



# 量子の世界

No. 23, 2026 年 春号 (2026/4/13 発行)

## - 目次 -

	ページ
1. 量子化学が人生に齎してくれたもの 早川 俊昭 (東北大学)	1
2. 所変われば品変わる 飯田 健二 (北海道大学)	5
3. 「第 18 回革新的量子化学シンポジウム」(2026/5/9(土))のご案内 会場: 京都技術科学センター(出町柳より鴨川沿い南徒歩 10 分位)	9
4. 「量子化学講習会: SAC-CI 理論と Exact SAC-CI 理論、その素晴らしい 予言性」ご報告	12
5. 認定 NPO 法人の継続更新が認められました!	15
6. 量子化学研究協会の活動への継続的なご寄附のお願い	16
7. 本誌、「量子の世界」に寄稿しませんか	19

## 量子化学が人生に齎してくれたもの

早川 俊昭  
東北大学

2026 年春に量子化学研究協会研究所が設立されて 20 年を迎えられるとのこと、おめでとうございます。その節目の年の「量子の世界」の巻頭言を依頼されるとは夢にも思いませんでした。これまで巻頭言を執筆されてきた先生方は量子化学で大きく貢献された方ばかりでしたし、同期の中でも出来が悪い方でしたので。

中辻先生との出会いは実に 48 年前で、その頃はまだ助手のお立場でした。当時はまだ計算機センターのシステムは最近の携帯電話の CPU より遅いという時代で、ごく小さな分子でも計算するのが非常に大変な時代でした。棚の上には骨董的価値すらある



早川 俊昭 先生



ような手回し計算機が置いてありました。あの手回し計算機、今どうなっているのかなと時々懐かしく思い出しております。

私が量子化学を選択したのは化学が不得意(嫌い)でしたので、試験管を振らずに過ごせようだという実に情けない理由でした。

中辻研究室は当時、同期が3人も(一年遅れてもう一人の計4人も)志願するという大変な人気研究室でしたが、その中でも一番動機が不純でしたので先生も扱いには困られたと思います。

そこを見透かされたからと思いますが、最初にプログラムの勉強ということをお口にFORTRAN でカレンダーをプログラムしてプリントアウトするなど、およそ化学とは無関係と思われることから好き勝手やらせていただくことで、大変楽しくプログラムの技量をマスターさせていただきました。今思えばこの時期にプログラミングの楽しさを覚え、その延長上に今の自分があると思っております。

さて、そこからが大変でした。現在は大学関係者であれば誰でもパッケージとして使用できる量子化学計算ソフトウェアの Gaussian が当時はまだ開発途中でした。

数式の意味もわからず、Gaussian の Helmann-Feynmann Force のサブルーチンを作成していたので、今思えば無茶なことをやっていたと思います。

中辻先生からも、「君は理論も分からんのにようプログラム書けるな」と言われ、「いや、式があればその意味はわからんでもプログラムは書けます」と返したのを今でも覚えています。先生は「あれは褒め言葉や」とおっしゃいますが、単に呆れていらっしまったのだと思います。

しかし、理論がわからなくても得意なことがあればなにかしら世の中の役に立つことができるという妙な自信がついたこともその後の自分の糧になったと思っております。

以降、自分の人生の振り返りですが、しばらくお付き合いください。特に理論に自信のない方(「量子の世界」の読者の皆様にはいらっしやらないかもしれませんが)も、こんなやつでも元気で生きていけるというサプリメントとして本稿を楽しんでいただければ幸いです。

量子化学の理論に弱い私は 1981 年に中辻研で修士課程修了後すぐに、当然博士課程には行かず(行けず)、富士写真フイルムに就職し、ハロゲン化銀感光材料の基礎研究を行いました。

上司には大変恵まれ、若手数名が上司の自宅で勉強会を開催してもらい、仕事とは直接関係のない素粒子論について議論するなど、柔軟な思考を身につけることに関しては有意義な時間を過ごさせていただきました。

そのうち、製造現場も経験すると、工業用 X 線感光フイルムの開発を経験し、今までとは全く異なり、納期と品質を保証する現場責任者や実際に顧客のクレームを受ける営業の方を通じて身にしみるほど叩き込まれ、お金を稼ぐということの難しさ、責任の負い方などを学びました。これ以降、量子化学との接点はほぼ無くなりました。

一方、ハロゲン化銀の研究から、光励起された電子の挙動、還元された銀(潜像)の挙動など、非常に面白い現象について学びました。

そうこうしているうち、これからはデジタルカメラの時代だと直感して CCD の内製化のために新規に立ち上げられた子会社に自ら志願して転職し、全く素人ながら半導体プロセ



ス立ち上げに関わり、ミックストシグナル LSI、デジタル画像処理 LSI、高速通信 LSI の開発など、実に幅広い分野を経験しました。

富士フイルムが CCD から撤退するタイミングで LSI のテスターのメーカーのアドバンテスト関連会社に転職し、ここでは電気接点や MEMS、磁気センサーを研究しました。そして 60 歳の定年前に共同研究コーディネータとして東北大学にお世話になることになりました。

