



量子の世界

No. 20, 2024 年 秋号 (2024/12/6 発行)

- 20 号 記念号 目次 -

	ページ
1. 素晴らしい人との出会い	1
平尾 公彦 (京都大学)	
2. 「波田の式」を求めて	5
波田 雅彦 (京都府立大学)	
3. 「第 16 回革新的量子化学シンポジウム」のご報告	9
4. 「第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム」(北海道大学)のご報告	12
5. 量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い	20
6. ご貴稿を「量子の世界」へ	23
編集後記	23

素晴らしい人との出会い

平尾 公彦

京都大学 福井謙一記念研究センター リサーチディレクター

量子化学研究協会理事長の中辻博さんから「量子の世界」20 号の巻頭言への執筆依頼がありました。中辻さんとは半世紀以上にわたる長いお付き合いです。数えきれないほどの楽しい思い出があります。内容は何でも良い、というお言葉に甘えて、思いつくまま筆を執りました。結果として中辻さんとの思い出を振り返りつつ、口には出せない中辻さんへの感謝の念を表わすことになってしまいました。巻頭言には相応しくありません。お許してください。

人生において素晴らしい人との出会いが、その人の生き方や価値観に大きな影響を与えることがあります。素



平尾 公彦 先生



晴らしい人との出会いは、ただの偶然ではなく、人生に深い意味と影響を与える出来事です。その人との出会いを通じて自分の成長が促され、新しい視点や価値観が広がり、人生に対する意欲が湧くことが多いでしょう。このような出会いは、その人の人生に輝きと方向性をもたらし、生涯にわたって影響を与える大切な経験となります。私の場合、真っ先に思いつくのは加藤博史先生、藤永茂先生そして中辻博さんです。いずれも私が 20 台に初めてお目にかかった方々です。この方々との出会いがその後の私の人生を決定づける大きな転機となりました。

加藤博史先生は京都大学の大学院時代の恩師です。加藤先生が若者たちを引きつけたのは、何よりも先生の誠実さと率直さ、そして飾り気のない人柄と、研究に対する熱意でした。加藤先生は全ての人に愛され尊敬され、たくさんの若い研究者に囲まれていました。先生からは「人間性」が学問の本質であることを教えられました。加藤先生は 1992 年 7 月 17 日、祇園祭の朝に亡くなりました。その日のことは、今でも鮮明に覚えています。もっともっと長生きしてほしいかったです。理論研究に対して情熱を注ぎ、そして一般教育の発展にも大きく貢献された一生でした。

加藤先生が亡くなられた頃、大学改革(?)が大きな議論となっていました。自由化、多様化を目的にした大綱化でしたが、それは大学の属性から自由になされたわけではありません。一般教育は常に排除の対象とされてきました。皮肉なことに、いざそれが排除された現在、一般教育、教養教育の必要性は以前にも増して増大しています。今日の大学の研究力低下は間違いなくこの大綱化とそれに続く大学の法人化にあります。加藤先生が心配されていたことが現実のものとなっています。

学位を取った後、私は 1974 年から 1 年間カナダのエドモントンにあるアルバータ大学の藤永茂先生のもとで博士研究員を務めました。カナダには人間たちの小さなドラマなどには見向きもしない大自然がありました。そしてカナディアン・ロッキーの美しい自然以上に素晴らしい人々と出会いました。藤永先生との出会いによって、今まで気づかなかった新しい考え方や価値観に触れることができました。先生はカナダの白人社会への同化に努めるよりも、むしろ、その先住民に親しみを覚え、その側に身を寄せ、北米先住民の目でカナダの社会を見ていました。謙虚さや寛容さ、挑戦する心の大切さなど、先生の持つポジティブな面に触れると、自然とその姿勢を見習おうという気持ちが生まれました。「わが身を糺せ」と教えられました。エドモントンにはわずか 1 年間の滞在でしたが、その後の人生に大きな影響がありました。幸せな時間でした。藤永先生はもちろん優れた理論化学者ですが、思想家、エッセイスト、小説家としても有名です。奥様は先年、お亡くなりになりましたが、先生ご自身は 98 歳の今なお、お元気です。若いころの情熱を持ち続け、活発に執筆活動が続けられておられます。時々、藤永先生のお顔を拝見に福岡に行っています。先生を通して見えない世界を見ることができるようになりました。春になったらまた福岡を訪ねたいと考えています。

人との出会いが、自分では見えなかった可能性を開くことがあります。素晴らしい人のアドバイスによって自分の才能に気づいたり、新しい挑戦への一歩を踏み出すきっかけをもらったりすることがあります。その人から受ける影響がきっかけで、自分の進路や人生の目標が変わることもあります。中辻博さんとの出会いがまさにそうです。中辻さんは京都大学の米澤研究室の先輩に当たります。修士課程 1 年生で研究室に配属された時、中辻さんはすでに博士課程の大学院生で活発に研究されていました。当時、理論グループは小規模です



ぐ上の先輩が中辻さんでした。理論化学を初歩から手取り足取りして教えていただきました。中辻さんには公私にわたって親しくしていただきました。本当に充実した大学院時代でした。

