QCRI

量子の世界

No. 8

– 目次 –

	ページ
1．量子化学者と健康－セルフ・ヘルスケアのすすめ 江藤 正義 (兵庫県立大学 名誉教授)	1
2．二十年を経て 安田 耕二 (名古屋大学 未来材料・システム研究所 情報学研究科 准教授)	14
3．「第 12 回 革新的量子化学シンポジウム」のご報告	20
4．「第 7 回 JCS 理論化学シンポジウム」のご報告	23
5．認定 NPO 法人 量子化学研究協会への継続的なご寄付のお願い	27
6．「量子の世界」へご寄稿のお願い	29

量子化学者と健康－セルフ・ヘルスケアのすすめ

江藤 正義
兵庫県立大学 名誉教授

はじめに

江藤 正義 先生

中辻先生から「量子の化学」への寄稿のご依頼を受けた。私自身は、量子化学の専門家ではないが、逆に専門外の人間の文章は別の魅力があるのではないかと思って、お受けした。

まず、私の略歴を述べておく。私は、九州大学大学院農学研究科食糧化学専攻博士課程修了（1975 年）で有機リン化学、食品化学、食品衛生学、農薬化学などが専門である。大学院修了と同時に、兵庫県立の姫路短期大学に就職して、姫路工業大学環境人間学部をへて、2013 年兵庫県立大学環境人間学部を定年退職した。その間、食品学、食品衛生学、有機化学などを研究・教育した。在職中、米国、カリフォルニア大学バークレー校の故 J.E.Casida 教授の農薬化学および毒性学研究室で在外研究した。現在は自宅で、自分の体を使って境界型糖尿病の治療研究をしている。その成果の一部は、姫路市立生涯学習大学校で講義し、受講者の健康増進の手助けをしている。また、自宅では生命の起源を量子化

QCRI ©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

学の手法を用いて解明できないか、パソコンを用いて検討している。

なお、中辻先生とお知りあいになったのは、SAC-CI 講習会を受講したことがきっかけであった。特に、懇親会の出会いで、アドレナリン発見でノーベル賞候補であった高峰譲吉が名付けた「アドレナリン」という名前が、高峰譲吉の死後、アメリカの研究者によって「エピネフリン」という名前に変えられ、最近では、アメリカかぶれした日本の研究者もそれに追従していることをお話しし、中辻先生の「SAC-CI」も同じ被害に遭いかけたことに似ていることをお話した。

ライナス・ポーリング博士のビタミン C 大量摂取療法

米国留学中、スタンフォード大学のライナス・ポーリング科学研究所に留学していたビタミン C の権威・故佐賀大学名誉教授の村田晃博士(当時は助教授)と出会い、ビタミン C の生理作用についての知識を得た。村田博士は、九大農学部発酵学研究室の出身で、佐賀大学に赴任後、乳業会社からヨーグルト製造におけるバクテリオファージによるヨーグルト菌の汚染の解決法の開発を依頼され、食品の製造には使えない薬品の代わりに、食品成分でバクテリオファージの防除・制御を試み、ビタミン C が有効であることを発見した。その縁で、当時『ビタミン C と風邪』というベストセラーを出されていたポーリングから招かれ留学していた。

ライナス・ポーリングは、言うまでもなく、量子化学の権威である。ノーベル化学賞(1954 年)と平和賞(1962 年)の 2 つを単独で受賞した大科学者である。平和賞の理由となった反核運動が原因で、1952 年にアメリカ政府によって英国へのパスポート発行が拒否されていなければ、ワトソンとクリック以前に、イギリスで DNA の X 線回析図を見て、2 重らせん構造を発見し、3 個目のノーベル賞を受賞したのは確かであろうと言われている。