コーディネートするだけで自分では研究は行いませんでしたが、プログラムが得意でしたので、文科省指定の資料作りの自動化などで少しは役に立てたと思います。

その後、画像処理を経験したということもあって東北大の中川教授のもとでナノインプリントの位置合わせ精度向上に関わる研究に携わっております。

3 年前からデクセリアルズ (旧ソニーケミカル) 社と東北大学とで光メタセンシング共創研究所が設立され、現在は光学素子に関する研究のお手伝いをしております。

長きに渡り量子化学計算との接点は殆ど無いままでしたが、奇妙なことに「電子」との関係はずっと続いておりました。

量子化学計算とは無縁の企業人時代も、実は電子の挙動という観点では常に「Schrödinger 方程式」に支配されていたことになります。

そういうことも本能的に感じていたのか、中辻先生のところには時折尋ねて懐かしい昔話などさせていただいておりました。今思えば、恐らく量子化学の最先端を研究されている先生と共に学生時代を過ごしたこと、そして「電子」に関わる仕事をしてきたことが自分の体幹に残っており、それが無くなってしまうと、自分で無くなるという漠然とした不安があったのかもしれない。

恐らく「光電子励起」に非常に関係の深い光メタセンシング共創研究所ですので、多電子励起・非線形光学などの現象に関して量子化学を用いて理解しようと提案し、なんと中辻研卒業後、干支で 4 周目となる 48 年の歳月を経て再度先生のお力をお借りしようとしていますので、人生面白いですね。

そう言えば、この 4 月から東北大での有期雇用が 10 年になるため、一度雇用関係をリセット (クーリングオフ) しなければならず、なんと半年間「学生」になります。

皆様が本稿をご覧になるときは学生証を手にしていると思います。

妻には「保護者」をお願いし、これで学割が効くと喜んだのですが、既に 70 歳という高齢者のため、シニア割の方が安いという落語のネタのような経験もさせてもらっております。

それにしても、分子の光学特性は奥深いですね。励起状態を正しく理解することが如何に重要か思い知らされております。

中辻先生のご研究は進化を遂げられ、Schrödinger 方程式の完全解を導くという革新的な理論を構築されました。

理論に弱い私には到底「理論的な理解」はできませんが、「現象を正しく理解」するために是非ともその理論を活用させてもらおうと考えております。

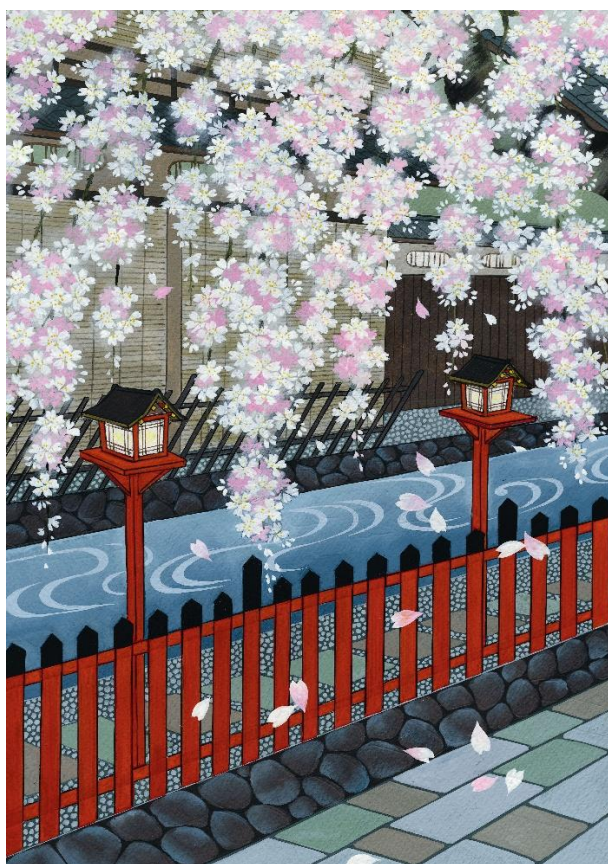
ところで面白いことに Google で単に「Schrödinger 方程式 完全解」と検索すると、「水素原子などの特殊な例を除き、多くの場合、電子が 2 つ以上存在する系 (ヘリウム原子など) では、そのままでは解くことができず、近似計算が必須となります。」と出てきます。そこで、上記検索条件に「中辻」を追加すると、



『中辻博（Hiroshi Nakatsuji）博士によって提案された「シュレーディンガー方程式（Schrödinger equation）の完全解（正確な解）」は、長年不可能とされてきた原子・分子の電子状態を、近似なし（エグザクト）に解くための一連の理論と計算手法です。』

とAIが答えてくれます。「中辻」を入れるかどうかで回答が180°変わってしまうのですから、AIの使い方には注意が必要ですね。もっと多くの人たちが「Schrödinger 方程式の完全解、中辻 or SAC-CI」で検索を行う事で「Schrödinger 方程式の完全解は存在しない」のは間違いであることを学ばせることが必要だと思っております。

取り止めもないことを書き綴ってしまいましたが、これからも「不可能」や「困難」と言われることに立ち向かい、克服されてきた中辻先生の後ろ姿を追いながら人生まだまだ楽しんで行きたいと思っておりますので、後進のためにも益々お元気で研究に邁進されますことを祈念して結びの言葉とさせていただきます。



## 所変われば品変わる

### 飯田 健二

北海道大学触媒科学研究所

北海道大学触媒科学研究所の飯田健二と申します。まず自己紹介をさせていただきます。私は京都大学の佐藤啓文先生のもとで学位を取得しました。それから、分子科学研究所の信定克幸先生の研究室に8年ほど在籍しました。そして2020年1月から現在まで、長谷川淳也先生の研究室に所属しております。

