



# 量子の世界

No. 21, 2025 年 春号 (2025/4/11 発行)

## - 目次 -

	ページ
1. 還暦を機に研究の歩みを振り返る 武次 徹也 (北海道大学)	1
2. ちいさな修復 - 吠えない犬と、丸まる糸の話 リントウルオト 正美 (京都府立大学)	9
3. 「第 17 回革新的量子化学シンポジウム」のご案内	12
4. クラウドファンディングを実施中：2025 年 3 月 3 日 - 6 月 1 日 テーマ：「化学の支配方程式・神の方程式を解いて化学を预言する」	14
5. 量子化学研究協会への継続的なご寄附のお願い	16
6. ご貴稿を「量子の世界」へ	19

## 還暦を機に研究の歩みを振り返る

武次 徹也

北海道大学 量子化学研究室

このたび、中辻博先生より「量子の世界」巻頭言の執筆をご依頼いただき、大変光栄に感じております。私は昨年 11 月に、人生の節目となる還暦を迎えました。よく話のネタにしているのですが、実は北海道大学量子化学研究室（通称：北大量子研）も 1964 年に創設されており、私と同じく還暦を迎えました。北大量子研は、初代・大野公男先生のご着任に始まり、二代目・山口兆先生、三代目・佐々木不可止先生、四代目・田中皓先生と、伝統が脈々と受け継がれてきた研究室です。そして私自身は、それまでの北大量子化学とは少し系譜を異にする「化学反応ダイナミクス」の分野を切り拓くことを期待され、2005 年 4 月に五代目の教授として着任しました。2024 年は私にとつ



武次 徹也 先生



て還暦の年であると同時に、研究室立ち上げから 20 周年という節目の年でもあります。これを記念して、卒業生有志が企画してくれた会が 11 月末に洞爺湖のホテルで開催されました。家族も招待され、懐かしい卒業生たちと、現役の学生たちも交えて、大変楽しい時間を過ごしました。宴会では「赤いちゃんちゃんこ」を着てステージに上がり、花束や記念品を頂戴しました。そしてサプライズとして、中辻先生ご夫妻からのお祝いのお手紙が学生によって代読され、心温まるひとときに胸がいっぱいになりました。記念講演の部では、卒業生代表として大谷優介さん(現・東北大学准教授)、そして東大・お茶の水女子大学時代に共に研究をした八木清さん(現・筑波大学教授)が、当時の思い出を交えた講演をしてくれました。さらに現役学生 3 名による「北大量子研のいま」のプレゼンもあり、最後に私自身がこれまでの歩みを振り返る話をさせていただきました。講演では、「北大量子研の 20 年」「自分の研究の歩み」「北大量子研の伝統と理論化学の現在」「人生の歩み」という 4 部構成で話す予定だったのですが、つつい話が脱線し、当初予定の 45 分を大きく超えて 1 時間半も話してしまいました。せっかく頂いたこの機会に、還暦を機に振り返った自身の研究の歩みの一部を、この巻頭言でご紹介できればと思っております。

私は東京大学工学部合成化学科の 4 年次に、平野恒夫先生の研究室に配属され、量子化学の世界に足を踏み入れました。研究テーマとして与えられたのは、平野先生が温めておられた「振動混合則・振動マッピング」の理論で、分子の基準振動に着目した新しい化学反応理論を創りたいという壮大な課題でした。当時、化学反応理論としては、福井謙一先生のフロンティア軌道理論や固有反応座標 (IRC) に基づくアプローチが主流で、ポテンシャルエネルギー曲面に基づく議論が一般的でした。そのなかで異彩をはなっていたのが、中辻先生による、静電定理に基づく力の理論でした。(中辻先生は、現在はシュレディンガー方程式の厳密解の探求に取り組んでおられますが、最近ではご自身の「力の理論」と関係づけられ、2025 年 3 月の日本化学会年会では中嶋浩之先生との連続講演の中で、Exact 解のエネルギー勾配がヘルマン-ファインマンカとほぼ一致することを示され、大変感動いたしました。) 分子内の原子に働く力は、ポテンシャルエネルギーを核座標で一次微分し、符号を反転したもので表されます。さらにもう一度微分すれば力の定数行列が得られ、そこから基準振動のベクトルと振動数が導かれます。平野先生から提示された命題は、「この基準振動の固有値方程式に摂動論を適用すれば、振動ベクトルと固有値の変化を導ける。そこに反応座標に沿った変化を絡めて、議論を展開できないか」というものでした。4 年生の 5 月、最初のゼミで論文紹介を担当することになりました。先輩から受け取った関連文献の中に、中辻先生の「力の理論」に関する一連の論文があり、何か心惹かれるものがあったので、それを選びました。初めての論文紹介ということで、全文を翻訳し、必死に内容を理解しながらレジюмеを作成して臨みました。こちらの発表に対し、平野先生や先輩方が真剣に議論してくださったことは強く印象に残っています。もちろん、「新しい反応理論をつくる」というテーマに対してはすぐに答えの出るものではなく、分子理論の基本概念をしっかりと理解し、その上で問題設定そのものを工夫する必要がありました。最終的にこのテーマに関して論文をまとめあげ専門誌に発表できたのは、博士課程 3 年次の冬でした。この間、平野先生には自由に研究をさせていただき、ボルン-オープンハイマー近似、高次元のポテンシャルエネルギー超曲面、そして固有反応座標といった量子化学理論の根幹について、じっくりと考える贅沢な時間を与えていただきました。この経験は、その後の研究における大きな基盤とな