中辻さんは大学院時代から独創的な理論を次々と発表され、めざましい活躍をされました。私もその背中を懸命に追いかけてました。中辻さんは学位を取得された後、京都大学で助手に就き、そのままずっと京都大学に籍を置き、福井謙一先生以来の理論化学の京都学派の中心としてその伝統を守り、発展させてきました。中辻さんあつての京都学派でした。中辻さんにはブレない力強さがあります。

反対に私は各地を転々とししました。カナダから帰国後は新設された滋賀医科大学の教養部で今村詮先生のもとで助手を務め、5年後に名古屋大学教養部に移りました。30代の教養部での10年間の助手時代は毎日、学生実験の準備や試薬作りに追われ、研究時間を確保することが難しい状況でした。周りの人々には大変良くしていただきましたが、これがこれまで努力してきた結果なのかと時折、絶望感に襲われ、転職を考えたこともありました。人生の中でもっとも苦しかった時期だったかも知れません。こうした研究活動の中での困難や人生の迷いに直面したとき、中辻さんの存在が大きな励ましになっていました。私を理解し、応援してくれる存在がいることで、不安や失敗に対して立ち向かう勇気が湧いてきました。中辻さんは困難を乗り越える力を与えてくれました。おかげで何とか頑張ることができました。その後、1993年に東京大学の工学部に移りましたが、この時も中辻さんの後押しがありました。今、思い返してみると節目節目でずっと中辻さんに助けられた人生でした。中辻さんからは「研究者としての心」を教わりました。本当に感謝しています。

東京大学の最初の10年間は自由に研究に専念できました。素晴らしい同僚や優秀な学生たちとも出会いました。応用化学専攻の魅力あふれる先生方とも親しくお付き合いをさせていただきました。藤嶋昭先生、(故)北澤宏一先生、御園生誠先生、澤田嗣郎先生、……。諸先生方の笑顔は茶目っ気のこもったやさしさにあふれていて、顔を合わせるだけでこちらの気が引き立てられる思いがしました。こうした場を与えてくれた東京大学に感謝しています。最後の5、6年は管理職として大学運営に携わり、雑用に追われる毎日でしたが、これも東京大学への恩返しと考え、一生懸命務めました。

東京大学を退官後、理化学研究所に移りました。「火中の栗を拾う」ことになるからやめた方がいいと多くの方からアドバイスがありました。事実、その通りでした。神戸で新しく研究所、計算科学研究機構を一から立ち上げ、スパコン「京」の運用に関わりました。苦勞の連続でしたが、神戸でも素晴らしい人との出会いがありました。米澤明憲先生、宇川彰先生と知り合うことができたことがせめてもの救いでした。

考えてみると、まわり道をしたことでそれだけ人生を長く生きられたような気がしています。京都、名古屋、東京、神戸、各地を転々としましたが、どこも気に入っています。好きになるように努力してきました。それぞれの場所に思い出があり、素晴らしい人々との出会いがありました。

理化学研究所を退任後は京都に戻り、京都大学の福井謙一記念研究センターでお世話になっています。雑務から解放され、一研究者として現役復帰すべく、努力していますが、長年にわたるブランクは大きく、若い人に助けられながらの研究です。

量子論誕生以来、理論化学は物質内での電子の振る舞いについて多くの知見を提供し、化学の知識を豊かにしてきました。多電子系では、2階の微分方程式を解析的展開法を用いて、



行列式の固有値問題という代数の問題に帰着させて Schrödinger 方程式を近似的に解いてきました。中辻さんはこれまでとは異なるセンスで、しかし同じような細心さで、基礎方程式である Schrödinger 方程式そのものの内容を分析し、Schrödinger 方程式を厳密に解く理論を作り上げてきました。独創的な研究です。リアル系の Schrödinger 方程式を有限規模の計算の可能性のなかで解くことができれば、新たな可能性がひらかれることでしょう。大いに期待したいです。

スペインの画家、Francisco de Goya (1746-1828)の晩年の版画に「Aún aprendo (それでもまだ学ぶぞ)」があります。杖を突き、白髪で腰が曲がった 80 代の Goya は自画像



にこの題名をつけました。「Aún aprendo」は私のひそかな「座右の銘」です。きっと中辻さんも Goya のように一生、研究が続けられることでしょう。中辻さん、これからも、その才能と情熱を持ってさらなる高みへ進んでいてください。心から応援しています！

「波田の式」を求めて

波田 雅彦

京都府立大学

機関誌「量子の世界」が 2015 年 4 月に創刊されて今回で第 20 号であると伺いました。記念すべき第 20 号に文章を書かせて頂くことを大変光栄に存じております。

東京都立大学を定年退職して一昨年度から退職者生活に突入した。然し、未だ研究者としては引退したつもりではなく、研究への熱意があるうちは自分のペースで研究を続けたいと思っている。現在、京都府立大学にレンタルラボを借りてささやかに研究生活を続けている。本寄稿では、定年退職時のエピソードを端緒として、現役時代の研究と、退職後の研究への思いを書かせて頂こうと思う。



