



量子の世界

No. 22, 2025 年 秋冬号 (2025/12/23 発行)

- 目次 -

	ページ
1. Molecular Quantum Mechanics Conferences 2025 (MQM2025) 佐藤 啓文 (京都大学)	1
2. 不思議な縁に導かれて 神原 龍冬 (北海道大学)	4
3. 「第 17 回革新的量子化学シンポジウム」のご報告	12
4. クラウドファンディング: 「化学の支配方程式・神の方程式を解いて 化学を予言する」、ご報告	16
5. 「量子化学講習会: SAC-CI 理論を中心に exact 理論の展開もまじえて」 開催のご案内 (受講希望の方 受付中!)	19
・ 2026 年 3 月 7 日(土) 10:00~17:00: 基礎	
・ 2026 年 3 月 14 日(土) 10:00~17:00: アドバンス	
6. 量子化学研究協会の活動に、温かいご寄付をお願いします	22
7. 本誌、「量子の世界」に寄稿しませんか	25

Molecular Quantum Mechanics Conferences 2025 (MQM2025)

佐藤 啓文
京都大学

本稿がお手元に届くのは年の瀬近くでしょうか。2025 年も色々な出来事がありましたが、せっかく頂戴した機会なので、5 月 23 日~5 月 28 日の 6 日間に渡り京都テルサで開催された国際学会 MQM2025 のご報告をしたく存じます。

コンファレンスは組織委員であり創始者の 1 人、Henry F. Schaefer III 教授 (Univ. Georgia) の挨拶で幕を開け、MQM の歴史と趣旨について説明がありました。同教授が 1987 年 8 月に同大学へ異動し、国際会議開催を打診されたことをきっかけ



佐藤 啓文 先生



に故 Nicholas Handy 教授 (Univ. Cambridge) とともに構想を温めたそうです。関連の国際会議として 1973 年 Menton にて第一回開催された ICQC や 1987 年 Budapest にて第一回開催した WATOC を挙げ、これらとは少し異なる立場から、非経験的 (第一原理的) 量子化学を基軸に据え、また当時すでにノーベル賞有力候補者であった John Pople 博士の業績を讃える機会として 1989 年に米国 Athens (Georgia) にて第一回が開催されたとのことでした。以来、約 3 年毎に欧米各国を巡りながら開催されてきており、今回は日本ではもちろん、アジア地区で初めての開催となりました。

続いて京都大学福井謙一記念研究センターの前センター長である筆者が、センターを代表して歓迎と開催の祝意を述べ、(引き続き) 今度は本会組織委員長の立場から、1981 年ノーベル化学賞に輝いた故福井謙一博士と、その薫陶を受けた 4 名を紹介し、その業績を讃えることが本会の趣旨の一つであることをお伝えしました。MQM は、毎回優れた研究者に焦点をあて、その業績を称える点が特色の一つで、今回は、中辻博京都大学名誉教授、平尾公彦東京大学名誉教授、故諸熊奎治米国 Emory 大学および分子科学研究所名誉教授そして故加藤重樹京都大学教授がその対象となりました。ご案内の通り、先生方は電子相関理論や化学反応分野において新しく強力な手法を開発し、その国際的発展に大きな貢献をされ、いずれも「国際量子分子科学アカデミー」会員として選出されています。筆者自身は加藤先生の学生として、また米国 Emory 大学にいらした諸熊先生の研究室で 3 ヶ月に渡ってご指導を受けたことから、特に感慨深い、貴重な機会となりました。

コンファレンスは 9 つの short talk を含む 43 の講演が続き、最新の研究成果報告や活発な議論がなされました。特に第 2 日目からの 4 日間に渡って、加藤先生 (24 日)、諸熊先生 (25 日)、平尾先生 (26 日)、中辻先生 (27 日) に焦点を当てた講演を午前の最後に設定しました。講演はそれぞれにゆかりの深い、森田明弘教授 (東北大学)、Peter Pulay 教授 (Univ. Arkansa)、Henryk Witek 教授 (陽明交通大学)、中井浩巳教授 (早稲田大学) が登壇し、その業績を讃えました。また、各セッションの座長についても、東雅大教授 (名古屋大学)、畑中美穂教授 (慶應義塾大学)、重田育照教授 (筑波大学)、江原正博教授 (分子科学研究所) と各門下生・縁の方に担当をお願いし、会場が一体となって祝意や追憶を共有し、そのサイエンスを辿る場となりました。会期中、多くの講演者・参加者が 4 名の方々との交流や業績を振り返るとともに、当該分野の国際的発展に対して、これまで日本の量子化学分野が果たしてきた役割の大きさを再認識したという趣旨の発言が数多くあったことが印象的でした。27 日晩にホテルグランビア京都にて催された晩餐会では、岩田末廣名誉教授 (分子科学研究所・総合研究大学院大学) にご挨拶賜りました。最終日である 28 日には、平尾先生および中辻先生が自ら登壇されて最新の研究成果を発表され、コンファレンスが締め括られました。ポスター形式の発表は 24 日、26 日の夕刻と、27 日午後設定され、約 120 名の研究者・大学院生の方々が互いの研究を紹介しあい、交流を深める機会となりました。また日本化学会学術情報部のご厚意で学位取得後 5 年以内の方を対象として BCSJ Award for Poster Presentation が、学生の方を対象として Chemistry Letters Young Researcher Award がそれぞれ贈られました。講演者による投票の結果に基づき前者 1 名および後者 4 名の受賞者が最終日の閉会式にて発表され、中辻先生、平尾先生から授賞されました。

全体を通じて分子系の量子力学を主軸に、種々の分光学、溶媒効果、タンパク質を含む凝縮・複雑系における化学過程から、QED、量子コンピューティング、電子相関理論に至るま



で幅広いトピックスについて、文字通り第一線で活躍する研究者が世界中から集い、互いの進捗など最新の情報を交換し、熱心な議論がなされました。また中辻先生、平尾先生をはじめとする先生方が世界に与えて来たインパクトの偉大さを再認識する機会となりました。

組織委員としては筆者とともに、前述の Schaefer 教授、天能精一郎教授（神戸大学）、中井浩巳教授（早稲田大学）、柳井毅教授（名古屋大学）が、また実務については杉山佳奈美助教、浦谷浩輝助教および番場みちよ支援職員、中野美香支援職員（いずれも京都大学）が担当し、倉重佑輝准教授（京都大学）にも要所要所で協力頂きました。さらに理論化学会には共催のみならず、同会討論会の開催時期を調整してもらうなどご配慮頂きました。改めて御礼申し上げます。

本コンファレンスには国内外 20 カ国あまりから世界をリードする数多くの研究者、ポスドクや学生などの若手研究者が 200 名以上集って学術上の交流を深め、次代を担う人的ネットワークを築く機会になったものと思います。量子化学分野の発展に貢献し、国際相互理解の促進に資する機会となったならば、お世話した側としても望外の喜びです。