っているように思います。博士課程 2 年次には、立花明知先生の「反応座標の不安定性」に関する論文を読み、さらに藤永茂先生の「分子軌道法」に書かれていた Helzberg-Teller 展開による二次のヤン・テラー効果の議論と結びつけて着想を得ました。すなわち、「IRC に沿って電子基底状態と励起状態の振電相互作用が変化することで、反応経路の分岐が生じるのではないか」というアイデアでした。GAMESS を用いて、 $\text{H}_2\text{CS}$  分子の解離反応と異性化反応における IRC に沿った励起状態のエネルギーの変化を計算したところ、反応座標が不安定となる領域で非全対称の励起状態が実際に基底状態に近づいてくることが確認されました。さらに電子相関の効果により励起状態が基底状態から離れ、結果として反応座標の不安定性が消失することも示すことができました。この研究成果を論文の形にまとめて JCP に掲載されたものが、自身にとって最初の論文となりました。さらに、その年の分子構造総合討論会で初めての口頭発表を行い、質疑応答を通じて多くの刺激を受けたことも、研究者としての出発点として私の中に深く刻みこまれています。

平野研究室での大学院時代を振り返ったとき、大きな出来事の一つが、修士 2 年の 9 月に平野先生が東京大学からお茶の水女子大学へ教授として異動されたことです。博士課程への進学を決意し、その意思を先生にお伝えした直後の頃でした。平野先生が出張中に、かつて外部研究員としていらしていた企業の方から研究室に一本の電話があり、平野先生の異動の話を知って耳にして衝撃を受けました。まさに青天の霹靂で、「自分はこれからどうなるのだろう」と数日間、不安な思いで過ごしました。出張から戻られた先生から学生も一緒に連れていくつもりであることをお聞きしたときには、肩の力が抜けるような安堵感を覚えたのを覚えています。当時、平野研究室には M2 が 2 名、M1 が 2 名、学部 4 年生が 3 名の計 7 名の男子学生が在籍していましたが、東京大学に所属したままお茶の水女子大学で研究を続けることが認められました。結果的に、うち 4 名が博士課程へ進学し、私自身は学位取得後の半年間を含めて、約 4 年間お茶の水女子大学に通うことになりました。お茶の水女子大学では、細矢治夫先生、長嶋雲兵先生、鷹野景子先生、そして細矢研の学生の皆さんとの新しい出会いがありました。新しい環境での刺激や温かい交流に支えられながら、とても充実した大学院生活を送ることができました。

学位取得後は、それまでに多くの日本人研究者を受け入れておられたアイオワ州立大学の Mark Gordon 先生の研究室にポスドクとして留学することになりました。Gordon 先生は、在外研究でご縁のあった鷹野景子先生に会いにお茶の水女子大学を 2 度訪問され、その際、1 度目の訪問では反応経路分岐の発生機構について、2 度目には GAMESS に ab initio 分子動力学 (AIMD) コードを実装した成果について発表する機会を頂き、そこで気に入っていただいたことがきっかけでポスドクとしての受け入れが決まりました。雇用プロジェクトは、遷移金属イオンによる NH 結合活性化機構の解明であり、MR-SDCI 法によるアプローチが求められる課題でしたが、同時に「GAMESS に AIMD コードを実装・公開する」こともミッションの一つとされていました。後者のテーマは、ちょうど博士論文の流れを引き継ぐものであったため、まずはこちらの課題に集中することにしました。渡米後の最初の 3 ヶ月間は、朝から晩まで、土日も関係なく研究に打ち込みました。そして 12 月までに、AIMD トラジェクトリーを基準座標で展開する研究とトラジェクトリーが IRC を参照経路として、どのように進行するかを調べた研究という 2 本の論文を仕上げることができました。



た。Gordon 先生からは "You are productive!" というお褒めの言葉を頂き、論文原稿に的確なコメントと質問を迅速に加えていただきました。ちょうどその頃、平尾公彦先生と高塚和夫先生が Gordon 研を訪問される機会があり、両先生の前で研究発表をさせていただきました。平尾先生には、私が博士課程 3 年のときに名古屋大学から東京大学に着任され、学位審査では副査を務めていただいたこともあり、その場で温かいお言葉をかけていただいたことが励みになりました。年が明けてからは、Gordon 研の学生だった松永仁城太さんと親しくさせていただき、研究漬けの生活も少し緩やかになっていきました。Gordon 研にはちょうど 1 年間お世話になりましたが、その 1 年は非常に重要な時間だったと確信しています。アメリカでは、日本と比べて研究に専念できる時間が十分に確保されており、アプローチの違いを肌で実感できる環境がありました。この経験を通して、研究者としての視野が大きく広がったと実感しています。