波田 雅彦 先生

1. 退職時の贈り物

懇意な有志の皆さんから定年退職のお祝いを頂いた。Bluetooth のオーディオ機器と 10 cm 程度のガラスのペーパーウェイトがセットになっていた（アモルファス SiO_2 ではないがガラスと呼ばせて頂きます）。ガラスの中に好みの文字を書き込むことができる仕様になっている。事前に連絡があり、「波田先生の作った式を書き込みます。式を送ってください！」と依頼された。大変に有難い申し出なのだが、少々困ってしまった。さて「私の作った式」などというものが有っただろうか。量子化学・理論化学の分野で研究をしていたので、式が載っている論文は幾つもあった。然し、どれも「私の式」と云うわけにはいかない。大抵は、中辻先生の式であり、若しくは、他人の式の引用である。私が関与した式だとしても、ガラス彫刻として刻むには躊躇がある（この理由は後ほど述べる）。それほど重々しく考える必要もない話であることは解っている。ただ、折角の機会なので自他共に納得する式を選びたいと思った次第である。写真でしか見たことはないのだが、ボルツマンの墓には $S = k \log W$ と刻まれている。そんな大それた式とは全くレベルが違うのだ。すっきり開き直って、気軽に楽しく「波田の式」なるものを物色しつつ、私の昔話を聞いて頂きたい。

2. 京都大学時代に NMR と相対論的量子化学を始めた

京都大学時代の初期より、中辻先生の御助言の下に、重原子を含む化合物の NMR 化学シフトの計算に取り組み始めた（博士課程の学生の頃にも、4 年生の卒業研究のお手伝いの為に、核スピン-スピン相互作用の計算コードを書いた経験がある）。スピン-軌道相互作用を考慮すると、従来法では再現できなかった NMR 化学シフトが見事に再現できた。最近になってよく云われる SO-HALA (Spin-orbit heavy-atom on the light-atom) 効果である。HALA 効果という言葉自体は昔からあったようであるが当時の私は知らなかった。それでも、毎月のように CPL に論文を書くような幸せな毎日であった。スピン-軌道相互作用だ



けでなく、Breit-Pauli 型の相対論補正項全体を加えたり、1 次の Foldy-Wouthuysen 項を加えたり、相対論レベルを徐々に向上させ、相対論的量子化学と云える領域に近づいていたように思う。同時に相対論の勉強もでき、忙しくも楽しい毎日であった。ところが、そんな際に、Hg や Tl など重原子が共鳴核になると、今迄は面白いように再現できていた化学シフトがどうしても再現できない事例に遭遇した。この問題は 2 次 Douglas-Kroll-Hess (DKH2)法を使う段階で解決され、その当時に中辻研究室に居た福田良一君（現在はプライム プラネット エナジー&ソリューションズ株式会社）が纏めて論文にしてくれた。また、プエルト・リコ大学の石川先生との共同研究として Dirac-Fock 法で化学シフトを計算するコードを作った。中嶋隆人君（現在は理化学研究所）が diamagnetic 項までのコードを作り、私がデバッグ作業と paramagnetic 項を加えて完成させた。更に、Dirac 方程式と電子相関を組み合わせて、Dirac-CCSD 法を開発し、究極の精度（当時はそんな言葉を使っていた、懐かしい限りである）を目指す研究もしていた。この研究は福田君達が論文にしてくれ、途中段階で東京都立大学へ移籍した私も共著にいられて頂いた。思えば色々と皆さんに御迷惑を掛けたのかもしれない。

3. 東京都立大学に移る、初期の悶々

東京都立大学に移ってからも NMR 及び相対論的量子化学の計算を続けたいと思っていた。只、前節で開発した Dirac-CCSD 法は計算量が大きく、自作の計算コードでは大きな分子には適用できなかったもので、頭打ちになっていた。京大時代に使っていた DKH2 法の精度にも若干の不足を感じており、なんとか改良したいと思っていた。偶々、Fe-ポルフィリンラジカルの paramagnetic シフトの研究を目にしたので、今迄の NMR 研究の蓄積と SAC-CI 法も使わせてもらって、ミオクロビン、ヘモグロビン、シトクロム c、HRP など幾つかの化合物の paramagnetic NMR を解析した。初期の研究は JACS に載ったが、NMR 計算の高精度化・相対論化という方向に沿わなかったもので、その後の研究は放置してしまった。paramagnetic NMR も続ければ重要な研究プロジェクトになったであろう。残念な限りである。同じ頃、Barysz さんらの論文を読んだ。今では、Barysz-Sadlej-Snijders (BSS) と呼ばれることもあり、1 電子系の 4 成分 Dirac 方程式を exact に 2 成分方程式に変換する方法である（1 電子系の場合のみ exact である）。衝撃的な論文であった。精度不足の DKH2 法や計算量が膨大な Dirac 法にやや限界を感じていたので、この方法を NMR 計算に適用したいと思った。同時に、これまでの相対論的方法をコードしてきた経験から、論文を読んだ瞬間に「こんなこと簡単にできる」と感じた。式が種明かしされているので誰もが理解できるのは当然なのだが、当時の正直な感想としてご容赦頂きたい。Barysz さんは、BSS を Infinite-Order Foldy-Wouthuysen (IOFW)と呼んでいた。最初は我々も Barysz さんに習って、この方法を IOFW 法と呼んだが、2 報目の論文を提出する際に referee との議論の末に Infinite-order Douglas-Kroll-Hess (IODKH)法という名称に変えた。以下では IODKH と呼ぶ。勿論 IODKH そのものには我々のオリジナリティーは少なく、そこを超えて NMR の計算にまで進む必要があった。

4. 研究を通した学生さんとの出会い

IODKH のコードは簡単に組める、という直観は間違いではなかったが、実際の作業は多難であった。まず、その当時の私に計算コードを書く暇がない。原理は解かっているのに作



