



# 量子の世界

No. 3

## - 目次 -

1. 「国際的な共同研究のネットワーク」  
江原 正博 (自然科学研究機構 計算科学研究センター 教授)
2. 認定 NPO 法人としての出発
3. 「第 10 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
4. 編集後記

## 1. 国際的な共同研究のネットワーク

自然科学研究機構 計算科学研究センター 教授 江原 正博

新年度を迎え、過ごしやすい季節となりました。皆様におかれましては、益々ご活躍のことと存じます。岡崎では清々しい日々が続いており、春を満喫しています。さて、本稿では、私が京大から分子研に異動してから最近の近況まで振り返ってみたいと思います。個人的な話題で恐縮ですが、よろしくお願ひします。分子研では、トップ・インスティテュートとして最先端の研究を推進するとともに、共同利用機関であることから、国内外の共同研究が推奨されています。私は京都時代から沢山の共同研究者の方にお世話になっていたのですが、分子研に来てからも京都時代に知り合った方や、新しく縁があつて出会えた方など多くの方々と共同研究をさせていただきました。寧ろ、皆さんに支えていただいたという思いが強く、この場をお借りしまして、共同研究者の方々に心から感謝したいと思ひます。

言うまでもなく共同研究では信頼関係が大切です。我々が基礎としている SAC-CI 法は、国際的に「励起状態の高精度な電子相関理論」と認識されていて、実験・理論を問わず信頼していただくことができ、国内外の方と広く共同研究を推進することができています。まず、京都時代に知り合った Piotr Piecuch 教授に招聘研究者として分子研に 3 ヶ月間滞在していただき、金属クラスターに関する新しい共同研究が進みました。フランス・ENSCP の Carlo Adamo 教授や Ilaria Ciofini 博士とも知り合うことができました。Carlo さんは Vincenzo Barone 教授と 1999 年に DFT 法の汎関数 PBE0 を開発された方です。PBE0 は nn\* 励起など価電子励起には比較的よい結果を与えるハイブリッド汎関数として知られています。Carlo さんとは Gaussian の開発者会議で以前にお会いしていたのですが、分子研



と ENSCP との学術交流会議で再会し、共同研究が進みました。その関連でイタリア・フランスの多くの研究者の方と知り合うことができました。岡崎や京都にも来ていただき、楽しく共同研究を進めています。

ご存知の方が多いと思いますが、イタリアの Roberto Cammi 教授とは励起状態の溶媒効果の研究で一連の PCM SAC-CI 法の共同研究を行うことができました。PCM (Polarizable Continuum Model) は分極する連続体モデルによって溶媒効果を記述する理論で、Tomasi 教授のグループが開発されてきた方法ですが、効率よく溶媒効果を記述することができます。この研究では、福田さんがしっかりした研究を進めてくれて、大きく発展したと思います。励起状態における溶媒の分極も含めて多くの励起状態を一挙に計算できる方法もできていて、今後、広く応用されることを期待しています。これらの研究は、最近では、極限高圧下の励起状態の研究にも展開しています。(PCM-XP SAC-CI 法)

また、2011年頃からポスドク時代の友人である Thomas Sommerfeld さんと電子共鳴状態の研究を進めてきており、複素吸収ポテンシャル (Complex Absorbing Potential) に基づく CAP/SAC-CI 法を開発することができました。この方法は、連続状態に浸みだす波動関数をポテンシャルによって吸収することによって、一般的な電子状態理論に基づいて共鳴状態を記述できる方法です。有効ハミルトニアンも固有値も複素になりますが、固有値の複素部分が共鳴幅で、寿命の逆数になります。準安定である電子共鳴状態の寿命を計算することができます。積分の実装や確認のために時間がかかりましたが、2012年によやく1つ成果を出すことができました。当時、EOM-CC のグループも同様のアプローチで共鳴状態の計算ができるように研究を進めていました。一方、我々はポテンシャルによって結果に若干の任意性があることを経験し、しばらく研究が思うように進みませんでした。色々な工夫をしながら試行錯誤を繰り返していましたが、最近、安定な結果を与えるポテンシャルを見いだすことができ、DNA 塩基なども研究することができるようになりました。この計算では広がった軌道を十分に含める必要があり、計算コストもかかりますが、大きな系にも適用できるように工夫したいと思っています。