1995 年、私が 30 歳のとき、平尾先生の研究室に助手として迎えていただきました。当時の平尾研究室は、平尾先生を筆頭に、山下晃一助教授、中野晴之助手という強力な布陣で構成されており、優秀な学生が次々と集まる活気あふれる研究環境でした。私もその末席に加えていただき、学生と一緒に反応経路分岐、AIMD、多次元ポテンシャル曲面の構築、多次元トンネル経路、非調和振動理論といった課題に取り組みました。平尾研の中心テーマは、平尾先生・中野先生による多参照摂動理論の研究であり、私も多配置・多参照電子状態理論の最先端に触れることができましたが、これは非常に貴重な経験で、後の研究に大きな影響を与えました。また、科研費プロジェクトの一環として、希土類錯体におけるスピン軌道相互作用を考慮した CASSCF 計算や、表面反応の計算にも取り組むこととなり、これらもその後の研究テーマにつながっています。平尾先生は生粋の "親分肌" の先生で、人望が厚く、国内外の理論化学コミュニティにおいてもリーダーシップを発揮されていました。研究室は自由で風通しの良い雰囲気にもまれており、自然と優秀な学生や国内外の研究者が集まり、活発な議論と交流が絶えないまさに理想的な研究環境でした。私が平尾研に所属したのは 1995 年から 1999 年 3 月までの約 3 年半ですが、その間に築かれた人的ネットワークや学術的つながりは今に至るまで私の財産となっています。改めて、平尾先生には深い感謝と恩義の念を抱いております。

「歴史は繰り返す」と言われますが、1999 年 4 月、東大からお茶大に助教授として赴任することになり、平尾研の男子学生 3 名と一緒に連れていくこととなりました。その中には、現在九州産業大学准教授の中尾嘉秀さん、そして筑波大学教授の八木清さんが含まれます。お茶大では助教授として 6 年間務めることとなりましたが、着任当初の 3 年間は、学部 4 年生が 1 人ずつ配属されては就職するという流れが続いていました。そのため平尾研から一緒に移った学生たちの存在は非常に心強く、研究活動の大きな支えとなってくれました。特に、博士課程の最後までお茶大で共に過ごしてくれた八木さんとは二人三脚で研究に取り組み、電子状態計算と振動状態計算をリンクした非調和振動分光計算の手法を確立しました。八木さんは博士号取得後、高塚研での博士研究員を経て平尾研の助教となり、その後、海外での滞在や理化学研究所での研究活動を経て、昨年 4 月より筑波大学教授に着任されました。現在は自身の研究室を率い、独自に開発された非調和振動プログラム SINDO により、振動分光計算の分野で第一人者として活躍されています。お茶の水女子大では、平野先



生との共同研究として、星間分子  $\text{HCNH}^+$  の解離性再結合反応ダイナミクスの研究にも取り組みました。この共同研究を通して、2001 年後半からは AIMD 法を励起状態に拡張する手法開発に着手しました。励起状態のダイナミクスでは基底状態と異なり、電子状態間の非断熱遷移を考慮する必要があります。そのため、Tully の最少遷移数アルゴリズムが適していると判断し、Molpro による CASSCF 計算で得られる非断熱結合項を用いて、Tully の手法に基づいた surface hopping AIMD プログラムを開発しました。現在では光反応に対して一般的に使用されていますが、当時はまだ AIMD と surface hopping をリンクさせる試みはほとんど存在せず、まさに手探り状態での研究でした。2002 年の分子構造総合討論会(静岡)で最初の発表を行い、同年 12 月のマウイ島で開催された AIMD ワークショップ、年明けの 1 月に韓国・浦項で開催された日韓ジョイントシンポジウムでも発表を行って、手ごたえを感じることができました。ただ最初に取り組んだ星間分子の解離性再結合反応はその性質上物理学的側面の強い反応であり、「光化学反応」という観点での研究展開には限界を感じる面もありました。そこで新たに、スチルベンのシス-トランス光異性化反応の研究をスタートさせました。この研究は後に、理化学研究所の田原太平さんとの共同研究へと発展し、光反応ダイナミクス研究の重要な出発点となりました。

2004 年 11 月、40 歳の誕生日に北大で面接に呼ばれ、その日のうちに採用の連絡を受けました。伝統ある北大量子化学研究室の主宰を任されることへの重責をひしひしと感じつつ、2005 年 4 月、新たな量子化学研究室を、野呂武司助教授、小野ゆり子さん(学振 PD)、4 年生 4 名という体制でスタートさせました。同年 10 月には、現・東京大学教授の中山哲さんが助手として加わり、量子化学の講義やプログラミング、分子軌道計算実習の内容を自転車操業で整備しながら、最初の年を全力で駆け抜けました。北大に着任してすぐに、榊茂好先生が代表を務める特定領域研究「実在系の分子理論」の計画班に入れていただき、A03 班長の加藤重樹先生から多くのご指導を頂きながら、「励起状態の化学反応ダイナミクス」研究に本格的に取り組み始めました。この特定領域研究は、資金面はもちろん人的交流の面でも新たに立ち上げた研究室にとって大きな支えとなり、順調なスタートを切ることができました。励起状態ダイナミクスは研究の柱の一つとなり、理論手法の開発や実験との共同研究として継続的に取り組んできました。2019 年にはこのテーマで日本化学会学術賞をいただき、諸先生方に深く感謝しております。

少し遡りますが、2003 年夏にドイツ・ボンで開催された ICQC において、当時 M2 だった前田理さんが、反応経路自動探索法の萌芽となる「超球面探索法」について初めてポスター発表を行っている場面に偶然立ち会い、強烈なインパクトを受けました。ポテンシャルエネルギー曲面の極小構造から出発してポテンシャルの非調和性に基づいて遷移状態構造を探索するという、他では聞いたことのない高いオリジナリティを持つ内容であり、かなり長時間にわたって議論した記憶があります。後に本人から聞いた話では、最初にポスターを訪れたのが私で、次にやってきたのが八木さんだったとのことでした。その後、分子科学討論会などで大野公一先生とも親しくお話をさせていただくようになり、学会ではポスター発表でコメントすると次にはそれが克服された内容に upgrade される印象が定着し、前田さんや大野先生の発表は学会の大きな楽しみの一つとなりました。2009 年に大野先生が定年退職されて豊田理化学研究所に異動された後、名古屋での分子科学討論会に続いて長久手で