業は遅々として進まない。そんなとき清野淳司君（現在は早稲田大学）が現れた。彼に方針を伝え、フォートラン言語の勉強が終わったばかりの彼は、すぐさま IODKH コードの作成に取り掛かってくれた。ここからの展開は早かった。彼は、研究室の蓄積を利用しつつ、半年後に IODKH 法のコードを完成し、次に我々の本来の目的であった NMR 部分のコードも完成し、NMR 化学シフトの計算をやったのけた。IODKH-NMR は DKH2-NMR の精度を凌駕する上々の結果を得た。NMR 項の相対論化は、エネルギー項の相対論化よりも困難性が数段上であることは言うまでもなく、この式は確実に我々のオリジナルである。さらにオリジナルティーを高めるため、1 電子系のみで正確な IODKH 法に 2 電子項を含める研究を始めた。この頃の私は、清野君に対して進むべき方向を指し示すだけ、という状況になっていた。私は口頭で清野君に云った。「2 電子項は IODKH 法を 2 回繰り返せばいいんだよ」。今になって考えると、学生さんの労力を無視した（計算量も無視した）なんともお気楽で大雑把な指示であったことか。でも、私の方針は概ね正しかったらしく、清野君の努力もあって、多電子系 IODKH 法も我々の重要な研究成果となった。このような経緯が、最初に紹介したガラス彫刻に IODKH 関係の式を選ぶことに少々躊躇した理由である。とは言え、自分の机の上に置いて眺めるだけなら、清野君も喜んで納得してくれるだろう。次式は磁場のベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ を含めた 4 成分 Dirac ハミルトニアンが IODK 変換で 2 成分ハミルトニアン $h_{\text{IODK}+}^{V+A}$ に変換されることを示している。

$$U_1^\dagger U_0^\dagger \begin{bmatrix} \mathbf{V}\mathbf{I}_2 & c^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}) \\ -c^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}) & (V - 2c^2)\mathbf{I}_2 \end{bmatrix} U_0 U_1 = \begin{bmatrix} h_{\text{IODK}+}^{V+A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & h_{\text{IODK}-}^{V+A} \end{bmatrix}$$

IODKH 法で NMR 計算をするための出発点になる式である。実はこの式がガラス彫刻になっている。変換行列 $U_0 U_1$ を作用させた後も重要なのだが、長くなるので詳細は論文に譲る (J. Seino, M. Hada, *J. Chem. Phys.*, **132**(17), 174105(1-8), 2010)。

完結しなかった研究も幾つかある。そのひとつとして、Natural Perturbation Orbital (NPO) を使って物性解析や反応解析を実施する研究がある。この研究のモチベーションは昔々の学会での質疑応答に遡る。電子相関を含めた高精度計算を報告した発表があり、その発表後に「そこまで高精度計算をしたのに、反応解析はやはり HOMO-LUMO を使うのですか？」という質問があった。HOMO-LUMO を使った解析は重要だが、質問者の云うように高精度計算には沿わないのかもしれない。この質問がずっと私の記憶に残っており、いつか新しい方法を考えたいと思っていた。これを宮本優弥君（現在はヒューリンクス）に話し、例によってなんとなくぼんやりした大雑把なアイデアを示したら、別の研究 (non-collinear スピン関数の研究であったと記憶している) の合間に、半年ほどで具体的な理論とコードを作ってくれた。これが NPO 法の始まりである。電子相関の DMRG 法で使う特異値解析に類似した方法といえる。DMRG の特異値解析で電子相関を小さな空間に集めるが、物性発現や反応進行に関する効果を小さな空間に集めることもできる。軌道エネルギーという概念が消失するという欠点もあるが（欠点が否か解らないが）、物性計算では 2～3 軌道の中に殆どの効果を閉じ込めることができ、なかなか良好な結果が得られた。これを化学反応へ応用するのが目下の研究だが、果たして完成するかどうかは何とも言えない。



研究室の助教であった阿部穰里先生（現在は広島大学）と共同で実施した研究も、私にとって印象深いものである。Electron's Electric Dipole Moment (eEDM) に関する研究は、時間反転対称性の破れを探索する実験を支援する可能性を秘めており、物理や物理化学の理論・観測の方々との共同研究を進めることができた。砂賀彩光君（現在は Eotvos Lorand 大学のポスドク）がこの研究テーマに加わって活躍してくれた。また、重原子の化学反応における原子核サイズの効果に関する研究は、相対論量子化学を適用する恰好の対象だった。 ^{235}U と ^{238}U の僅かな原子核半径の違い（0.1 fm 程度、1 fm = 10^{-15} m）から定量的に同位体分別係数が計算できることに、当時、驚きを感じた。これらの研究は研究室内の共同研究であるが、阿部先生が主体となった研究ゆえ、これらの式を彫刻に掘るのは少々お恥ずかしい話である。

5. 退職後、研究の抱負

2022 年 3 月末に定年退職を迎え、先に述べたように京都府立大学で研究を始めることになった。一人で研究を始めようと思うと色々困ったことが出てくる。現役時代に研究室のスタッフさんや学生さん達に囲まれていた有難みをひしひしと感じる。技術的・実務的な事は何でもスタッフさんや学生さんに聞けばよかった。例えば、新しい PC を買ったとき、計算科学研究センターの計算機にリモート接続するにはどうするのか。利用の手引きを読んで初手から作業を始めるのはなんとも苦痛である。リモート接続は 2 日で解決するが、日常の度々のトラブルは自分で解決しなければならない（本来はそれが当たり前ののだが）。一人で研究して成果を出されている先輩研究者は皆さんさぞかし苦労されている事だろう。