私がこの文章を書いているのは3月末~4月初めでして、本州では桜満開の春真っ盛りの頃です。ちなみに、研究室にいる北海道出身の学生に「どんなときに春を感じる?」と聞きますと、「雪が解けて露の臺が出てきたときですかね」と答えていました。地面から生えている露の臺を見たことが無い人は多いかなと思います。緑の芽が漸く出てきた頃、茶色い地面から鮮やかな黄緑色で現れます。桜は5月初めに満開となるので、初夏に移っていく前に一瞬咲いているものという認識らしいです。春が4月前後なのは同じなので、気候が違う分だけ春の感じ方が違うようです。

このたびは中辻先生から大変ご丁寧な寄稿のご依頼をいただき、とても嬉しく思いました。「量子の世界」では学会などでは聞けないようなお話もあり、私も楽しく拝読しております。これまで楽しませて頂いてきた分を少しでもお返しできればと思い、お引き受けいたしました。しかし、何か話題がないかといざ自分の研究人生を振り返りますと、迷っていた記憶ばかり思い出しました。そして考えた挙句、新しい場所に移るたびに出てきた迷いについて書かせて頂くこととしました。関西人(故郷は大阪府吹田市)としてはオチの無い話で恐縮ですが、少しでも楽しんでいただけましたら幸いです。



飯田 健二 先生



北大触媒研の前にて

### 役に立つか立たないか

私は、元々は人の役に立つことがしくて、京都大学工業化学科に入学しました。将来について考えるなかで、基礎研究は大きな応用に繋がる可能性があることに魅力を感じました。ただ、応用から遠すぎると自分には合わないように思い、触媒反応の理論計算をされている榊茂好先生の研究室を選びました。テーマ選びとなり当時准教授だった佐藤啓文先生の研究テーマが面白そうだったので、佐藤先生のご指導を仰ぐこととしました。ご紹介いただいたテーマは、水中でのエタノールアミンと二酸化炭素の反応でした。排ガス中の二酸化炭素回収という産業課題に関わり、水和が重要な点で基礎的にも面白そうだと感じました。ですが、研究を始めることとなると、水酸化物イオンと二酸化炭素の反応について計算をす



るようにとご指示を頂きました。疑問に思いましたが研究は楽しく、反応機構が分かった時は嬉しかったことを覚えています。そして、役に立つかどうかに関係なく研究は楽しい、と思うようになりました。それから学位取得後に、「なぜ最初からエタノールアミンの計算をしなかったのですか」と佐藤先生にお伺いする機会がありました。すると「その時にはまだ収束しなかった」と仰っておりました。先の展望を示すことの大切さを学んだように思います。

修士課程のころ、電極反応に関する発表を幾度か聞いて、電圧や光などの外場の力に驚きました。そして博士課程では、電極反応の研究がしたいと思い、その足掛かりとして固液界面の液体構造とその外場応答ダイナミクスの研究に取り組みました。平衡系に対するモデル理論である RISM をダイナミクスへと拡張するべく、数式をいじったりプログラムを書いたりするのが楽しかったことを覚えています。外場による水和構造変化のダイナミクスの計算結果が出た時には達成感がありました。しかし、電極反応の研究には至りませんでした。そして固液界面や担持ナノ粒子などの不均一系を量子化学的に扱いたいと思うようになりました。応用に繋がることをしたいと思いつつ、気づけば基礎的なことを楽しんでいました。

学生の頃は、自由に研究させて頂いていたつもりでした。改めて振り返りますと、箱庭の中にいたので迷わなかったのかもしれませんが、ただ、この頃から現在までずっと変わらず、研究は心の赴くままに進めることが出来れば一番良いと思っています。

## 理論と計算

学位取得後は、分子科学研究所の信定克幸先生のもとで研究をさせて頂けることになりました。信定先生は、ご自身の研究室に入った人に、やりたいことをやったら良いがこれまでやっていたことは忘れるように、と仰っていた方でした。新しいことをしようという分子研の理念を体現されていました。そして、何でも正直に仰っていました。私は、研究に対する考え方を一新されていくなかで、どういう研究者になろうかと真剣に考えるようになりました。信定先生ご自身は、近接場光励起に関する研究に尽力されていました。ただ信定先生からは、「近接場光は私の研究だから飯田君はそれ以外のことをやりなさい」と激励していただきました。

信定グループに入って最初は、安池智一さんが開発された量子開放系クラスターモデルと誘電体モデルを組み合わせで電極反応の研究をしました。それから、研究方針について試行錯誤しました。信定グループとしては、野田真史さんが超並列第一原理計算プログラムの開発を進められて、京コンピューターで大規模計算を始めておりました。私は、学生の時にはモデル理論を使った研究が主でした。そのため、信定グループに入った時点では超並列計算に興味を持っていませんでした。ですが、信定先生と石村和也さんに引き込まれて参画することになりました。京コンピューターを使って金ナノ粒子や有機配位子保護金クラスターの光励起の計算を進めていくにつれて、複雑な物質のリアルな姿を表現する超並列計算に魅了されていきました。それ以来、「理論」と「計算」の両方の面を大切にするようになりました。様々な物質や現象に対する統一的・系統的な理解を与えうる理論、多様性や特異性を精緻に表現する数値計算、理論計算の二つの側面を重視しながら研究をしています。



