



量子の世界

No. 18, 2023 年 秋号 (2023/12/7 発行)

- 目次 -

	ページ
1. 理論化学の魅力と科学における位置づけ	1
榊 茂好 (京都大学)	
2. 「QCRI セミナー」の活動について	6
3. 「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」来年 6 月札幌で開催、ご参加を	12
4. 前回の「第 15 回 革新的量子化学シンポジウム」のご報告	13
5. 認定 NPO 法人のために、3 千円のご寄附のお願い	17
6. ご貴稿を「量子の世界」へ	21

理論化学の魅力と科学における位置づけ

榊 茂好
京都大学

最近、理論化学・実験化学双方で博士課程進学者が減少し、また、理論化学分野で博士課程を修了してもアカデミック分野でなく、企業への就職を希望する人が増えていることを耳にしました。もちろん、企業への就職が良くない、と言うつもりは全くありません。企業における理論化学も大変重要で、興味深い研究対象を取り扱っています。実際に社会に必要な生産活動をしている企業で、理論化学が役に立つことも、理論化学分野の研究者にとって、大変うれしいことです。しかし、このような傾向から、アカデミック分野における理論化学の魅力が小さくなっているのではない



榊 茂好 先生

かと言う懸念も感じました。何故だろうと考えている内に、自分にとって理論化学の魅力とは一体何だったのだろう、そもそも、どのような魅力を感じて理論化学の研究を始めたのだ



ろうか、と考え始めました。私は4年生で触媒化学講座に所属し、卒業研究は錯体触媒反応の実験でした。本筋には関係ないのですが、ガラス細工も結構上手で、三方接合をして減圧蒸留のトラップを自作して使用したり、真空ラインも自分で作ることが出来るくらいでした。理論化学との初めての接点は、雑誌会で紹介するようにと、指導教官から渡された R. B. Woodward と R. Hoffmann の共著で J. Am. Chem. Soc. に 1965 年に発表された Woodward-Hoffmann 則に関する論文でした。今、振り返ってみますと、1968 年当時、固体触媒化学の教官が、その 3 年前に J. Am. Chem. Soc. に発表された Woodward-Hoffmann 則の論文を見つけて、読むようにと卒論生に言う見識に感心します。おそらく「固体触媒化学にこのような視点を持つ必要があるから勉強しなさい」、と卒論生に示唆したかったのだと思います。多分、固体触媒を長年、研究されていた多羅間公男先生が助手の金井宏淑先生を通して、私に伝えたのではないかと、思います。「その論文で理論化学に魅力を感じて」、と書くと、すっきりしたストーリーになりそうなのですが、実は、この論文は理解できたとは思っているのですが、「面白い」と感じることはありませんでした。後のノーベル賞の論文を読んで、その価値が分からなかったのは、当時の私は視野が狭く、化学における Woodward-Hoffmann 則の位置付けを正しく理解する能力も見識も無く、教官の気持ちも理解できていなかったと、今は痛切に反省しています。また、自分自身、異なる分野の重要な論文、それも将来、ノーベル賞の受賞になるような論文を見つけて、それが異分野でも役に立つと確信をもって、研究室の学生に読むように示唆するような教育もして来なかった、と反省もしています。理論化学に興味を持ったきっかけは、卒業研究に関連して読んだ J. C. Chatt のニッケル-アルキル結合の安定性に関する論文でした。Chatt は白金-オレフィン錯体の結合が供与相互作用と逆供与相互作用から出来ていることを提唱し、ほとんど全ての無機化学の教科書に紹介されている「Dewar-Chatt-Duncanson モデル」の提案者の一人です。今、Chatt の論文を見直してみても、1960 年代に現在でも興味を持てるような研究をしている優れた研究者です。その論文では、d 軌道分裂が大きいとニッケル-アルキル結合は強い、と述べてありました。ニッケル(II)錯体は d^8 電子配置を持ち、閉殻系では平面構造を取りやすいのですが、 d^8 電子配置を持つ平面 4 配位錯体では HOMO は non-bonding の d 軌道、LUMO はアルキル基との反結合性 d_{π} 軌道です。もし、結合が強ければ LUMO は上に押し上げられますが、non-bonding d 軌道のエネルギー準位はほとんど影響されません。ですから、d-d 分裂が大きいと言うことは、ニッケル-アルキル結合が強い、と言うことを反映していると議論されていました。金属-アルキル結合の強さをどのように評価すればよいのだろうか、どのような property に反映されるのか、について疑問をもっていた私にとって、配位子場理論から分かりやすくアプローチしている議論は大変興味深く、理論化学的考察に魅力を感じるきっかけとなりました。理論化学の研究者は皆さんご自身の興味を持って研究をしていると思います。その意味で、多種多様な興味があるのですが、私にとっては「分子の構造や性質、化学反応の本質を電子状態から理解し、出来れば、電子状態に基づく一般則を明らかにしたい」というモチベーションが重要な位置を占めていたと思います。理論化学の魅力は、深く、幅広く、「化学事象を説明するための新しい理論の開発」はもちろん、「理論化学による生命現象・生命科学の解明」も大切ですし、「大規模計算や高精度理論計算の開発」も必要でしょう。理論化学は、このように化学、ひいては物質の本質に迫り、さらには生命にも関連する研究対象に取り組み、その本質