有難いことに、科研費が未だ継続中である（前節で述べた NPO 法がテーマ）。継続は今年度限りである。さてどうしたものかと考えている。一応は来年度の科研費を申請してある。申請テーマは原点回帰を企てた相対論関係である。先日、公開コードである Dirac で X2C-NMR を計算したところ奇妙な結果が出た。開発者の Saue さんに聞くと「X2C-NMR は未だ不完全だから使わないで」というお返事であった。Dirac のような相対論を謳った汎用プログラムでも、高次相対論において NMR がまだ計算できないなら、私にもまだまだやるべきことは有りそう。科研費が採択されることは期待していないが、採択されれば協力者を募って研究の幅を広げたい。

共同研究も幾つか引き受けている。実験の先生方から聞く新規な化学反応や物性は私にとっては大変に興味深い。一方で、私が使う計算方法は完全に従来法であり、オリジナリティーのカケラもない。更に、これが本来の研究を遅らせる一因になっている。しかし、量子化学が他の研究者の役に立っていることを実感するのは楽しい限りであり、何の見返りも期待せず、やれる限りの協力は惜しまないつもりである。なぜ研究をするのかは人生の phase で異なると思う。私としては、卒業の為－職の為－名誉の為－周り人々の為－趣味の為、だったかと思う。現在は「周り人々の為－趣味の為」の段階に入っているのだろう。人に依っては「世の中の為」という段階もあるかもしれないが、私はその器ではない。私が可能な範囲で精一杯のことをやりたい。

我々理論化学者は実験装置がなくても研究できる。実験を主体とする同年代の先生方と話していると、つくづく理論化学者の有難さを感じる。机に座って PC を操作できる限りは研究を続けたいと思っている。



— ご報告 1 —

「第 16 回 革新的量子化学シンポジウム」のご報告

開催日時: 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)

「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—」が、2024 年 5 月 11 日(土)に下記プログラムにて開催されました。例年以上に多くの方にご来場頂き、講演者の先生方の白熱したお話と共に、参加者の方との活発な議論が展開されました。懇親会も、講師の先生方だけでなく参加者の皆様同士の和やかな交流の場となりました。

来 2025 年も「第 17 回 革新的量子化学シンポジウム」を同時期(5 月頃)に開催予定です。まだ参加されていない方がおられましたら、是非一度ご参加いただければ幸いです。

プログラム

13:00 挨拶・司会 中辻 博

13:05-14:05 榊 茂好 (京都大学)

「d 電子複合系の理論化学・計算化学」

14:05-14:30 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~

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

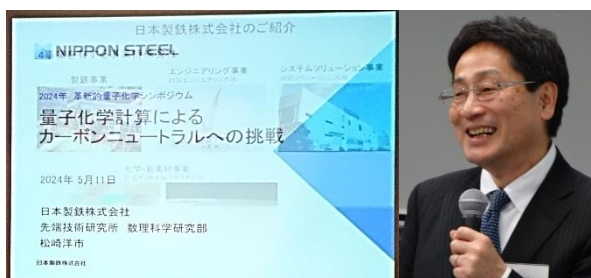


講演して頂いた先生方

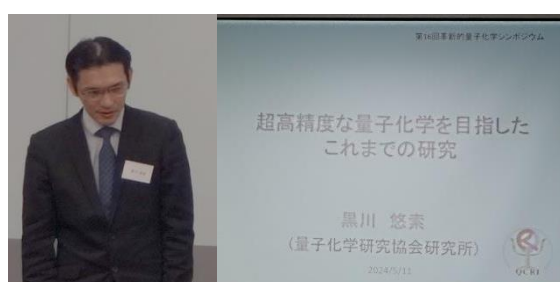
榑 茂好 先生



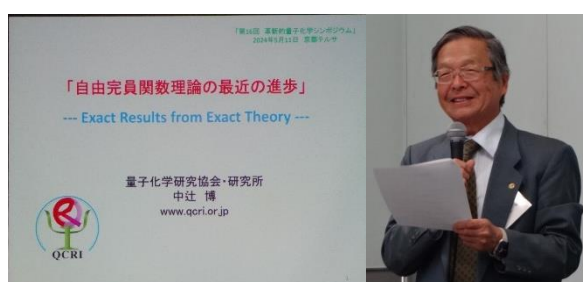
松崎 洋市 先生



黒川 悠素 先生



中辻 博 先生



シンポジウムの様子



榊先生のご講演は、これまでご研究されてきた様々な金属元素を含む化合物の構造論と反応論を「d 電子複合系」という観点から理論的に体系化された先生の緻密かつ壮大な理論化学をお話になり、とても感銘を受けました。松崎先生のご講演は、カーボンニュートラルの挑戦に関する最前線のお話で、企業における量子化学の具体的な活用について知ることができる、大変貴重な機会を得ることができました。黒川先生は、比較的小さい系の超高精度な量子化学について、体系的なご講演をされました。中辻先生は、Scaled シュレーディンガー方程式と自由完員関数理論の最近の進歩についてご講演されました。

