



量子の世界

No. 19, 2024 年 春号 令和 6 年(2024)/4/19

- 目次 -

	ページ
1. 我が研究への思いと人との出会い 遠藤 一央 (金沢大学)	1
2. 「思い返してみる」 加藤 毅 (東京大学大学院 理学系研究科)	10
3. 「第 16 回革新的量子化学シンポジウム」のご案内 5/11(土), 京都テルサ	15
4. 「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」のご案内 6/17(月)-21(金), 北海道大学 (札幌)	17
5. 編集後記	
1. 量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い	18
2. ご貴稿を「量子の世界」へ	

我が研究への思いと人との出会い

遠藤 一央
金沢大学

量子の世界での巻頭言では、この分野の理念、今後の目標、夢などが提案されるのが多いと思います。大変恐縮ですが、小生の場合は、人生は、失敗を恐れず一生勉強と努力とと思っていますので、今回は、上記題目での個人的回想録を書かせて頂きます。

私の人生のまわり道は、埼玉県深谷商業高校時代の理系に行きたいと云う思いから始まり、理系大学に進むには、自分で数学、物理及び化学の勉強をしなければならなかった。その当時、父の退職による経済的不安もあったが、それは、母が、保険会社の外



遠藤 一央 先生



交員として頑張って、経済的基盤を支えてくれた。常識人の私に対する意見は、「あなたの経済的環境で自分の希望を叶えることは無理だから、諦めて就職なさい。」であった。結局、高校の担任の先生の薦めもあって、一時は、商事会社に半年間勤めたが、進学希望は諦めきれず、宅浪することを決心した。この浪人の間、精神的には、高校時代世話になった新任先生の encouragement を受け、理系大学を受験できる自信は通信添削 Z 会の理科や数学の問題を解いて上位優秀者で名前を掲載すること、実力判断は、予備校、東大や東工大の学生たち主催の模擬試験会の成績結果を参考に判断し、結局、第二希望の東京理科大学理学部(神楽坂キャンパス)に入学した。

理科大 2 年間の大学生活は、深谷から飯田橋まで片道 2 時間通学していた。大学 2 年時、米国帰りの新任半田隆先生の量子化学の講義を聴き、将来はこれを自分の専門にしたいと決めた。しかし、東京理科大には、応用分野だけで基礎分野は無く、自分の希望する道に進むには、他の大学院を選ばねばならなかった。大学 2 年終了時、理科大の近くに埼玉学生誘掖会の寮(深谷出身の渋沢栄一翁初代会頭)が、新宿区砂土原町の最高裁長官公邸の西隣にあることを知り、大学 3 年時からは、真面目に勉強すべく、その寮に入った。理大は余りにも近くに在ったので、1 年目は寮に居るだけで大学に通った気になり、皆と卓球、麻雀をしたり、社交ダンスを習ったり、社交ダンス教習クラブのバイトまでしていた。理大 3 年時、遊んでしまった自分のいい加減さを反省し、3 年終了後、物理化学に磨きをかけたく色々量子化学の本を読んだ。その量子化学の本の中で、安積宏先生著の本で自分の師となる青野茂行先生の研究が引用されていたのを見付けて、志望大学院を金沢と決めた。その研究内容は、ヨウ素ベンゼン分子化合物の構造についてで、Mulliken 先生(1966 年ノーベル化学賞)は「ヨウ素はベンゼン分子面に平行の模型」を提唱、青野先生は「ヨウ素はベンゼンに垂直に結合」(その根拠は「垂直の時の重なり積分は平行の時より 20 倍大きい」)を提唱、後に青野先生のモデルが正しいと実証された。

埼玉誘掖会(この会は、1902 年埼玉県出者の東京で修学に資するために設置された宿舎で、2001 年宿舎を閉鎖し、宿舎の敷地の売却金を基金として学生への奨学金を給付する事業(奨学金財団)開始し、小生は、舎監をされていた島田先生の推薦で役員を拝命)の寮生活では、奨学金(日本育英会特別貸与奨学生)と家庭教師 2 件のアルバイトをもって、自活した。当時、舎監は、島田龍郎先生(平凡社重役)がされていて、後々まで大変ご厄介になった。この頃の寮生は、30 人前後で、学生自治で毎年寮長 1 人と会計 2 人など決め、夕飯だけは、寮の平屋に住んで居た賄いの家族の方に料理して貰っていた。毎日の朝食は、パンと牛乳で済ませ、昼は大学の学食や神楽坂近傍の「家の光会館」のレストランとか、「キッチンクマ」(現在カナルカフェの場所)というレストランなどへ出かけた。その時の寮友には、同輩の良きライバルとして、曾根和穂さん(東大原子力専攻(和算で有名な'関孝和'の血縁))、根岸正彦さん(東大法学部)、樋口忠彦さん(東大工土木専攻)らが居た。曾根さん(キャノン退職)、樋口さん(京都大学建築学科退職)、根岸さん(昭和電工退職(10 年前に逝去))たちとは、今日までの良き友としての付き合いになっている。特に曾根さんとは、後の京都大学院時代の話と重なるが、京都で量子論の勉強会、恋愛関係の話、飲み会も一緒に出掛けたりして 3 年間は、毎日のように会っていた。曾根さんは、京大キャンパスで知り合った人と恋愛結婚し、私は東京に戻った時、東京から京都への新幹線で見染めた wife と 1 年半ほど付き合っ



生結婚した。曽根さんとは、1 カ月違いで、互いの司会で結婚式を挙げた仲である。樋口さんは、私の従妹と結婚し、家族とも親交深くと言う関係である。

大学院は、何とか希望通り金沢に決まり、兼六園隣の城の中に在った金沢大学院理学研究科に通い始めた。金沢でも、自活を心がけたが、奨学金は、貰えない上に、家庭教師のアルバイトも見付けられず、其の上東京の半額以下の相場であった。そこで、誘掖会で舎監をされていた金沢出身の島田龍郎先生に手紙を書いて、窮地の脱却を図った。島田先生からは、当時、金沢在住の資生堂金沢支社長をされていた人など紹介頂き、家庭教師は、何とか上手く決まっていた。時には、親に経済的負担を願ったこともあった。