を明らかにすることが出来ることを多くの人に、特に、若い学生さんに知ってもらいたいです。

現在、化学系の学生の皆さん、特に、研究室に配属される前の1年生から3年生までの皆さんが理論化学をどのように理解しているのか、学生さんとの接点が無くなった私にはよくわかりませんが、学部の学生さん、もっと若い高校生の皆さんは理論化学と言う分野の存在をどの程度知っているのでしょうか。私自身を振り返ると、高校生時代はもちろん、大学に入っても、理論化学とはどのような分野か、知りませんでした。若い学生の皆さんに理論化学の魅力を感じてもらうにはどうすれば良いのでしょうか。特効薬はないでしょうが、高校生や学生さんが理論化学に接する機会がもっとあれば、と思います。京都大学では、コロナ以前に市民向けに研究紹介を行うアカデミックデイと言う企画があり、一定額以上の外部資金をもらっている研究者に声がかかり、義務ではないのですが、なんとなく義務であるかのような雰囲気に参加要請が来ました（コロナで中断していましたが、再会したのか、止めてしまったのか良くわかりません）。私も数回参加しました。聞きに来てくれる人がいるのだろうか、と心配しながら参加したのですが、理論化学にも興味を持って聞いてくれる方が少なからず居ました。分子研でも市民向けの研究所公開があると聞いています。類似の企画があちこちで継続的にあると良いように思います。現役の教員・研究者の皆さんはご多忙でしょうから、私のような定年後の研究者がそのような活動の負担をすると良いだろうとは思いますが、定年になって分かったのですが、定年後は全てのことをほとんど一人でやることになり、時間があるようで無く、また、組織から離れてしまいますので、それなりに難しい点もあります。協力しあうと良いのかもしれません。

理論化学が化学分野、あるいはもっと広く、科学分野の中で、どのように見られているのか、どのように位置付けされているのか、も「理論化学の魅力」に関係すると思います。十数年前から「理論化学と実験化学のinterplay」が必要と言われ続けて来ました。実験化学が理論化学との共同研究を求める傾向は日増しに強くなり、現在では、おそらくほとんどすべての実験化学分野が理論化学との共同研究を必要とし、求めていると言っても過言ではないと思います。私たちの年代が理論化学研究を始めた頃から考えますと、文字通り、隔世の感があります。諸熊先生－岩田先生が始められた重点領域研究に参加させていただき、それに関連して、研究会を開いて、実験化学の大御所的な先生に講演をお願いしました。その時、「役に立つ理論化学であって欲しい」と言われました。2000 年前後かだと思います。実験化学から見て、「理論化学は本当に意味のある研究をしているの？」と思われていたのでしょう。その約10年後の2012年頃に、自動車触媒と二次電池に関する元素戦略研究projectの立ち上げをお手伝いしました。これは材料創成グループ、計測グループ、電子論グループがお互いに協力しあって、目的を達成しようと言う文科省直轄の元素戦略projectですが、電子論グループが実験グループと等価に参加している画期的なprojectでした。電子論研究が、次第に注目されてきたことがわかります。全体の代表と材料創製と触媒のとりまとめは京大の田中庸弘先生、計測と電池のとりまとめは東大の山田淳夫先生、電子論グループのとりまとめは江原正博先生が務められました。この研究projectの発足当初、我が国では、自動車触媒や二次電池の研究をしている理論化学分野の研究グループはほとんどありませんでした。ご存じのように、触媒化学、電気化学、理論化学は全て物理化学に属します。しかし、発足当時は、理論化学は有機化学にむしろ近く、固体化学や電気化学との交流は少なかったように思います。固体触媒も電池も、実験化学分野からは「理論化学は本当に



役に立つの?」と思われていたでしょう。理論化学分野からは「固体触媒や電池は複合系で単純でなく、理論化学の研究対象には適していない」と思われていたのでしょうか。私自身も固体触媒には知識が乏しく、自動車触媒（三元触媒と言う名称もこの project で始めて知りました）が排気ガスの中の一酸化炭素、窒素酸化物、ガソリン残渣をどのようにして二酸化炭素と窒素と水に変換できるか、触媒が酸化反応と還元反応を同時に担っているメカニズムが分かりませんでした。また、二次電池で何が問題なのか、も知りませんでした。この project に参加して、なるほどと理解できました。そのような状況の中で、本当に、理論化学が自動車触媒や二次電池の実験化学者と対等に研究の成功に貢献できるのだろうか、と心配しました。しかし、数年すると、理論化学、実験化学双方でお互いの研究状況が分かり、江原先生のご尽力もあり、共同研究が何件も行われ、多くの成果が出ました。しばしば、「実験結果の説明や解析でなく、予測をして欲しい」と言われますが、多少の予測もできたようです。現在では、この分野でも理論化学と実験化学の interplay は軌道に乗っていると言えるでしょう。これ以外にも、学術変革研究領域やクレスト project に多くの理論化学研究者が参加しています。多くの分野で、理論化学の重要性が認められ、その貢献が求められていると言えます。

