研究室と第三パラダイム

諸熊研で最初に取り組んだのが、酵素反応の反応機構の解析でした。ようやく、計算化学（第三パラダイム）の研究に取り組むことになったものの、電子状態計算以外のすべての面において初心者だったため、なかなか研究が進まず、他の研究グループに同じテーマの論文を出されてしまいました。これを機に、研究テーマを考え直すことになり、自分がやりたいことは何かという問いに真剣に向き合うようになりました。当時、ランタノイドの発光材料を理論的に設計できるようにしたいと強く思っていたものの、それを可能にする計算方法がなかったため、ひとまずランタノイド錯体の配位構造に対する知見を貯めるために、ランタノイド触媒反応の研究に着手することにしました。最初のテーマではつまづいてしまったものの、ここからは幸運が続きました。一つ目の幸運は、反応経路自動探索（GRRM）プログラムが使える環境にあったために、TSの構造最適化の職人技がない私でも、触媒反応の研究をスムーズに進められるようになったことです。二つ目は、研究室内のテーマ組み分けがかなり柔軟だった—研究を進める上で、他のメンバーを巻き込んだ方がはやく進みそうな場合は、迷わずメンバーを追加する—方針だったことです。三つ目は、諸熊研の中に詳しい人がいなければ、他の研究室に学びに行くことが奨励されていたことです。研究を一人で進めなければいけないと思っていた私にとって、これらは目から鱗でした。研究者としての諸熊先生は、ブルドーザーのような方で、目指す研究の過程に壁があると、壁を回避してまわり道をするのではなく、壁を切り崩しながら直進するようなスタイルを貫かれています。諸熊研で過ごした四年間で、自分が持っている技術の範囲内でできそうな研究をするのではなく、本当にやりたいことに向かって、必要な技術をどこからでも取り入れようと思えるようになりました。未経験の分野でも四年間頑張れば何とかなったという経験と、足りない技術を貪欲に取り入れる諸熊先生の姿を間近で見ていた経験が、その後の私の研究人生において、新しいことに挑戦することに対する障壁を大きく下げてくれたと思います。

第四パラダイム：マテリアルズ・インフォマティクスとの出会い

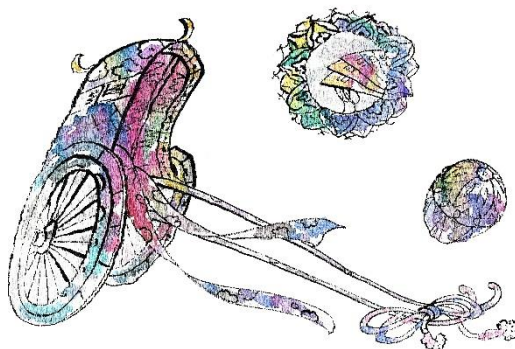
諸熊研でポスドクとして4年間を過ごした後、近畿大学理工学部にて助教として着任しました。近畿大学での直属の上司は、分光実験がご専門の若林知成先生でした。若林研では、研究については自由にさせていただきつつも、実験や大学の業務について色々勉強させていただき、楽しい日々を送っていました。アットホームな学科で、気軽に実験の相談ができる環境だったため、学部一年生の研究体験型授業にかこつけて、大量にランタノイド塩化物を購入し、発光錯体を合成したりもしていました。とても居心地の良い大学だったのですが、予想外に早く近畿大学を離れる日が来ました。アメリカの Materials Genome Initiative を



発端にしたデータ駆動型科学の潮流がやってきたのを機に、さきがけ研究員に採用していただき、さらに、奈良先端科学技術大学院大学(NAIST)の特任准教授として異動することになりました。新しいことに挑戦したい精神が旺盛だったため、すぐにデータ駆動型の研究に取り掛かりました。しかし、同じ頃、ご病気の諸熊先生からプロジェクトを引き継いだこともあり、目の前のことをこなしていくだけで精一杯の状態になっていきました。せっかく NAIST で研究室主催者 (PI) にしていただいたのに、研究室の学生たちには、夢を追う研究者の姿を見せるどころか、何かに追われている姿ばかり見せてしまい、本当に申し訳なかったと今でも思っています。NAIST に着任してから、藪下先生の後任として慶應に戻ってきてからの2~3年間は、必死だったという以外の思い出がありません。(この期間、こなしかねなかったお仕事もたくさんあります。ご迷惑をおかけした皆様、本当に申し訳ございません。)

