

## 設立趣旨書

### 1 趣 旨

化学は化学工業、製薬業、プラスチック産業、繊維業などから、最近のIT産業に至るまで、わが国の製造業を代表する産業の基礎となる学問である。これらの産業の恩恵は社会生活や家庭のあらゆるところに多岐に浸透しており、化学という学問の進展が、人類の幸福や繁栄を地道ながら着実に支える大きな原動力になっている。化学という学問の基本的な立場は、物質をその構成要素である原子・分子のレベルで捉え、その性質や効能を設計し作り上げるところにある。このような原子・分子のあらゆる性質は、それを構成している原子核と電子の運動によって規定されることが量子力学によってわかっており、したがってこの量子力学的な原理を基に演繹的に化学の諸現象を理解し予言しようとするのが量子化学や理論化学といわれる学問である。つまり、量子化学は化学という学問の屋台骨に相当する学問といえる。ここに設立を申請している特定非営利活動法人量子化学研究協会は、量子化学の研究とその普及に熱意を持つ者が集まり、自主・協力的に活動を行い、その成果を国際的に公表することによって科学技術の発展に寄与するとともに、広く社会への普及活動も行って人類の幸福と文化の発展に貢献することを目的とする。このような活動は多くの公的な大学や研究所でも行われているが、これを特定非営利活動法人という形態で行おうとする理由は、広く日本全国に広がっている会員が、大学や研究所の枠を越えて連携し、それらとは相補的な形で、重要な量子化学的テーマを研究し普及するのに、特定非営利活動法人という形態がさしあたり最も適していると考えられたためである。

### 2 申請に至るまでの経過

ここに申請に至った理事や会員の多くは理論化学・量子化学の研究者や学生であり、幾つかの大学や企業の研究所において量子化学の研究・開発およびその応用に取り組んできた。特に京都大学工学研究科の中辻研究室を中心に、分子のあらゆる状態（普通に存在する状態や光を吸収して励起した状態など）を対象に研究することの出来る正確なSAC-CI理論とその計算プログラムが開発・公開され、世界の大学・研究所・企業において化学研究に利用され役立っている。このプログラムをさらに有用なものに改良していくことは将来に亘って大切なことである。また、化学現象を律する方程式として化学の中でも中心的な重要性を持つシュレーディンガー方程式の解法が中辻らを中心に発見され、この発展と展開は理論化学のパラダイム・シフトに繋がるものとして世界の注目を集めている。しかしながらこれらの研究やプログラム開発の担当者がすでに色々な所属に散らばり、これを連携的に継続・展開するための組織が必要である。また、これらの研究の発展と普及に参画する会員を含めてその力量を高め、より深く広く科学技術と文化の発展に寄与することも重要である。そのため、我々は、特定非営利活動法人量子化学研究協会の設立を発起し、申請するに至った。

平成18年4月29日