ポーリングは、彼のカール・ノイベルグ賞受賞記念晩餐会（1966 年 3 月）に出席していた生化学者、アーウィン・ストーンから、大量のビタミン C を摂取するように勧める手紙とストーンの 4 編の論文を 4 月に受け取った。それらの論文では「ヒトは全て低ビタミン C 血症という遺伝性の病気にかかっている」、「この遺伝病による慢性的なビタミン C 不足状態が多くの病気の遠因になっている」、「大量のビタミン C を補って低ビタミン C 血症を改善することが、それらの病気を防ぎ、それらの病気を治すことにつながっている」ということが論じられていた。この考えは、ポーリングに大きいインパクトを与えた。

ヒト、猿、モルモット以外の圧倒的多数の哺乳動物は、体の中でビタミン C を作ることができる。ヒトの体重 70kg 当たりに換算すると、一日に 2～20g も作っている、ヒトと猿はビタミン C を作れないが、共通の祖先動物は体内でビタミン C 作っていた。この祖先動物がビタミン C を作れなくなったのは突然変異によるもので 2500 万年前のことである。緑豊かな熱帯ジャングルの中で生息していた祖先動物は、ビタミン C を合成するという負担を免れ、多くの子孫を残すことが出来、ビタミン C を作れる祖先動物は減少し、最後に、ビタミン C を作れない動物だけが生き残った。やがて、この動物は進化し、ヒトと猿に分かれた。原始人は、植物性の食物から、1 日 2g 程度のビタミン C を摂っていた。ヒトに近縁のゴリラは朝から晩まで、植物を食べて、1 日 2g(ヒトの体重当たり)のビタミン C を摂っている。

ポーリングが、ビタミン C と風邪についての文献を徹底的に調べたところ、1930 年代の終わりからその時まで、予想以上に多くの試験研究が行われていて、その全てがビタミン C の風邪に対する有効性を示していることを知った。二重盲検法ないしそれに近い方法で行

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

われた試験も 6 つあった。これらの文献は医学界から完全に無視されていた。

ポーリングが「大量のビタミン C は風邪に効く」と話したところ、マスコミの一部が取り上げた。これに対し、当時の米国の栄養学と医学界は激しく否定した。医学界では、ビタミン C は壊血病の予防効果以外は全く考えられていなかった。

そこでポーリングは、「民衆を啓蒙し、社会の考えを変え、社会の世論を背景に、医学者、医師の啓発を進めていく」以外にはないと、考えを固めて、1970 年の夏、一般向けの啓蒙書を一気に書き上げた。1970 年 12 月の初め、ポーリングの『ビタミン C と風邪』は全米の書店に並んだ。時は冬の風邪のシーズンであった。この書は、すぐにベストセラーとなり、世間はビタミン C と風邪の話で持ちきりとなり、ドラッグストアのビタミン C 製剤はたちまち、売り切れて、問屋にも在庫がなく、メーカーの製造は、追いつかない状態になった。

これに対して、厚生当局と医学界は、とにかく、ポーリングを激しく批判･非難することによってこの騒ぎを静めようとした。「ビタミン C が風邪に効く、という確かな証拠がない」、「大量のビタミン C の毒性・副作用について述べられていないが、その恐れはないのか？」という 2 点で批判し、また、「十分な裏付けが無いことを一般の人に語った」と非難した。

さらに、食品医薬品局は食品として扱っているビタミン剤を医薬品として規制しようとした。1972 年に出された政府の規制案は「ビタミンの栄養所要量の 150%以上含有する製剤は、医薬品とする」というものであった。また、ビタミン剤の外箱に「ビタミン剤は食物から十分に取れる。ビタミン剤を常用する化学的な根拠はない」と印刷することを義務づけようとした。ちょうど今のたばこの箱の表示と同じことが行われようとしていた。これには、食品・製薬業界も猛反対して、米大統領に史上最大の数の個人が手紙を送った。ポーリングは反対運動の先頭に立って、議会にビタミン自由化法案を提出し、また、15 件にものぼる訴訟を起こして、活発な法廷闘争をした。1975 年 2 月、米連邦最高裁判所は、「ビタミンを医薬品と見なすのは不当である」として、食品医薬品局に規制案を改めるように命じた。5 月 28 日の官報は、「ビタミンは、医薬品ではなく、食品として扱う」と告示した。ここに、ポーリングと米国民はビタミン C の大量摂取における最大の障害を取り除いた。