また、参加者の皆様からは、多くの質問や議論が展開され、とても活発なシンポジウムとなりました。厚く御礼申し上げます。

休憩時間の様子



講演ごとに 30 分近くの休憩時間が設けられ、講演中に質問できなかったことでも講師の先生と気軽にお話することができました。京都の銘菓、阿闍梨餅、益樹(エキジュ)糖などを楽しみながら、会話が弾んでいました。

懇親会の様子

懇親会は、講演会会場と同じ京都テルサ内のレストランで開催されました。長谷川先生の乾杯のご挨拶からスタートし、和やかな雰囲気の中、お酒も進んでとても盛り上がりました。参加者の皆様と近況を語り合い、次のステップへの活力と英気を養うことができました。



長谷川 淳也 先生
乾杯のご発声



柳田 祥三 先生
閉会のご挨拶



その他の写真は、QCRI ホームページ: <https://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”)から見るすることができます。

— ご報告 2 —

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

2024 年 6 月 17 日(月)~6 月 20 日(木), 21 日(金)(エクスカーション)

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

Web ページ: <https://www.cat.hokudai.ac.jp/jcs8/>

コロナ禍のため延期が続いていた第 8 回 JCS 理論化学シンポジウムは、2018 年の第 7 回・プラハ大会から 6 年を経てようやく、2024 年 6 月 17 日(月)-21 日(金)の日程で、北海道大学の工学部フロンティア応用科学研究棟 (鈴木ホール) にて開催されました。今回の Organizer 代表・長谷川淳也先生にはこの間多大のご心労をおかけしましたが、その甲斐もあって、興味深い発表も多くとても盛会でした。心より感謝いたします。また、開催に当たりその準備、開催中の会場やポスターのお世話など北海道大学の皆様には熱いご支援とご協力を頂きました。感謝の言葉もございません。ありがとうございました。

本 JCS シンポジウムは、チェコの理論化学者 R. Zahradnik 先生、Z. Havlas 教授、日本の中辻が、相互の尊敬と友情を基礎に始めたもので、「Friendship is our principle, Science will follow with us.」という理念のもと、学術的なレベルの高さと、研究者同士の温かい研究交流を育むことを最も重視しています。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され、JCS (日本、チェコ、スロバキア) 3 国の理論化学者の温かい友情のもとに企画されています。これまで、プラハ(2005)、京都(2007)、ブラティスラヴァ(2009)、プラハ(2011)、奈良(2013)、ブラティスラヴァ近郊 Smolenice Castle(2015)、プラハ(2018)、そして第 8 回札幌(2024)と続き、次回は 2027 年プラハで開催予定です。

Opening

オープニングでは、Havlas 先生より、2020 年にご逝去された Rudolf Zahradnik 先生への追悼のお言葉があり、参加者全員で黙祷を捧げました。また、シンポジウム開催直前に、Josef Michl 先生の訃報がありました。Zahradnik 先生、Michl 先生共にチェコの偉大な科学者であり、JCS シンポジウムの創始と、その発展に多大な貢献をされました。謹んでご冥福をお祈り申し上げます。(Zahradnik 先生のお写真は Havlas 先生のご講演からとらせて頂きました。)



Rudolf Zahradnik 先生
(1928-2020)



Havlas 先生より
追悼のお言葉

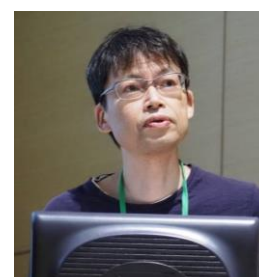


講演と会場の様子

今回の JCS シンポジウムは、これまでの伝統を保持した上で、JCS3 国間及び JCS 以外の国の研究者がより密に friendship が築き上げられるよう、長谷川先生により数々の工夫がなされました。例えば、チェコ、スロバキア側の招待講演者に対し、セッションを共にしたい日本人研究者の推薦を募る Coupled Invitation (CI) が企画され、8組の CI ペアが成立しました。その結果、少し異なる分野や実験研究でご活躍されている方々も多く招待され、とても新鮮なご講演を聞くことができました。また JCS で初めて口頭発表される方や若手研究者の発表も重視されました。



最初のセッションは、Noga 先生が座長で、天能先生のご講演からスタートし、活発なシンポジウムが始まりました。この四日間、どの発表も、世界の最先端でご活躍の先生方によるの素晴らしい lecture ばかりで、聴き応えもあり、セッションの間の休憩時間には活発な議論が行われ、いつも時間が足りない感じでした。長谷川先生の CI の効果もあってか、今までの JCS よりも発表研究の分野も広がり、充実感にとんだシンポジウムになりました。



また、もう一つの新しい企画として、共同研究の促進のための講演が、3日目に長谷川先生の司会でありました。Jan Hrušák 先生による EU の共同研究制度の紹介とその活用、そして前田 理先生による北大の化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD) と MANABIYA(共同研究の窓口)の紹介、がありました。今後、本3か国の研究者の参加による活発な共同研究の実現が望めます。どの講演に対しても多くの質問があり、白熱した議論が展開されました。