中辻先生をはじめ、ご参加、ご協力下さった皆様に、この場を借りて重ねて御礼申し上げます。



左から、中井浩巳先生、中辻博先生、江原正博先生



左から、重田育照先生、平尾公彦先生、Henryk Witek 先生

不思議な縁に導かれて

神原 龍冬
北海道大学

この文章は、中国のアモイ市内からバスとフェリーで 30 分の距離にある世界遺産、「音楽の島」ことコロンス島で、洋琴の調べを聞きながら書いています…と書けるとかっこよかったのですが、実際は観光名所弾丸ツアーから帰ってきて這々の体で書いています。いま、中国で開催される理論化学のシンポジウム「China-Japan-Korea Workshop on Theoretical & Computational Chemistry」に参加するためにアモイ大学にお邪魔しています。中国のおもてなし文化はたいへん素晴らしく、学会中に何度も美味しいご飯をご馳走になり、ツアーも楽しませていただきました。韓国の先生方とも議論が弾み、たいへん楽しく過ごしております。このような国際会議を開催していただけること、一学生に対しても平等に門扉を開き、参加させていただけることに関して、感謝に堪えません。



神原 龍冬 先生
コロンス島ビーチにて。

前置きが長くなってしまいました。私は、北海道大学の量子化学（武次）研究室で博士後期課程 1 年の学生をしております、神原龍冬（かんばりゅうと）と申します。不思議なご縁で、「量子の世界」には 3 号連続で登場させていただいております。よろしければ、前号・前々号も併せて御覧ください。実は中辻先生と誕生日が同じで…というのをよく話のネタにしています。私は分子科学若手の会において役員を務めており、2025 度の夏の学校においては分科会の担当者として中辻先生を講師として呼びし、集中講義を行っていただきました。中辻先生からはその時のご縁で、今回の執筆に関して大変ご丁寧な依頼をいただきました。「量子の世界」には、深夜に一人の研究室で何かに行き詰るたびに幾度も目を通し、元気をいただけてきました。そこに自分のような学生が…という気持ちもあるにはあるのですが、元来の能天気な性格に従って難しいことは忘れ、ありがたくお引き受けしたという次第です。読者諸兄の通読に耐えるものになるかは疑問ですが、楽しんで書かせていただきます。

研究について

武次研究室には、反応経路動力学を専門とする武次徹也先生に加えて、電子状態理論を専門とする小林正人先生、近接場理論を研究されている岩佐豪先生も在籍されており、日常のちょっとした会話やゼミのたびに様々な刺激を頂ける大変充実した環境です。着任前の北大量子研について、武次先生は「原子や小さい分子系の電子状態計算を大切にして *ab initio* 分子軌道法のプログラムを独自に開発し、『よく遊び、よく学べ』の精神で研究に取り組む…」というふうに書かれていましたが、その伝統は十全に継承され、学生は皆のびのびと研



究に打ち込んでいます。また、北大理学部化学科には協力講座も含めて理論分野の研究室が5つ存在し、小松崎民樹先生が主宰されるデータ数理研究室、長谷川淳也先生の触媒理論研究室、前田理先生が率いる理論化学研究室に加えて、数年前に新しく高橋啓介先生の情報化学研究室が走り出しました。これらの研究室間では、「北大理論化学合同ワークショップ」をはじめとするさまざまな連携がなされています。前田先生を拠点長とする WPI-ICReDD という大規模プロジェクトも走っており、理論化学の研究をするには北大は最高の環境です。

私自身は武次先生の下で、「反応経路」、「反応動力学」、「励起状態」の3つをキーワードに研究を行っています。前田理先生とその師匠である大野公一先生が開発された反応経路自動探索 (GRRM) 法により、量子化学計算によって得られるポテンシャルエネルギー曲面上での反応経路を網羅し、つなぎ合わせた「反応経路ネットワーク」の概念が創出され、このネットワークを用いた逆合成解析や速度論解析は実験分野にも大きなインパクトを与えています。しかしこれらの一連の解析においては、分子の運動エネルギーの効果、すなわち動的効果は考慮されていません。武次研究室では、反応経路ネットワークを出発点として動的効果が重要となるような系についての研究が行われています。「IRC 跳躍」、「動的に隠される反応経路」と呼ばれるものがその例で、前者は反応経路のないところに分子が分け入っていく過程、後者は反応経路があるのに分子がそこを通らないという過程です。どちらも、経路に沿って「お行儀よく」運動する分子を仮定する反応経路描像では捉えることのできない反応です。前者、後者とも魅力的ですが、後者のほうがひねくれた感じがしてかっこいいと思いませんか？そういうわけで、私は動的に隠される反応経路の謎を B4 学生の頃から追いかけています。

動的に隠される経路は、そもそもは加速した分子カチオンを用いる衝突実験をされていた九州大学の古屋謙治先生が、衝突によって引き起こされるいくつかの反応の中に実験閾値と GRRM が予測したポテンシャル障壁が合わないものがあることを見出し、反応経路探索の学会にて報告されたことから始まった共同研究です。私の先輩に当たる織田耕平さんがこの問題に取り組み、多段階反応において1段階目の反応による原子核の慣性がその後の分子運動、反応の進みややすさに影響を及ぼすことが要因であることを明らかにしました。私はこの描像を励起状態にまで拡張するという壮大なテーマを頂き、光照射によってジカチオン化した硫化カルボニル (OCS) 分子の解離反応について調べてきました。

ジカチオン化した硫化カルボニル (OCS) 分子が示す解離反応について、光イオン-光イオンコインシデンス (PIPICO) や光電子-光電子コインシデンス (PEPECO) といった実験手法を用いて、どれだけのエネルギーの光を分子が受け取ればどのような反応が進行するのか詳しく調べられ、 OCS^{2+} 分子から $\text{CO}^+ + \text{S}^+$, $\text{CS}^+ + \text{O}^+$ の解離反応が起こることが明らかになっていました。しかし近年、解離して出てきた S^+ が高い運動エネルギーを持つ場合とより低い運動エネルギーで解離する場合の2つの過程があることが明らかになり、ある先行研究ではこれらの一方は OCS 構造からの解離に、他方は COS 構造に異性化してから解離に対応する可能性について言及していました。

この分子系に対して基底状態の反応経路ネットワークを作成してみると、実験家が予測した COS 構造の異性体が発見されました。しかし面白いことに、実験で観測されていない $\text{OS}^+ + \text{C}^+$ の解離経路まで見つかったのです。これに対して、以下の2つの可能性が考



えられます。(1) 実験家の言う通り、 S^+ 解離反応は COS 構造を経由しているが、動的効果によって C^+ 解離反応は起こらない。(2) S^+ 解離反応はそもそも COS 構造を経由しておらず、2つの解離過程は初期構造以外の要因（たとえばはじめに励起状態に遷移している、など）で異なるエネルギー分布を持つ。