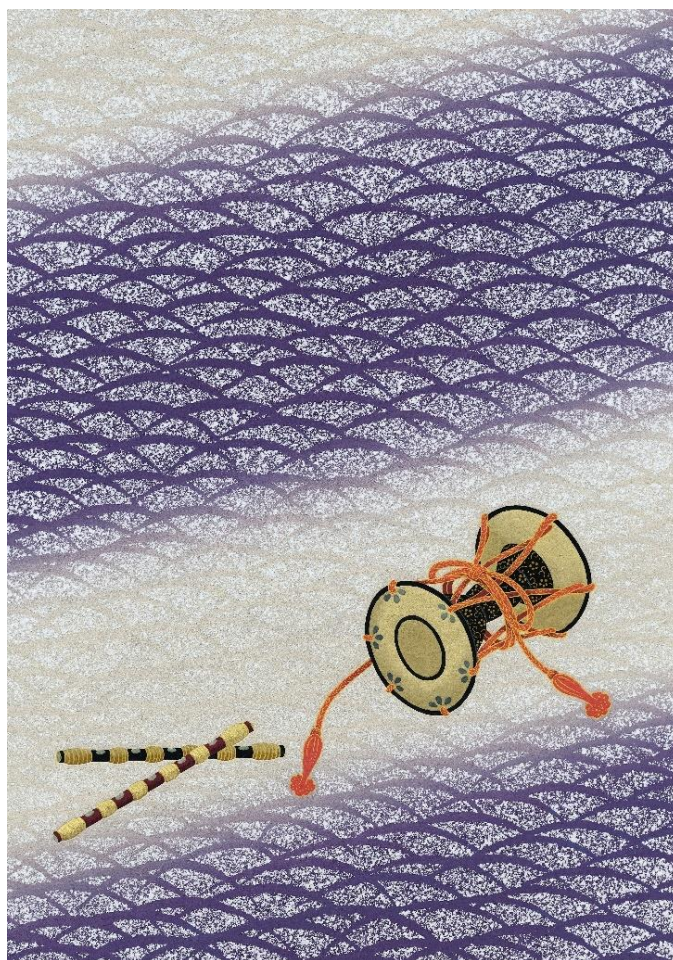
理論化学にとって、大変、望ましい状況ですし、interplay 研究で予算も獲得でき、良いことばかりです。しかし、interplay 研究にも問題が無いわけではありません。interplay 研究では、実験化学側が回答を求め、それに理論化学が応じる、と言うケースがほとんどです。しかも、実験化学側は早急に回答を求めますので、勢い、応用研究になってしまいがちです。理論化学は「理論の開発」が重要ですが、interplay 研究では、「新しい理論を開発し、それを用いて実験化学側に回答を提供する」ことは時間的に不可能な場合がほとんどではないか、と思います。Interplay 研究の一つの理想的な姿は、「実験化学との共同研究から理論の開発が必要であることが示され、新しい理論が開発され、それによりこれまでになくレベルでの理論研究が可能になり、実験化学にも貢献すること」、ではないかと思います。実験化学との interplay や共同研究はとても大切ですが、それだけでは十分とは言えません。理論化学自身の発展が必要不可欠なことは言うまでもないと思います。もう一つの interplay 研究の理想は、「理論化学が分子や物質の本質に迫ろうと言う motivation からスタートした研究が分子や物質の新しい姿を明らかにし、それにより実験分野が刺激を受け、新しい研究領域が始まる」、というものではないか、と思います。このような研究がいくつも誕生すると、理論化学は一層、大きく発展すると共に、自然科学の中で確固とした地位を占めることになるかと期待されます。

理論化学がどのような領域をカバーするか、も大切だと思います。今後、理論化学はどのような方向に発展して行くのでしょうか、あるいは、発展してゆくべきでしょうか。私自身は研究の終着駅の一步手前に居ますので、自分でそのような研究は出来る時間も能力も無く、余分なお節介みたいなものですが、何となく考えてしまいます。理論化学は有機分子の構造や性質などに関する分子科学からスタートし、金属錯体、化学反応、生化学・生命科学関連と領域を拡大し、それらの分野で大きな成果を上げて来ました。しかし、表面、固体の理論化学研究は十分なレベルに到達していないように思います。これらの分野は従来、主に、固体物性・物性物理・応用物理分野に属しています。しかし、表面、結晶や無定形の固体に分子科学の観点からアプローチする理論研究は非常に重要だと思います。特に、分子結晶や分子の無定形固体は分子科学の視点からの解明が待たれている研究対象だと思います。ほとんどの