新たにシンポジウム「反応経路探索のニューフロンティア (SRPS)」を開催され、私にも声をかけてくださいました。改めて当時のプログラムを振り返ると、初日の諸熊奎治先生・大野先生による特別講演の座長を中辻先生が務められており、翌日のプログラムの講演者や座長をみても、その後の展開を見据えた構成であったことがよくわかります。SRPS はその後、分子科学討論会に合わせて前後の日程で毎年開催される仕組みが整い、継続的に開催されて今年第 17 回シンポジウムが広島で開催される予定です。これまでの全プログラムはウェブサイト (<https://iqce.jp/SRPS/>) にアーカイブされていますので、ぜひご覧ください。2011 年の第 3 回は私が実行委員長を務めて北大で開催しました。この年は学科長が回ってきていて多忙を極めていましたが、研究室でテニユアトラック助教を採用できることになり、前田さんが 2012 年 2 月に助教として着任しました。結果として大野先生や諸熊先生との連携もさらに緊密になり、大野先生が関連研究者に呼びかけて立ち上げられた NPO 法人「量子化学探索研究所 (IQCE)」にも副理事長として参画することになりました。

北大着任時は、独自の理論化学を切り拓くことに加え、実験との共同研究へのスタンスも問われました。私は、北大の量子化学研究室を主宰する以上、計算化学をさまざまな実験分野に波及させていくことも重要なミッションと考えました。最初に固体化学研究室の稲辺保先生より、鉄フタロシアニンの特異な磁性を計算化学で説明できないかという相談を受けました。稲辺先生は d- $\pi$  相互作用が重要であると考えられていたことから、その描像に沿って分子軌道の解析や CASSCF 法によるスピン軌道相互作用の計算などを行い、共著論文を出版しました。この論文が後に北大薬学部の小川美香子先生の目に留まり、共同研究のお誘いがありました。小川先生はケイ素フタロシアニンを光癌治療薬として研究されており、このご縁が CREST や概算要求プロジェクトへと発展していきました。また、電気化学分野の魚崎浩平先生より 2009 年に「元素戦略」プロジェクトへのお誘いを受け、触媒の計算化学にも着手することになりました。魚崎先生は、実験に先んじて理論計算が研究を先導できないかという考え方を示され、さらに異分野の研究者が "under one roof" のもとで議論することで新しい発見が生まれるという理念の実践を考えておられました。ちょうどその頃、計算物理分野の Andrey Lyalin 博士がドイツから加わり、触媒研究に大きく貢献してくれました。従来、燃料電池などの酸素還元触媒としては白金が最強とされていましたが、Lyalin さんは理論計算によって、これまで絶縁体として触媒候補に挙げられることのなかった六方晶窒化ほう素が、金属担持によって電極触媒になり得ることを予測しました。これを受けて魚崎先生のグループが実験実証に成功し、理論が先導して実験が裏付けるという価値ある成功例を示したということで高い評価を得ることができました。この触媒研究を通して北大量子研に周期境界条件を用いた DFT 計算が導入され、この流れが、前田先生による反応経路自動探索法の表面反応や結晶への拡張へとつながる契機にもなりました。

私が 2005 年に北大に着任した当時、北大における理論化学は理学部化学科の量子化学研究室のみでした。しかしその後、2007 年には電子科学研究所に小松崎民樹先生が、2012 年には触媒科学研究所に長谷川淳也先生が着任され、さらに 2017 年には前田先生が教授に昇任されて理論化学研究室を立ち上げられました。2022 年には理学部化学科に新たに情報科学研究所ができて高橋啓介先生が教授として着任され、現在は学内に 5 つの理論化学グループが形成されています。これらの研究室はいずれも理論化学という共通の枠組みの



中にありながら、研究の対象や方法論はそれぞれ異なり、多様性に富んでいます。そのような中、学内での連携と相互理解を深めるため、毎年夏には「北大理論化学合同ワークショップ」を開催し、各研究室から講演者を出して研究交流を図っています。そして2018年、前田先生を拠点長として提案された「化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD)」が文部科学省の世界トップレベル研究拠点(WPI)プログラムに採択され、北大に本格的な計算化学の国際拠点が誕生しました。ICReDDでは、「計算科学・情報科学・実験科学の融合により、人類にとって重要な化学反応の発見を加速する」ことをミッションに掲げ、専門分野の異なる研究者が"under-one-roof"の理念のもと、同じ空間で議論し、研究を進めるという独自の体制を築いています。2021年には、ICReDD海外PIの一人である Benjamin List 先生がノーベル化学賞を受賞され、国内外から大きな注目を集めました。