## 物理と化学

信定先生と最後にお話したのは2017年12月でした。「これからは自由にやったら良い」と仰っていただきました。ただ、私の目には元気になってきているように見えましたし、ご本人がその際に「もう大丈夫」とも仰っていたので、意図が分からず困惑しました。そのため、2018年1月に信定先生がご逝去されて、突然のことに愕然としました。しかし自分の居室から一歩出れば、すぐ近くには年が近くて理論計算研究をされている方々がいて、皆さんに優しくして頂きました。おかげさまで、沈み込んだままとならずにいれました。

研究室に一人となってからは、研究をどう進めていこうかと悩みました。信定先生は、矢花一浩先生など物理をご専門とされる方々との携がりを強くしていらっしゃいました。その影響を受けて、私の研究も物理化学から物理によった方向へと進んでいました。ところが信定先生という羅針盤がいなくなり、化学と物理のどちらの方向に進もうかと迷いました。ありがたいことに、研究でも多くの方に支えて頂きました。信定先生に繋いでいただいたご縁で、現在まで様々な方と共同研究を続けさせていただいています。矢花一浩先生をはじめとする SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) プログラム開発グループの方々と良くお話をするようになったのは、信定先生が亡くなってからだったと思います。SALMON は、私が使っている超並列第一原理計算プログラムです。開発メンバーは、私以外は、殆どが物理を専門とする方々です。線形な光学応答の物理の次の問題として、非線形な光学応答の物理を明らかにされていっておられます。2023年にアト秒光パルスに関する研究がノーベル物理学賞を受賞しましたが、SALMON はそのような系を対象とした理論計算で力を発揮しています。私は、そうした最先端の物理の研究に感銘を受けつつも、化学組成や幾何的構造に応じて光吸収スペクトル(つまり線形応答特性)が違ふと、その理由が気になってしまいました。そうしたなかで、物質や自然現象の多様性や特異性を扱う化学が好きだと自覚しました。

といいましても、SALMON 開発グループの方たちは第一原理計算を行っていることもあり、化学的な関心も強いようです。ですが、その繋がりでお会いした物理学者の方に「化学結合に興味があるのですね」と言われまして、「はい、化学者なので」とお返事したことが印象に残っています。そういえば“化学”結合だったなと気づきました。そうした経験を経て、自分は物理化学を専門とする化学者としてありたいのだと認識するようになっていきました。

## 研究を深めることと拡げること

現在は触媒科学研究所で研究をさせて頂いております。触媒研では、理論計算を専門とする部門は長谷川研だけで、他の部門は実験研究をご専門とされています。触媒分野は産業界との距離が近いので、基礎研究に重点を置く分子研との違いを感じます。勿論、反応機構を理解することが大切だということは良く認識されています。他の部門の方から、理論計算について相談を受けることもあります。ただ、理論計算研究の意義について考えることが多くなりました。

分子研と触媒研のどちらも、学生の人数が少ないことは大きな特徴だと思います。特に分



子研ですと、他大学から大学院生がこない限りゼロです。そのため、分子研の助教なら、自分が計算をしないと論文が出ません。しかし授業などの学生と関わる仕事が極めて少ない分だけ、研究時間は多くなります。私は、分子研で助教だった時には、本当に研究だけをしていました。そうしますと、研究をひたすらに深めていくことができます。ただし、沢山の学生を抱える研究室と比べますと、論文数は少なくなりがちです。自然と、尖った研究という位置付けになるようです。一方で、大学の先生方からは、自分で研究をする時間が確保できずに苦慮されていると度々伺います。お忙しいなかで沢山の学生を育てつつ、研究を拡げて一分野を築いていっておられるように見受けられます。研究を深めることと拡げること、どちらも大切だということは皆さんにご賛同いただけるかなと思います。ただ、今の時流の中で、どのようにバランスを取るべきなのだろうかと思いを巡らせるようになりました。

### 変わるものと変わらないもの

長谷川研に移る際には、様々な方々から「良い研究をしてください」と激励していただき、「はい、頑張ります」とお返事しました。ただ、少し困ってしまいました。と言いますのも、その方々全員に良い研究だと認めて頂ける共通項が分からなかったからです。結局、自分がやりたいように研究を進めさせていただいています。ありがたいことに、やりたいけれど難しいかもと躊躇っていますと、長谷川先生が激励して下さいます。長谷川先生や頑張ってくれている学生に感謝しきりです。現在は、電圧や光などの外場下の固液界面や担持金属触媒において発現する触媒作用を解明するべく研究に取り組んでいます。量子化学・統計力学・電磁気学の連成法を使って大規模計算をしています。基礎的には、マクロとミクロの両観点からの理解が必須となる現象を明らかにしていきたいと思っています。そのために、数 nm スケールの電気二重層や表面・界面が、局所的な化学結合の形成開裂でどのような役割を果たすのかについて研究しています。何故に外場を露わに扱うかといいますと、電圧と光のどちらにしても、系全体が応答して局所的な化学結合の形成開裂に至る、つまりマクロな応答がミクロな現象に繋がるからです。界面と外場が組み合わさることでマクロな領域とミクロな領域が連動して働く機構を明らかにしていきたいと考えています。佐藤研から信定グループに行った際には、「何で信定グループに行ったの?」としばしば聞かれました。長谷川研に入った際にも、同じように聞かれることがありました。均一溶液系の研究をしていた学生の頃から随分変わった気がしています。

