



- 目次 -

1. QCRI 誌「量子の世界」創刊に寄せて 中辻 博 (量子化学研究協会 理事長)
2. 「第 9 回 革新的量子化学シンポジウム ～量子的自然の叡智と美～」のお知らせ
3. 「第 6 回 JCS 理論化学シンポジウム」のお知らせ

QCRI 誌 「量子の世界」 創刊に寄せて

量子化学研究協会 理事長 中辻 博

量子化学研究協会が設立されたのは 2006 年 8 月 14 日、暑い快晴の日であった。NPO 法人設立のための色々の書類を整えて、すでに何度か通った京都府庁に、「今日のようなお盆前の日、業務をしているだろうか」と思いながら、蝉の声のすだく中、善は急げと足を運んだ。丁度担当官の方がおられて、書類をひとつずつ丁寧に調べになって、「これで結構です」と言われ、受理証を頂いた。「これで全てでしょうか？」との質問に対して、「これで全てです。もしお時間があれば、税金に関係した事柄について本能寺の所にある事務所をお尋ねになっては」と言われて、電話番号を教えて頂いた。府庁を出て、その事務所へ電話したところ、営利業務の無い NPO 法人の場合には来なくて良い、との返事。その時、「これで、量子化学研究協会が設立されたのだ」との深い感慨が浮かび、青い空を眺めやった。それから早や 8 年以上が過ぎた。

量子化学という学問はとても面白い学問である。原子や分子が関係する「化学」という世界は「量子の世界」であり、私たちが日常経験する「古典力学」の世界とは違う原理で営まれているため、私たちの「感覚」では理解できない事が多々ある。しかしその世界は「量子力学」という力学で支配されている事ははっきり分かっている。このように「古典力学」の世界と「量子力学」の世界はその支配原理が全く違うため、一方の世界で当たり前前の事が、他方の世界では「とても以外」に見える。この「意外性」こそが科学の発見の真価であるから、「量子の世界の科学」を研究する「量子化学」がとても面白いのだと思う。

「古典力学」の世界の最も純化された世界が宇宙である。ケプラーの法則、Newton 力学から始まって、私たちの入学試験にまで現れた惑星の運行、そして最近の「はやぶさ」の



快挙など、古典物理学理論の美しさとその正確な予言性は、相対論の僅かの補正を加えればほぼ完璧である。他方、「量子の世界」の原理は、シュレーディンガー方程式と相対論も取り入れたディラック方程式で正確に書かれている。この事は化学がこれらの方程式の「応用数学問題」になる、つまり、とても経験的な化学の世界が全くの第一原理から演繹できる世界に変貌する可能性を示唆し、多くの人々を引き付けたのである。問題はこれらの式はとても簡単な形の数式に書けるが、「解けない」、という事であった。古典力学のニュートン方程式は何桁でも正確に解け、壮大な宇宙の運行を正確に予言できるのである。量子力学の建設者の一人ディラックですら、とても簡単な水素原子などの例外を除いてこれらの式は解けないと 1929 年に公言した。更に彼はこれらの原理に基づいて「近似的な」理論を作り化学を定性的に「説明」することが科学者のすべきことであるとまで言っている。それでは満足できない科学者達の真剣な努力にもかかわらず、その流れはその後 80 年も続いたのである。

2004 年にこの流れに一つの突破口が開かれた。中辻が 2000 年から出版してきた思考の延長線上にシュレーディンガー方程式とディラック方程式を正確に解くための一般原理が築かれたのである。この理論は現在「自由完員関数理論(Free Complement (FC) theory)」と呼ばれ、小さな系についてとても正確な解を与えることが実証され、実用に向けた道も開かれた。これが実はこの量子化学研究協会の研究所が作られることになった大きな動機になった。この研究上の発見はその将来性に夢もあることから、それを発展させることが必要であるとの認識が共有され、多くの会員の方々の熱意に支えられて冒頭の NPO 法人の設立に至ったのである。この研究協会の設立以来、多くの会員の方々、サポーターの方々の熱意があって、今がある。

量子化学研究協会の研究所では、①シュレーディンガー方程式の解に基づく「正確な予言的量子化学」の建設、②光励起状態の理論、SAC-CI 法の更なる展開と応用、③表面触媒反応の理論(DAM)を基軸とする研究展開、などに携わってきた。②・③については別に触れるが、①の所謂 exact 研究の道も最近ようやく開けてきて、分子研や東工大の並列計算機を使って、当初は思いもすることができなかったフェロセンや C₆₀(フラーレン)にまで、この方法を応用できるようになった。その結果についてはまだ吟味が必要であるが、このような計算は理論展開のマイルストーンであり、しっかり確立してゆきたい。