機能材料は固体で使用されますので、応用化学的にも重要でしょう。表面、固体の電子状態計算はスラブモデルの DFT 計算、結晶の周期境界条件下での DFT 計算、クラスターモデルでの電子状態計算に止まっています。画期的な理論的アプローチが出てくると、この分野での理論化学の大きな進展が可能になると思います。特に、表面や固体、結晶などでの光化学、励起状態の化学は重要ですが、現時点では固体や表面の励起状態の理論化学は容易ではありません。新しい理論的方法が求められています。これらの分野には分子科学にとって宝物がたくさん埋まっているように思います。

新しい研究対象には新しい理論的アプローチが必要な場合が多いと思います。多くの新しい研究対象に向かって、新しい理論的方法が開発され、分子や物質にこれまでにない高いレベルで新しい、そして、本質的な深い理解を可能とし、それが実験分野を巻き込んで大きな新しい研究の潮流が始まるような未来が期待されます。自然科学で新しい分野を開拓するような発展を理論化学が主導できれば、自然科学のなかで、理論化学が現在以上に重要な地位を占めることとなります。理論化学には、そのような能力があるはずで、そのような将来がおとずれることを確信しています。



量子化学研究協会研究所の「QCRI セミナー」の活動

量子化学研究協会研究所 (QCRI) では、量子化学の研究交換や、人的交流を深める目的で、研究会「QCRI セミナー」を不定期に開催しています。量子化学研究協会研究所が発足した 2006 年以來の行事ですが、記録を取り出した 2009 年からでも、すでに 40 回以上を重ねています。

この研究会では通常の学会やシンポジウムではなかなかできない密な質問や議論が可能であり、講師と参加者が時間を気にせず純粋に science を語り合うことのできる大変楽しい場になっています。セミナーの後には、懇親会ときには excursion を行っています。研究だけでなく、研究生活、文化、そのときの思いなどをざっくばらんに語り合う、まさに「**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**」という量子化学研究協会研究所の目指す理念の 1 つに繋がっています。「**QCRI セミナー**」は **open な研究会であり、興味のある方はどなたでもご参加ください、大歓迎です。認定 NPO 法人として、とても大事な活動の一つです。**

次ページにこれまでの「QCRI セミナー」の開催記録を示しました。日本人だけでなく外国人の講師も多く、研究所を訪問された方や、学会等で訪日された方に講演を依頼してきました。研究所の研究分野・量子科学だけでなく、幅広い分野の先生方をお招きしてきました。2020 年來のコロナ禍による中断はとても残念でしたが、それ以後はコロナ禍前よりさらに充実した研究会になるように心がけて計画し、開催しています。

ご興味のある方、ご自身のご研究と関わりのある方、講師や研究会参加者と懇親されたい方など、研究所のホームページの http://www.qcri.or.jp/ja/event_ja/qcri_seminar 等で不定期に開催の案内をいたしますので、是非ご参加ください。参加料はもちろん無料です。**場所は、**量子化学研究協会研究所で、京阪・出町柳駅を下車、鴨川沿いに 300 メートル程南に下り、東一条交差点の信号を過ぎて、京都精華学園中・高等学校を過ぎたその南側の京都技術科学センターの中にあり、その北側中二階の 16 号室です。**ご参加希望の際は、office@qcri.or.jp までご連絡ください。**

次ページの開催記録を見ると、様々な分野の先生方の貴重なご講演を拝聴することができたことに感謝の念が沸き上がってきます。講師の先生と対話しながらスライドの各箇所で疑問に思ったことを議論することができ、十分な理解に繋がりました。また、著名な先生方と親密に議論ができる貴重な機会でありました。英語が不得手でも互いに意思疎通できるまでしっかり議論することができました。どの先生方にも共通していたことは、どんな素人的な質問であっても優しく丁寧に分かりやすくお答え頂けたことです。ナイブな疑問や質問は、そこから新たなアイデアが生まれる源泉です。「なるほど、そうか!」と思えたら、この分野も勉強してみようと奮起し論文を読むなどして、研究の発展に繋がったこともたくさんありました。

そして何と言っても楽しみなのは、講演会後の懇親会や excursion です。その場では、講師の先生や参加者の方々の研究感や研究生活など新たな一面を知ることができ、お互いをより身近に感じることができるとともに、友情の発展に繋がるものでした。**本号でアナウンスしている JCS(Japan-Czech-Slovakia)シンポジウムもその精神の発展したもので 2024 年 6 月 17-21 日札幌の北海道大学内で開催されます。皆様、是非ご参加ください。**



「QCRI セミナー」の開催記録 (最近のものから古いものへ)