自分が何故に現在の研究を面白いと思うのだろうかと振り返りますと、小学生の頃に遡るのかもしれませんが。顕微鏡が恰好良く見えて親に買ってもらいました。600 倍まで拡大出来まして、微生物のサンプルなどを見ますと、拡大倍率に応じて見え方が変わって驚きました。拡大倍率を変えながら、色々な物を見て楽しんでいました。そうした思い出が、異なるサイズスケールから、異なる理論を組み合わせ、複合的な見方をして考えることを面白いと感じる今に繋がっていきそうです。新しいことをやろうと試行錯誤しながら研究してきたつもりが、心は子どものころから進歩していないかもしれないと気づいて唖然としました。ですが、初心なら大事にしても良いのかなとも思っています。



## 「第 18 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: 2026 年 5 月 9 日(土) 13:00~16:40 (懇親会: 17:00~19:00)

場所: 京都技術科学センター(B 会議室) (昨年までと場所が変わります。)

参加費: 無料

(申込は不要です。自由にご参加ください。懇親会の参加費: 3,500 円程度)

13:00 挨拶・司会 中辻 博

13:05-14:00 化学 60 年の歩み

(有限会社ミネルバライトラボ) 松村 竹子

#### 発表の要旨

・ 出発は電気分析化学: 京都大学理学部化学科で藤永太一郎教授の指導のもとで、電気分析化学を学ぶ。次いで藤原鎮男東京大学教授の下で Ir 錯体の ESR 研究に学び、白金族錯体 (Ir, Os, Ru) の電気化学的研究を行う。通常の錯体と異なった安定性が特徴的である。

・ 振動化学反応 (非線形化学) の研究: 学生が見つめてきた Belousov-Zabotinsky 反応に出会い、実験研究を行う。この反応系は吉川研一氏が理論的な研究をしておられた。色彩変化を伴うことに興味を持ち、学生諸氏とともに種々の触媒で反応を追跡し、反応画像解析装置を作製、反応の動的な変化を画像としてとらえた。

・ 白金族錯体の電気化学: Ir, Os, Ru 錯体の合成は長時間反応がネックであった。日常使う電子レンジの効果に着目し、電子レンジ改造型マイクロ波装置を自作し、反応時間を短時間化した。(ナショナル郡山工場、奈良教育大技術科教官の支援を得る。)

マイクロ波は電磁波の 1 種で、主に通信(無線や、電話)に使われているが、現在、電子レンジ (2.45 GHz) が急速加熱調理器として広く使われている。電子レンジ改造型還流式化学反応装置を用いて数々の発光錯体の短時間合成に成功した。この研究に対して池田泉州銀行の優秀賞、姫路工業会賞を受賞した。

・ 市販マイクロ波装置の作製: 市販のマイクロ波装置は主として外国製品が主で、国産品は数少なかった。東京電子(株)、柳田祥三教授(大阪大学)と共同してグリーンモチーフを作成し、販売した。同時に柳田教授と共著で「化学を変えるマイクロ波熱触媒」を出版した。その後、ミネルバライトラボでの研究は Ir, Ru 錯体の発光性に注目し、マイクロ波合成法を開発した。発光色は、赤、青、緑の呈色で、有機 EL 材料として貴重である。

有機 EL について山形大学城戸淳二教授、笹部准教授に指導を受けた。有機 EL 材料のマイクロ波合成法の開発は時間短縮と高純度錯体の作成にその特徴がある。現在、装置化の進展として半導体マイクロ波装置の開発を行い、マグネトロンから半導体マイクロ波電源への変換によって迅速な PC 処理が可能な装置の開発を行い、より広範な材料科学への適用を目指している。

課題として、研究開発の後継者の育成、バトンタッチが急務である。

発表の機会を与えて下さいました中辻博先生に感謝申し上げます。



14:00 – 14:30 休憩

14:30 – 15:20 **量子化学計算による触媒反応の探索**  
(東京科学大学) **石川 敦之**

**発表の要旨**

触媒は現代のエネルギー・環境問題において鍵となる物質であり、その効率的な物質探索手法は水素化社会を構築するために必要不可欠である。触媒の主な役割は化学結合の生成・解離であり、したがって量子化学がその根本的理解のために必須である。一方で、実用的な触媒開発において興味のあるほとんどの量が、原料転化率や選択率などのマクロ的な物性である。したがって、理論計算を「原理的な理解のためのツール」と「実用的なツール」として両立させるためには、微視的な理論手法と巨視的な理論手法を併用する必要がある。具体的には、量子化学により結合生成・解離の熱力学量などを評価し、それを速度論方程式に反映させ、さらに気体の流れとして計算・予測する必要がある。講演者は、このようなアプローチを行うための種々の理論的手法を近年検討してきた。講演では、その検討内容の紹介と今後の方向性について議論したい。