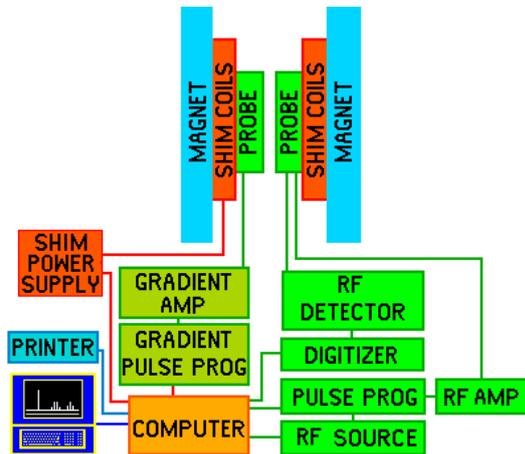
金沢の大学院の研究室は、先生 4 人(青野先生、佐道昭先生、須原正彦先生、米光直志先生)と学生 8 人という恵まれた研究室環境だった。当時教授だった青野先生(その後、量子化学における Green 関数の権威、第 7 代金沢大学長となられた)は、教育熱心で量子力学(ランダウ・リフシッツの英語版)を中心に週 4 日は午前か午後は 2~3 時間輪講勉強会を行った。勉強会では学生は週 1 度どれかに当たるので、何とか量子論の関係式の誘導を出来るように予習したものだった。自分も同僚たちも、式の意味する physical picture まで、とても理解するには至らなかった。輪講勉強会の 1 つでは、青野先生が選んだ Pople 先生(GAUSSIAN Software の創始者:1998 年ノーベル化学賞)や McLachlan 先生(量子化学・磁気共鳴)の量子化学分野の original papers を徹底して読み、勉強させて貰ったことは、後の自分の研究分野への指針となった。博士課程は、青野先生の紹介と自分の希望で京都大学院工学研究科の燃料化学専攻の米沢貞次郎先生(量子化学権威)の研究室に進むことになった。

京都の博士課程は、埼玉の寮友の曽根和穂さんが、東大から京大の大学院(工学研究科原子核工学専攻)に進学していたので、京大工学部の米沢貞次郎先生(福井・米澤量子化学研究グループ)の研究室に移ることにした。そこでは国際的な研究論文を発表するのが当然という活発な研究環境だった(同時代の仲間には、現在内外に通じた量子化学者の中辻博さん(院生時代から J.Chem.Phys. に論文を掲載していた)や量子化学者の平尾公彦さん(理化学研究所名誉会員他)、北川進さん(現在金属錯体研究者の権威)、吉野彰さん(リチウムバッテリーの権威(2019 年ノーベル化学賞))らと一緒に研究室時代を過ごした。自分にとっては、1 年目に書いた磁気共鳴における核の化学遮蔽に関する理論的研究(J.Chem.Phys. に 1970 年の投稿)が米国の磁気共鳴の大先生(N. F. Ramsey 1989 年ノーベル物理学賞)に、興味を与えたと言うことを米澤先生らを通じて聴いた。それは、Ramsey 先生が、1970 年に letter('多次摂動法を用いた化学シフトの磁場依存の可能性の論文を発表'(Phys. Rev. A1(1970)1320))を書かれたことから分かった。このことは、自分が研究という職でやって行けるという大きな自信に繋がった。これは、金沢の修士課程時代に学んだ基礎的な知識と共に、京都に移って 1 年目に曽根さんたちと更に量子力学など色々と勉強会を重ねた成果が実を結んだと思っている。京都で学んだことは、研究の纏めは少なくとも必ず英語で論文を書き、Journal に投稿し、掲載されることだった。

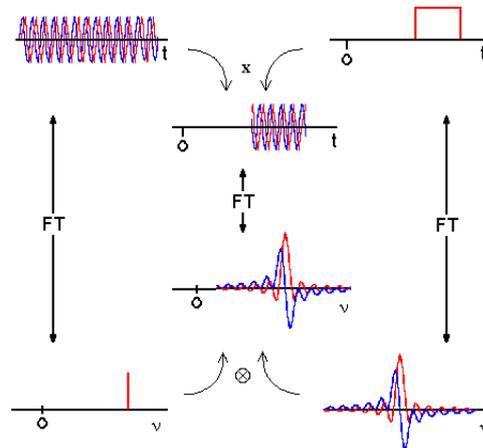
1973 年京都で博士課程修了(博士号取得(主査:米沢貞次郎先生、副査;福井謙一先生、岡本邦男先生))後、磁気共鳴メーカー(Bruker Physik A.G.:西ドイツ)に入社し、入社後の training 3 日間で固体材料解析用の装置名 XPS(X は原子核、P は pulse、S は spectrometer)



と云う当時最先端の FT(Fourier- Transform) NMR 装置の各 unit に関して scilloscope による電波画像(動画)の説明に感動し、この装置に自ら惚れ込み、操作法も自分なりに色々試して学んだ。日本に戻って、この装置による複雑な pulse 手法を用いて磁気的双極子相互作用をゼロにできる(固体の NMR スペクトルは、広幅に対して液体のスペクトルはシャープな線スペクトルに対応)研究を 1975 年春の日本化学会で発表した。



NMR 各 Unit



NMR シグナルの電波画像

この西独での 1 年間は Karlsruhe 市近郊に夫婦で在住した。会社では、世界の同分野の研究者と知り合い、今でも家族共々米国人 Hawkins さん(NMR の自動測定法の考案製作者) 家族などと交際している。この会社の社長(大学教授だった人 Prof. G. Laukien)とは、日本での装置販売の営業方針に関しての意見が合わず、次の職も決めずに 2 年で退職した。

1975 年春、ドイツ滞在中も、京都で住んでいた府営アパートは、そのまま借りていたので、京都を生活基盤とした。研究面では、自分の研究を深める意味で、京大大学院物理学科の端恒夫先生の物理第一研究科電波分光光学研究室(コヒーレント波で共通な非線形光学レーザーと磁気共鳴現象の分野)の研修員として籍を置かせて貰った。助教授は東大物理から来られた松岡正浩先生(後に東大物理科教授)が居られ、主に非線形光学レーザー分野を専門とされていた。端先生は、磁気共鳴と非線形光学両分野を持たれていた。助手は、福田行男さん(磁気共鳴と非線形光学両分野で、後に神戸大学理学部物理教授)と中塚宏樹さん(非線形光学レーザー分野で、後に筑波大学物理工学系教授)で、この二人とは年齢が近く研究面、生活面でも色々話し合い、大変お世話になった。この研究室の勉強会には、必ず毎回参加し、重要な基礎知識として、レーザー現象が起こる原因「エネルギーの二準位レベルを考えると励起準位の緩和時間が非常に長くこの準位の光電子 population が基底状態に比べて異常に増大するから起こる。」を学んだ。この研究室には、磁気共鳴分野の大御所の Harn エコーで有名な E.L. Harn 先生が訪れ、Harn 先生と卓球を楽しんだり、レーザー分野では、若かった T.W. Hänsch 先生(2005 年のノーベル物理学賞)も訪れ、先生の歓迎会(自分はドイツ語で'野ばら'を歌った)での研究室全員で撮った写真は、楽しい思い出となった。

他に、自分の研究者としての履歴は、立命館大学の鈴木啓三先生のお世話で 4 年間非常勤講師をすることができた。生活費は塾、高校の非常勤講師を続けて何とか稼いだ。この期



に、京大で高校理科教職免許も取得した。研究面では、立命館理工学部高圧物理化学研究室の鈴木啓三先生(先生とは長い親交が続いた)の研究室の院生と核磁気緩和時間(線幅)の圧力依存性の研究(有機ラジカル分子を含んだ溶媒分子の 1 気圧から 1000 気圧の圧力変化のプロトン Broadening)を Chem.Phys.Lett.に掲載できた。また阪大産研の桐山先生御夫妻の研究室の固体 NMR(XPS 装置)を使わせて頂き、夏休み春休みに集中して実験し、何とか論文発表(ラジカル分子や酸素を含んだ有機溶媒の ^1H や ^{19}F の緩和時間の磁場依存性の研究を J.Phys. Chem.などに論文として掲載した。