2016年、中井浩巳先生より、4年に一度開催される理論化学・計算化学の国際会議 TACC について、日本での開催を望む声が出ていること、その開催地として札幌を候補にできないかというメールを私と長谷川先生宛にいただきました。TACCは国際的に認知された理論化学の会議で大役であることは明らかでしたが、日本ではしばらく理論化学分野の大規模な国際会議が開催されておらず、ここで北大が引き受けることには大きな意義があると感じたことから、長谷川先生とも相談し、開催をお引き受けすることとしました。開催予定は2020年9月でしたので準備期間があることも後押しとなりました。ちょうどそのタイミングで、分子科学討論会についても話が持ち上がってきました。前回の札幌開催が2011年だったこともあり、「そろそろ北大の順番ではないか」との声が上がり、関係分野の先生方と協議のうえ、2021年9月の開催をお引き受けして準備を開始しました。しかし、ご存知のとおり、2020年2月後半から新型コロナウイルスの感染が急拡大し国内外の情勢は一変しました。まず、TACCの開催をどうするかという大きな判断を迫られました。当初は事態の長期化が予測できなかったため、1年延期という案が出ましたが、2021年には分子科学討論会の開催がすでに予定されていたため、TACCはさらに1年遅らせ、2022年に延期する方向で調整を進めました。その後も状況は思うように改善せず、2021年の分子科学討論会は直前までハイブリッド開催を模索したものの、最終的にはオンライン開催となりました。そしてTACCについても、再度の延期を決断し、最終的には2023年9月に開催することになりました。困難が続く中での調整や判断には相当なストレスが伴いましたが、2023年のTACCでは、ついに世界各国から理論化学の研究者たちが札幌に集まり、対面での充実した議論と交流が実現しました。最終日は中辻先生による plenary lecture で締めくくられ、会議の成功を確信することができました。TACC2023を無事に開催できたのは、多くの参加者と関係者のご協力があったことであり、感謝の念に耐えません。

最後に、先週撮影した2025年度の北大量子化学研究室のメンバーの集合写真をお示しし、本稿を締めくくりたいと思います。ここまで走ってこられたのは、ひとえに優秀なスタッフ、そして情熱あふれる学生たちに支えられてきたからです。定年までまだもう少し時間があります。これからも諸先生方に負けないように、一步一步、前を向いて走り続けていきたいと思えます。





北大量子化学研究室の集合写真（2025年4月2日）





## ちいさな修復 - 吠えない犬と、丸まる糸の話

リントウルオト 正美

京都府立大学

学問に携わる日々の中で、ふと感じることがある。ときにはそこから一步引いて、癒しのお話をしたくなるのだ。

うちには、7歳になるビーグルがいる。ビーグルは小型犬の分類だと思っていたのだけれど、わが家の犬は体重 12kg の立派な中型犬。力も強い。迎えたのは 5 歳 10 か月のときで、初対面の印象は「歴戦の面構え」。まるで、国会で苦しい答弁を繰り返す某首相のような目をしていました。

この犬は、それまでの 5 年間でいわゆる繁殖犬として過ごしてきた。けれど、腰骨が細く、帝王切開が必要だったようで、比較的早く“お役御免”になったらしい。うちに来た当初は 9.8kg のスリムな体型だったが、家族全員が手厚く甘やかした結果、14.5kg まで成長。獣医師に「そろそろダイエットしましょう」とすすめられるまでになった。

食べ物への関心もなく、おもちゃにも反応せず、ごはんさえ残す。虚無の表情で壁に向かって座り込む姿が、なんともいえず切なかった。散歩に出ても、地面に伏せたまま、膝を曲げて恐る恐る前進する。まるでカメレオンのような姿勢で、体高も今よりずっと低かった。けれど、時間が経つにつれ、次第に背が伸び、今ではダイニングテーブルにあごを乗せてのぞき込むほどに成長した。

トイレの習慣も、当初はまったくなかった。おそらく、ケージの中で排泄するように訓練されていたのだろう。家の中のあちこちに粗相をし、私たちはそのたびに掃除に追われた。これが最も骨の折れる課題で、解決までには約 10 か月を要した。ようやくトイレシートでできるようになったものの、なぜか周期的に“おもらしの波”が訪れる。ここ数日も、編み物をしている私の隣で、静かに、しかし途方もない量の排泄をなさる。中型犬の底力である。

7 歳といえば、人間でいえば中年にさしかかる頃だろうか。その年齢にして背が伸び、次々と新しいことを覚えていくのだから、大したものだと思う。おやつをたらふく食べながら、ダイエットにも取り組む日々。散歩で出会うご近所のご婦人方からは「よう肥えてるなあ」と笑われているが、実はこの犬、堤防の絶壁を駆け上がるほどの運動神経を持っている。俗にいう「動けるデブ」である。運動量に任せて、自然に痩せていくことを願いつつ、長い目で見守っている。

3 年前まで、わが家にはジャックラッセルテリアがいた。自分のことを大型犬だと信じて疑わない、気の強い犬だった。希少がんを患い、2 年間の闘病の末に亡くなったとき、私はまるで魂が抜けたようになってしまった。いわゆるペットロスだった。

見かねた家族が私をある保護施設に連れて行ってくれた。そこにいたのが、今のビーグルである。施設の中では、ほかの犬たちを引き連れて、吠えながら先頭を切って走り回ってい



リントウルオト 正美 先生



た。その姿が、亡くなった先代犬の強気な様子と重なって、心をつかまれた。

けれど、家に連れ帰ってみると、その印象は一変した。彼女はとても繊細で、おとなしい犬だった。この2年間で吠えたことは、ほんの数えるほどしかない。ほかの犬にじゃれられても、甘噛みされても、回転ヒップアタックを顔面に受けても、ただ静かにやり過ごす。もし先代犬だったら、間違いなく即座に大乱闘だっただろう。