米医学界は、米国アカデミー会員であれば無条件で掲載できる「米科学アカデミー紀要」などの学術雑誌への掲載拒否や公的研究費申請の拒否などで、ポーリングの研究を妨害した。これらのことは、村田晃博士の著書[1)]に詳述されている。最悪の妨害は、ポーリング博士がビタミン C によるがん治療の効果を発表した時、1979 年と 1985 年米国の巨大病院メイヨ－クリニックのメイヨ－医科大学のモーテル教授が無作為割り付け二重盲検試験を行い、この効果を否定したことであった。この医者は、当時 20 ほどの抗がん剤治験を行っていた抗がん剤派であった。メイヨ－医科大学は有名な大学で、載った雑誌も世界一レベルが高いと言われる雑誌だったので、世界中の人々がこちらを信用して、ポーリングはいかさま師扱いされた。ところが、この治験は、実際には、ずさんなもので、ポーリング博士も激怒したそうである[2)]。

ビタミン C（アスコルビン酸）による抗がん作用の利用については、それから 30 年の時を経て、超高濃度ビタミン C 点滴療法として、形を変えて復活している。この療法の従来の抗がん剤治療との大きな違いは、１．ビタミン C を超高濃度で点滴すると、ガン細胞を殺す作用が生まれ、その効果は、従来の抗がん剤に引けを取らない。２．従来の抗がん剤は強い副作用が出やすいが、この療法は、正常細胞に対してほとんど副作用がない。それどころか、むしろ患者さんは日々元気になってくる。普通、がん患者は、免疫力が弱っており、

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

風邪を引き易く、肺炎が原因で亡くなることが多いが、この療法ではこの病気は全く見られない。３．従来の抗がん剤なら、必ずいずれ効かなくなってくるが（耐性という）、この療法はずっと同じように効き続ける。ガン細胞がゼロになるまで、安全にこの療法を続けることが可能。４．がんの転移を抑えるなどである。

この抗がん作用機構は、アスコルビン酸の性質による。アスコルビン酸は、本来、還元物質であるが、鉄や銅などの遷移金属が存在すると、酸化物質として働き、過酸化水素を発生する。ここで生じた過酸化水素は、正常な細胞では、抗酸化酵素（カタラーゼやグルタチオンペルオキシダーゼ）によって水と酸素に変えられ無毒化される。ところが、ガン細胞はカタラーゼやグルタチオンペルオキシダーゼの量が少ないことが知られている。そのため、ガン細胞は、過酸化水素による障害を非常に受けやすく死滅する。これが、アスコルビン酸の抗がん作用機構と考えられている [3)]。

ポーリングの著書の普及で、私がアメリカにいた 1978 年頃には、ドラッグストアで、ビタミン C の 1g のタブレット数百錠入りのボトルが売られており、医学界の必死のネガティブキャンペーンにもかかわらず、ビタミン C の大量摂取は普及していた。

ポーリングのビタミン C 摂取法は、時計の長針が 12 を指したら 1g のタブレットを 1 錠飲むというもので、一日に合計 10g を飲んでいた。晩年はさらに増やして、一日 20g 飲んでいたので、村田博士がどうしてそんなに大量に摂るのかと尋ねたところ、「私は皆さんにビタミン C を大量に飲むことを勧めている。従って、自分が大量に飲んで、安全性を皆さんに示すのが目的だ」と言われたそうである。

医学界では以前から、「ビタミン C を大量に摂ると蓚酸カルシウムの腎臓結石ができる」という理由で大量摂取に反対してきた。これはネズミでの実験結果に基づいている。ネズミは自分でビタミン C の必要量を合成しているので、他から大量投与されると、多すぎて腎臓結石ができるようである。

一方、ヒトでは、そもそも自分ではビタミン C は合成できず、また、腸からは一度に 1g 以上吸収されない。吸収されても、体に必要のない分は、尿として排泄される。したがって、よほど特殊な体質でない限り、この原因での腎臓結石は起こらない。ビタミン C は、大量にとっても下痢をする事はあっても、他に副作用はない。逆に朝起きた時 1g のビタミン C と水を飲むと便秘が解消される。これは、最も安全な便秘薬である。