1979 年 9 月、端先生の推薦も在り、36 歳で三菱製紙(MPM)感材研究所(京都)に入った。当時京都のハロゲン化銀写真製版材料は、内外に向けて 20 年以上黒字製品として好調なものだったので、会社として人材を増員した。この研究所だけでも 2 年間で大学院卒 20 人(DC 卒 5 人、他 14 人は MC 卒)だった。この中で共同研究者となった山本京ノ介君(現在も親交持続)の修論は、「高分子大御所の桜田一郎先生の高分子合成の実験的理論式」を独自の観点から厳密な理論式を考え、simulation の結果、桜田先生の式は、精確なもの結論付けた。彼ら新人と一緒に、週 1 度金曜日、勤務終了後の 17 時過ぎから、AgX 写真材料研究(写真材料プロセスの理論(英語版)、結晶学など)の勉強会を行い、学会発表や特許などを書くことを目的とした。

この時期には、最初、自ら電気化学実験を行って、各種銀錯体の生成定数を決定し、 ^{109}Ag NMR の化学シフトの測定を日本電子本社(東京昭島)まで出張して内外に先駆けて発表した。 ^{109}Ag NMR の化学シフトが決定できたので、このシフトを MO 計算から追究できないかと思い、中辻先生に ^{109}Ag NMR の化学シフトを計算して貰うべく、久しぶりに中辻さんを訪ねた。この頃、偶然中辻さんは、周期表の重原子金属の電子状態の研究をされていたので、快く銀錯体の電子状態と ^{109}Ag NMR の化学シフトの計算も承諾して貰えました。この時、中辻さん、院生諫田克哉さんも含めて NMR 勉強会を数回に亘って行ったのも楽しい思い出となりました。これらは、金属の NMR 化学シフトのオリジナル論文として J.Am.Chem.Soc に掲載されました。

会社(京都)での仕事の話に戻すと、記録材料の開発では、ハロゲン化銀写真材料研究(カラー製版印刷材料に関しては、実験室的材料開発からカラー印刷まで自分で行き、工場生産現場まで立会い、製品化には、山本京之介君の助力を得て、こぎつけることができました。更に市場での印刷屋さんを訪れて製品の使われ方まで見守りました。この時で、入社後 5 年ほどが経過していました。その後、AgBr を主体とする超高感度の写真材料が各写真メーカーでの競争時代になっていました。AgCl を主体とする超高感度写真材料は、何処の写真メーカーも作れていなかったため、写真製版印刷材料の AgX は、AgCl が主体であったので、誰も作製出来なかった高感度の塩化銀平板結晶の作製に挑戦しました。その結晶形成の確認は、走査電子顕微鏡を観察させて貰いながら試みしました。走査電子顕微鏡を見て、内外で初めての平板 AgCl 結晶を観察したとき、大変感激したものでした。しかし、この結晶は、写真特性を調べると、残念ながら写真材料としては、かぶり(fog)が発生して実用化が難しいので、特許出願だけは行い、その後、論文発表を写真記録材料の Journal に掲載しました。後にこの論文を見て、米国 Kodak 研究者が特許に引用してくれました。他、銀塩写真特性などの論文や特許など掲載した京都での 9 年間でした。



1989年(平成元年)、茨城の筑波研究所に移り、開発及び解析研究グループのリーダーを数年担当することになった。当時バブル期だったので、新研究所の分析用装置の予算として4億円超を見積もり、最新の装置 XPS (アルバックファイ社製)、NMR(Bruker 社製)、走査用電子顕微鏡(日立製)、IR、熱分析装置(パーキンエルマー社製)、X線回折装置(リガク社)を購入し、解析グループには、新人5人を操作及び解析技術者として配属して貰いました。会社での開発3グループの研究は、記録材料の特に磁気記録材料開発及び解析研究(磁気、感熱・感圧記録、有機半導体記録材料)を担当し、個人的には余裕の持てない日々が続きました。

筑波研での5年目からは、自分の研究に対する思いを主張することができる環境だったので、自分なりに感光材料のAgXやCuXに絞って、材料研究調査やNMRによる解析など行っていました。週の後半(木、金)曜日は、17時過ぎからは、時々自分の自由時間として、学術的研究なども纏めていました。その時も「これは大学の研究、これは企業の研究」と区別をつけず英語の論文に纏めて Journal に掲載することを心がけました。結局、筑波での9年間、京都での9年間を加えて合計MPMで18年間過ごしました。この会社では、特許20報、論文40報以上を纏めました。

50歳の時、会社の解析研究部門で行った研究論文の2,3の高分子の電子状態に関する論文を読んで貰えたカナダ・ブリティッシュコロンビア大学(UBC)のChong先生(量子化学)からの書簡(Chong先生がクリスマスの次ぐ日に発送)を正月明けに受けた。書簡には、Chong先生の分子レベルの電子状態に関する論文が10報程度同封されていた。その論文を一通り読んで、すぐ共同研究を開始することが出来ました。その共同研究で英語論文を纏める時、ファックス通信で遣り取り出来たので、1年間に5論文のペースとなり4年で20報の論文を重ねることが出来た。それが、わが半生を過ぎた時でした。

1991年(51歳)、自費でカナダから米国を2週間で、XPS及びNMR関係の研究者に会いに行く計画を立て実現させました。会社には2週間の有給休暇を提出し、最初は、カナダバンクーバーのChong先生のUBC(ブリティッシュコロンビア大)研究室を訪ね、更なる今後の研究展開の話をし、大学宿舍の宿を案内して貰いました。3日間滞在し、Chong先生のお宅に伺ったり、奥様Helenさんの案内でバンクーバー市内の観光地を訪れました。また、先生が知人など呼んで、中華料理レストランでの歓待を受けました。

2番目の訪問先(Fort Collinsのコロラド州立大学)は、Seattle経由でDenverに向かいました。コロラド大学にはBruker時代の知人HawkinsさんがNMR技術・研究者として在職しており、コロラド州立大学のProf. Macielの共同研究者でした。この前年、Maciel先生(Chemagnetics顧問)は大塚電子主催のChemagneticsの「固体NMR」の日本での講演会に来られ、先生の研究講演の中にHawkinsさんが共同研究者として登場し、固体NMRのパルス組合せ操作技術法も話されたので、講演後質問したり、Hawkinsさんとの関係を聴いたりしました。日本出発前、大塚電子(株)を通して、今回Chemagnetics本社を訪れ、持参の混晶試料($K_xRb_{1-x}X$ ($X=Br,I$))の測定を依頼し、共同研究として発表することも伝えていたので、Denverでは、大塚電子の橋本さんに出迎えて貰え、Fort CollinsのHotelまで送って貰いました。この時の論文は、J.Phys.Chem.Solids,57, 1609(1996)「 ^{87}Rb & ^{39}K MAS NMR」として掲載されました。