性格は正反対だが、だからといってかわいさが減るわけではない。それぞれに違う魅力があり、それぞれがかけがえのない「うちの子」なのだ。ご機嫌な様子で散歩する姿を見て「苦労した犬を引き取って、得を積んだね」と言われることがあるけれど、私はいつも思う。救われたのは、私のほうだと。

私のもうひとつの癒しは、編み物である。はじめて自分のお小遣いで毛糸を買ったのは小学5年生のときだった。ベストを編もうとして、途中で毛糸が足りなくなり、前身頃の半分だけ色が微妙に違う仕上がりになった。それでも、自分の手で何かを形にする喜びは、当時から今も変わらずにある。

それ以来、長い年月にわたって編み物を続けてきた。ただ、博士課程の頃と、子どもが生まれてから5歳くらいまでは、手を止めていた。編み物をしていると、思考が整理されて心が落ち着く。精神衛生にも良いと感じていたのだが、「その時間があるなら他のことをすべきではないか」という罪悪感がいつもどこかにあった。また、編針や小さな道具は子どもには危ないのでは、という不安もあった。子どもに分別がつくまでのあいだ、私は編み物を静かに我慢していた。

子どもが小学6年生になった年、先代のジャックラッセルテリアがわが家にやってきた。女の子だったが、見事なまでのやんちゃぶりで、編み物道具に興味がないはずがなかった。時間をかけて丁寧に編んだ極細糸のカーディガン。2年がかりでようやく完成したその作品に、ほんの一瞬目を離したすきに大穴が開けられたときには、涙がこぼれた。子犬だった彼女に悪気はなかったし、私が不注意だったのも事実だった。泣きながら編みなおしている私の様子を見て、犬も何かを感じたのだろうか。それ以降、編み物関連のものには一切手を出さなくなったのは、不思議なことだった。それにしても、自分のかけていた眼鏡までくわえて、1日に3本破壊した破壊王に、そんな慈悲の心があったとは。

いま、編み物が静かなブームを迎えているという。若い世代のあいだで人気が高まり、インフルエンサーの影響もあるらしい。近所の毛糸屋が次々に閉店していった時期を知る者としては、これはとても喜ばしい現象だ。

もちろん、今は流行に乗っているだけの人も多いだろう。けれど、そのなかの何割かは、やがてこの世界の楽しさにとりこになり、ずっと残っていくのではないかという期待がある。いつも通う毛糸屋も、最近は大盛況だ。数年前までは休日に立ち寄っても客は私ひとりということが珍しくなかったが、今は若い人や外国の方々でにぎわっている。心からうれしく思う。



図1 某首相ばりの目つきでこちらを見つめる、うちのビーグル

一本の糸が複雑な模様を浮かび上がらせていく様子は、何度見ても面白い。編み込み模様を、私はメリーゴーランドのつもりで編んでいたのに、夫には「サイケデリックな迷彩柄」に見えたらしい。最終的に馬のシルエットがいくつか浮かび上がり、それらが回りはじめたとき、ようやく「これはメリーゴーランドです」と胸を張って言えるようになった。そういう過程もまた楽しい。

「これはもう、数学だな」といつも思いながら編んでいたのだが、最近、本当に研究対象としての編み物に関する論文が出た。

阪大と慶大の研究グループが、「編み物の端が丸まるのはなぜか？」という素朴で、けれど誰もが見過ごしてきた問いに挑んだ。Tajiri, Kotone, et al. による “Curling morphology of knitted fabrics: Structure and Mechanics.” (Extreme Mechanics Letters, 2025) は、編み物の自然なカール現象のメカニズムを、実験とシミュレーションの両面から明らかにしている。

そのニュースを知ったとき、衝撃を受けた。というより、大ショックだった。私は半世紀近く編み物を続けてきたというのに、その“なぜ”を解き明かそうと思ったことは一度もなかったからだ。ものの見方が、根本的に科学的ではなかったのだと、反省とともに妙な敗北感に襲われた。

けれども、それでも私は、今日もまた漫然と編み針を手取る。考えるというよりは、ただ糸をたぐり、模様を浮かばせていく。科学が解明しても、なお残る「手で編む」ことの静かな魔力に、私は取り憑かれているのかもしれない。

最近、犬がどうも私の編み物を快く思っていない節がある。最初は、毛糸のにおいがかぐふりをして、鼻先で軽く触れる程度だった。それが次第にエスカレートしてきた。

次にとった手は、毛糸の上に頭を載せるという静かな妨害。糸が引き出せなくなるため、編み針は自然と止まる。どかそうとしても、驚くほどの力で踏ん張って動かない。毛糸に頭を載せられないよう工夫をすると、今度は編み物のテキストの上にとっかりと座り込み、寝転がってページを覆い隠すという作戦に出た。そして、最終手段としてのおもらしである。

さすがにこのときばかりは叱った。以来、その“決定打”は封印されているが、それでも妨害はやまない。テキストの上で座る、寝そべる、毛糸を枕にする。彼女なりの存在感の示し方なのだろう。「編み物をしている私の足元に、犬が静かに寝そべっている」。そんな光景を夢見ているが、どうやらそれはもうしばらく先の話になりそうだ。