15:20 – 15:50 休憩

司会 **長谷川 淳也**

15:50 – 16:40 **スケールド・シュレーディンガー・レベルの量子化学の  
新しい展開と実用化**

(量子化学研究協会研究所) **中辻 博・中嶋 浩之・黒川 悠索****発表の要旨**

化学は分子の構造論・反応論・物性論からなる物質の多様性の科学である。その化学の基礎方程式としてシュレーディンガー方程式は重要であるが、この方程式を正確に近似なしに解こうとすると発散することは知られていた。この発散の困難は 2004 年これと等価なスケールド・シュレーディンガー方程式の導入によって解決された。これによりその「完全に正確な解」を求めることが可能になり、「Exact 量子化学」が化学の真の基礎理論として発展していく道が確立された。2006 年に成立した NPO 法人・量子化学研究協会の研究は、この「新しい量子化学」に基礎を置き、それを発展させる形で進められてきた。最近この研究を SAC-CI 理論や静電力理論と結びつけることにより、その対象を分子の基底状態だけでなくいろいろな励起状態などにも広げ、さらにその基礎物理量をエネルギーだけでなく系のすべての原子核に働く力というベクトル量にも広げることができた。これにより私たちの研究は、エネルギーと力という二つの基礎物理量にたつ「複眼的研究」となり、本質をより明瞭に観察し理解できるようになった。この研究はベンゼンのような比較的大きな分子にも応用され、その一重項・三重項励起状態の幅広い正確な研究が



発表された: J. Chem. Theory Comput. **22**(6), 2928 (2026)。この研究は昨年(2025)の第 17 回 革新的量子化学シンポジウムでも発表された。ここではこの方法を用いて量子化学研究協会研究所で行ってきた研究を幾つか紹介したい。基本的にはいままで SAC-CI 理論や静電力理論で取り上げてきた理論研究が、スケールド・シュレーディンガー方程式に基づく Exact 理論の洗礼によってそのすべてが Exact になっていく。これにより今まで SAC-CI 理論や静電力理論の枠内に閉じ込められていた研究が、Exact なスケールド・シュレーディンガー方程式のレベルの正確さに引き上げられ、個々の理論の良さが Exact レベルで発揮されるようになり、実験と同等のレベルにまで引き上げられ、予言力は格段に向上した。これはとても素晴らしいことと思われる。

**17:00 – 19:00 懇親会**

**会場: 京都技術科学センター(会議室 B) (シンポジウムと同じ部屋です。)**

## 会場(京都技術科学センター)へのアクセス

京阪電車・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。)

<https://www.khc.or.jp/general/access.html>

京都駅からのアクセス:

- ① 京都駅→(JR 奈良線)→東福寺→(京阪電車)→出町柳
- ② 京都駅→(地下鉄烏丸線) →今出川  
→(京都市バス 201 系統など)→出町柳



この建物です。



「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、一般向けの分かりやすいお話をお願いしております。これまでのシンポジウムでは、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ています。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ることと存じます。皆様、奮ってご参加ください。



- ご報告 -

量子化学講習会  
SAC-CI 理論と Exact SAC-CI 理論  
その素晴らしい予言性

量子化学研究協会研究所では、「量子化学講習会: SAC-CI 理論と Exact SAC-CI 理論、その素晴らしい予言性」を、

- ・ 2026 年 3 月 7 日(土): 基礎編
- ・ 2026 年 3 月 14 日(土): アドバンス編

として、京都技術科学センターにて開催しました。

SAC-CI 理論は、分子の基底状態だけでなく様々な励起・イオン化・アニオン化状態をも統一的に扱う有用な理論で、世界的汎用量子化学プログラム「Gaussian」にも搭載されています。特に、光と分子が関わる多様な分野、植物の光合成サイクルの理論研究、ヒトの目の視覚のメカニズムなど、多くの現象の解明に応用されています。他方、Exact 理論は、シュレーディンガー方程式の正確な解への収束が保証される唯一の理論であり、また、その必要条件である Hellmann-Feynman 定理を満たすべく設計されており、エネルギーと原子核に働く力の両面から化学を正確に研究し予言することができます。これらの理論を組み合わすことで、分子の基底・励起・イオン化・アニオン化状態をカバーする、Exact SAC-CI 理論が誕生しています。これらの理論は全て、中辻のオリジナリティにより想起されたもので、本講習会は理論創始者の中辻自身による他にはない独創的な講習会となりました。

**基礎編(3/7(土)):**

3 月 7 日(土)の基礎編は、SAC-CI 理論の基礎や応用に関する講習・演習が行われました。まず、量子化学の発展の歴史、量子化学を築き上げた世界的に著名な研究者との逸話、Gaussian に SAC-CI が



搭載された折の経緯など、中辻先生からしか伺うことのできない、とても貴重な話がありました。

次に、SAC-CI 理論の基礎と理論体系が詳しく解説されました。SAC-CI 理論誕生前は、励起状態は難しく歯が立たないとも考えられていましたが、SAC-CI 理論によって様々なありとあらゆる励起状態が定量的に求められるようになり、その重要性を知ることができました。続けて、SAC-CI 理論が活用された幅広い応用例が紹介されました。精密理論スペクトロスコピーから光合成や DNA 等の生物分子への応用、ESR スペクトルや円二色性(CD) スペクトルなど、多様な応用例が紹介されました。

また、実際に SAC-CI 理論の計算を実行する際に有用なマニュアル「SAC-CI Guide」の



説明と活用の仕方についても紹介されました。SAC-CI Guide は、Gaussian 自身のマニュアルとは別に、SAC-CI 理論の計算とプログラムに特化したもので、理論的基礎からプログラムの構造、多様な計算例や計算方法が詳細にまとめられています。量子化学研究協会研究所ホームページよりダウンロードできるので、是非ご活用ください。