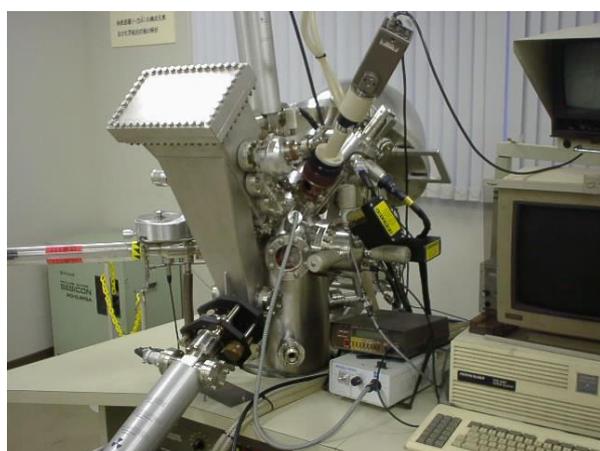
3 番目は、Minneapolis の Physical Electronics 社(アルバックファイの関連会社)で XPS 関係の研究技術者と話をし、自分の講演‘Simulation of XPS for polymers by the MO method using the model molecules’を聴いて貰いました。

4 番目の訪問先は、Prof. G. C. Levy (^{13}C NMR の著名人)(Ann Arbor 在住(Michigan 州)) で、同年齢で、友人的付き合いになっている。この出張 4 年前に MPM の京都で合成研究者のために ^{13}C NMR の講演を行って貰いました。今回は、Michigan 大学を案内して貰いました。日本へ来たときは、必ず再会している。

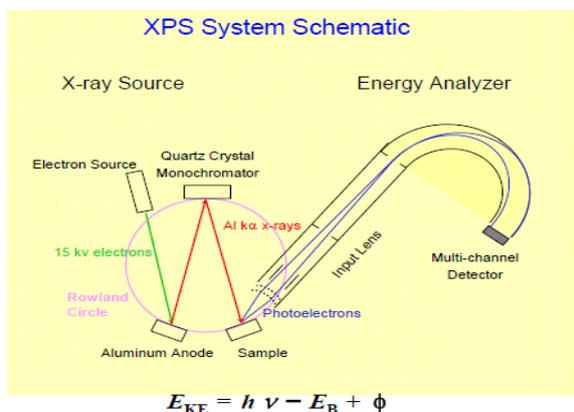
5 番目は、Pittsburgh(Pennsylvania 州)を訪問、MPM の後輩藤田郁夫君の留学先(Pittsburgh 大) Prof. David Pratt と面会し、レーザー分光による生命プロセスの物理化学分野の研究をされているのを知った。この時、同じ研究分野の京大理学部化学科の広田譲先生が Pittsburgh 大に留学されていたと伺った。

6 番目は、Boston の (Bruker 米国本社の見学) 製造部マネージャーの D.Burum さんに工場内を案内して貰い、米国 Bruker の社長(ドイツ Bruker 本社の社長(Prof. Laukien の息子))と対面しました。その後、Boston から New York に出て成田に帰国しました。

1995 年以降、アルバックファイ社製 XPS 装置による高分子の実験光電子及びオージェ電子スペクトルは、自分の DFT 計算による理論スペクトルを加え、その電子状態も含めて、内外を通じて先駆的研究として論文発表し、Journal (J.Phys.Chem.など)に掲載されました。



XPS (or ESCA) 装置



1996 年秋の日本化学会誌 9 月号の大学教員公募欄に金沢大学理学部の助教授公募(数年後に教授)を見付け、締め切りの 1 週間前に応募した。12 月 25 日の最終選考面接に選ばれ、その面接の教授会で自分の学術的研究発表を 2 時間近く発表し、採用されることになった。次ぐ年(1997 年)4 月に赴任し、須原先生、水野元博先生と一緒に自分の専門は、物理化学分野の量子化学、磁気共鳴、電子分光などの専攻としました。詳しくは、固体内部並びに表面構造の他、原子・分子レベルの構造や状態変化の教育研究を行うこととしました。金沢は、単身赴任であったので、wife が 2, 3 週間ごとに 夕食の料理として 10 日分程を茨城からクール宅急便で送ってくれたのは大変有難いことだった(未だに感謝感謝である。)

Wife は、1 年に 4~5 度猫 2 匹を車に乗せて片道 600km を運転して、金沢を訪れた。2~3 週間ほど一緒に居て、二人で北陸地区を車で、観光したことは、楽しい思い出となった。

1998 年以降、Internet を通じて①カナダ (Prof. A. Moewes of University of Saskatchewan)、②ロシア (Prof. E. Kurmaev, ロシア科学アカデミー所属金属材料研究所)、③フランス (Dr. C. Bureau, CEA-Saclay) の研究者と共同研究を展開し、高分子やインターフェース材料物質の X 線発光スペクトル及び光電子スペクトルの理論解析を行い、それぞれの研究論文(①Thin Solid Films. **357**,106-112(1999), etc、②Phys. Rev. B **60**,15100-15106(1999),etc、③ Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. **B131**,1-12(1997),etc)を発表しました。国内の人たちとは、実験グループ(民間会社の研究所(電解重合高分子, ECASIA 97(John Wiley&Sons, Chichester,1997)759-763.)、産業技術総合研究所(プラズマ表面制御による高分子, Langmuir,**15**,7055-7062(1999).)、理化学研究所(荷電粒子を注入した高分子, Polym.J.**33**,621-628(2001))、表面分析機器のメーカー(分析グループ, J. Phys. Chem. **A 107**, 9403-9408 (2003)) の研究を発表しました。また、色素・顔料・有機半導体材料の X 線光電子スペクトル及び紫外可視の吸収スペクトルの理論解析(Bull. Chem. Soc. Jpn, **71**,807-818(1998) , Bull. Chem. Soc. Jpn. **73**,43-51(2000), J. Mol. Struct., **608**,175-182(2002), etc)も行いました。金沢でのこれらの研究は、研究室 staff(水野元博さん、井田朋智さん)と当時の学生諸君と論議しながら、各種素材物質の実測スペクトルの理論的解釈と共に理論スペクトル算出する方法を確立することができたと思っています。

専門分野の国際会議には、2 年毎に欧州(スウェーデン- Göteborg での (ECASIA 国際会議)、ベルギー (Brussels での DFT 国際会議や Namur 大学の Pireaux 先生の研究室で 2 回講演、ドイツ(Münster 大学での SIMS 国際会議)及び韓国(特に表面科学研究発表会)に 3 回程出かけ、特に 2000 年秋には、共同研究者の Bureau 博士の招待で、フランスパリ近郊の CEO(原子力研究所)-Saclay に 2 カ月間在留し、パリ近郊の apart を住居とした。この間、wife も apart に 1 カ月訪れて、土日は、パリ観光に出かけました。

金沢時代での特記すべき事としては、文科省の学術研究費の中で特別招聘教授研究費があった。これは、外国人の共同研究者でノーベル賞研究に近い研究者を対象としたもので、2 ヶ月間、大学の研究室に招くことができた。(招待された教授は、月収 90 万円超、宿は大学のゲストハウスか市内のホテルで、費用は大学持ち、渡航費は、夫婦揃って飛行機でビジネスクラス)。私は、5 年間の間に 2 人の共同研究者(カナダ UBC の Chong 先生とロシア科学アカデミー金属研究所の Kurmaev 先生)を研究室に 2 ヶ月間招くことが出来、両先生との共同研究は、別々に 20 報以上の研究論文として Journal に発行された。