これについて調べるために、基底状態において第一原理分子動力学計算を実行し、COS 構造に異性化するトラジェクトリを得ました。 C^+ 解離が進行するには、COS 構造において C-O 伸縮モードが励起される必要がありますが、実際のトラジェクトリでは CO^+ 部分の回転運動の慣性によって COS 構造から再び OCS 構造に戻ることが明らかになりました。これこそが「動的に隠される」という言葉に我々が込めたものです。スピードを出しすぎた車がカーブを曲がりきれないように、運動量を持った分子は運動方向を大きく変える反応経路には追従しきれず、実質的にこの経路には進行し得ないこととなります。また、COS への異性化を起こせる条件についても調べましたが、シミュレーションを行った限りでは変角振動モードを選択的に、そして非常に大きく励起する（量子数表示で 350 程度）ことが必要であることが分かり、これを現実再現することは難しだろうということで (1) の COS 構造を経由する反応過程については棄却しました。

(2) についても調べるために、こんどは OCS^{2+} の励起状態に注目した解析を始めました。反応のさなかに非断熱遷移を起こす分子を再現するために、Tully の最少遷移アルゴリズムを武次研で開発している第一原理分子動力学計算プログラム SPFR に実装し、シミュレーションの土台を整えました。また、分子軌道や電子配置、ポテンシャル曲線に着目することで解離・異性化反応に重要となる電子状態を抜き出し、それらを始状態とするシミュレーションを行いました。

O^+ の解離反応に対するポテンシャルエネルギー曲線を確認すると、実験で解離が起こり始めているエネルギー帯においても依然ポテンシャル障壁が高く、解離など起こりそうにもないという問題が生じ、頭を悩ませました。しかし、たまたま実験研究室の友人が屈曲 3 原子分子の解析を行っていたことを思い出し、屈曲構造を取ることに伴う直線対称性の破れを考慮に入れることを着想しました。変角振動により分子の対称性は $C_{\infty v}$ から C_s に落ち、振電相互作用により断熱状態のポテンシャル障壁はほとんどなくなる上に非断熱遷移で渡れる電子状態数が増加し、 O^+ 解離チャネルが開けることを見出しました。また、複数の電子状態から S^+ 解離が進行しうることを確認し、現実の OCS^{2+} 分子においても (2) の過程が優先され、少なくとも COS 構造への異性化は主要過程とはならないということを明らかにしました。

ところで近年、実験分野において、強レーザー場という特殊な環境においては、動的に隠されるはずの $OS^+ + C^+$ の解離反応が進行しているという報告がありました。このことは、これまでに考慮してきた反応経路、動的効果という 2つのファクターに加えて、光-分子相互作用という新たな要素が反応に関与していることを意味します。今後は、この動的に隠される反応経路にレーザー場によって光が当てられる動的機序を解明していきたいと、現在新たな研究を立ち上げている真っ最中です。なお、これらの一連の研究は武次先生、古屋先生に加えて、兄弟子でもある堤拓朗先生との共同研究の形で進めてきました。今後も摩訶不思議な分子動力学の世界を探索していく所存です。





研究グループの集合写真。左から古屋先生、堤先生、(近くにいたので入ってもらった)田原太平先生、武次先生、私。

なお、この研究を始めた頃は、「分子小さくないですか?」「PIPICO 実験って、アイスクリームみたいな名前ですね」などのいじりを受けましたが、研究が進んでいくうちに、とても多くの方から研究について褒めていただけるようになりました。特にありがたかったのが実験系の先生方に非常に強く関心を持っていただけたことです。どうやらこの分子は最も単純な非対称分子として昔から盛んに研究されてきた分子であるようで、発表をしていると必ずと言っていいほど実験系の先生方に聞きに来ていただけて、質疑で盛り上げていただいております、非常にありがたく思っています。

恩師・友との出会い

私の初めての学会参加は学部 4 年生の時、大学院入試の 1 ヶ月後にあるシンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア」(SRPS) とその直後にある分子科学討論会でした。6 月頃、研究が順調に進捗していた同期たちが次々に分子科学討論会への参加を許可され、遅れを取っていた私はヤキモキしながら研究を進めていました。グループミーティングでようやく面白い結果が出ました、という発表をしたのですが、その翌日、朝のエレベーターで武次先生とぼったり乗り合わせ、その扉が閉まった瞬間に「神原くんも分子科学討論会に行きますか!」というお言葉をいただくことができました。二つ返事で参加の意思を表明して(返事だけはいいい)、少々見切り発車の要旨を急いで仕上げ、準備を急ぎました。会期中は右も左もわからぬままに各会場を駆け回り、ポスター発表ではたくさんの先生方、学生に発表を聞きに来ていただきました。ここで話した多くの方には実験科学者の先生や学生も多く含まれており、今でも可愛がっていただいております。

それ以降、本当に色々な学会に行かせていただきました。修士課程 1 年生の初夏にあった理論化学討論会では、初めて中辻先生の発表を聞かせていただきました。私自身がかなり実験志向であることもあり、理論化学討論会の発表は少々難しいなと思いながら聞いていたのですが、中辻先生がご発表で Li_2 のポテンシャル曲線を自由完員関数理論から得られた計算値と実験値とで比較され、それらがピッタリと一致するのを目にしたときには大変に感激したのを覚えています。また、私自身は全く覚えていないのですが、この理論化学討論会の時、私は中辻先生のすぐ横の横の席に座っていたそうで、また不思議なご縁を感じております。



また、ここ何年かで、北大で国際会議が開催される機会が何度かありました。2023 年には武次先生が Congress Chair を務められた Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC、武次研内ではもっぱら「タックシー」と呼称されていました) が、また 2024 年には触媒科学研究所の長谷川淳也先生が Congress Chair を務められた The 8th Japan-Czech-Slovakia International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS8) が開催され、多くの海外研究者の方が北大を訪れることとなりました。写真経験のあった私は撮影係に立候補し、名前もよく知らないまま先生方の写真を(時には自分も入れたツーショットでの写真を)撮りまくることとなりました。これ以降、各地の学会で「あの時写真を撮っていた人ですよ」とお声がけ頂く機会が多くあり、非常にありがたく感じております。また、これらの学会では中辻先生と初めてお話する機会があり、研究について励ましの言葉をいただくとともに皆で写真を撮っていただきました。JCS の際には、中辻先生が理論化学会誌「フロンティア」に書かれた巻頭言をプリントアウトし、そこにサインを頂きました。そのなかのとある一節にいつも励まされており、机の前に貼っていつでも見られるようにしています。



TACC のおもひで (ほんの一部)

JCS のおもひで (ほんの一部)