最近になって、ようやく心の余裕が生まれてきて、再び、研究に対する夢を思い描けるようになりました。「こんな機能を持つランタノイド材料がほしいです」と呼びかけることで、構造式や合成方法を教えてくれるランタノイド GPT を作りたい! 「ランタノイドを上手に使って呼吸をしたり、光合成をしたりする生命を作りたい」と伝えてたら、その遺伝子情報を答えてくれたらもっと面白い! ランタノイドは配位数が多いので、現存の文字列表現 (SMILES) で表現しきれないし、データも多くありません。しかも、理論計算でできることも限られています。つまり、目の前の壁はとてつもなく高いのですが、今の私の心の中は、わくわくで一杯です。

第1~4のパラダイムに相当する研究分野を渡り歩いてきて気づいたことは、新しいことに挑戦する時に一番大事なのは、やれそうかどうかを考えるのではなく、やりたいかどうかを考えることだということです。新しい研究に挑戦している時期は、インプットに時間を割かざるを得ないため、研究のアウトプットが減ってしまいます。そのリスクにばかり目が向いている期間は、自分がやりたいことではなく、自分にやれそうな小さくまとまった研究テーマを設定しがちです。期限付き・テニユアトラックのポジションの間は、アウトプットを増やすことに全力を傾けるべきなのでしょうが、逆にテニユアのポジションになってからは、研究以外の業務に追われるために、なかなか新しいことに取り組むのが難しいというジレンマがあります。「〇〇になったら新しいことを始めよう」と考えていたら、いつまでたっても始められないのです。そう考えると、結果が出ていなくても発表申し込みをするくらいの無鉄砲さは、新しいことに挑戦するために必要な素質の一つなのかもしれません。いつまでも無知では困りものですが、無敵だったころの気持ちを忘れずに、これからも新しいことに挑戦しつづけたと思います。



「第 15 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: 2023 年 5 月 27 日 (土) 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

「革新的量子化学シンポジウム」は、毎年 5 月～6 月頃に量子化学研究協会研究所が主催して行う公開シンポジウムです。その目的は、「**量子的自然の叡智と美**」とその奥の深さを、**参加者一同感得し、楽しむこと**にあります。量子化学の研究者や全くの素人などが集まり、互いに交流して楽しむ場となるよう、参加者同士の交流の場を重視しています。休憩時間や懇親会などでも、和やかで楽しい、そして活発な会話が展開されています。講師の先生方には、一般向けの分かり易いお話をお願いしております。Science 全般や、理論化学に、興味や好奇心をお持ちの方、是非ご参加ください。

プログラム

13:00 挨拶・司会 中辻 博

13:05～14:05 波田 雅彦 (京都府立大学)

基調講演

「20 年間の相対論的量子化学の建設とその応用」



14:05～14:30 休憩

14:30～15:20 杉崎 研司 (慶應義塾大学)

「精密量子化学計算に向けた

量子アルゴリズム開発の現状」



15:20～15:50 休憩

司会 江原 正博

15:50～16:40 中嶋 浩之 (量子化学研究協会研究所)

「正確な量子化学理論の実践と応用:

化学研究への実用化を目指して」



懇親会

日時: 2023 年 5 月 27 日 (土) 17:00~19:00 頃

場所: アサヒ・ビアレストラン スーパードライルネサンス (京都駅北口東側, セレマビル B1F)

<https://superdryrunesansu.owst.jp/>

参加費: 6,000 円 程度

昨年の懇親会は、お酒を控えてシンポジウムと同じキャンパスプラザ内で開催されましたが、参加者全員にご近況などをお話頂き、とても和やかで楽しい会でした。

今年は、お酒もある中で、参加者の皆さま同士がざっくばらんに交流することのできる楽しい会になればと考えています。シンポジウムと同様、Science 全般や、理論化学に、興味や好奇心をお持ちの方、是非ご参加ください。楽しい時を過ごしましょう。



昨年のシンポジウム



藤井 啓祐 先生



江藤 正義 先生



昨年の懇親会:

皆さん、マスクをしています。
今年はどうでしょうか？

参加申し込みフォーム

e-mail に下のフォームを貼り付け、
office@qcrl.or.jp まで、5 月 25 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:

ご所属:

ご住所:



会場へのアクセス



シンポジウム: キャンパスプラザ京都 (京都駅北、
烏丸口、北西側すぐ、ビックカメラの通りを隔てた北側)

懇親会: アサヒ・ビアレストラン (セレマビル B1F,
京都駅北烏丸口、北東側すぐ)

これまでの革新的量子化学シンポジウム

革新的量子化学シンポジウムは、今回の開催で第 15 回目を迎えます。これまでのシンポジウムを振り返り、下記に講演者と講演タイトルを一覧にしました。これまで様々な分野の多様な講師の方々をお迎えし、講演をお願いしてきました。これらを踏まえ、今後のシンポジウムへの要望、取り扱って欲しいトピック、お迎えして欲しい講師など、ご意見がありましたら、忌憚なく office@qcrl.or.jp までお寄せください。

	開催日	講演者	タイトル
第 1 回	2007/01/27	中辻 博	量子化学研究の魅力
		中尾 武寿	松下電器本社技術部門でのデバイス開発と電子状態解析
		安田 耕二	専用計算機で量子化学を
		高島 一	創薬研究における計算化学
		石村 和也	大規模量子化学計算に向けて - 高速化と並列化 -
第 2 回	2008/05/31	上田 潔	原子間クーロン緩和：希ガス 2 量体を用いた実験的検証
		長谷川 淳也	ヒト網膜の光受容体におけるスペクトル・チューニング
		松崎 洋市	新日本製鐵における量子化学計算の活用
		中嶋 浩之	正確な予言学としての量子化学の確立にむけて - 少数原子・分子系のシュレーディンガー方程式の超精密解
		川上 量生	わたしの起業体験
		中辻 博	革新的量子化学に向けて
第 3 回	2009/05/01	杉山 弘	DNA の構造と機能をあやつるケミカルバイオロジー
		大川 和史	製薬企業におけるコンピューショナルケミストリー
		中井 浩巳	分割統治(DC)電子状態計算法の開発と GAMESS への実装
		安田 耕二	ストリーミングプロセッサによる科学技術計算
		福田 良一	SAC-CI 化学の拡大: 大環状化合物のスペクトルと励起状態の構造緩和
		中辻 博	革新的量子化学の建設
第 4 回	2010/05/01	山口 兆	Broken-Symmetry (BS) 法の発展 -マンガン酸化物クラスターの水分解酸素発生機構-
		井上 隆	III 族窒化物半導体の構造、特性、及び電子デバイス応用
		杉本 学	量子化学を基盤とする計算シミュレーション研究の展開と挑戦的課題
		豊田 和男	零磁場テンソルの量子化学計算・現状と課題
		伊澤 勝	プラズマエッチングにおける表面反応機構と形状制御
		中辻 博	創造的化学理論への挑戦
第 5 回	2011/04/30	中嶋 隆人	量子分子科学と京コンピュータ
		中村 振一郎	産業界の計算科学が更に躍進することを願って
		宮原 友夫	核酸の螺旋構造と吸収・円二色性スペクトル-SAC-CI 法による研究
		志田 忠正	開殻型電子構造をもつ分子の電子スペクトル、ESR の実験データ
		戸木田 祐一	ソニーにおけるバイオエレクトロニクス研究開発
		中辻 博	革新的量子化学の展開