金沢大を定年後 75 歳まで、母校の東京理科大で物理学科・化学科向けの化学熱力学、物理化学、量子化学、化学数学、原子分子物理学などの講義を担当し、大学内外に限らず、理論的な共同研究も進めている。それは、自分の家で、金沢大時の desktop-pc(大学から許可)を自宅に移し、また自分のパソコン(pc)を用いて原子・分子レベルの計算を行えるからである。2011 年 9 月中旬には、5 日間に亘り金沢で国際会議 QSCP(Quantum System in Chemistry and Physics)XVI を開催することになった。これは、私が金沢を定年する前年(2007 年)に、QSCP の Chair をされているスウェーデン・ウプサラ大学の Brändas 先生が、



金沢を訪れ、「2011年に金沢でQSCPを開きたい。」ことから始まる。世話人は、金沢大の量子論関連の研究分野の後輩先生たち(西川清さん、長尾秀美さん、井田朋智さん)になって貰い、名誉 chair には、青野茂行先生になって頂いた。金沢でのQSCPには、夫婦で参加し、Openingの時、青野先生は欠席されたので、青野先生の message は、私が代読した。この時の私の研究発表は、(Oral,Poster)それぞれ1件ずつ行った。

2012年夏、私が最も尊敬する恩師の青野先生が88歳で逝去されたのは、とても残念なことであった。先生は、亡くなる前日まで、量子論の原著を読みたいからと、息子さんに病院まで持ってきて貰ったと聞いている。また亡くなる3年前までは、学会発表も行ったり、論文まで書かれていた。私が、青野先生に貢献できたことは、先生の研究発表論文をすべてpdfファイルに纏めて、米寿のお祝いの論文集として誕生日前に先生にお送りしたことだった。先生に大変喜んで頂いたのが、私にとっての慰みとなった。

私たちの金沢大理論化学研究室出身のグループでは、青野先生を囲んで、2002年からこの理論化学研究室関係者による研究会を年に1度秋に開催することにした。この会を“AonoSchool(青野学派)理論化学研究会”と命名し、青野先生が、亡くなられてからも、私が代表幹事となり、毎年、青野先生の弟子たちが、活躍している大学で、勉強会を開催することにした。2012年以降、東京(2012年)、大分(2013年)、長岡(2014年)、金沢(2015年)と開催し、名古屋(2016年)、東京(2017年)、長岡(2018年)、群馬(榛名)(2019年)、コロナ禍のため2020、2021年は休止し、金沢(2022年)、東京(2023年)で行っている。

最後に述べておきたいこととして、福井先生のノーベル化学賞を記念して、恩師の米沢先生、永田先生が1999年10月10日に出版された「ノーベル賞の周辺」の中から、“日本の研究者は孤独になることを極端に恐れ、皆と同じことをしていると安心しているように見えるが、フランスでは皆と同じことをするのを最も嫌い、他人と違ったことをやりたがる”(永田先生へのフランスの若い研究者の言)や福井先生(1981年ノーベル化学賞)の言「数多くの文献を読み、それを整理蓄積するタイプの勉強に関心をもたなかった。文献を読むならすぐれた論文を選び、それを徹底して読むように薦めた。」は、同感です。また、独創的人間に必要な素養とは、「①科学に興味をもち、研究が好きであること。②世俗的な栄誉や利益と独創的研究は相容れない。③好奇心、文献の読み方、主流よりも反主流が大切である。」は、重要なことと思う。



「思い返してみる」

加藤 毅

東京大学大学院 理学系研究科

中辻博先生から大変ご丁寧な「量子の世界」への寄稿のご依頼を受けたのは3月の初旬でした。執筆をお引き受けした時から、私自身が量子化学を専門とする研究室の出身者ではないこと、これまでに指導してきた学生数も少数であることから、「量子の世界」について何がしかを記せるなどとは露にも考えてはおりませんでした。ですので、ここでは私がこれまでにどのような環境・心持で研究を遂行してきたのかを記して「量子の世界」の読者の方々にささやかな話題を提供できればと考えております。



加藤 毅 先生

私は東北大学理学部化学科で藤村勇一教授が主宰されていた数理化学研究室で学位を取得しました。研究内容は、一言でいえば、分子系の非線形光応答の解析ということになります。分子系のハミルトニアンとその定常解が与えられた条件下で、非線形光学応答を求めることが中心的な課題で、時間に依存した高次の摂動理論と振動子に対する密度行列が研究の道具でした。学位取得後は、台湾、つくば、片平（仙台）、岡崎とポスドクを渡り歩きました。岡崎では多次元振動分光法を提唱したばかりの谷村吉隆助教授の下で、本格的な数値計算を経験することになります。それまでの研究では、定式化とそれに続く手計算の確認のための数値計算程度しか経験したことがありませんでしたが、谷村グループでは一つのプロットを作成するのに2週間から1か月程度の計算時間は普通のことでした。必要とされた理論は振動子系に対する経路積分法でしたが、学位取得後の1か月間ほど「ファインマン経路積分と量子力学」を頭ごなしに解いていった経験があり、その時のノートが役に立ちました。研究テーマは最新のものではあったのですが、私自身のアイデアを殆ど盛り込むことができずにおり、仙台の藤村先生のところまで行って、もう研究者を目指すことは止めて違う職を探そうと思うのです、とご相談にあがったこともあります。そのような経緯もあってか、藤村研究室の助教授であった河野裕彦先生が強光子場科学分野の理論研究者として世界的な研究を展開されるようになった時に、研究支援者として雇用して頂き、私は再び数理化学研究室にお世話になる機会に恵まれました。2002年の頃です。

強光子場科学の分野にあまり馴染みのない読者の方もおられるかも知れませんがその概要を記しておきます。強いレーザー場を使った特異な物理現象の誘起は、1979年のP. AgostiniらのXeの多光子（超閾）イオン化実験にまで遡ることができるのかも知れません。そして、1988年のA. L'Huillierらの希ガス原子からの高次高調波の発生の発見とその発生機構の解明は、近赤外領域の高強度のレーザーパルスの生成技術の発展をさらに促し、2000年代に入ってからの軟X線領域のアト秒（ $1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$ ）パルス発生の実現に繋がりました。これらの発見や発明は2018年（G. Mourou, D. Strickland）と2023年（P. Agostini, F. Krausz, A. L'Huillier）のノーベル物理学賞の対象研究となっています。2023年のノーベル物理学賞の選考委員会は3氏の功績を“for experimental methods that



generate attosecond pulses of light for the study of electron dynamics in matter”と総括し、“We can now open the door to the world of electrons. Attosecond physics gives us the opportunity to understand mechanisms that are governed by electrons. The next step will be utilising them”と評価しています。ここで、電子運動の時間スケールの例としては、水素原子の基底状態にある電子の古典的な周回時間が 152 アト秒であること、また、10 eV のエネルギー差のある 2 つの定常電子状態の重ね合わせ状態の運動周期が 414 アト秒であることを挙げるすることができます。したがって、強光子場科学分野で新たに見出される現象を理解し、活用するためには、物質と光の非摂動論的な相互作用を記述する新しい動的な理論手法が必要となってくるのです。