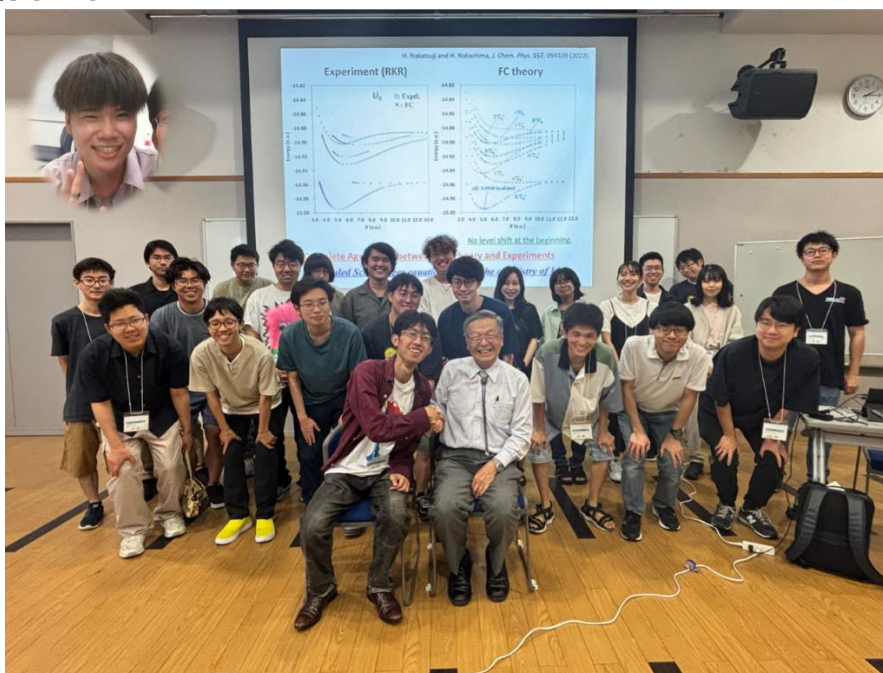
分子科学若手の会夏の学校

この文章を読んでおられる方は、分子科学若手の会についてご存知かもしれません。この会の最も大きな行事として、毎年 8 月の半ば頃に行われる夏の学校があります。この学校は、毎年場所を変えながら全国から 100 人程度の学生・若手研究者を集めて開催されています。例年夏の学校の中日のころ、役員たちは夜の飲み屋に集まり、来年の役員をどうするかとか先生は誰を呼ぶかとかといった話を(アテに飲み会を)します。私は 2025 年度の分科会担当を拝命したのですが、はて誰をお呼びしたものかと悩みはじめました。

せっかく分科会をデザインすることのできる立場に立ったからには、みんなが気になる優れた研究をしている先生をお呼びしたいところです。これまでの夏の学校の開催記録[1]を何周かしていくうちに、驚いたことに中辻先生がこれまでに呼ばれていない[2]ことに気が付きました。実験値にピタリと重なるポテンシャルカーブを思い浮かべながらその日のうちに講師のお願いをするメールを書き上げ、中辻先生にお送りしました。中辻先生からは

すぐに丁寧な受諾のご連絡をいただい、その日は嬉しさを小躍りしながら研究をしたのを覚えています。

2025 年度の夏の学校は金沢市において開催され、中辻先生ご夫妻を会場である IT ビジネスプラザ武蔵にてお迎えしました。講義内容としては、1. 静電力理論、2. SAC/SAC-CI 理論、3. 自由完員関数理論、4. 綜合理論という 4 本立てで組んでいただきました。5 日間にわたる夏の学校では、テキストやスライドといった講義資料の作成まで先生にお願いしているのですが、中辻先生にはお忙しい時間を縫ってテキストを作ってくださいました。中辻先生のすばらしい講義に呼応するように、学生たちがとても活発に質問をし、中辻先生からはそのそれぞれに対して丁寧な回答をいただきました。講義はとても和気藹々とした雰囲気で行いました。



夏の学校第一分科会の集合写真。

実は中辻先生からは講義の様子のビデオ撮影を依頼されており、私は講義を仕切りながらビデオを撮りながら次の予定を確認しながら…といった感じで気持ちを切り替えつつ（実践できていたかは疑問です）の聴講となりました。夏の学校期間中には初対面の学生からも色々話しかけていただき、目の回る思いがしましたが、大変楽しい夏の思い出となりました。終了後に、土日のちょっとした時間を使って慣れない手つきでビデオを編集しました（Youtuber かよと自己ツッコミ）。DVD に焼き付けて京都の中辻先生にお送りすることができ、喜んでいただけました。

一つだけ、ビデオ撮影をしそこねた場面があります。それは先生方をお願いしている「フリートーク」の時間です。中辻先生からは、「フリートークは 2 人でお話ませんか」というお誘いを開始 30 分ほど前（！）にいただき、インタビュー形式でのフリートークにすることを決め、大急ぎで質問の内容を決めました。実際のフリートーク中は、ノートに書いた質問を猛烈な勢いで書き換えながら、学生の立場から中辻先生に色々な質問を投げかけ、参加者全員を巻き込んで笑いあり涙ありの（？）とても楽しい時間を過ごすことができました。

中辻先生と 2 人でフリートークで喋ったことのある学生というのは、世界中探しても私しかいないと自負しています。

来る 2026 年度には、分子科学若手の会夏の学校は第 65 回を数えます。僭越ながら私は代表を拝命しており、関連イベントも含めて開催準備に当たっております。今年も講師の先生、学生運営委員とも強力な陣を布いていますので、学生読者の皆様におかれましては是非参加のご検討をお願い致します。また先生方におかれましては、学生への周知をお願いするとともに、もし学生から講演の依頼があった際には、ぜひ前向きなご検討をお願い致します。



来季の運営委員の仲間たち。

ふらふらと：むすびに

先日、北大の構内をふらふらと散策しているときに、循環バスの停車口の横に立っていたおじいさんからバスはいつ頃来ますかと話しかけられました。バスロケーションシステムを確認して「5 分くらいで着きますよ」と返事したのですが、そこから何やら話が弾み、色々な昔話をしていただきました。おじいさんが 30 年前まで北大に勤めておられたこと、大学院環境科学院が発足した直後辺りに教養棟からそちらに移られたこと、出身は理学部化学で…「待ってください、僕も理学部化学科の人間です。」学生の頃は分析化学講座に所属していて、指導教員は神原先生で…「待ってください、僕の名前も神原です。」何度も「待ってください」が飛び出す、不思議なお話、不思議なご縁でした。

これまでの人生、色々な縁に導かれるようにして、あちらこちらへ寄り道しながら生きてきました。子供の頃の私は就寝前の読み聞かせをととても楽しみにしている子供で、本を読むのが好きな文系の性格でした。しかし、いつの頃だったか数学のことを書かれた本を読んでいるうちに、数学やそれを使った理論物理が好きな子供に変わりました。この宇宙がシンプルな数式で記述されるということへの、漠然としていて明確なあこがれを抱いていました。それで数学や物理を勉強していたのですが、結局大学で入学したのは理学部の化学科でした。