休憩時間や食事の時間でも下の写真に見られるように活発な議論や交流が展開されていました。



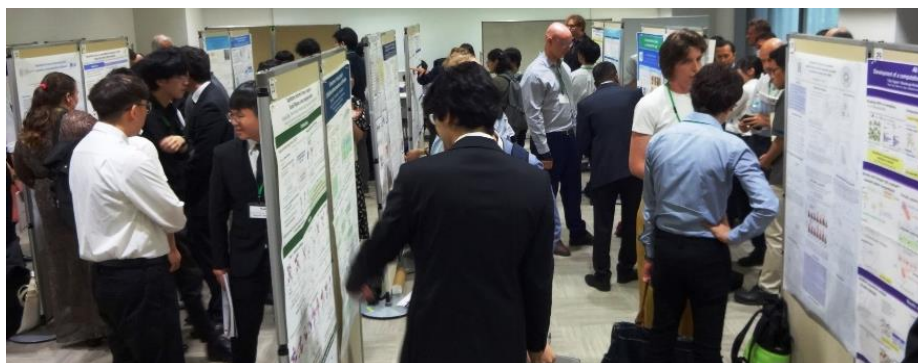
Welcome Reception

初日の Welcome Reception は、札幌の中島公園にある「豊平館」という国指定重要文化財の建物で開催されました。会の始めには、中辻先生のご挨拶により、JCS シンポジウムの理念が改めて説明されました。内部の建築は素晴らしく、伝統的な空間でお酒と食事を楽しみました。若手 hope のピアニストによる素晴らしい生演奏もありました。



Poster Session

ポスターセッションは、科学的繋がりと温かい友情を育むことを目的とした JCS シンポジウムにおいて、最も重要なプログラムの 1 つです。若手や学生さんのご発表も多く、活気溢れる討論が展開されました。また、様々なサポーター、スポンサーから幾つかの賞が設けられ、若手や学生さんにとって、その審査員たる重鎮の先生方と直にディスカッションできる機会になりました。



招待ディナー

2 日目のプログラム終了後は、招待講演者と外国からの参加者が、ディナーに招待されました。Welcome Reception や Banquet とは打って変わって、雰囲気が違う日本の“居酒屋”で北海道名物を堪能し、打ち解けて語り合うことができました。



Banquet

3 日目の夜、北大近くのホテル マイスティズ札幌アスペンで Banquet が開かれました。武次先生、榊先生、スロバキアの Jozef Noga 先生のご挨拶の後、中華スタイルの料理を楽しみました。北大オーケストラの学生さん達による弦楽演奏もあり、とてもいい雰囲気でした。シンポジウムもそろそろ終盤、ついつい、お酒を飲み過ぎてしまった方も多かったはず！ その後も、札幌の街に繰り出した方も多かったのではないのでしょうか。



Noga 先生、武次先生、
榊先生よりご挨拶



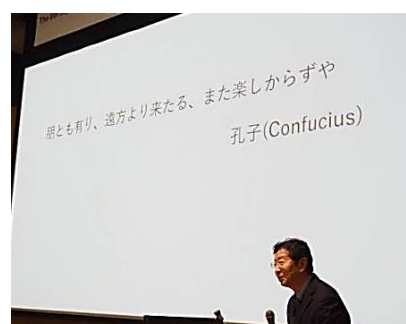
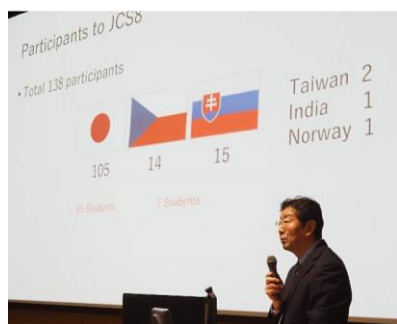
Closing

4 日目、全講演終了後の Closing では、長谷川先生より今回の JCS シンポジウムの総括がありました。今回の参加者は 140 名程 (日本:105、チェコ:14、スロバキア:15、ポーランド、台湾、インド、ノルウェイ等)で、盛況な会となりました。またこの JCS で始めて導入された 3 カ国間のコミュニティ形成の促進のための Coupled Invitation (CI)「相互招待」の企画など、新しい企画の成果も紹介されました。また、本 JCS で紹介された、具体的に共同研究を進めるうえでの EU の実情や日本の取り組みなども、今後に生かされればと思います。また、サポーターやスポンサーによる幾つかのポスター賞の授賞式も行われました。

最後に、長谷川先生より孔子の言葉

「朋とも有り、遠方より来たる、また楽しからずや」

の言葉が紹介されました。まさに、JCS の理念そのものです

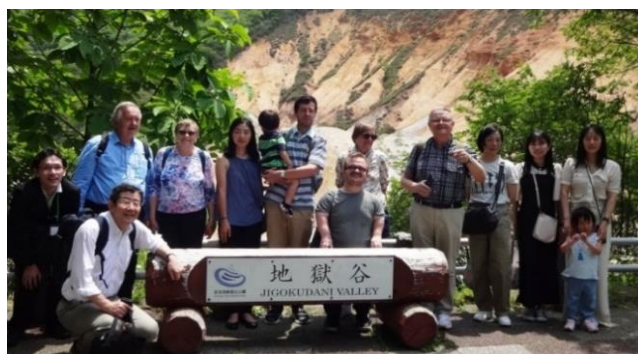


エクスカーショ

5 日目は、北海道の自然を満喫しながら science を語り合い友情を築くことを目的とした、エクスカーションがありました。“Gentleperson コース”と“Adventure コース”に分かれました。前者は観光をゆったり満喫するコース、後者はアクティブに自然を満喫する体力自慢のコースでした。なんとなく、日本人は“Gentleperson コース”が多く、外国人は“Adventure コース”に参加される方が多かったと思います。チェコ、スロバキアの方々は、日頃から美しい東欧の自然を満喫され、ハイキングや山登りを楽しんでいる方も多いようでした。