回	日付	講師名(敬称略)	所属(発表時)	講演タイトル
39	2023/11/20	長谷川 淳也	北海道大学 触媒科学研究所	系間交差を経由する化学反応機構に関する研究
		豊田 和男	大阪公立大学 理学研究科	有機化合物の三重項状態におけるゼロ磁場分裂テンソルの理論計算
38	2023/7/10	石川 敦之	東京工業大学	触媒化学と反応速度論と高精度量子化学計算
37	2023/4/26	中井 浩巳	早稲田大学	複雑系の量子化学：理論と応用
36	2023/3/31	江原 正博	分子科学研究所 計算科学研究センター	触媒の理論化学：プラチナ・クラスターの酸素還元反応を中心として
35	2022/9/3	江原 正博	分子科学研究所 計算科学研究センター	複雑系の理論研究：光機能性分子・不均一系触媒
34	2019/12/6	福田 良一	京都大学 触媒・電池元素戦略	やや複雑な電子励起状態の計算と小分子の活性化
33	2019/11/18	水上 渉	大阪大学 先導的学際研究機構 量子情報・量子生命研究部門	変分量子固有値法を用いた量子化学計算：量子コンピュータへの期待と現状
32	2016/12/1	江原 正博	分子科学研究所 計算科学研究センター	CAP/SAC-CI 法による電子共鳴状態の研究
31	2016/11/28	James S. M. Anderson	理化学研究所 計算科学研究機構	A Novel Method to Formulate a Potential Leading to a Quasisolvable Schrödinger Equation
30	2016/9/7	Jakub Rydzewski	Nicolaus Copernicus University (Poland)	Recognition of sulfonylurea photoswitches by EPAC2
29	2016/4/22	Josef Michl	Department of Chemistry and Biochemistry, The University of Colorado	Planar Arrays of Artificial Dipolar Molecular Rotors
28	2016/3/28	Paul Abbott	The University of Western Australia	Towards Closed-form Solutions to the Few-body Schrödinger Equation
		Henryk Witek	National Chiao Tung University	Non-Born-Oppenheimer approach to the helium atom
27	2016/2/26	大塚 勇起	神戸大学	配置空間の量子モンテカルロ法の概論
26	2014/5/9	Jared A. Hansen	Michigan State University	Development and Application of Numerical Methods for Use with Highly Correlated Quantum Chemistry Approaches
25	2014/3/31	Josef Michl	Department of Chemistry and Biochemistry, The University of Colorado	Alkylation of Gold Surfaces with Main Group Organometallics
24	2013/3/22	Henryk Witek	National Chiao Tung University	Exact solution of Schrodinger equation for helium: Where are we?
23	2012/12/14	YU, Jen-Shiang K.	National Chiao Tung University	Theoretical investigation on the homoleptic $\text{Fe}(\text{NO})_4^-$ and similar anions : A SAC-CI study
22	2012/11/21	James S. M. Anderson	Nuclear Theory Group Department of Physics University of Tokyo	GKCI Approach for Solving the Electronic and Nuclear Schrödinger Equation
21	2012/9/28	中谷 直輝	プリンストン大学	Tree Tensor Network States for Quantum Chemistry



20	2012/8/7	Piotr Piecuch	Michigan State University	1. Renormalized and Active-Space Coupled-Cluster Methods: Key Concepts and Recent Advances 2. Local Coupled-Cluster Methods for Chemical Reaction Pathways Involving Large Molecular Systems
19	2012/7/12	大田 浩二	産業技術総合研究所 関西センター	パイ共有機分子の二光子吸収特性
18	2012/4/18	和田 健彦	東北大学・多元物質科学研究所	・生体高分子の機能材料への展開と動的機能制御-核酸とタンパク質の特性の活用を目指して- ・高感度・高時間分解能を有する円二色スペクトル測定法の開発-生体高分子の動的構造変化検出を目指して-
17	2012/3/10	Sundaram Arulmozhiraja	Australian National University (ANU)	1L_a and 1L_b States in Indole and Azaindole: Is Density Functional Theory Inadequate?
16	2011/11/25	Debashis Mukherjee	Indian Association for the Cultivation of Science (IACS), India	Spin-adapted State-Specific and State-Universal Multi-Reference Coupled Cluster Approach: Formalism and Pilot Applications
15	2011/9/9	Jean Maruani	LCP-MR, CNRS & UPMC, France	The Dirac equation: spin, zitterbewegung, and the electron mass
		Erkki J. Brändas	Uppsala University, Sweden	Gödelian structures in physical and biological systems
14	2011/6/27	倉本 圭	兵庫県立大学	表面分子分光と素反応解析による触媒モデリングの現状と今後の展開
13	2011/4/7	中嶋 隆人	理化学研究所	次世代分子理論の展開: Developing next-generation molecular theory
12	2011/2/18	James S. M. Anderson	東京大学理学部物理学 大塚孝治研究室	Novel Sparse Grid Approaches to Solving the Electronic Schrödinger Equation
11	2010/12/8	Jen-Shiang Kenny Yu	台湾国立交通大学	Recent topics
10	2010/12/6	今堀 博	京都大学	ポルフィリン色素増感太陽電池: 分子構造、膜構造、光ダイナミクス、光電変換特性の相関解明
9	2010/11/15	柳井 毅	分子科学研究所	DMRG およびその動的相関法の話を中心に
8	2010/10/12	百瀬 孝昌	The University of British Columbia, Canada	Chemistry and Physics of Hydrogen and Related Compounds in Universe
7	2010/5/26	長尾 秀実	金沢大学	銅タンパク質の酸化還元電位に関する理論的研究
		西川 清	金沢大学	レーザー光による分子系の量子制御について
6	2010/4/28	牛尾 二郎	日立金属	
5	2009/10/28	Rika Kobayashi	The National Australian University, Australia	Quantum Chemistry in Australia
4	2009/8/24	Yuan-Pern Lee	台湾国立交通大学	Studying Reaction Intermediates using Time-resolved Fourier-transform Infrared Spectroscopy and p-H ₂ Matrix Isolation Technique
3	2009/7/31	Roberto Cammi	Universita' di Parma, Italy	Implementation of the PCM-SAC/SAC-CI
2	2009/7/11	波田 雅彦	首都大学東京	相対論的量子化学理論の開発と応用
1	2009/1/31	寺西 慶哲	台湾国立交通大学	・ Highly Multiphoton Excitation of Molecule by Intense Laser Field ・ Collision Processes of Antiproton with atoms