化学に対して興味がなかったわけではないのですが、見えもしない分子の世界を見てきたように語る中等教育の化学に対してなんとなく反感を抱いていたのも相まって、今後の身の振り方について多少なりとも途方に暮れたのを覚えています。そんな中、「XX 化学」と

名のつく無数の講義群の中に時折現れる「量子化学」の文言は、背伸びをして読んでいた量子力学の本のことを思い出させてくれ、大変励みとなりました。武次先生から物理化学の講義を受けた大学2年生の私は、雷に打たれたように[3]波動関数や対称性といった量子化学の魅力に取りつかれ、藤永茂先生の本を読んで勉強を始めました。量子の言葉を使えば分子の世界が見えることを学んだ私は化学も好きな子供になりました。そこから私が研究室分属の際に第一志望で武次研究室を志望したのは、ある種必然でした。

学部4年生の夏、同期の皆は大学院入試の準備に追われていました。幸運にも筆答免除者に選んで頂いていた私は時間があるのかまけ、当時読んでいた教科書を参考に、時間依存のシュレーディンガー方程式に従い波束が走っていくアニメーションを出力するプログラムを書いてみました。はじめ一つだった波がポテンシャルの窪地を通り抜けるたびに広がり、分岐し、また干渉効果で縞模様を形成するさまは非常に美しく、驚きに満ちていました。少しずつ条件を変えながら、子供のように夢中になって波束の様子を見守っていたのを覚えています。私は、生き生きと動く量子のダイナミクスを覗くのが好きな子供になりました。これからも、色々な縁に導かれながら、子供の気持ちで分子の世界、量子の世界を覗き込んでいければと思います。



2人めの師匠（中辻先生、左）と、1人めの師匠の師匠（平野恒夫先生、中央）と。子供のように…。

[1] これまでの夏の学校の開催記録です。錚々たる面々の先生方に講義していただいていることが見て取れます。

<https://www.ymsa.jp/%E9%96%8B%E5%82%AC%E8%A8%98%E9%8C%B2>

[2] 分子科学若手の会夏の学校では、同じ先生をお呼びするのは一度だけという不文律があります。

[3] 東大教養学部報に掲載された高塚和夫先生の「<駒場をあとに>精一杯生きたか?」という文章からこの大変美しい言葉をいただきました。

<https://www.c.u-tokyo.ac.jp/info/about/booklet-gazette/bulletin/581/open/581-5-1.html>



「第 17 回 革新的量子化学シンポジウム」のご報告

開催日時: 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)

「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—」が、2025 年 5 月 10 日(土)に下記プログラムにて開催されました。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。

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~

場所: カフェラウンジ凛 (京都テルサ内)



講演して頂いた先生方



平尾 公彦 先生

平尾先生のご講演は、これまでのご研究と研究生活を振り返る壮大なお話でした。精密な理論計算から大きな分子の実用的な量子化学計算まで、理論化学における平尾先生の様々な偉大な貢献を改めて系統的に学ぶことができ、とても感銘を受けました。



北河 康隆 先生

北河先生のご講演は、様々な開殻系分子材料の化学現象の理論的研究を紹介されました。例えば、一般的に困難な対象として知られる多核金属錯体の化学的メカニズムを鮮明に解析され、その素晴らしい成果に感動しました。また、故中野雅由先生のご意志を引き継ぎ、様々な対象にチャレンジされている気概に深い感銘を受けました。



中辻 博 先生

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、SAC-CI 理論及び静電力理論を結び付ける画期的な理論を紹介され、分子の exact 理論計算の新たな可能性を拓くご講演でした。

シンポジウムの様子





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。毎年恒例となった京都の銘菓シリーズ：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



江藤 正義 先生による、乾杯のご発声

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。江藤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、お酒も進んで盛り上がりました。そして、太田先生の締めのご挨拶により閉会しました。参加者の皆様と近況を語り合い、活力と英気を養うことができました。



太田 浩二 先生による、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。

次回、「第 18 回 革新的量子化学シンポジウム」は、**2026 年 5 月 9 日(土)**に開催予定です。まだ参加されていない方も、是非一度ご参加いただければ幸いです。



クラウドファンディング

「化学の支配方程式・神の方程式を解いて、化学を预言する」

2025 年 3 月 3 日 – 6 月 1 日

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

ご報告

認定 NPO 法人・量子化学研究協会研究所では、2025 年 3 月 3 日から 6 月 1 日(23:00)までの 90 日間、「化学・物質・生物の支配方程式 神の方程式を解いて化学を预言する」と題し、クラウドファンディングを行いました。

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、などを目的にしました。多くの皆様から例年以上のご支援をたくさん頂き、心から感謝申し上げます。期間中も多くの皆様より温かい応援メッセージも頂きました。右図は

そのほんの一部です。これらは、READYFOR のサイトの“応援コメント”から見るができます。(<https://readyfor.jp/projects/QCRI/comments>)

その結果、最終的に、

- ・ 寄附総額: 8,036,000 円
- ・ 寄附者総計: 102 人

の多くのご支援を賜り、クラウドファンディングが完結いたしました。皆様の温かいご支援を改めて感謝申し上げます。このプロジェクトを通じてご支援頂いた皆様におかれましても、通常の認定 NPO 法人への寄附と同様に税の控除が受けられます。

クラウドファンディングによる進歩と成果

このプロジェクトに示されている通り、**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、実用化することは大切です。

中辻は、すでに次のような重要な理論

1. **自由完員関数(FC)理論**: Scaled シュレーディンガー方程式に基礎を置く exact 理論
2. **SAC/SAC-CI 理論**: 基底, 励起, イオン化, アニオン化状態を同時に解く精密理論.
3. **静電力(ESF)理論**: exact 解の必要条件である Hellmann-Feynman 定理を満たす理論,

川上 量生

中辻研出身者として応援します！

長瀬 寧次

頑張ってください
凄い事に挑戦しているのですね。
同級生の誇りです。

okumura

人類の知の地平線を広げる研究ですね。頑張ってください！応援しています。

kawashima

研究が進出し様々な場所で利用されるようになることを願っております。

福西モヒカン快文

神の厳密解が、今までの悪魔のAIでの分子設計に勝ると面白そうに思います。

寄附者の方からの
応援メッセージの一部



を提案し開発してきましたが、これに加えて、さらにこれらを融合し、これらの長所が相乗的に生かされる **exact 理論: FC(SAC-CI, ESF)理論**を新たに提案しました。この理論は、自由完員関数理論による正確性、SAC-CI 理論による幅広い分子への応用性、静電力 (Electrostatic Force (ESF))理論による化学概念、を兼ね備えた強力な Exact 理論であり、今後の研究所の中核的な理論に育っていくことが期待されます。