SAC-CI ホームページ: <https://qcri.or.jp/sacci/>

⇒ SAC-CI Guide はここからダウンロードできます。

最後に、受講者からの様々なご質問と回答、さらに、受講者の皆さま自身のご研究についても議論され、次のアドバンス編へ繋がるまとめで締めくくられました。

### アドバンス編(3/14(土)):

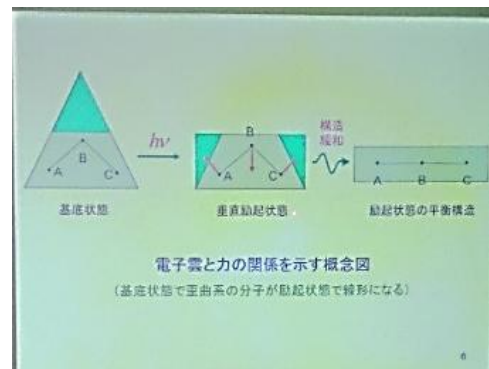
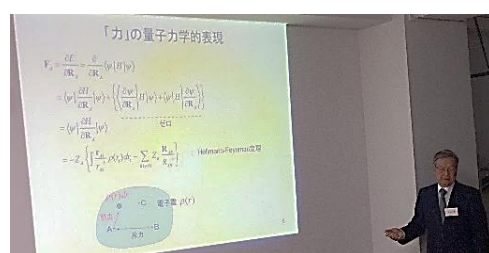
3月14日(土)のアドバンス編では、Exact 理論、静電力理論と結び付けられた最新の Exact SAC-CI 理論の講習が行われました。

まず、2000年以降中辻によって構築されてきた Exact 理論について詳しく解説されました。特に、2004年に中辻によって提案された、シュレーディンガー方程式の発散問題を



解決し変分法によって exact 解を求めることを可能にした Scaled Schrödinger Equation (SSE)方程式と自由完全関数理論: Free Complete-element (FC)理論は、exact 解への収束を保証する唯一の理論であり、その後の Exact 理論の展開の幕開けとなるものでした (*Phys. Rev. Lett.* **93**, 030403 (2004).). この Exact 理論によって、例えば、ヘリウム原子における何十桁も正確なエネルギー、Li<sub>2</sub>分子の正確な解として得られた、実験と完全に一致するポテンシャルカーブ、第二周期原子や簡単な分子の実験エネルギーを高度に再現する絶対解など、まさに正確なシュレーディンガー方程式の解が求められる実証応用例も紹介されました。

次に、正確な波動関数と共に化学を正確に予言しその本質を理解する上でとても重要で有用な、静電力理論: Electrostatic Force (ESF)理論について詳しく解説されました。ESF 理論は、中辻が既に1973, 1974年に提案した理論であり(*J. Am. Chem. Soc.* **95**, 345 (1973); **95**, 354 (1973); **95**, 2084 (1973); **96**, 30 (1974).)、原子核に働く力(Force)と電子密度分布との関連から、化学現象や化学反応の正確な理解や予言に繋がるととも興味深く重要な概念です。これが、Exact 理論、SAC-CI 理論と結びつくことで、基底状態だけでなく励起状態の光化学も含めた、極めて有用な理論体系が出来上がります。



そして、アドバンス編の目玉である、最新の Exact SAC-CI 理論の基礎と理論体系、及びその応用例が紹介されました。このアドバンス編開催の直前に、この理論の第一報がベンゼン分子への応用例と共に Journal of Chemical Theory and Computation (JCTC) に掲載されました。ご興味のある方は是非ご覧ください。

第一報の論文(JCTC): H. Nakatsuji, *J. Chem. Theory Comput.* **22**, 2928 (2026).

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.5c02112>

アドバンス編開催のときは、上記のような巻号も未定の段階で、著者だけに与えられるバナーでした。ある意味貴重なものが受講者の皆さまに示されました。

#### 懇親会:

アドバンス編の講習修了後には、受講者の皆さまと共に懇親会が開催されました。遠路より来られた方もおられましたが、全員が懇親会に参加頂けて、とても楽しい会となりました。特に、受講者の皆さまのご研究や理論計算時に抱えている問題などについてもお話し頂けて、今回の講習会を経て、SAC-CI 理論、さらに Exact SAC-CI 理論を皆さまのご研究に活用される道筋や今後の共同研究への発展にも繋がる有意義な議論を行うことができました。

量子化学研究協会研究所では、定期的に「量子化学講習会」などの講習会やセミナー等のイベントを開催します。皆様の研究の一助、あるいは共同研究への発展も見越した有用なイベントにしていきたいと考えています。ご興味のある方は、是非ご参加ください。



## 認定 NPO 法人の継続更新が認められました！ 2026 年 3 月 24 日～2031 年 3 月 23 日の 5 年間

認定特定非営利活動法人(認定 NPO 法人)制度は、NPO 法人への寄附を促すことにより、NPO 法人の活動を支援するために税制上の優遇措置として設けられた制度です。NPO 法人の中でも、その活動・財務等が優秀な法人で、さらに、寄附金と事業活動に関して下記のような条件を満足する必要があります。

- ・ **広く一般から支持を受けているか:** 社会的に公益性の高い活動が認められ、寄附が定着していること
- ・ **その活動や組織運営が適正に行われているか:** 活動・事業が適正に行われているか、会計や法令順守がしっかり行われているか
- ・ **より多くの情報公開が行われているか:** 事業報告・会計報告は、所轄庁及び法人事務所で誰でも閲覧可能