編み物道具をすべて枕にして眠る、わが家の妨害担当

## 「第 17 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: 2025 年 5 月 10 日 (土) 13:00~16:40

場所: **京都テルサ** 西館 3 階 第 2 会議室 (京都駅南 徒歩 20 分)

参加費: 無料、申し込み・問合せ: [office@qcrl.or.jp](mailto:office@qcrl.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。昨年のシンポジウムでは、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。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 平尾 公彦 (京都大学)

「50 年の研究生生活を振り返って」

14:00-14:30 休憩

14:30-15:20 北河 康隆 (大阪大学)

「“開殻性に基づく分子性機能材料設計”

を志向した量子化学への挑戦

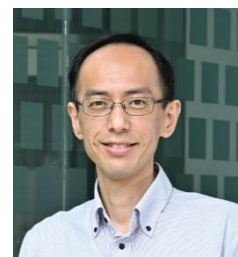
– Quantum Chemical Engineering をめざして –」

15:20-15:50 休憩

司会 波田 雅彦

15:50-16:40 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)

「exact theory の新しい展開」



## 懇親会

日時: 2025 年 5 月 10 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。



## 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](mailto:office@qcri.or.jp) まで、5 月 8 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

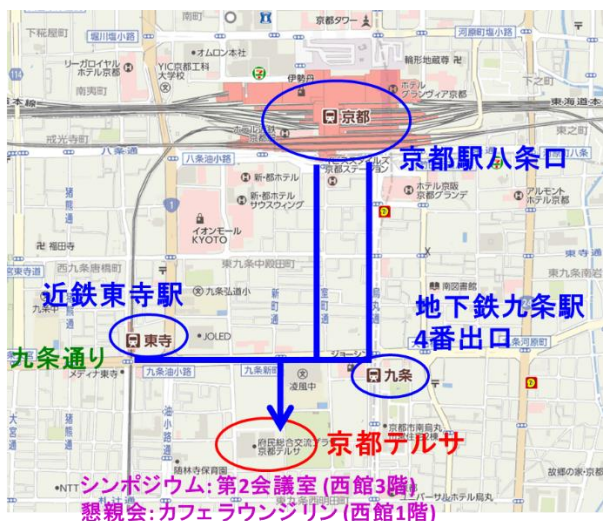
ご芳名:

メールアドレス:

ご所属:

ご住所:

## 会場(京都テルサ)へのアクセス



- JR 京都駅(八条口)より南へ徒歩 20 分
- 地下鉄(烏丸線)九条駅 4 番出口より西へ徒歩 8 分
- 近鉄東寺駅より東へ徒歩 8 分

## クラウドファンディングを実施中：2025年3月3日-6月1日 テーマ：「化学の支配方程式・神の方程式を解いて化学を予言する」

寄付金控除型 #チャレンジ #寄付金控除型 #研究

化学・物質・生物の支配方程式 神の方程式を解いて化学を予言する

中辻 博 (認定NPO法人量子化学研究協会)

(2025年4月10日時点)

化学・物質・生物の支配方程式  
神の方程式を解いて化学を予言する  
発見から実用化まで



認定NPO法人 量子化学研究協会・研究所  
代表 中辻 博  
www.qcri.or.jp

寄付総額  
**6,702,000円** 目標金額 9,000,000円

74%

寄付者 残り  
57人 52日

プロジェクトの寄付にすむ

♡6

<https://readyfor.jp/projects/...>

コピー

専用URLを使うと、あなたのシェアによってこのプロジェクトに何人訪れているかを確認できます



Facebook



X



LINE



note

目標金額の達成の有無にかかわらず実行者は寄付金を受け取ります (All in 方式)。原則、寄付のキャンセルはできません。寄付募集は6月1日 (日) 午後11:00までです。

サイト(READYFOR):

<https://readyfor.jp/projects/QCRI>

スマートフォン:

右 QR コードよりアクセス可能



認定 NPO 法人・量子化学研究協会研究所では、原子・分子の世界を支配する「神の方程式」と言われるシュレーディンガー方程式を正確に解く方法を開発してまいりました。最近この方法をより容易かつ一般的に解く方法を開発し、その成果も出ています。しかし、これらの研究に必要な研究費は不足がちであり、これを克服するために一般の皆様からの善意を募集する「クラウドファンディング」を立ち上げることにし、「READYFOR」という専門の事業者を通じてご寄付を募ることにし、実現いたしました。是非、のぞいてみてください。

ミチオ・カクという方の本に“神の方程式「万物の理論」をもとめて”という本があります。NHK 出版から斉藤隆央さんの訳で出版されています。この本の意味では、神の方程式はまだ見つからない究極の式で、シュレーディンガー方程式はその道筋にある式という位置づけです。しかし、実際の化学の立場では、それに近い意味があります。このクラウドファンディングのタイトルとして、神の方程式という呼び方をしたのはそのためです。

クラウドファンディングの期間は、3月3日から6月1日(23:00)までの90日間、実施されます。4月10日の時点(残り52日)で57名の方からご支援(ご寄附)を頂き、目標金額