第 6 回	2012/04/28	柳田 祥三	光電変換プロセスと計算化学
		平尾 公彦	「京」コンピュータと計算化学
		小松 紘一	フラーレンの分子手術 --水素およびヘリウムを内包したフラーレンの人工合成
		石村 和也	量子化学計算の高速化と超並列化
		中辻 博	革新的量子化学の展開
第 7 回	2013/04/28	波田 雅彦	相対論的量子化学現象の精密解析
		毛利 文仁	企業で計算科学を有効に活用するにはどうしたらいいか
		斉藤 真司	凝縮系ダイナミクス --超高速ダイナミクスから熱力学的性質の分子起源--
		倉本 圭	量子化学と情報科学の接点：自動車排ガス触媒設計から喘息発作に関する研究まで
		中辻 博	革新的量子化学の展開
第 8 回	2014/05/03	中井 浩巳	量子化学・統計力学・熱力学：新しい凝縮系の自由エネルギー計算
		黒川 悠索	正確な波動関数の満たすべき条件を求めて--2 粒子近接における波動関数の振舞い--
		東大路 卓司	計算化学から材料開発へ（私の経験から）
		中辻 博	革新的量子化学の展開
第 9 回	2015/05/09	廣田 襄	化学史の楽しみ：ライナス・ポーリングをめぐる話題
		江原 正博	金属微粒子触媒の理論化学
		リントゥルオト 正美	蛋白質の構造変化と機能発現に関する理論的研究
		中辻 博	予言的量子化学に向けて
第 10 回	2016/05/14	杉山 弘	DNA を中心としたケミカルバイオロジー
		柳井 毅	密度行列繰り込み群に基づく拡張多状態多参照擬縮重摂動理論
		中嶋 浩之	認定 NPO 法人としての出発
		中辻 博	予言的量子化学の設計
第 11 回	2017/05/13	尾崎 幸洋	量子化学と分子分光学
		奥村 久士	アミロイド線維のシミュレーション--構造サンプリングと非平衡分子動力学--
		畑中 美穂	自動反応経路探索を用いる不斉触媒反応の機構解明と機械学習による解析
		中辻 博	原子・分子のシュレーディンガー解による 予言的量子化学の設計
第 12 回	2018/04/21	奥村 光隆	金ナノクラスター触媒に関する理論計算：ヘテロ接合界面が開く触媒機能
		Nurbosyn U. Zhanpeisov	Structure and Chemical Activity of Selected Metal Oxide Catalysts, Metal-Organic Frameworks and Gold Structures: Theoretical DFT Study
		Jen-Shiang Kenny Yu	Theoretical Study on the Reversible Cleavage/ Formation of the Cr–Cr Quintuple Bond in the Highly Regioselective Alkyne Cyclotrimerization
		中辻 博	General Electronic Structure Theory Covering Exact and Variational Solutions of the Schrödinger Equation

第 13 回	2019/04/20	長谷川 淳也	メタン・カップリングにおける液体金属の触媒作用
		山門 英雄	超球面探索法を用いた結晶構造予測 ～未解決問題への挑戦～
		中辻 博	シュレーディンガー方程式の正確な解法に基づく新しい量子化学の建設
		中嶋 浩之	FC 理論による exact 計算のための Slater 型関数の積分法と計算プログラムパッケージの開発
第 14 回	2022/06/05	藤井 啓祐	量子コンピュータと量子化学計算
		江藤 正義	健康寿命 100 歳を目指す健康管理ー偉大な科学者たちに学ぶー
		中辻 博	正確で有用な予言的量子化学の開発
第 15 回	2023/05/27	波田 雅彦	20 年間の相対論的量子化学の建設とその応用
		杉崎 研司	精密量子化学計算に向けた量子アルゴリズム開発の現状
		中嶋 浩之	正確な量子化学理論の実践と応用: 化学研究への実用化を目指して



これまでのシンポジウムの様子



これまでの懇親会の様子



**量子化学研究協会 10 周年記念会
も兼ねての懇親会:** 諸熊奎治先生
や平尾公彦先生にご挨拶頂き、
ハーブ演奏なども楽しみました。

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

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/>

本国際会議は、チェコの理論化学者 R. Zahradnik 教授、Z. Havlas 教授と日本の中辻が、相互の尊敬と友情を基礎に始めたもので、第 1 回(2005)は日本とチェコの 2 国間で、第 2 回からスロバキアも参加して、2 年に 1 回のペースで開催されてきました。その過程でシンポジウムの理念も次第に成長し、これら 3 国の理論化学者に共通の高いレベルでの科学的つながりと温かい友情がその礎であることが確認されてきました。その理念は、**「Friendship is our principle, Science will follow with us.」、つまり、「人と人との温かい友情が新たなサイエンスの創造と育成をリードする」**に表現されています。

コロナ禍のため延期されていた第 8 回シンポジウムは、2024 年 6 月に気候の良い北海道にて開催予定です。第 5 回(2013 年, 奈良)以来約 10 年ぶりの日本での開催となります。実空間で参加者が集い、チェコ、スロバキアと近隣諸国の著名な研究者と第一線で活躍する若手研究者を招き、Scientific な活発な議論と互いの文化交流を図り、親睦を深め新しい発展の礎を築くことを目指します。

本シンポジウムは、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。ご参加・ご発表をご希望の方は、積極的に jcs8@cat.hokudai.or.jp まで御連絡下さい。