分子研では、実験グループの先生方とも交流することができ、新たに金属微粒子触媒や錯体触媒の研究も始めました。特に、櫻井英博教授 (現・阪大) や田中晃二先生 (現・京大 ICeMS) との共同研究を楽しく進めてきました。金属微粒子触媒の研究は、簡単に見えるかもしれませんが、実は課題が沢山あります。金属微粒子は強相関電子系ですので、厳密に言うと強相関を取り扱える理論が必要です。それでもなんとか研究を進めるために、Piotr さんと汎関数の評価をしつつ、現在は DFT 法で研究しています。方法論の検討に加えて、系が柔軟であったり、多くのスピン状態、反応サイト、励起状態などが関与していたり、1つの研究にとても時間がかかります。また、合金微粒子の研究では安定な構造を探索するために遺伝的アルゴリズムも利用しました。これらを研究してくれた博士研究員の人や主にタイの共同研究者 (主に NANOTEC・Supawadee のグループ) にはとても感謝しています。これらの研究の過程でも多くの人との共同研究が進みました。ポスドク時代の友人の Elke Pahl さんとも APCTCC で再会し、合金微粒子と一緒に研究ができました。

ご存知の方は少ないかもしれませんが、私が分子研に異動してから行った研究の中で最も論文引用数が多いのが、Double Core Hole (DCH) の研究です。これは特任助教の



田代さん(現・東洋大学)が中心に研究を進めてくれました。東北大・上田潔先生や Lorenz S. Cederbaum 教授などとの国際共同研究からスタートし、スタンフォード大学の LCLS プロジェクトの実験とも協力することができ、新しい量子状態(two-site DCH 状態)の発見につながりました。DCH 状態の理論的検討は Cederbaum 教授が 1986 年に発表しているのですが、その化学解析で緩和エネルギーを実験的に観測できることを 2010 年に世界に先駆けて提案できました。また、このような量子状態からのオージェ緩和過程についてもはじめて解析できました。勿論、この研究の back ground には、自由電子レーザーや同時計測分光法などの実験技術の進展があり、実験的にもこのような量子状態が観測できる状況になったということも幸運でした。この一連の研究では、理論が先導して研究を進められたのではと考えています。このような最先端の研究に声をかけていただきました上田先生には大変感謝しています。

その他にも沢山の方々との交流がありました。カナダのプリティッシュコロンビア大学(UBC)の百瀬孝昌先生とはパリティバイオレーションに関連する基礎研究を進めていますし、百瀬先生の紹介から始まった関西学院大学の尾崎幸洋先生、現・近畿大学の森澤勇介さんとは、減衰全反射遠紫外分光(ATR-FUV)という近紫外領域の新しい分光法に関する共同研究を進めています。広島大学での集中講義から始まった江幡孝之先生との共同研究も現在進行形です。これらの共同研究は、分子研協力研究やナノプラットフォームの協力研究で進めることができました。Michl 先生との共同研究はいつも大変になりますが、妥協を許さない研究に対する信念には感動します。分子研にも訪れていただき、激励していただきました。

総研大には学生さんが多くはいないので、国内外の研究者の方々やインターンシップの学生さん達と研究交流し、国際的な共同研究のネットワークによって研究を進めてきました。皆さんのお蔭でなんとか研究を進めてこれたように思います。一方で、大学のように多くの学生さんと研究を楽しむことは難しいので、その点は残念です。(宣伝ですが、分子研には総研大があり、5年一貫制の大学院があります。現在の大学院に所属したまま、分子研で研究ができる受託学生の制度もあります。)これまでの研究では、一つの分野を極めるというよりも、結果的に幅広く研究を進めてきました。いまではこれが自分のキャラクターなのかなとも思います。今後も色々な分野に挑戦しながら頑張っていきたいと考えています。岡崎は静かでストイックな町です。研究にはとてもよい環境だと思います。機会がありましたら、是非、岡崎に訪れていただきたいと思います。

末筆ですが、皆様のご研究の益々のご発展をお祈りしています。討論会やシンポジウム、量子化学研究協会研究所が主催している JCS(日本、チェコ、スロバキア)シンポジウムなどで皆様のご研究を拝聴させていただくのをとっても楽しみにしています。



## 2. 認定 NPO 法人としての出発

「特定非営利活動法人 量子化学研究協会」は、6 か月以上にわたる厳格な審査の上で、京都市より、2016 年 3 月 24 日「認定 NPO 法人」に認定されました。まずの期間は 2021 年 3 月 23 日までの 5 年間です。本稿では、「認定 NPO 法人」とは何かを概観した後、認定 NPO 法人としての量子化学研究協会の新たな出発と決意について述べたいと思います。