研究室では外部レーザー電場 $\varepsilon(t)$ の影響をシュタルク効果として取り入れた量子化学計算（断熱状態法）によってポテンシャルエネルギー曲面（PES）を構築し、時間（すなわち電場振幅 $\varepsilon(t)$ ）に依存した PES 上での核波束運動の計算を博士課程の学生が行っており、また、電子系の動力学計算では水素原子、水素分子イオンに対する厳密計算がひと段落したという状況でした。そして、私自身は一体何をすればよいのか、正直に申して、何も分からない状況でした。今から思うと非常に有難かったことに、河野先生からは「何か電子運動が従う法則のようなものがないかねえ」と、かなり一般的なテーマを与えられておりましたので、断熱状態法でもなく時間に依存したシュレーディンガー方程式を厳密に解くアプローチでもない、何か新しい方法論を構築すべく、藤永茂先生の教科書を頼りに電子状態理論をゼロから勉強することができました。

当時、汎用性のある実時間計算法として、時間に依存した密度汎関数理論（TDDFT）が知られてはいたのですが、何分不勉強でしたし、交換相関汎関数の困難なことについてはさすがに聞き及んでいましたので、選択肢から外しました。しかし、一方では 1 電子ポテンシャルという明確に意味付けられる量を使って多電子動力学が議論できるという点には一種の憧れを抱いていました。そのような状況の中で、私自身の大体の目指す方向は、時間に依存した波動関数理論における有効一体場を見つけること、ということに収斂していきました。

それからは毎日、河野先生の出勤を待ち構えては議論を持ち掛けるという日々が数カ月は続いたと思います。私は MCSCF の何たるかもよく分からない状況でしたので、非常に初等的な議論もして頂いたと思います。河野先生は大変お忙しい中、最低でも 15 分間位は、ときには河野先生が前日の夜に作成した資料を持参して頂いて議論を重ねました。

その時の議論から生まれた方法論の骨子は、時間依存の配置間相互作用法を拡張した形式をとり、配置関数を構成している分子軌道自体も時間に依存させて最適にするというものでした。分子軌道を時間に依存させて最適化する、あるいは分子軌道の運動方程式を導くためには時間に依存した Dirac-Frenkel の変分原理の利用が大変に有効でした。実際、Dirac の量子力学第 4 版の翻訳書の付録にこの変分原理を見出すまでは理論展開に行き詰まりを感じていました。この方法は現在では多配置時間依存 Hartree-Fock (MCTDHF)法として受け入れられています。この方法論を定式化し、小原・雑賀の分子積分の計算方法の勉強から始めて MCTDHF の計算プログラムを 2 年近くかかって完成させたことで私自身、やっとオリジナルな研究の端緒を掴んだ気がしました。広島で開催された理論化学討論会の場で



初めて MCTDHF について報告した時に、中辻先生から「大変面白いと思います」とのお言葉を頂いたことは研究を進展させるうえで大きな励ましとなりました。

その頃私が心の中でよく反芻していたことは、「苦勞するということと、理解するということは同じ意味ですよ」(小林秀雄 講演 第三集「本居宣長」, 新潮社カセット文庫) という高校生の頃から信じ始めていた言葉でした。

MCTDHF 法は当初の目的であった波動関数理論における有効一体場理論ではありませんでした。波動関数理論における有効一体場理論は、私が 2006 年に東京大学に職を得た後の 2018 年に論文としてまとめることができました。MCTDHF 法の報告から 14 年後のことでした。この有効一体場理論の中に適切な近似を導入することによって、これまでに提唱されてきた多配置波動関数に対する有効一体場、例えば、J. C. Slater が提唱したポテンシャルを合理的に導くことができました。また、配置関数を展開する分子軌道を配置関数の組毎に設定する非直交分子軌道を使う場合にも、分子軌道の組毎に有効一体場を導入することができることも分かり、Hill-Wheeler 方程式と呼ばれる方程式を動力学計算に応用する際の実践的な処方となることも分かりました。この間、電子系の動力学計算法として開発された MCTDHF は、MCTDHB としてボーズ粒子系の動力学計算法として、あるいは、電子-核波動関数の取り扱い法としての改訂・拡張が様々なグループによって行われました。我々も、電子-プロトン波動関数への応用研究を行いますが、そのことは Born-Oppenheimer 近似を越えて「分子構造」を考えるためのヒントとなりました。しかし、これらの理論を使って厳密な有効一体場を求めるためには、波動関数を展開する配置関数を原理的には無限個とらなければならない、現実的には「厳密な有効一体場」は計算できない量となっていました。このような訳でそれまでずっと避けてきた密度汎関数理論に消極的ながら魅力を感じるようになってきました。そして、私の研究の重心は波動関数の研究から、密度汎関数の研究に徐々にシフトしていくことになりました。

密度汎関数の研究の契機として先ず思い出すことは、徳島での分子構造総合討論会での中辻先生が発せられた質問です。DFT の長距離補正のご講演に対して、中辻先生が真っ先に質問に立たれ「どうして補正ばかりを考えて、厳密な密度汎関数理論を展開しようとなさらないのでしょうか？」とご質問されました。勉強不足から「厳密な密度汎関数理論」というものをイメージすることさえできなかった私には大変に新鮮味のあるやり取りとして記憶に残りました。また、高田康民先生が「第一原理からの多電子問題：今、何故、これが物理理論の中で一番重要と考えるのか？」の中で述べられている以下のステートメントも忘れられないものでした。「高次の密度相関関数に無関係に、単に一体問題を解くだけで $n(\mathbf{r})$ が厳密に決定されるということは、BBGKY の階層構造で記述される物理的実体と直接的には無関係に $n(\mathbf{r})$ が決まるということなので、DFT で現れるこの $v(\mathbf{r})$ (筆者註: $v(\mathbf{r})$ は Kohn-Sham ポテンシャルのこと) は物理的な実体ではあり得ない。 $n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ なども同時に決定されるように DFT を拡張する試みが多数提案されてきた。私見では、このような試みは DFT 本来の哲学に反するがゆえに決して成功しないものとする。そもそも、 $n(\mathbf{r})$ とは異なり、 $n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を具体的に決める方程式は一体問題には還元できず、それゆえ、この二体密度相関関数を決定する問題の難しさは通常が多体理論におけるそれと同等になるので、DFT を標榜する利点が失われる。言い換えれば、 $n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を議論すると、忽ち DFT は数多の多体理論の群れの中に埋没してしまうのである。」私が DFT を勉強し始めた当時、



MCTDHF を指導したことのある卒業生に送った、とても虫のよい私の感想が残っています。「DFT をきちんと習得するにはもちろん伝統的な多体問題に対する理解が必要だと思えます。しかし、今更物理学科に入ってやり直すわけにもいきません。また、高田はテキストの中で以下のようなことを書いています。--上のステートメント-- これを我田引水的に解釈すれば、DFT の理解自体は伝統的な多体論の立場からは全く離れたところでなされる、ということになります。その意味で、上の内容は伝統的な多体問題に精通していなくても DFT の理解は可能かもしれないという励ましになるのではないのでしょうか？」