このように、「客観的な基準において、高い公益性をもっている」ことを判定された法人のみが認められ、5 年毎に認定継続の更新があります。

量子化学研究協会は、2016 年 3 月 24 日に京都市より「認定 NPO 法人」として認定され、2021 年に 1 回目の更新、そして、**この度 2 回目の更新: 2026 年 3 月 24 日～2031 年 3 月 23 日の 5 年間が認められました。**これも、ひとえに皆さまの温かいサポートによるもので、厚く御礼申し上げます。

量子化学研究協会の研究活動は、今、大きく発展しようとしています。身の回りの物質の根源である原子・分子の世界は、シュレーディンガー方程式という原理方程式によって支配されていますが、これを解くことは不可能と言われていました。2004 年に中辻は、これを正確に解く理論を提唱しました。さらに最近、この exact 理論を中辻オリジナルな化学理論である SAC-CI 理論・静電力理論と結び付けることにより、様々な分子のあらゆる電子状態(基底・励起・イオン化・アニオン化状態など)に拡張され、しかも化学の直観と結びつく極めて有用な理論が完成しました。現在、研究所では、これらの理論を土台に学問的にも実用的にも重要かつ有用な展開を行っています。ご興味をお持ちの方は、是非ご参加いただき、私たちと一緒にこの研究を伸ばしていくことができれば、とても嬉しいです。

これまでやってこれたのは、皆さまの温かいご指導、ご支援の賜物であり、深く感謝申し上げます。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

京都市指令文 地第 246 号  
令和 8 年 3 月 24 日

主たる事務所の所在地	京都市伏見区桃山町三河 58 番地の 8
法人名	認定 NPO 法人量子化学研究協会
代表者氏名	理事長 中辻 博 様

京都市長 松井 孝治

認定特定非営利活動法人としての認定の有効期間を更新した旨の通知書

貴法人から令和 7 年 10 月 8 日付けでされた認定特定非営利活動法人としての認定の有効期間の更新を受けるための申請について、下記の期間を認定の有効期間として更新することとしたので通知します。

	記
認定の有効期間	自平成 28 年 3 月 24 日 至令和 13 年 3 月 23 日
今回更新された有効期間	自令和 8 年 3 月 24 日 至令和 13 年 3 月 23 日



## 量子化学研究協会の活動への継続的なご寄附のお願い

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重要です。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、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者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

(ATM やネットバンキングでは、通常、銀行、支店の選択と口座番号の入力のみが必要です。その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

(ATM やネットバンキングでは、通常、銀行、支店の選択と口座番号の入力のみが必要です。その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

<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;</p> <p><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</p> <p>* <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。

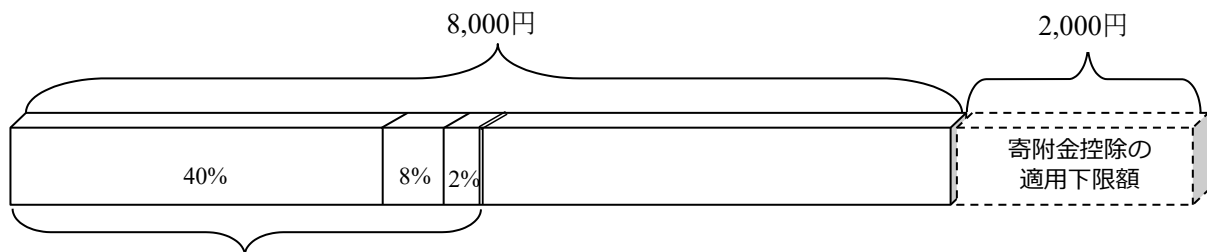
#### (参考) 京都市民の方が認定NPO法人に 10,000 円寄附した場合の例

（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）

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

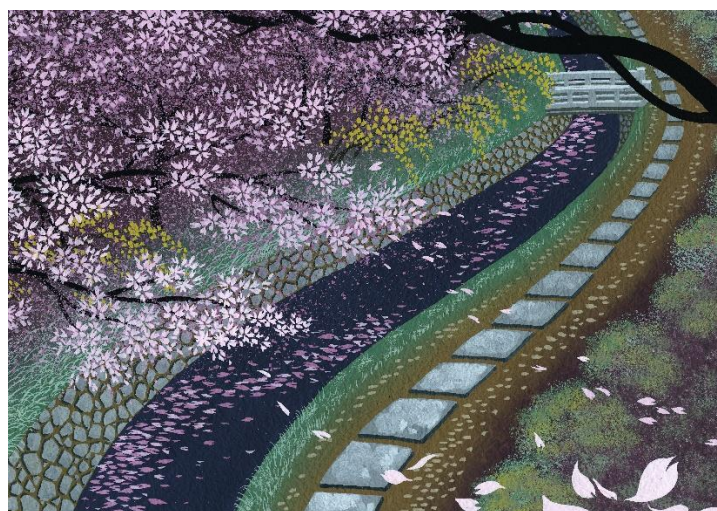
寄附した人の相続税の計算において、その寄附した財産の価額は、相続税の課税対象から除かれる。（ただし、相続税の申告期限までに寄附する場合に限る。）

(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。何卒よろしくお願ひいたします。



### 「量子の世界」第23号, 2026年(令和8年)春号

2026年4月13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](mailto:office@qcri.or.jp)

電話・FAX: 075-634-3211

Copyright © 2026 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。