このたび、量子化学研究協会研究所の活動と、研究協会の交流、さらには市民や社会の皆様への発信や交流などを目指して、「量子の世界」と題する機関誌を創刊することにいたしました。本誌では、研究所の活動報告は勿論、「量子の世界」に関する色々な話題を載せてまいりたいと存じます。量子の世界を探索する我々の活動も、また、量子の世界です。皆さまからの色々なご寄稿をお願い致します。とりあえずは年 2 回の発刊と臨時号を考えており、春、秋の美しい季節の移ろいにあわせて、私たちのコミュニケーションの場として活用していただくことを念じています。

今後とも、「量子の世界」の成長と発展にご支援のほど、よろしくお願い致します。



第 9 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: 2015 年 5 月 9 日(土) 13:00~16:40

場所: キャンパスプラザ京都 (京都駅前北西すぐ)、第 1 会議室(2 階)

参加費: 無料

Web: <http://www.qcri.or.jp/?p=2655>

プログラム:

13:05 挨拶・司会 中辻 博

13:10 - 13:50 廣田 襄 (京都大学名誉教授)

「化学史の楽しみ: ライナス・ポーリングをめぐる話題」

私が化学史に興味を持つに至った経緯を多少話した後、具体的な話としてポーリングに関連した話題、彼が化学結合論から生体関連分子の研究へ移った理由、タンパク質の α ヘリックス構造解明における成功にもかかわらず、DNA の構造解明の競争では構造化学の第一人者の彼が駆け出しの研究者のワトソン・クリックのチームに敗れた原因、1949 年に彼が予見した 2000 年の化学がどの程度実現したかなどについて話す。

13:50 - 14:30 江原 正博 (分子科学研究所)

「金属微粒子触媒の理論化学」

金属微粒子触媒は、自動車触媒や化成品合成触媒など様々な分野で活用されています。しかし、これらの触媒系は一般に複雑であり、これまで理論化学があまり貢献できていなかった分野でした。理論研究においては、担体と微粒子の界面の現象を如何にモデル化するか、複雑な電子状態や化学反応をどのように記述するかなどの課題があります。本発表では、最近の我々の研究から、高分子や金属酸化物に担持された金属微粒子触媒の触媒作用に関する研究を紹介します。触媒作用に重要なコンセプトや化学指標を提案して実験にフィードバックし、触媒開発に貢献したいと考えています。

14:30 - 15:30 休憩

司会 長谷川 淳也 (北海道大学)

15:30 - 16:05 リントウルオト 正美 (京都府立大学)

「蛋白質の構造変化と機能発現に関する理論的研究」

タンパク質の構造とその動的な変化は、タンパク質の機能とその発現に大きく関連していることが知られている。われわれの研究グループでは、これらの構造変化と機能発現を分子レベルで解明することを目的として、1.局所的構造変化を伴う機能発現、2.アロステリック構造変化と機能発現、3.構造平衡揺らぎと機能発現、の3つの項目に分類して研究している。今回は1, 2のテーマを中心に発表する予定である。



16:05 – 16:40 中辻 博 (量子化学研究協会・研究所)

「予言的量子化学にむけて」

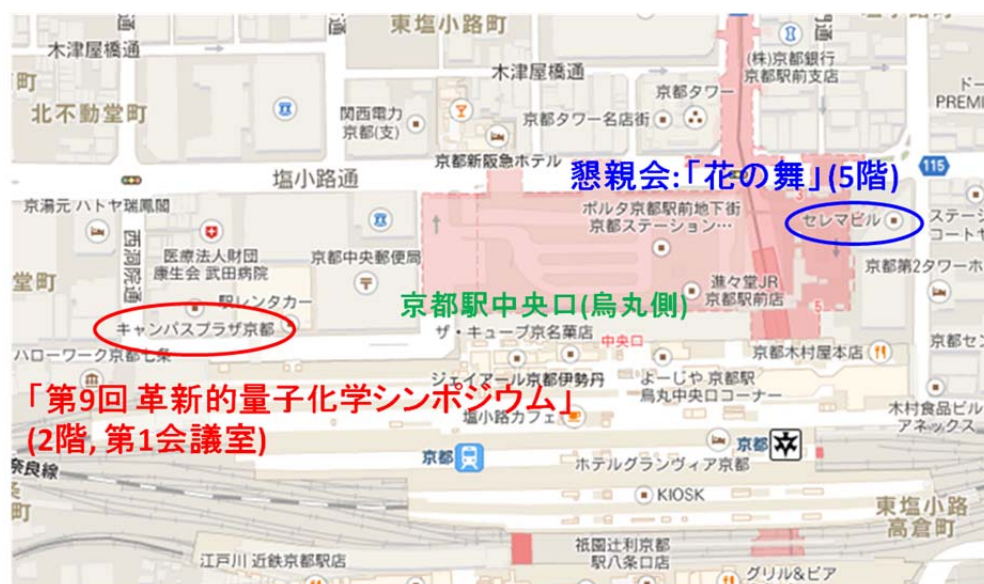
真に定量的な予言のできる量子化学を建設するためには、①化学を支配しているシュレーディンガー方程式を正確に解く一般的な方法確立し、②これを化学的に有用な分子群に適用して正確な予言ができる理論・計算体系を創造する、ことが必要である。私たちの研究所では、①の理論的発見に引き続き、定量的予言能のある「予言的量子化学」の建設を目指して研究を続けてきた。ここでは最近のブレイクスルーについて報告する。