©2025 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

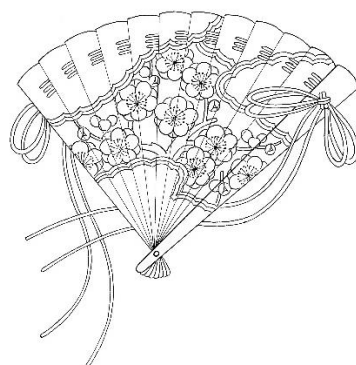
まで進捗が約 75%まで到達しました。厚く感謝申し上げます。目標額は、もし早く満たされれば、更新して増額してゆくことも可能です。まことに心苦しく恐縮ではございますが、皆様におかれましては、プロジェクト達成に向け、温かいご支援を是非ともよろしくお願い申し上げます。また、多くの方々にお呼びかけいただければ誠に幸いです。

また、認定 NPO 法人への通常の寄附と同様に、支援者(寄附者)はその寄附額に対して、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。詳細はクラウドファンディングのサイトまたは次章をご覧ください。

### READYFOR サイトでのご寄附の手順

1. READYFOR で新規アカウントを生成 (READYFOR のアカウントをお持ちでない方)
  - ・ <https://readyfor.jp/> で、右上の「ログイン・新規登録」のボタンからアカウントを生成
  - ・ ユーザー名、メールアドレス、パスワードのみで簡単に登録可能です。
2. 量子化学研究協会のプロジェクト: <https://readyfor.jp/projects/QCRI> に移動
  - ・ READYFOR サイトの検索欄で"量子化学"で検索しても出てきます。
3. 画面右側の「プロジェクトの寄付にすすむ」をクリック
4. 画面右側で寄附金額を選択
5. お支払方法(クレジットカード, コンビニ支払い, 銀行振込)を選択し必要な情報を記入
6. “ギフトお届け先”という欄には、ご自身のご氏名, ご住所, 電話番号等を記入(このご住所に寄付金受領証明書を郵送致します。)
7. 確認画面にて入力情報を確認後、ページ下部の「寄付を確定する」ボタンをクリック
8. 登録メールアドレスに"[READYFOR] ご寄付ありがとうございました！” という件名のメールが届きます。

(詳細は、<https://faq.readyfor.jp/--630f5d605ea6b60023fe7096> をご覧ください。)



## 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。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 3,000 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、ご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、次ページ、<http://www.qcri.or.jp/>やをご覧ください。温かいサポートを、お願い致します。

現在、**クラウドファンディング・「化学・物質・生物の支配方程式 神の方程式を解いて化学を予言する」** (<https://readyfor.jp/projects/QCRI>)を行っています。これを通じても私たちの活動に対するご支援をお願いいたします。認定 NPO 法人は、学校法人などと同様、“寄付金控除型”としての募集が可能であり、このクラウドファンディングに対するご支援(ご寄附)においても、通常のご寄附と同様に税の控除が受けられます。

このクラウドファンディングは、私たちの研究の意味をより広く世間の方々に知って頂くこと、それによる温かいご援助とご支持の拡大、そして、今までの学問の世界という枠を超えた・社会への貢献の可能性を考え・探求すること、などを目的としています。

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、ご寄附をお願いいたします。それは私たちの研究活動が、社会からもサポートされているひとつの証となり、活動に弾みがつき・より発展していくことにつながります。

### 通常のご寄附(銀行口座へのお振込みによる方法)

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  
 ゆうちよ銀行以外の銀行からこの口座に振込まれる場合は下記内容をご指定ください。  
 店名(店番)： ○九九 (ゼロキュウキュウ) 店 (099)  
 預金種目： 当座  
 口座番号： 0332225

② **銀行名：三井住友銀行**

支店名： 伏見支店  
 預金： 普通預金  
 口座番号： 1453553

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

口座名義： 特定非営利活動法人量子化学研究協会 理事 中辻博  
 カナ： トクテイヒエイリカツドウホウジン リョウシカガクケンキュウキョウカイ  
 リジ ナカツジヒロシ

**郵便振替での振込の方法**

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。

The image shows two forms used for postal remittance. The left form is the '払込取扱票' (Payment Slip) and the right is the '振替払込請求書兼受領証' (Remittance Request Form and Receipt). Red boxes highlight the fields where information should be entered: account number (0099106), amount (332225), recipient name (特定非営利活動法人 量子化学研究協会), and address (住所とお名前を必ずご記入ください). The right form also highlights the amount field (左と同じ金額をご記入ください) and the recipient name field (お名前をご記入ください).

**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

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

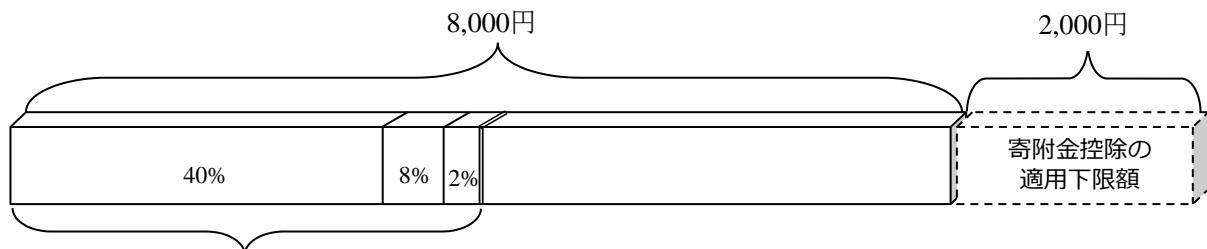
#### (参考) 京都市民の方が認定NPO法人に 10,000 円寄附した場合の例

（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）

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

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

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



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。

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」第 21 号, 2025 年(令和 7 年) 春号

2025 年 4 月 11 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 © 2025 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。