### そもそも、「NPO 法人」とは？

「NPO」とは「Non-Profit Organization」の略称で、様々な社会貢献活動を目的として結成された法人で、団体の構成員に対して収益を分配することを目的としない団体です。

「特定非営利活動法人(NPO 法人)」とは、我が国において、特定非営利活動促進法に基づき法人格を取得した法人で、20 種に特定された非営利的な活動を、不特定かつ多数のものの利益の増進に寄与することを目的として行う法人のことです。量子化学研究協会は、この内、6. 学術、文化、芸術又はスポーツの振興を図る活動、15. 科学技術の振興を図る活動、2. 社会教育の推進を図る活動、を行う NPO 法人です。「NPO 法人」と「寄付文化」についての詳細は、「量子の世界 2015 年秋号」をご覧ください。

### 「認定 NPO 法人」とは？

認定特定非営利活動法人（認定 NPO 法人）制度は、NPO 法人への寄付を促すことにより、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
- ・ NPO 法人が、以下の基準を満たしていることを【認定】されることによって「認定 NPO 法人」へとステップアップ

認定 NPO 法人になるためには、寄付金と事業活動に関して幾つかの条件を満足する必要があり、さらに会計や法令順守において特別しっかり運営されていることが求められます。

1. 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、寄付が定着していること(認定 NPO 法人制度は、寄付文化の醸成も目的)
2. 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
3. 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



「より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

これらのことが、6 か月以上の期間をかけ、綿密に審査されます。特に重要な項目が、「1. 広く一般から支持を受けているか」であり、社会的に活動が認められ寄付が定着していることを表す Public Support Test と呼ばれる次の二つの条件の内、どちらかを満たす必要があります。





認定 NPO 法人を維持する条件 (Public Support Test)	
相対基準	総収入額のうち、「寄付金収入の占める割合が 20%以上」
絶対基準	「年 3,000 円以上の寄付者」が「年平均 100 人以上」

このうち、「相対基準」は、毎年の事業状況によって変動する条件であるため、安定に認定 NPO 法人を維持するには、「絶対基準」を満たすことが重要となってきます。そのためには、広く社会から認められ、寄付金を確保することが必要です。

全国及び京都市における、認定 NPO 法人の割合を以下に示します。量子化学研究協会は、京都市で 15 件目の認定 NPO 法人になりました。認定 NPO 法人の割合は、全 NPO 法人の 2%以下です。量子化学研究協会は、NPO 法人としてもそのフロントランナーとして恥じない活動と、広く社会に貢献していくことが求められています。

	NPO 法人	認定 NPO 法人	認定 NPO 法人の割合
全国	50,736 件 (2016/1/31)	884 件 (2016/3/25)	1.74 %
京都市	823 件 (2016/1/31)	15 件 (2016/3/25)	1.82 %

(参考) 内閣府 NPO ホームページ: <https://www.npo-homepage.go.jp/>

### 認定 NPO 法人に寄付したときの税の控除

認定 NPO 法人へ寄付をすると、寄付者は以下のような税の控除を受けることができます。

<p style="text-align: center;"><u>個人が寄付した場合: 所得税と住民税(自治体による)が減額</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 所得税は、寄付金額の 2 千円を超える分の 40%が控除されます。</li> <li>・ 住民税は、寄付金額の 2 千円を超える分の 10%が控除されます(自治体による)。</li> </ul>
<p style="text-align: center;"><u>個人が相続又は遺贈により取得した財産を寄付した場合: 相続税が減額</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 相続財産のうち、寄付した財産については、相続税の課税対象から除かれます。</li> </ul>
<p style="text-align: center;"><u>法人が寄付した場合: 法人税が減額</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 一般寄付金の損金算入限度額とは別に、特別損金算入限度額[(資本金等の額×0.375%+所得金額×6.25%)×1/2](資本金がある場合)の範囲内で損金(経費)への算入が可能です。</li> </ul>

尚、この控除を受けるためには、確定申告をすることが必要です。その際、役に立つサイトには以下のようなものがあります。

① <所得税> 国税庁ホームページ、認定 NPO 法人に寄付をしたとき  
<https://www.nta.go.jp/taxanswer/shotoku/1263.htm>