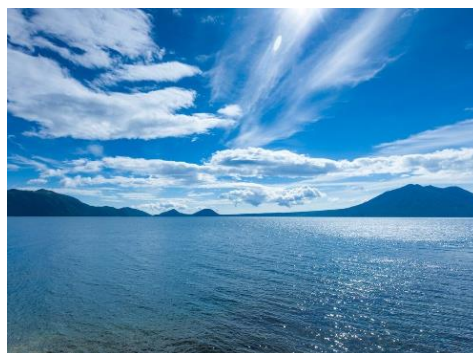
皆様の御来札をお待ちしております。



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



これまでの JCS シンポジウムの様子

第 7 回シンポジウム(2018 年, プラハ(IOCIB チェコ科学アカデミー), チェコ)



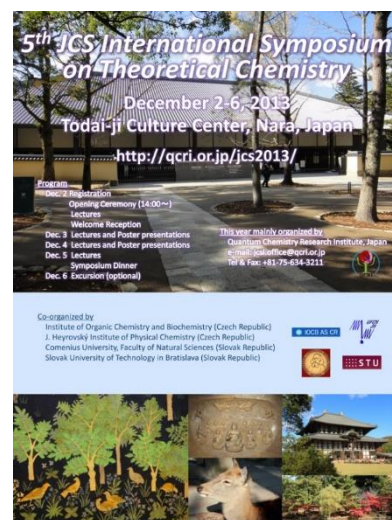
第 6 回シンポジウム(2015 年, ブラティスラヴァ郊外(Smolenice 城), スロバキア)



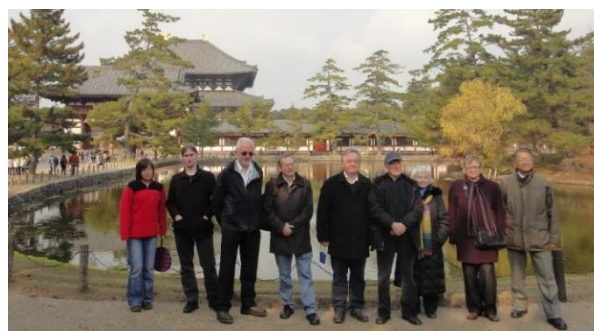
第 5 回シンポジウム(2013 年, 奈良(東大寺), 日本)



200 名を超える参加者



懇親会



エクスカーシオン

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



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。

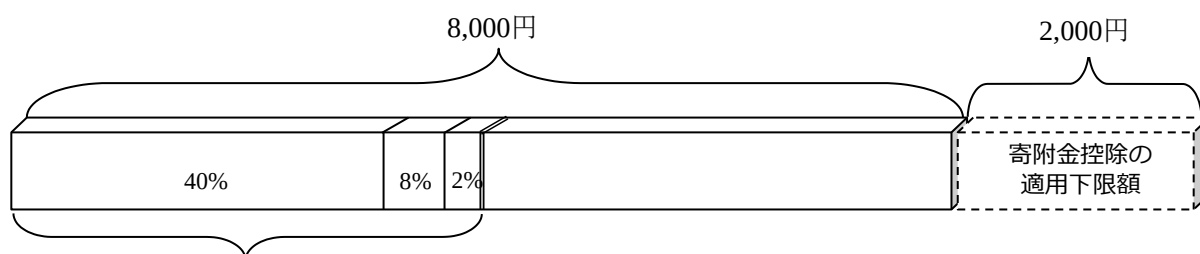
(参考) 京都市民の方が認定NPO法人に 10,000 円寄附した場合の例

（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）

$$(10,000 \text{ 円} - 2,000 \text{ 円}) \times 40\% = 3,200 \text{ 円} \quad (\rightarrow \text{所得税から控除})$$

$$(10,000 \text{ 円} - 2,000 \text{ 円}) \times 8\% = 640 \text{ 円} \quad (\rightarrow \text{市民税から控除})$$

$$(10,000 \text{ 円} - 2,000 \text{ 円}) \times 2\% = 160 \text{ 円} \quad (\rightarrow \text{府民税から控除})$$



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。

$$\text{特別損金算入限度} = (\text{資本金等の額} \times 0.375\% + \text{所得金額} \times 6.25\%) \times 1/2$$

(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.17, 2023 年(令和 5 年) 春号

2023 年 5 月 9 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 © 2023 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.qcri.or.jp/>)にてご覧になれます。