なお、ポーリングは、ビタミン C だけを大量に摂取していたわけではなく、他のビタミンも大量に摂取していた。これをメガビタミン主義と呼ぶ。本人は、分子矯正医学という学問を打ち立てた。これは、薬剤のように生体異物の働きで病気を治すのではなく、食べ物で予防したり、治したりする学問である。

前述の超高濃度ビタミン C 点滴療法では、65 分間に 65g のビタミン C を点滴しても、患者のがん細胞は死ぬが、正常細胞には何ら影響はない。ただし、禁忌があるので、ここに、付け加えておく。１．Glucose-6-Phosphate Dehydrogenase（G6PD）異常症は禁忌 G6PD 異常症があると、この療法で溶血性貧血になる危険性がある。２．腎不全は禁忌。３．むくみ、胸水、腹水のある人は、相対的禁忌。

ポーリングが、一般書を書いて、大衆に直接語りかけたのは、彼の反核運動と同じ手法であった。ちなみに、ポーリングの反核運動によって、大気圏核実験が禁止された。当時、アメリカもソ連も大気圏で原爆実験や水爆実験をしていたが、この実験で水や大気中の窒素から ^{3}H や ^{14}C が大量に生ずることを危惧してのことであった。その後、核実験は、地下核

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

実験に移行した。

ポーリング博士は、1994 年に 93 歳で逝去されたが、死ぬまで頭脳明晰で学術論文を書いていた。91 歳の時、前立腺がんが見つかり、「ビタミン C は私のがんの発生を 20 年遅らせた」と述べたことは有名である。ポーリングは、1966 年にビタミン C を大量に摂取し始める (65 歳)までは、風邪を良く引き、病弱であった。

ビタミン C の生理効果

ビタミン C には様々な生理効果（40 種）がある。一石 40 鳥である。以下に、村田博士の著書 [4]を参考に改変・列記しておく。

1．環状ヌクレオチドの生成と調節に関係、

ビタミンとしての作用

2．水酸化（ヒドロキシル化）反応に関与、 3．コラーゲンの生成と維持に必要、（プロリンとリジンの水酸化）、 4．プロスタグランジンの生成と調節に関係、 5．薬物代謝系に関わる、 6．副腎皮質ホルモンやカテコールアミンの生成と維持に関わる、

抗酸化作用

7. アスコルビン酸⇔アスコルビン酸ラジカル⇔デヒドロアスコルビン酸という可逆的な酸化還元系を構成し、体全体の酸化還元に関わっている、8. 活性酸素、その他のラジカルを補足する。9. 抗酸化（還元）作用をもつ、10.ビタミン E ラジカルを還元して、ビタミン E を再生する。つまり、ビタミン E と相乗的抗酸化作用を示す、

糖尿病の改善効果

11.糖の代謝に関係、12.インスリン様の血糖低下作用を持つ、

美容効果

13.アミノ酸代謝に関係、14.チロシンからのメラニン生成を抑える、

血液の正常化

15.葉酸の代謝に関係、16.カルニチンの生成に関わる、17.鉄の吸収を高める、18.鉄を含むタンパク質の生成と代謝に関わる、

骨粗鬆症予防

19.カルシウムの吸収と代謝に関わる、20.骨代謝や骨芽細胞の分化・増殖に関わる、

血管系疾患の予防

21.悪玉の LDL コレステロールを減らす、22.善玉の HDL コレステロールを増やす、23.中性脂肪を減らす、24.血圧の上昇を抑える、25.利尿作用を持つ、26.血液のフィブリン溶解活性を高める、