先に言及した波動関数理論における有効一体場理論を展開した時の印象から、厳密な交換相関ポテンシャルを定式化することができれば「厳密なエネルギー密度汎関数」の構築も何とかなるのではないかと真剣かつ楽観的に考えるようになってきました。この方向転換を後押ししてくれた忘れることのできない出来事は、2016 年から 2 年間の分子研での客員准教授としての招聘です。分子研にはかつて藤村研究室での同期生であり、DFT 計算に精通している故信定克幸准教授がおり、また、私の分子構造総合討論会デビューのときからの知り合いであった斉藤真司教授が笑顔で待っていてくれました。

交換相関ポテンシャルを電子密度の汎関数として定式化すること(逆 Kohn-Sham 問題)は比較的容易に遂行することができました。というのも、波動関数理論における有効一体場理論を展開した時に、偶然にも中辻先生が開発されていた密度方程式理論に現れてくる縮約密度関数のセットに遭遇していたからです。密度方程式を使えば、電子間相互作用のある現実系と Kohn-Sham 系での電子密度を比較することは容易な作業です。さらには、こちらも中辻先生が開発されていた時間に依存した密度方程式理論は殆どそのままの論理で、時間に依存した逆 Kohn-Sham 方程式の構築に繋がりました。したがって、基底状態に対する逆 Kohn-Sham 問題と時間に依存した系における逆 Kohn-Sham 問題が同一の理論的根拠から解決されたこととなります。逆 Kohn-Sham 方程式の導出のために使われた密度方程式理論の存在と上記の高田先生のステートメントの調和は、密度方程式と BBGKY の階層構造の関係を解明することで解決できるように思われます。

密度方程式理論と逆 Kohn-Sham 問題との関連について興味深い事実があります。密度方程式理論が提案された 1976 年に Hierarchy equation for reduced density matrices という密度方程式理論の必要条件を述べた論文が発表されています。そして、今度はこの論文をベースにして、1997 年に Exact Exchange-Correlation Potential from Low-Order Density Matrices という論文が公表されています。ただし密度方程式の使い方の違いから、我々が逆 Kohn-Sham 積分方程式を導いたときとは全く異なる式展開がなされていました。MCTDHF の開発を通して、同じような考え方をする研究者は多くいるのだとはよく聞かされた話でしたが、これらの論文を見出した時にはとても驚きました。

閑話休題。残る問題はエネルギー密度汎関数の構築です。この問題は逆 Kohn-Sham 問題ほど簡単には解決することができずにあります。着想を得てはモデル系で確認計算を行い、そして着想の齟齬を知らされる、ということをおまわりにも多く繰り返したために、最近では新たな着想を得ても、それを数値的に確認することが怖く思えてくるほどです。それでもこの問題の基礎的な重要性を考えて、そして、教科書での解説文を読んでもなお理解に苦しむことのある密度汎関数理論の論理を打ち立てた P. Hohenberg、W. Kohn、L. J. Sham ら



の労苦を想像して（本当は全く苦労しなかった可能性もあります。W. Kohn, Nobel Lecture, January 28, 1999）、今なお私なりに解を探すことに集中しています。一つ覚えのことでありますが、「苦労するということと、理解するということは同じ意味ですよ」という言葉が心の中で繰り返されます。

密度汎関数理論とは別の観点から、1986年にG. Hunterは電子密度の平方根が従うシュレーディンガー方程式を提出しています。そのシュレーディンガー方程式を支配している有効一体場 $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ は、N. H. Marchらの研究によって厳密なKohn-Shamポテンシャルと関係づけられており、それらの差は電子の量子統計性を表現するPauliポテンシャル $v_{\text{p}}(\mathbf{r})$ と呼ばれるものであることが明らかにされています。これらの研究はより精緻な数値計算を通してE. J. Baerendsらによって継承され有効一体場の理解の深化が図られています。

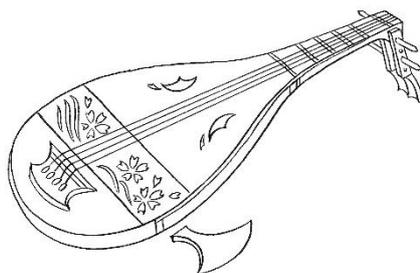
ここで、Hunterの研究の例のように原理に基づいた理論研究が、量子の世界の未解決問題として次世代の理論化学者へ継承されていくことは注目すべき点であると思います。自然を真に理解するためにも、基礎方程式の構築と運用を着実に前進させることには意義があり、不可欠な行為であることは自明であると思います。もし、Hunterが物理的な直感のみに頼って彼の理論を構築していたならば、MarchやBaerendsらの研究との連絡は途絶えていたかも知れません。

Hunterの研究に関連して、最近面白い体験をしました。3月1日から2週間、国立台湾大学からKinetic Energy Partition Methodの開発者である趙聖徳教授をお迎えしたのですが、最近、趙先生もHunterやMarchの論文を読み始めているのだと伺いました。原理に基づいた理論展開がなされていたからこそ、後の世代の研究者が興味を持てる論文となったのであろうとの確認がとれた次第です。

最後に、私の研究はまだその途上にあり、原理のみに基づいた議論から有用な結論を導くことができる段階にはありません。しかし、新たな着想に思い至る限りその可能性を追求していきたいと考えております。

「私たちはこの物語を詳しく話すことにしよう、綿密かつ徹底的に。－というのも、物語のおもしろさや退屈さが、その物語の必要とする空間や時間によって左右されたことがはたしてあったらどうか。むしろ、私たちは、綿密すぎるというそりりをも恐れずに、徹底的なものこそほんとうにおもしろいのだという考えに賛成したい。」

(Thomas Mann, Der Zauberberg (魔の山), 高橋義孝訳, 新潮社, まえおき)



「第 16 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: 2024 年 5 月 11 日 (土) 13:00~16:40

場所: **京都テルサ** 東館 3 階 B 会議室 (京都駅南)

昨年と会場が異なります! (次ページ地図参照)

参加費: 無料、申し込み・問合せ: office@qcri.or.jp

「革新的量子化学シンポジウム」は、毎年 5・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、その奥の深さ**」を、**感得し、楽しむこと**にあり、そこに集まった人々が互いに交流し、新しい繋がりが創られる場となるよう願っています。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、とりわけ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。休憩時間や懇親会でも、和やかで楽しく親しい会話がかわされることと存じます。

プログラム

13:00 挨拶・司会 中辻 博

13:05-14:00 榊 茂好 (京都大学)
「d 電子複合系の理論化学・計算化学」



14:00-14:30 休憩

14:30-15:20 松崎 洋市 (日本製鉄(株))
「量子化学計算による
カーボンニュートラルへの挑戦」



15:20-15:50 休憩

司会 江原 正博

15:50-16:20 黒川 悠索 (量子化学研究協会研究所)
「超高精度な量子化学を目指したこれまでの研究」



16:20-16:40 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)
「自由完員関数理論(Free Complement theory)
の最近の進歩」