最初の目的地の登別温泉地獄谷では、地面から噴出する硫黄や高熱の温泉など、自然の壮大さを体感しました。





次の目的地の地球岬は、室蘭の絵鞆半島の最南端の岬で、360 度に近い眺望で太平洋を一望できる景勝地です。地球の丸さを実感し、世界は繋がっているんだなと実感できました。



最後に

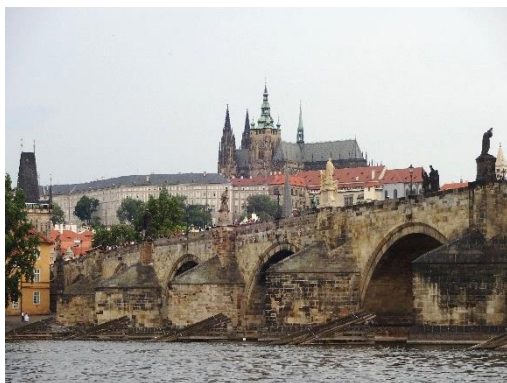
今回の JCS シンポジウムでも、“JCS”の理論化学者がより固い友情を育むことができました。また世代を問わず交流でき、とても楽しい時間を共有できました。

シンポジウム全体に亘り、参加者全員が楽しめるよう計画され、とても素晴らしい会でした。今回の JCS シンポジウムを成功に導き、直接運営してくださいました長谷川先生はじめ北海道大学の Local Committee の先生方や学生の皆さまに厚く御礼申し上げます。(この記事では、北海道大学の神原龍冬さんがシンポジウム中に撮影された写真も、たくさん使わせて頂きました。ありがとうございます。)

— 次回 —

第 9 回 JCS 理論化学シンポジウム

次回の第 9 回 JCS 理論化学シンポジウムは、チェコで開催予定です。是非皆様、奮ってご参加ください。



量子化学研究協会への継続的な参千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。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。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 3000 円のご寄附を、**よろしくお願いいたします。** 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)に設置の青色の「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下さい(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、赤文字の箇所(寄附金額, ご住所, お名前, 通信欄に e-mail)をご記入ください。

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。



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。

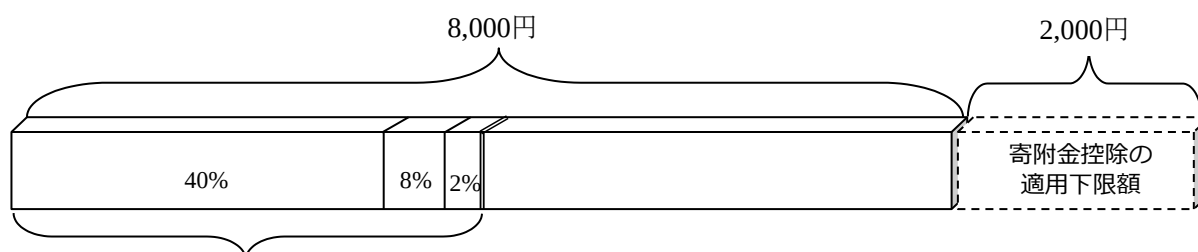
(参考) 京都市民の方が認定NPO法人に 10,000 円寄附した場合の例

（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。）

（参考ページ：<https://www.npo-homepage.go.jp/kifu/kifu-yuuguu/kojin-kifu>）



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、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、それをいかに活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。

編集後記

「量子の世界」も今回で 20 号を迎えました。ここに「20 号記念号」をお届けいたします。2015 年 4 月 10 日に発行された第一号から 9 年の歳月を継続することができました。感慨深いものがあります。これも皆様の熱いサポートのおかげであり、深く感謝いたしますとともに、今後何卒よろしくお願いいたします。

今記念号では平尾公彦先生、波田雅彦先生からご寄稿を頂き、それぞれの熱い文章に、編集委員一同感激いたしました。両先生には心より御礼申し上げます。

この 11 月 14 日、分子科学会速報に廣田襄先生ご逝去との訃報がはいり驚くとともにその真偽を疑いました。先生は京都大学理学部をご退職後も、特に化学史にご興味を持たれ、「現代化学史・原子・分子の化学の発展」と題する大部の著書も出版されました。その御本は単なる歴史書ではなく、例えばノーベル賞等をうけた研究も、その科学を深く掘り下げて説明されるなど、科学書としてもとても価値のある御本です。また、ご健康にもお気をつけられる生活を実践しておられました。量子化学研究協会の恒例の春のシンポジウムでも、2015 年 5 月 9 日(土)に「科学史の楽しみ：ライナス・ポーリングをめぐる話題」と題するご講演をいただきました。ただただ、ご冥福を祈るしかありません。

「量子の世界」第 20 号 記念号, 2024 年(令和 6 年) 秋号

2024 年 12 月 6 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.qcri.or.jp/>)にてご覧になれます。