<所得税の申告書の作成方法> (確定申告書等作成コーナー)  
<https://www.nta.go.jp/tetsuzuki/shinkoku/shotoku/kakutei.htm>

② <法人税> 認定 NPO 法人等に対する寄付金  
<https://www.nta.go.jp/taxanswer/hojin/5284.htm>

③ <相続税> 内閣府 NPO ホームページ: 寄付に伴う税制上の優遇措置  
<https://www.npo-homepage.go.jp/kifu/kifu-yuuguu>

個人が相続又は遺贈により取得した財産を認定 NPO 法人に寄付した場合  
<https://www.npo-homepage.go.jp/kifu/kifu-yuuguu/kojinsouzoku-kifu>



## 量子化学研究協会の「認定」NPO 法人としての出発

量子化学研究協会の目的は、量子化学の研究とその普及に関する活動を行い、その成果を国際的に公表することによって、科学技術の発展と人類の幸福に寄与することです（定款第3条）。私たちは、理論化学者としての夢と化学と工業への貢献の接点の一つとして、真に有用な予言的量子化学の建設を目指しています。

化学の世界は1926年に発見された量子力学の原理によって支配されていますから、理論化学の立場から見ると、この量子力学の原理を正確に解き、その解に従って化学現象を正確に説明すれば、化学という学問も、化学産業での製品開発や製薬なども、スムーズに行うことが出来るはずで、この夢を実現するために生まれた学問が量子化学であり、そのための研究が活発に行なわれてきました。ただ、肝心の量子力学原理の正確な解法が発見されたのは、十数年前の中辻の研究によってであり、以来量子化学研究協会の研究所では、この解法を発展させて化学に応用できる有用な方法論を作る努力が続けられてきました。最近、この方法もかなり発展し、小さな分子は勿論、大きな分子や巨大系に至る広い対象に対して、「解けた」と感じる進展がありました。この5月14日の第10回 革新的量子化学シンポジウムの中辻の話の中で触れる予定です。その理論的成果に基礎を置いて、新しい理論と計算法、計算機プログラムなどを開発して、化学と化学者にとって有用な理論体系を作り上げるべく、研究所は今おおわらわです。

そんな中、このたび、量子化学研究協会は、京都市より、「認定 NPO 法人」との認定をいただき、身の引き締まる思いです。私達は上の相対基準によって認定を受けましたが、認定 NPO 法人の絶対判定基準として、「毎年、100人以上の方から、3000円以上の寄付がある」、があります。これを真摯に考えますと、真に有用な量子化学の姿が浮かんでまいります。まず真に有用な量子化学とは何か、正確な予言能のある量子化学であると同時に、化学において、化学産業において生きた化学を産み出す量子化学、それによって、化学や化学産業に潤いをもたらす量子化学、そのようなものでなければなりません。正確な予言能というハード面は勿論、化学に豊潤な活動をもたらすというソフト面をも兼ね備えた学問体系を建設していかなければいけない、と思います。それによってハード・ソフト両面での評価を得ることが出来、多くの方からサポートを得る事ができ、私達も真に励まされるのだと思います。今、世間の量子化学は“black box theory”を正当化しています。それでいいのでしょうか？たとえエネルギーや property が正確に求めたとしても（現状はその正確さすらありませんが）「何故か」が分からなければ進歩はないと考えます。予言の「正確さ」と、それが「なぜか」の両方に答えるのが、真に有用な「学問」ではないでしょうか？この問いかけに真摯に向き合い、それに応える「学問」を建設してゆく覚悟です。

認定 NPO 法人に課せられた使命、即ち、私達の活動が世間一般に“善”として認められること、具体的には現代社会にとって真に有用な科学と技術を創り、提供し、一つの体系的な「学」として発展させていく事が重要です。このような研究の展開は、化学だけでなく広く物理学・生物学・宇宙科学等にも寄与し、化学や製薬産業の製品開発等を通じて経済の発展にも貢献し、社会の持続的な幸福に繋がるものと思います。この様な活動を今後広く行ってゆく覚悟です。皆様の熱い御支持と、お導きを望んでいます。