懇親会

日時: 2015 年 5 月 9 日(土) 17:15~19:30

場所: 京都駅ビル東側 セレマビル 5 階「花の舞 京都中央口店」

参加費: 5000 円



前回のシンポジウムの様子



前回の懇親会の様子



第 6 回 JCS 理論化学シンポジウムのご案内

- 6th JCS (Japan, Czech, Slovakia) Symposium on Theoretical Chemistry -

日時: 2015 年 10 月 11 日(日)~10 月 14 日(水)

場所: Smolenice Castle near Bratislava (Slovakia)

Web: <http://jcs-2015.sav.sk/>

第 6 回 JCS 理論化学シンポジウムが 2015 年 10 月 11 日(日)-14 日(水)にスロバキア ブラティスラヴァ郊外の Smolenice 城にて開催されます。このシンポジウムは、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、“Friendship is our principle, science will follow with us.”という理念のもと、研究者同士の国際的フレンドシップを育むことを最も重視しています。これまで、プラハ(2005)、京都(2007)、ブラティスラヴァ(2009)、プラハ(2011) で開催され、前回の第 5 回(奈良(2013))においては国内外より 200 名を超える参加がありました。今回は会場の都合で最大で 80 名程度の予定と伺っています。皆さまも是非ご参加ください。



Smolenice 城 (Wikipedia より)



(提供: 中辻)

3rd JCS(Bratislava)のバンケット

JCS(2009)を成功に導いたスロバキアのオーガナイザー: 酒蔵のワインと Urban 教授, 自慢の喉を披露する Noga 教授, 全体を見守る Kello 教授



(Google map より)

スロバキアの首都 ブラティスラヴァ と Smolenice 城



Smolenice 城 (シンポジウム会場) の歴史

Smolenice 城は 15 世紀につくられました。しかし、18 世紀、ナポレオン戦争で完全に破壊されてしまいました。その後 20 世紀になり József Pálffy 伯爵の命令によってようやく再建されました。新しい城は建築家ジョーゼフ・ヒューバートによって設計され、ウィーンの近くの Kreuzenstein 城がモデルとなりました。そして、バイエルンから来た建築家 Pavol Reiter による監修の下、Smolenice 城は再建されました。建設期間中、イタリア、ドイツ、オーストリアとハンガリーから巨匠たちが呼ばれました。本館は 2 つのウィングと塔から成っています。1945 年春、城は第二次世界大戦により損傷を受けましたが、1950 年以降、数回の改修が行われ、1953 年より Smolenice 城はスロバキア科学アカデミーの所有となっています。現在、Smolenice 城は会議場として用いられており、7 月と 8 月の二か月間だけ一般に公開されています。

(http://en.wikipedia.org/wiki/Smolenice_Castle (Wikipedia)より)

スロバキアについて

■気候：日本と同じように四季があり、南部の平原地帯と東部の低地帯は比較的穏やかですが、山岳地帯は厳しい気候。また、内陸部のため気温の変化が激しいのが特徴です。8 月半ばから秋らしい気候に。ただしスロバキアの秋は短く、10 月には日中でも肌寒い日が増えるので、上着を準備しておくで安心でしょう。

ブラティスラヴァの 10 月の 平均気温 8.3 度, 降水量 37.0mm

平均最高気温 15.4 度, 平均最低気温 5.6 度

(参考) 東京の 10 月の 平均気温 19.4 度, 降水量 154.5mm

(<http://www.hankyu-travel.com/guide/east-eur/sk-country.php> (阪急交通社より))

■自然：東欧のアルプス『タトラ山脈』—— ポーランドとスロバキアの国境にまたがるタトラ一帯は、欧州でも有数の山岳リゾートで知られており、景観保護のため、国立公園に指定されています。動植物相が豊かな地域で、マーモットやカモシカなどが生息しています。子供からプロの登山家まで楽しめる様々なハイキング・コース、川下り、パラグライダー、バンジージャンプといったアトラクション、2000 メートル級の山々に一気にアクセスできるケーブルカーやロープウェイなど、自然のエンターテイメントもいっぱい、季節を問わず、国内外からたくさんのお客が訪れます。「日本にも山はある」と思うかもしれませんが、険しく切り立ったタトラの絶景は圧巻であり、山頂からいくつものカルデラ湖を見渡した時には、地球創世のダイナミズムを実感することでしょう。 (http://poland-mead.com/tatra_mountain 及び Wikipedia より)



■通貨：ユーロ

■サマータイム：3 月 4 週目の日曜日～10 月 4 週目の日曜日は時差 -7 時間。