免疫の正常化

27.免疫能を増強、28.抗炎症作用に関係、29.抗ヒスタミン作用を持つ、

脳機能を高める

30.寒冷抵抗力を高める、31.脳の機能に関わる、32.鎮痛作用を持つ、

泌尿器

33.尿酸低下作用を持つ、34.金属キレート作用を持つ、

感染症予防

35.ウイルスを不活性化する、36.殺菌作用を持つ、37.インターフェロンの産生を促し、活性を高める、

発がん抑制効果

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

38.ニトロソアミンの生成を抑える、39.がん原性を不活性化する、40.抗腫瘍作用を持つ。ほかにもいくつかの作用がある可能性がある。

私のビタミン C との出会いと効果

1966 年九大農学部に入学して、1 年半後、食糧化学工学科に進学し、故山藤一雄九大名誉教授(当時教授)（ビタミン B_1 発見者、鈴木梅太郎博士の孫弟子）の授業を受けた。その中で、ノーベル化学賞(1929 年)受賞者故 Hans von Euler 博士と、彼が発見したレダクトンについて学んだ。ビタミン C がエンジオール基とγ－ラクトン環を持つ化合物であり、エンジオール基が還元性を持つことに興味を持った。さらに、卒業研究では食糧化学研究室(山藤教授主宰)に入り、山藤先生が会われた多くのノーベル賞受賞者の話を身近に聞き，当時最も偉大であった学者たちに親しみを覚えた。

1969 年秋ごろノーベル生理学・医学賞（1937 年）受賞者の生化学者アルバート・セントジョルジー（ビタミン C 発見者）が福岡を訪れ、講演をした。國弘正雄氏の逐次通訳で聴いた講演には、深い感銘を受けた。そこでセントジョルジーご本人から聞いた話として、彼は、ビタミン C を、それまで壊血病の予防効果あると知られていた柑橘類から単離したのではなく、アジソン病という全身が黒くなる病気とリンゴなどの褐変反応が同じ反応ではないかとの連想から、ウシの副腎から還元性物質を単離し、これがビタミン C であることを証明し、ノーベル賞を受賞した。セントジョルジーは、講演の中で「若き科学者への忠告」として、自分の失敗や成功から得た貴重な教訓を話され、これは、私のその後の研究人生の指針となった。

大学院では、山藤教授後任の故大村浩久九大名誉教授(当時教授)の指示で、農薬化学研究室の故江藤守總九大名誉教授(当時助教授)の指導を受け、サリゲニン環状エステルの一種、MTBO（2-methylthio- 4 H-1,3,2-benzodioxaphosphorin-2-oxide）のリン酸化反応の研究を行い、3,’5’－環状 AMP などの生化学的に重要なリン酸エステルの合成研究で農学博士の学位を得た。その中でトリオースレダクトン-2-リン酸を合成した。

1978 年米国カルフォルニア大学バークレー校留学中、日本人科学者の集まりのバークレーセミナーに村田晃博士を招き、「ビタミン C の健康効果」の話を聴いた。その後スタンフォード大学のライナス・ポーリング科学研究所を見学した。それをきっかけにライナス・ポーリングを見習って、私もビタミン C の大量摂取を始めた。また、ポーリング関係の本を多数読んだ。その後、物理学者・三石巌氏の著書 [5]でビタミン C が白内障予防に役立つことを知った。その後、40 年間摂取した結果、動脈硬化は比較的軽微で、白内障は全く出ていないという結果を得た。

2017 年、糖質制限による自らの糖尿病の治療の研究(後述)の中で、アボットジャパン(株)のフリースタイル・リブレの血糖値計(24 時間測定可)はビタミン C でも数値が出てくることを知り、ビタミン C は、摂取後 7 時間程度、体液中で高い状態にあることを、確認した。そこで、毎食後ビタミンCを取れば、1 日中ビタミンCの血中濃度を高い状態に保てることになる。

研究寿命 100 歳を目指す健康管理

次に、研究者寿命について述べる。一般に研究者には、定年を迎えると、それまでの研究環境を失い、研究人生を終了させざるを得ない人が多い。

一方、私の大学時代の恩師、故山藤一雄名誉教授は、ノーベル賞候補であったすぐれた研究者であった。大学退官後も研究室を持って研究を続けたが、惜しくも80歳で逝去された。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