## ご寄付のお願い

量子化学研究協会研究所の研究活動は、上に述べましたように、まだとても幼稚な段階でしかありませんが、科学者の純真な心によって共感される確かな夢に基礎を置くものです。「空を飛べたら素晴らしいな」という思いが、多くの冒険を呼び、失敗を重ね、そして今の飛行機に発展しました。わが国でも二宮忠八という方が「カラス型飛行器」を飛ばしたのは、ライト兄弟がアメリカで初めて有人飛行実験に成功（1903年12月17日）するより12年前でした。10年前には有人の「玉虫型飛行器」を設計しその実現に奔走しましたが、理解を得られず、ライト兄弟成功の報に接してしまうこととなります。私達は今迄、文部省の科学研究助成金などによって、上に述べた私達の研究開発を行ってきました。しかし最近はこれだけでは十分な研究が行えないのも事実であり、個人の皆様、民間企業等の皆様からのご寄付を求めています。ご寄付頂きました御ころざしは、上に述べました通り、真に有用な量子化学の研究とその普及を通じて科学技術の発展と人類の幸福に寄与する活動に使わせて頂きます。

皆様からのご寄付は、私たちが社会に貢献していることを示す大きな証となります。また、認定NPO法人を維持し、世間一般から認められる新たな形の研究組織を確立することは、我が国の研究組織の新しい形態として、文化・学術の在り方の発展にも繋がります。既存の大学や研究所にはない真に自由な研究の在り方、本来この自由こそが独創性のある研究を育ててきた原点であるとの思いで、研究を展開して参りたいと存じます。

ご不明な点やご寄付のお申し出は、e-mail アドレス [office@qcri.or.jp](mailto:office@qcri.or.jp) にお問い合わせください。



### 3. 第 10 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: 2016 年 5 月 14 日(土) 13:00~16:45

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

#### プログラム:

13:05 挨拶・司会 中辻 博

#### — 特別講演 —

13:10 - 14:00 杉山 弘 (京都大学 理学研究科、物質—細胞統合システム拠点)  
「DNA を中心としたケミカルバイオロジー」

DNA は生命の設計図であり塩基配列情報を持っている。DNA の化学合成法は確立し、酵素反応と組み合わせれば如何なる配列でも合成できる。また合成した DNA は Watson-Crick 塩基対の形成により安定な 2 本鎖構造を形成する。DNA の塩基配列の組み合わせによって様々なナノスケールの構造をデザインでき、特に DNA オリガミ法を用いると自在にボトムアップ的にナノ構造体が簡単に構築できる。我々はこれまで DNA の構造や反応性そしてその機能の調節について分子レベルで研究を行ってきた。最近、DNA オリガミ法によるナノ構造体を利用して、設計したナノスケール空間での生体分子の操作と挙動の可視化、さらに構造体の集積化とデバイス化を検討している。例えば、設計した DNA ナノ構造上で「DNA モーター」と呼ばれる DNA 分子機械の数ナノメートルの動きを直接捉え解析した。また「DNA フレーム」と名付けた構造体を設計作成し、酵素の反応や DNA の構造変化を直接観測する新しい手法を開発した。この DNA フレーム構造を利用することで、酵素の反応性が DNA の張力に依存することを明らかにした。また脂質二重膜を利用し複数の DNA オリガミを配置することにも成功した。

細胞内の DNA に目を転じると、2003 年にヒトゲノム配列も決定され、新しいポストゲノム時代に突入し研究が急展開している。遺伝子診断が日常的に行われるようになり、次世代シーケンサーの登場により個人のゲノム DNA 配列の決定も 10 万円程度で決定できるようになった。遺伝子の発現は DNA 塩基配列情報とともにヒストンのアセチル化や DNA のメチル化などのエピジェネティックな修飾によっても制御されていることが明らかになってきた。我々は、DNA の塩基配列を認識する人工遺伝子スイッチを分子設計することによって、任意の遺伝子の発現を制御する手法を開発することを目指している。N-メチルピロール-N-メチルイミダゾール(Py-Im)ポリアミドは、DNA 塩基配列特異的に結合する人工分子である。我々はこれまで、このポリアミドにアルキル化剤をコンジュゲートさせることにより様々な配列特異的アルキル化剤を合成し、選択的な遺伝子発現の抑制 (オフスイッチ) に成功している。また最近では遺伝子の発現の活性化 (オンスイッチ) を目指し、ポリアミドにヒストンデアセチラーゼ (HDAC) 阻害剤をコンジュゲートさせ遺伝子の発現を検討した。その結果結合配列が異なると、それに応じて異なる遺伝子群を活性化することが確認された。これらの手法は、細胞の