懇親会

日時: 2024年5月11日(土) 17:00~19:00

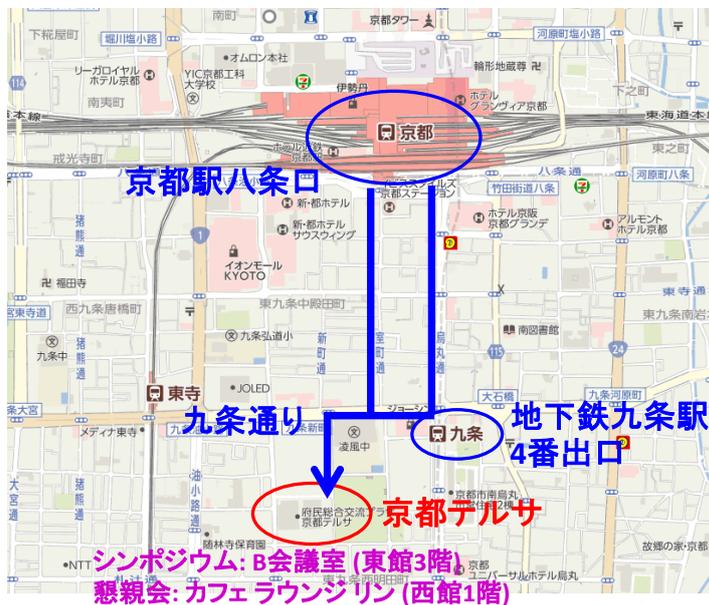
場所: カフェ ラウンジ リン「Cafe Lounge 凜」
(京都テルサ内、西館1階)

参加費: 5,000円 (着席ビュッフェ形式)

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
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

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@qcri.or.jp まで、
5月9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:



「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」開催まで 2 か月！
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

ホームページ: <https://www.cat.hokudai.ac.jp/jcs8/>

Registration, ポスター発表 募集中！ 是非、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えます。また、invited poster を充実させて、広く参加を呼び掛けたいと思えます。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



登別 (エクスカーションの候補地)



地球岬



編集後記

1. 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。この認定 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 円以上の寄附**が法律で定められています。皆様の温かいご支援により、多くのご寄附を賜り、深く感謝申し上げます。今期は 2020 年から 2024 年までの 5 年間ですが、**毎年 100 人以上という絶対基準の人数カウント**はとても厳しく、是非、本 2024 年度も、多くの方々から、私たちの研究活動に対する支持の証としてのご寄附を、よろしく願いいたします。また、周りの方にもお声掛けして頂けましたら幸いです。どうぞよろしくお願い申し上げます。

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**が受けられるという特典があります。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。

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。

ご寄附のお振込先： 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・番号はお間違えないよう記入してください。				振替払込請求書兼受領証			
口座記号		口座番号(右詰めで記入)		金額		口座記号番号	
0 0 9 1 0 6		3 3 2 2 2 5		千 百 十 万 千 百 十 円 * 寄付金額をご記入ください。		0 0 9 1 0 6	
加入者名 * 特定非営利活動法人 量子化学研究協会				料金		加入者名 * 特定非営利活動法人 量子化学研究協会	
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。				備考		金額 * 左上と同じ金額をご記入ください。	
ご住所とお名前を必ずご記入ください。				日附		おなまえ * お名前をご記入ください。	
(ご連絡先電話番号)				印		ご依頼人 * 様	
ご依頼人欄に、おところ・おなまえをご記入ください。				日附印		(消費税込) 円	
これより下部には何も記入しないでください。				備考		備考	

各票の※印欄は、ご依頼人様においてご記入ください。

記載事項を訂正した場合は、その箇所に訂正印を押してください。

この受領証は、大切に保管してください。



銀行や郵便局(ゆうちょ銀行)でのお振込

銀行や郵便局(ゆうちょ銀行)からは、窓口やATM(現金での振込も可)、各銀行のインターネットバンキング、ゆうちょダイレクトなど、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: 定額自動送金

毎年継続してご寄附をお申し出頂ける方には、各銀行の定額自動送金のサービスを利用することによって、毎年の振込の手間を省くことができます。各銀行窓口にて、所定の依頼書を記入し手続きを行うことで可能になります。銀行によっては、インターネットバンキング上での手続きも可能です。

各銀行の手続きの案内:

三井住友銀行:

<https://www.smbc.co.jp/kojin/furikomi/soukin/>

三菱 UFJ 銀行:

<https://www.bk.mufg.jp/tsukau/furikomi/teigakujidosoukin/index.html>

ゆうちょ銀行:

https://www.jp-bank.japanpost.jp/kojin/sokin/jido/kj_sk_jd_jdsokin.html

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	<p><対象となる寄附金額は、所得金額の40%相当額が限度></p> <p>所得控除と税額控除の選択制</p> <p>* 所得控除: (寄附金額 - 2,000 円) を総所得金額等から控除</p> <p>* 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</p>
個人住民税	<p><対象となる寄附金額は、総所得金額等の30%相当額が限度></p> <p>* 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</p>

(※) 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。



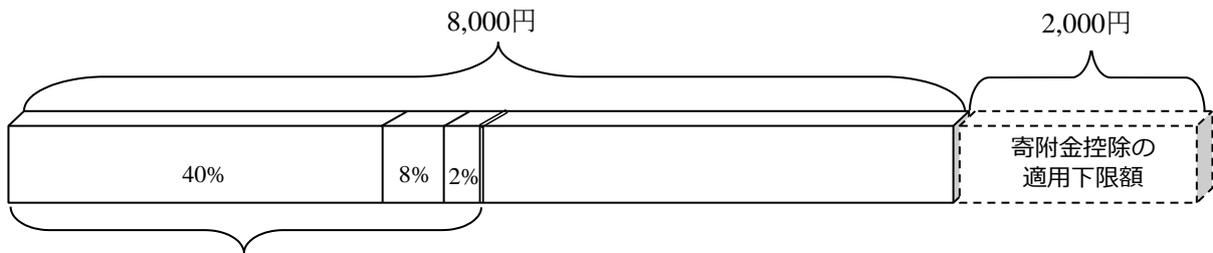
(参考) 京都市民の方が認定NPO法人に 10,000 円寄附した場合の例

(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: $(\text{資本金等の額} \times 0.375\% + \text{所得金額} \times 6.25\%) \times 1/2$

(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)



2. ご賞稿を「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、分子、更にそれ等からなる生物、そして私たちを含め、この世のあらゆるものが含まれます。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。本紙「量子の世界」は、それらを如何にうまく映し出そうかと日々悩んでいる私たちの活動の表現でもあります。これら広い意味での「量子の世界」を皆様の力で築き、未長く発展させ、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、宇宙の神秘、そして日々の生活の中にある哀歓、それらすべてを対象にしており、これらについて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、量子の民たる私たちの、「自由闊達な思いと意見の広場」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.19, 2024 年(令和 6 年) 春号

2024 年 4 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 © 2024 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
(<https://www.qcricri.or.jp/>)にてご覧になれます。