中辻は、このプロジェクトの具体的研究として、この理論を様々な分子の理論的化学研究に応用することを計画しました。その第一番に取り上げた分子は、化学の最重要キー分子の 1 つであるベンゼンです。この分子は 42 個の電子からなる分子であり、exact 理論としてかなり大きな分子ではありますが、この理論の高精度と高い有用性を示すためにまず取り上げ、中嶋が計算を行いました。その成果の一例を右図に示します。この図はベンゼンの様々な励起状態とイオン化状態のエネルギーについて、

FC(SAC-CI, ESF)理論による計算値と、実験値とを 45 度線を使って比較したものです。全ての状態がほぼ 45 度線上に乗り、絶対平均誤差は 0.095 eV で、理論値と実験値は非常に良く一致していることが分かります。理論はある意味絶対的な正確性のある値であり、45 度線からのずれの原因はむしろ実験にあるのではないかと考えています。

この理論は静電定理を満たしており、静電力理論の化学概念—電子密度と核に働く力—を使って調べてみましょう。図 2(左)は、このベンゼンの最低励起一重項励起状態: 1^1B_{2u} 状態の差電子密度分布(基底状態との電子密度の差)の等高線プロット(赤はプラス, 青はマイナス)と、この励起状態にある分子の原子核に誘起された C 原子と H 原子の核に働く力のベクトル(Force)を矢印で示しています。この励起状態は、結合性 π 軌道から反結合性 π^* 軌道への π - π^* 励起が主の状態です。差電子密度分布から、C-C 結合間の電子密度が減り C-H 結合間の電子密度が増えており、原子核はその電子分布に引かれ、C 原子は外側(環が拡張する方向)に伸び C-H 間は僅かに縮む方向に Force が働いています。また、図 2(中,右) は、

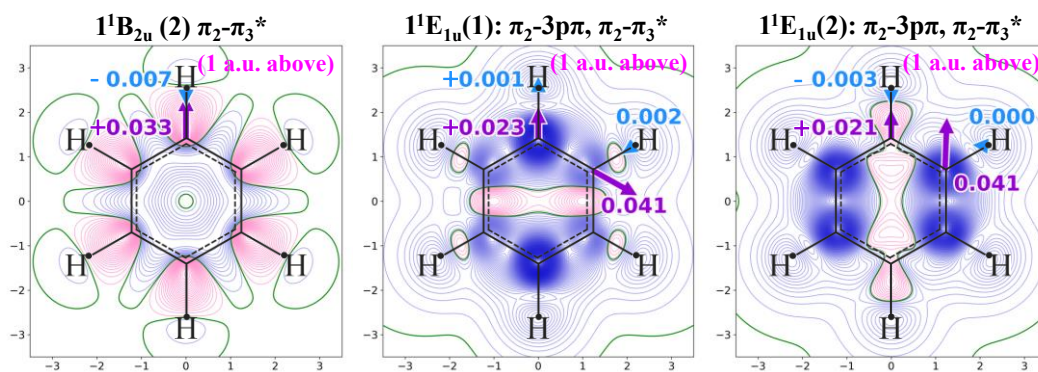


図 2. ベンゼンの 1^1B_{2u} 状態(左)と 1^1E_{1u} 状態(中,右)の差電子密度分布と静電力

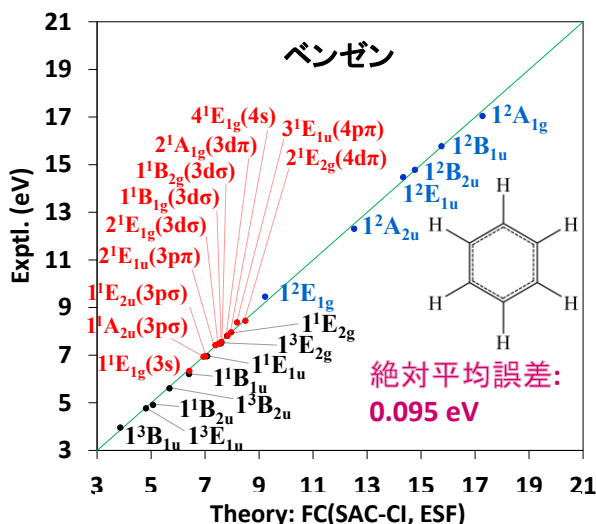


図 1. ベンゼンの励起エネルギー、イオン化エネルギーの実験値との比較

ベンゼンの 1^1E_{1u} 状態の縮退している 2 つの状態の差電子密度分布と原子核にかかる Force を示しています。この状態は、吸収強度が大きく重要な状態ですが、結合性 π 軌道から第三周期の $3p\pi$ 軌道への励起(Rydberg 励起)と π^* への Valence 励起が Mix している状態と言えます。そして、Force の解析により、 D_{6h} の六角形の対称性が崩れるヤーン-テラー効果による構造の歪みが予想できます。

次に右に示した図 3 は、FC(SAC-CI, ESF) 理論を CO 分子に適用した際の、核間距離 R に対する $X^1\Sigma^+$ 基底状態と $1^1\Pi$ 励起状態の C, O 原子核にかかるエネルギー微分(Gradient)と静電力(ESF)の関係を示しています。FC(SAC-CI, ESF)理論の波動関数は、Hellmann-Feynman 定理を満たすよう正確に構成されていますので、エネルギー微分と静電力の値はよく一致しています。一般に、エネルギー微分の計算は、高度な理論ほど計算コストが大きくなります。一方、静電力は、様々な基底・励起状態の 1 電子密度行列から容易に求められます。そのため、高精度で信頼性の高い本研究では、静電力理論に基づき、分子の電子密度分布に基づく力の概念により、化学反応やダイナミクスの研究を高精度かつ容易に展開することができます。

このように、我々は、既に様々な分子に FC(SAC-CI, ESF)理論を適用し、その有用性を確かめると共に、exact レベルでの化学研究を展開しています。本クラウドファンディングにより、このような高精度でありながら、実用性も高い FC(SAC-CI, ESF)理論を展開し、その理論の高い正確性と有用性を確認することができました。今後、さらにこの化学理論を飛躍的に進歩させるため、より広範な分子やシステムを対象に研究を展開し、これらの系のシュレーディンガー方程式の正確な解を求め、その正確な予言能に基づく正確でかつ実用的な予言的理論化学の実現を目指していきたいと思います。

このように、我々は、既に様々な分子に FC(SAC-CI, ESF)理論を適用し、その有用性を確かめると共に、exact レベルでの化学研究を展開しています。本クラウドファンディングにより、このような高精度でありながら、実用性も高い FC(SAC-CI, ESF)理論を展開し、その理論の高い正確性と有用性を確認することができました。今後、さらにこの化学理論を飛躍的に進歩させるため、より広範な分子やシステムを対象に研究を展開し、これらの系のシュレーディンガー方程式の正確な解を求め、その正確な予言能に基づく正確でかつ実用的な予言的理論化学の実現を目指していきたいと思います。