初期化や、目的とする細胞へ分化させる方法論も確立できる可能性を示しており、遺伝子発現の異常が原因の病気に対する根本的な治療への道を拓く可能性があることを示している。本発表ではこれらの最近の進展について述べたい。

**14:00 – 14:40 柳井 毅 (分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域)**

**「密度行列繰り込み群に基づく拡張多状態多参照擬縮重摂動理論」**

多参照電子状態計算は、近年、密度行列繰り込み群(DMRG)に基盤とすることで発展し、大規模な系への適用が実現されている。本発表では、高精度な大規模励起状態計算を目指した拡張多状態多参照擬縮重摂動理論の開発を議論する。光化学などの励起状態を介する反応の理論解析では、多配置的波動関数に基づく取り扱いがしばしば必要とされ、また動的電子相関の効果も重要となる。多参照摂動理論では、状態が擬縮重する多状態系を適切に取り扱うためには、単状態波動関数を混成する擬縮重摂動理論を用いる必要がある。本研究では、DMRG波動関数を参照関数として、どのように多参照擬縮重摂動理論を構築することができるかについて背景も含めて示す。

**14:40 – 15:40 休憩**

司会 波田 雅彦

**15:40 – 16:05 中嶋 浩之 (量子化学研究協会研究所)**

**「認定 NPO 法人としての出発」**

「NPO 法人 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 量子化学研究協会」として認定されました。認定 NPO 法人は、行政府により、NPO 法人の中でもその活動・財務等が優秀な法人のみを厳格な審査のうえ選んで認定されるもので、全 NPO 法人のうち僅か 2%です。ここでは、認定 NPO 法人とは何か、認定 NPO 法人へ寄付をする場合の税制上の優遇など、その制度について解説したあと、認定 NPO 法人としての量子化学研究協会の新たな出発と決意について述べたいと思います。

**16:05 – 16:45 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)**

**「予言的量子化学の設計」**

真に定量的予言能がありかつ有用な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応用して正確な予言と理解ができる理論・計算体系を創造することが必要である。演者は、ここ数年の研究によって、化学の問題に対してシュレーディンガー方程式は解けた、と確信できるようになった。その理由と、化学理論としての設計について述べる。そこで重要と考えている事は、①化学者が本理論によって、定量性は勿論、概念においても、研究の指針を得ることができること、②理論体系が、小さな分子は勿論、普通の系、巨大系に至るまで共通に応用でき、巨大系に応用可能な order N 的な要素を自然に内包していること、③exact theory は勿論、それほどの精度を要しない場合も、ほぼ同じ理論体系で研究でき、両体系の連携が容易であること、などである。その様な予言的量子化学の設計の可能性について述べる。



## 懇親会

日時: 2016年5月14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: 5,000円



廣田先生によるご講演



前回のシンポジウムの様子





休憩時間の参加者同士の交流



懇親会の様子



志田先生による乾杯のご発声

#### 4. 編集後記

「革新的量子化学シンポジウム」では、量子化学分野に限らず、色々な分野の著名な先生方や企業の方もお招きして、皆様に興味を持っていただけるシンポジウムになるよう企画しています。今回は、「第 10 回」という記念すべき会です。そのため、特に優れたご研究を展開して世界で活躍しておられるお二人の先生をお招きし、講演して頂けることになりました。まず DNA 科学の第一人者でおられる杉山 弘先生には、特別講演をお願い致しました。生命の設計図ともいえる DNA の世界の、壮大な Chemical Biology のお話をして頂けます。先生のアブストラクトをお読みになって感激された方も多いと思います。杉山先生は、分子を自在に合成できる合成化学者でもおられ、最近の進歩も含めて豊富な化学をお話しいただけるとと思います。柳井 毅先生には、量子化学の最先端理論の一つである密度行列繰り込み群の理論と応用のお話し、特にその最近の進歩についてお話し頂きます。すでにワクワクされている方も多いかと思えます。是非、お誘いの上ご参加ください。

また、この 3 月末、量子化学研究協会は、京都市より「認定 NPO 法人」として認定されました。私たちの活動と努力が認められ、一同大変嬉しく存じました。今後は、私たちの科学研究を広く社会にも貢献できるものにする活動も地道に行い、新たな決意の元に取り組んでいきたいと思えます。今後も、ご指導をよろしくお願い申し上げます。