Yuan-Pern Lee 先生

(2009/8/24)

Yuan-Pern Lee 先生は、ノーベル賞を受賞された Yuan-Tseh Lee 先生の弟さんで、台湾の著名な化学者です。講演会の翌日、台湾の同じ大学の Henryk Witek さんと桂離宮を楽しみました。



Jean Maruani 先生ご夫妻と Erkki J. Brändas 先生

(2011/9/9)

Maruani 先生は QSCP の, Brändas 先生は ISTCP の president をしておられます。講演会後の奈良の excursion では、Maruani 先生が鹿に歓喜、動物がお好きで、情熱的に奈良を愛しておられました。

(左)Maruani 夫妻, (右)Brändas 先生



Debashis Mukherjee 先生ご夫妻

(2011/11/25)

Debashis Mukherjee 先生は、中辻の最も古い海外の友人の一人で、とても長い付き合いです。何度も京都を訪問されています。金閣寺を楽しみました。



Piotr Piecuch 先生とご家族

(2012/8/7)

Piotr Piecuch 先生のご講演の後、奥様・お嬢様とご一緒に中辻宅にて。



Josef Michl 先生

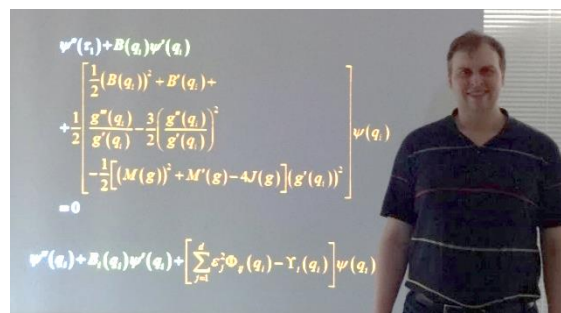
(2014/3/31, 2016/4/22)

IAQMS の president をされた Michl 先生も中辻の最も親しい外国人の一人で、その前の president であった諸熊先生や、榊先生、永瀬先生、江原先生など多くの方が、彼の講演を enjoy しました。懇親会のあと、京都・桂の旬料理を楽しみました。



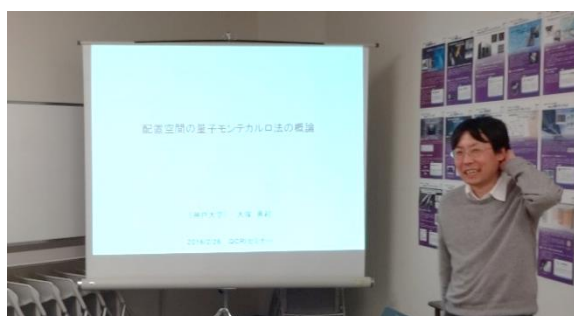
Henryk Witek 先生 (2016/3/28)

Helium 原子の超 exact 研究というお堅い話
懇親会ではお好み焼き屋さんに行きました。



James S. M. Anderson 先生 (2016/11/28)

研究所にも滞在。「数式大好き」な方です。
日本の文化も大好きです。



大塚勇起 先生のご講演

いつものシャイなお姿 (2016/2/26)



水上渉 先生(中央)のご講演の休憩時
波田先生(左)と中辻(右) (2019/11/18)



江原正博 先生(左奥)と QCRI 研究所で
(2022/9/3)



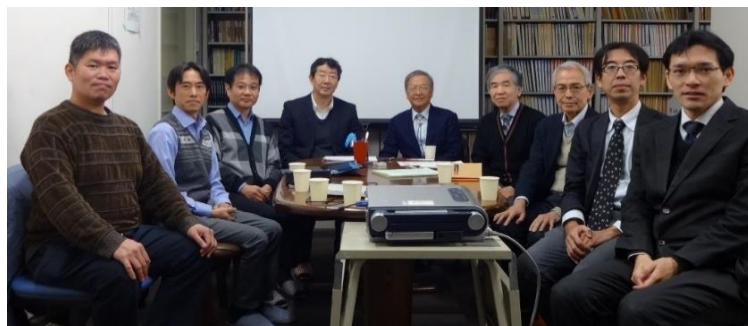
福田良一 先生(左奥)の講演会の様子
(2019/12/6)