今後とも、皆様の継続的なご支援を、心からよろしくお願い申し上げます。

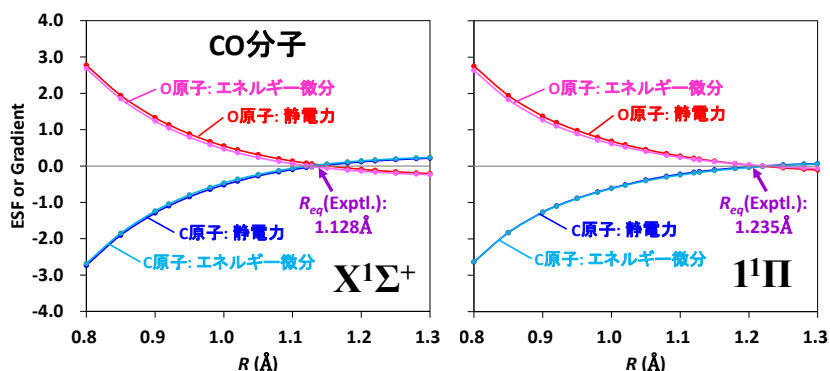
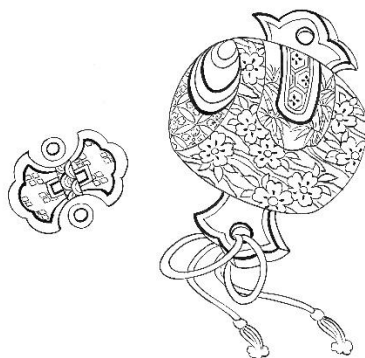


図 3. CO 分子の $X^1\Sigma^+$ 基底状態と $1^1\Pi$ 励起状態の核間距離 R に対する C, O 核にかかるエネルギー微分による力と静電力の比較



「量子化学講習会：SAC-CI 理論を中心に exact 理論の展開もまじえて」

量子化学講習会開催のご案内です。この機会にぜひご参加ください。

開催日時:

- ・ 2026 年 3 月 7 日 (土) 10:00~17:00: 基礎
- ・ 2026 年 3 月 14 日 (土) 10:00~17:00: アドバンス

(セットでの講習がベストですが、どちらか一方のみの受講も可能です。)

会場: 京都技術科学センター(会議室 B)、<https://qcri.or.jp/lab/ja/access>
(京阪出町柳駅より鴨川沿い南へ徒歩 10 分位)
(量子化学研究協会研究所のあるところです。)

講師: 中辻 博 (Exact 理論、SAC-CI 理論等の創始開発者)

会費(各会):

- ・ 一般: 25,000 円
- ・ 学生: 15,000 円

受講希望の方 受付中!

(会費は、研究所の運営と研究開発に充てさせていただきます。)

また、ご寄附などのご支援を頂けると幸いです。)

持ち物: ノートパソコン (講義資料や入出力ファイルの閲覧等に必要です。)

申込方法: office@qcri.or.jp に以下の返信フォームをお送り下さい。

---- 返信フォーム ----

御芳名:

連絡メールアドレス:

所属:

住所(ご自宅):

受講: 基礎,アドバンス両方 or 基礎のみ or アドバンスのみ

---- ここまで ----

一両日中に必ず受け付け記録をお送りいたします。もしその送信がなければ、届いていないためですので、再度ご送信ください。

ホームページ: <https://qcri.or.jp/>

量子化学研究協会研究所では、上記要領で分子の基底・励起状態の理論・SAC-CI 理論やシュレーディンガー方程式の正確な解法に基づく量子化学理論など、色々の理論の創始・開発者であるの本研究所の所長、中辻による「量子化学講習会：SAC-CI 理論を中心に exact 理論の展開もまじえて」を開催します。3 月 7 日(土)に基礎編、3 月 14 日(土)にアドバンス編、のセットでの講習となりますが、どちらか一方のみの受講も可能です。

SAC-CI 理論は、分子の基底状態をクラスター展開法の完成形 SAC 理論で解き、その励起、イオン化、アニオン化状態等を SAC-CI 法で解く理論であり、かなり正確な理論です。世界最大シェアの量子化学プログラム Gaussian にも搭載されています。



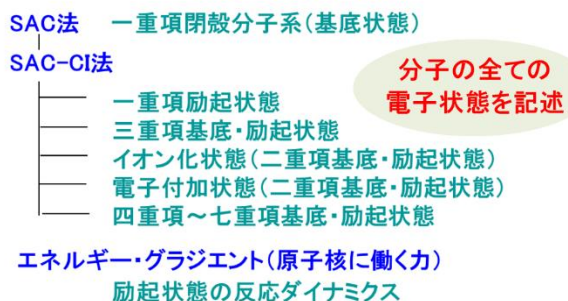
光と分子が織り成す化学には、光による植物の光合成を始め、目の視覚の科学など、科学者として研究し深めなければならない様々な分野があり、とても重要です。SAC-CI 理論はこのような分野を量子化学的に研究する上で、とても優れた理論です。その分野の化学現象を理論的に解析し、究明し、ひいては予言を行う上で、とても有用なツールとして活用される事をお勧めいたします。その構造は、右の図にまとめたようなものです。まず、ふつうの一重項の分子の基底状態を、SAC 法というクラスター展開法で解きます。この展開は非線形な展開ですので、展開の構成関数は symmetry adapt にしておかなくてははいけません。これがその名前の由来です。あらゆるクラスター展開は、以後その形になっています。SAC 理論では変分的な方法を使ってその関数空間をベストにするのですが、それを行うと、同時にその補関数空間が作られます。その補関数は、基底状態と直交・ハミルトニアン直交する空間を張っていることになり、まさに励起状態の空間なのです。これに気がつき、これを使って励起状態を作れるはずだ、というのが SAC-CI 理論です。実際、この空間を使って、分子の励起状態、イオン化状態、アニオン状態を計算すると、SAC の基底状態とバランスのとれたそれらの状態の波動関数が得られます。これが SAC-CI 理論です。SAC を解くと、そのおまけに、これらの多くの状態が一度に得られるのです。「子供時代のそれ」のように、おまけのほうはずっと面白いですね。実際、励起状態の研究の時には、そのおまけを求めるために、SAC/SAC-CI 計算をします。これらの研究が面白く、Gaussian の Mike Frisch は Gaussian に是非、と誘ってくれ、Gaussian にも搭載しました。この理論で植物の光合成のメカニズム、人の目の視覚の問題、蛍の光などいろいろ研究しましたが、蛍の光がまさに「蛍の光」の研究になって、その頃に京都大学をようやく卒業し、いまの研究協회를皆で立ち上げました。

その大分前ですが、1999 年それまでいろいろの角度からトライしてきたシュレーディンガー方程式の正確な解法が、あたり前の方法で解けそうな気がして、「正確な波動関数の構造」という研究を始めました。そして色々の角度から面白い研究を発表しましたが、ついに最も素直な、今までの研究のどれとも両立し、しかも全く新しい視座に立つ、シュレーディンガー方程式の正確な解法が 2004 年誕生しました。今回は、この研究もアドバンスで入りたいと思っています。それで、今までの講習会では、SAC-CI 講習会としていたものを、量子化学講習会とし、それらしき副題もつけています。

exact 理論というのは、シュレーディンガー方程式の正確な解を、まさにそれを求めるこ

SAC-CI理論

SAC-CIプログラム



対象: これらの状態が関与する化学と物理

FC(SAC-CI,ESF)理論

- 自由完員関数(FC)理論: シュレーディンガー方程式の正確な解
- SAC-CI理論: 様々な分子の様々な電子状態の精密計算
- ESF理論: Hellmann-Feynman定理を満たす正確な化学理論

これらの長所を兼ね備えた複合理論



とができる理論です。この理論はそれ自身、理論の最も優れた形でもありますので、他と妥協しないところもあり、また全ての方法を包容する大きさも持っています。こう言えるのは、中辻自身がその生みの親であり、その成長を見まもる立場であったからこそいえるのだと思います。

Exact 理論はシュレーディンガー方程式の正確な解法ともいえますが、それは Full-CI で、既にあるではないか、といわれる方もおられるかもしれません。しかしそうではありません。Full-CI はあってないような理論であり、荒い基底関数で Full-CI をしたところで、できたとしてもたいしたものではありません。完全な基底関数などないのですから。別の言葉で言えば、今ある量子化学理論で、真に exact な理論と言えるほどの汎用性を持ち、計算機さえ許せば、ずばり exact な解を出せる理論は、中辻の理論を除いてありません。

中辻の exact 理論はどのような関数から出発しても真に exact な波動関数を作り出す理論です。その行程の中に、あるいは現在の計算機では時間がかかるかもしれないプロセスがあるかもしれませんが、不可能なプロセスはありません。

そのような方法の一つとして福音があります。それはこの exact 理論は荒い波動関数から出発してそれを exact にするだけでなく、近似的な理論に応用して、理論そのものを exact にしていくこともできるということです。その一例として、この exact 理論を SAC/SAC-CI 理論にアプライする理論もこの講習会で紹介しようかと思っています。

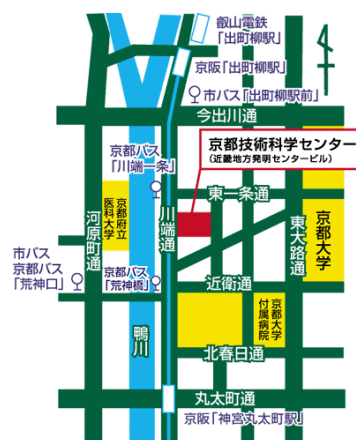
分子の計算では、exact 波動関数の一つの必要条件でもある Hellmann-Feynman 定理を満たすことも必要であると考えています。それにより、計算されるエネルギーだけでなく、一つ一つの原子核に働く力も容易に計算されるようになり、中辻の静電力(ESF)理論という exact 概念に立って化学を考え予測する考え方が生きてきます。これも面白い理論ですので是非使ってみてください。波動関数が exact になると難しくて何も分からなくなるのではないかと思われる向きもあると思いますが、決してそうではなく、静電力(ESF)理論という直感的で化学が面白く好きになる考え方が、自在に使えるようになるのです。

この講習会の一つの目的として、私たちの研究所本来の考えもあります。それは化学理論を通じて、世のため人のためになることをするということです。私たちの化学理論は、決してアカデミックだけではなく、世のため人のためになることを目的としています。NPO 法人としての目的です。もしこの量子化学講習会を通じて生まれる交流によって、世のため人のためになるチャンスが生まれるのであれば、是非教えてください。

さらにご興味のある方は、状況に応じて、ご研究内容に照準を合わせた共同研究への発展も可能です。お気軽にお尋ねください。

皆様のご参加をお待ちしております。

会場は、量子化学研究協会研究所のある京都技術科学センターです。京阪電車の出町柳駅を下車、鴨川沿いに南へ 10 分ほどの京都技術科学センターの 1 階、玄関から近い B 会議室です。静かな場所で、密なディスカッションが可能です。稔りある講習会になることを願っています。この機会にふるってご参加ください。



量子化学研究協会の活動に、温かいご寄付をお願いします

量子化学研究協会の活動にとって、皆様方の継続的なご寄附はとても大事です。私達の活動は、皆様の温かいご寄付のおかげで、「認定 NPO」という形で行なう事ができました。今後もこの「認定 NPO」を、京都市として認めていただき、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・「絶対基準」として、毎年 100 名様以上からの 3,000 円以上のご寄附が法律により定められています。

多くの皆様から、毎年、継続して、多大なご支援を頂き、深く感謝申し上げます。また、2025 年 3 月 3 日から 6 月 1 日までの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>)を通じて、多くのご寄附を賜りました。厚く御礼申し上げます。

今後も認定 NPO を継続し活動していくためにも、本年度も、是非、私たちの研究活動に対する支持の証として 3,000 円以上のご寄附を、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。皆様からのご寄附は、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。私たちは、今後も、皆さまのご好意やご寄附、ご期待に応えられるよう、不断の努力を続けていく覚悟です。ご寄附頂きました御心ざしは、量子化学研究協会の活動を通じて、研究所の活発な研究活動に使われ、それにより化学理論を飛躍的に進歩させ、科学・技術の進展を促し、ひいては人類の幸福に寄与すると考えています。

認定 NPO 法人へ寄附をすると、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 <http://www.qcri.or.jp/> や次ページ以降をご覧ください。

温かいサポートを、よろしくお願い致します。

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	<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。

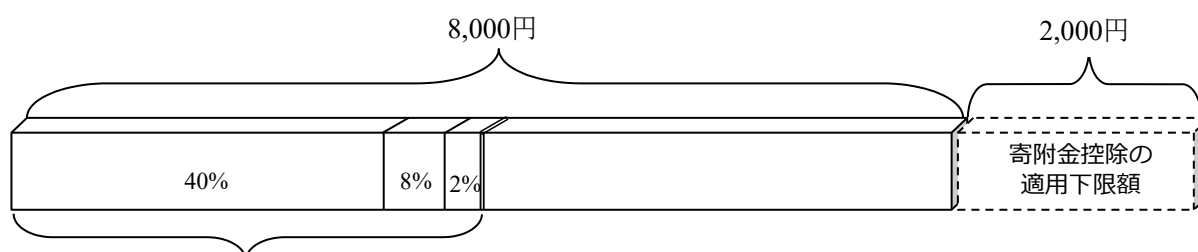
(参考) 京都市民の方が認定 NPO 法人に 10,000 円寄附した場合の例

（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：（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>）



本誌、「量子の世界」に寄稿しませんか

「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。



「量子の世界」第22号, 2025年(令和7年) 秋冬号

2025年12月23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://qcri.or.jp/>)にてご覧になれます。