中井浩巳 先生(左奥)の熱弁講演会の様子
(2023/4/26)



石川敦之 先生(左)と議論する中辻(右)
(2023/7/10)



長谷川淳也 先生(左奥)
講演会后、参加者と (2023/11/20)
系間交差を経由する多くの励起状態の
化学反応経路をスピン・軌道相互作用も
含め、詳しく研究されました。



豊田和男 先生(左奥)
講演会後の懇親会 (2023/11/20)
2 電子プロパティの膨大な研究の発表
のあと、研究所近くの松井酒造の地酒
神蔵(かぐら)を楽しみました。
皆様、少しできあがっています。

「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」開催の準備も本格化 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)
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/>

このサイトは大幅にアップデートされています。是非ご覧の上、ご参加ください。

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。

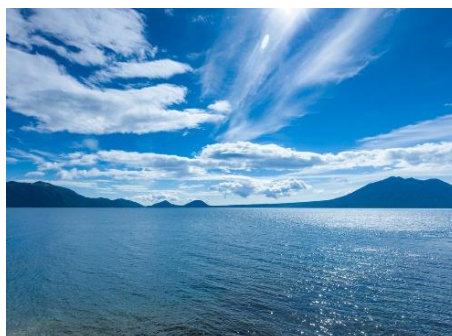
本シンポジウムは、基本的に全員ご招待の形で行いますが、若手の参加を歓迎し、機会を提供していきたいと思います。また、invited poster を充実させて、広く参加を呼び掛けたいと思います。ご参加・ご発表をご希望の方は、積極的に jcs8@cat.hokudai.or.jp まで御連絡下さい。

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



前回の「第 15 回 革新的量子化学シンポジウム」のご報告

開催日時: 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

「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～」が、2023 年 5 月 27 日(土)に下記プログラムにて対面形式で開催されました。新型コロナウイルス感染症が 5 類に移行後の開催となったため、多くの皆様に気兼ねなくご参加頂くことができました。講演者の先生方の白熱したお話を生で聞くことができ、参加者と共に活発な議論が展開されました。懇親会は、昨年は控えていたお酒も含めて、賑やかでとても楽しい会となりました。

このシンポジウムは、講師の先生方だけでなく参加者の皆様同士の交流も重視しております。来年も同時期に開催を予定しております。まだご参加されてない皆様も、是非一度ご参加頂ければ幸いです。

プログラム

13:00 挨拶・司会 中辻 博

13:05 – 14:05 **波田 雅彦 (京都大学)**

「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~

場所: アサヒビアレストラン スーパードライルネサンス



講演して頂いた先生方



波田 雅彦 先生

相対論的量子化学の建設という、まさに波田先生のライフワークであった壮大なご研究をまとめたストーリーで拝聴でき、とても感銘を受けました。重元素化学の発展に大きく貢献されたことに改めて敬服いたしました。



杉崎 研司 先生

現在の量子コンピュータのブームより遙か前から量子化学に対する量子アルゴリズムのご研究を展開されており、そのご慧眼に感服しました。量子アルゴリズムについて初学の聴衆に対しても、分かりやすくご講演頂き感謝申し上げます。



中嶋 浩之 先生

QCRI 研究所で開発している正確な量子化学理論(中辻,2004)について、実用化に向けた進展と応用例を中心に紹介しました。多くの質問を頂戴し、今後さらに発展しご期待に応えられるよう、研究所一丸となって努力していく覚悟です。

シンポジウムの様子





杉崎先生の名著をご紹介します
「量子コンピュータによる量子化学計算入門」
杉崎 研司 著 (講談社)
量子コンピュータの基礎や、量子コンピュータを用いた量子化学計算の方法など、とても分かりやすく解説されています。



多くの質問、活発な議論が展開されました。

休憩時間の様子



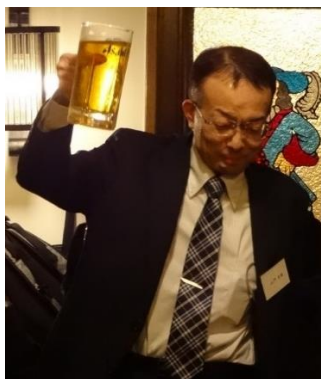
京都の銘菓、阿蘭梨餅、益樹糖を楽しみながら、交流が弾んでいます。



量子計算機の将来を語り合う。



懇親会の様子



山門英雄 先生より
乾杯の御挨拶



楽しく会話が弾んでいます。



左から、中辻博 先生、柳田祥三 先生、
江藤正義 先生



(有)ミネルバライトラボ の 松村竹子 先生より、
シンポジウム第 15 回記念に花束を頂きました。



長谷川淳也 先生より
締め御挨拶



では、そろそろ、お開きです。

その他の写真は、QCRI ホームページ:

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

トップページのメニュー ⇒ “写真” ⇒ “革新的量子化学シンポジウム”
にアクセスしてください。

認定 NPO 法人のために 3 千円のご寄附のお願い

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。 私達の活動を継続するためには、今後も「認定 NPO」を継続することがとても重要です。認定 NPO 法人を維持する要件「絶対値基準」として、**毎年 100 名以上からの 3,000 円以上のご寄附**が法律で定められています。今期は 2020 年から 2024 年までですが、寄付者数は 106 人(2020 年)、64 人(2021 年)、106 人(2022 年)です。**本 2023 年は未だ 34 人で、100 人に達していません。もしオーバーすると 2021 年にも繰り込んでいただけます。この、100 人以上、という人数のカウントはとても厳しく、是非、よろしくお願いいたします。**

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。

さらに認定 NPO 法人には「クラウドファンディング」に参加する道が拓け、これを通じて色々な活動が可能になります。私たちも今後このプロジェクトに参加し、色々な可能性を広げていきたいと考えています。

「クラウドファンディング」とは、公益性の高い活動に対して支援者からの支援を「寄附金」として受け取ることができるもので、認定 NPO 法人、公益財団法人、自治体や学校法人などによって幅広く利用されています。それに基づいて、社会への貢献という形の活動が活発に行われています。

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、不断的な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。

ぜひ、ご寄附を頂けますと大変ありがたく存じます。それにより、例えば私たちの研究活動などが、より容易になり、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。

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)：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

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

郵便局(ゆうちょ銀行)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										振替払込請求書兼受領証									
00		口座記号・番号はお間違えのないよう記入してください。								千：百：十：万：千：百：十：円		千：百：十：万：千：百：十：円		千：百：十：万：千：百：十：円		千：百：十：万：千：百：十：円		千：百：十：万：千：百：十：円	
0 0 9 1 0 6		3 3 2 2 2 5								寄付金額をご記入ください。		0 0 9 1 0 6		3 3 2 2 2 5		特定非営利活動法人 量子化学研究協会		特定非営利活動法人 量子化学研究協会	
加入者名		特定非営利活動法人 量子化学研究協会								金額		金額		金額		金額		金額	
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。								左と同一金額をご記入ください。		お名前をご記入ください。		お名前をご記入ください。		お名前をご記入ください。		お名前をご記入ください。	
ご住所とお名前を必ずご記入ください。		ご住所とお名前を必ずご記入ください。								日 附 印		日 附 印		日 附 印		日 附 印		日 附 印	
(ご連絡先電話番号)		(ご連絡先電話番号)								料 金		料 金		料 金		料 金		料 金	
ご依頼人欄に、おところ・おなまえをご記入ください。		ご依頼人欄に、おところ・おなまえをご記入ください。								備 考		備 考		備 考		備 考		備 考	
これより下部には何も記入しないでください。		これより下部には何も記入しないでください。								この受領証は、大切に保管してください。		この受領証は、大切に保管してください。		この受領証は、大切に保管してください。		この受領証は、大切に保管してください。		この受領証は、大切に保管してください。	



郵便局(ゆうちょ銀行)や銀行でのお振込

郵便局(ゆうちょ銀行)や銀行からは、窓口や ATM(現金での振込も可)、ゆうちょダイレクト、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、以下にご連絡ください。

中辻 博 e-mail address: h.nakatsuji@qcrl.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

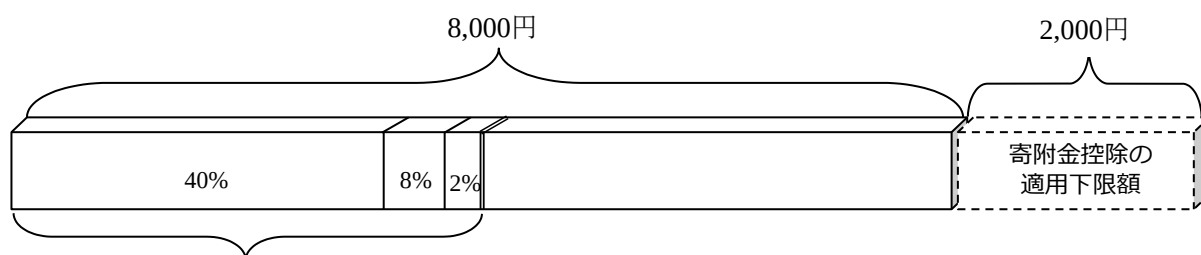
(ただし、京都府と京都市がともに条例で当該認定NPO法人に対する寄附金を指定している場合)

$(10,000 \text{ 円} - 2,000 \text{ 円}) \times 40\% = 3,200 \text{ 円}$ (→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）



ご貴稿を「量子の世界」へ

「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.18, 2023 年(令和 5 年) 秋号

2023 年 12 月 7 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.qcricri.or.jp/>)にてご覧になれます。



©2023 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.