山藤先生がノーベル賞候補であった事実は、ノーベル化学賞受賞者のスウェーデンの化学者 Hans von Euler 博士（1873～1964）が、来日された際に、「山藤博士をノーベル賞に推薦しているが、日本の学者が反対していて実現出来ない」と嘆かれたと聞いている。いかにも当時の日本人の島国根性を表す話である。そこで、Euler 博士は、ノーベル賞の代わりに、スウェーデン化学会から Scheele 賞を 1962 年に山藤博士に贈っている。ちなみに、スウェーデン人 C.W.Scheele（1772 年）は英国人 J.Priestley（1774 年）以前に酸素を発見 (単離)した人である。山藤博士の業績はカイコの多核体病が、カイコの遺伝子の中にウイルスが潜んでおり、ヒドロキシルアミンや過酸化水素によってウイルス誘導能できることを確かめたものである。山藤博士はこのウイルスを「プレウイルス」と名付けた。この実験は、後に、A.Lwoff(1965 年ノーベル医学賞)が過酸化物を中心とするプロファージ誘導の業績を公表する以前に行われた。

なお、ビタミン B_1 の発見者である鈴木梅太郎博士(東大農学部)も、ノーベル賞の有力な候補者であったが、東大医学部の反対で受賞できなかったことを最近の NHK の番組の中で放送していた。

さて、100 歳近くまで研究者として活躍した人には、Joel Henry Hildebrand という物理化学者(1881～1983)がいる。私が、カリフォルニア大学バークレー校にいたころ、化学系の建物に Hildebrand Hall があった。Hildebrand は、強靭な肉体を持ち、スキーは 1936 年米国オリンピックスキーチームの監督としてドイツに遠征された [11]。90 代になっても登山をしていて、バークレーの伝説になっていた。運動が健康長寿のために必要なことの一つの証明である。私の米国の恩師である Casida カリフォルニア大学教授は、2018 年 6 月 30 日に 88 歳で逝去されたが、あと 2 年したらリタイアする事を目標にして研究されていた。このように研究を続けている先生は長寿で素晴らしいことである。中辻先生もこのまま健康に気をつけてがんばられたら、益々立派な研究成果を出されることと思う。

さて、私は、退職後 4 年ほど姫路工業大学名誉教授会の幹事を務めた関係で、名誉教授の訃報に数多く接してきた。そこで、早く健康を害される人の共通点とその対策について考察した。

その原因は、①加齢による免疫機構の異常、②生活リズムの変化、 ③精神的な張りが無くなる、④現役時代の不健康な生活による老化、⑤定期健康診断を受けなくなるなどである。

一方、健康であれば、①人生を有意義に生きる、②病気を予防できれば、経済的な負担が軽くなる、③研究者の場合は新発見の可能性が増える、などの利点がある。

対策は、原因のところに述べた①から⑤に適切に対処することと、生物進化(ダーウイン医学 [6])に基づく健康法を行うことにある。そもそも、健康法とは、病気の予防法を積極的に行うことである。人は進化の過程でいろいろなものを得て、また失ってきたので、進化からヒントを得て、健康管理に生かすことも 1 つの方法である。

生物進化の歴史

まず、現在のヒトに至る生物進化を振り返って、以下に列記する。

- 138 億年前　宇宙誕生、46 億年前　太陽系誕生
- 38 億年前　原核生物誕生、36 億年前　光合成生物誕生
- 18 億年前　真核生物誕生－ミトコンドリアや葉緑体が別な真核生物に取り込まれた。ほぼ同時に有性生殖が始まった、
- 9 億 5000 万年前　多細胞生物誕生

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

- 5 億 4200 万年～4 億 8830 万年前(カンブリア紀)の「進化の爆発」で背骨の原型「脊索」を持った生物「ピカイア」が現れた。
- 6500 万年前　恐竜が絶滅した。その結果、哺乳動物が繁栄する環境が生まれた。
- 2500 万年前　霊長目がビタミン C 合成能力を失った
- 700 万年前　人類の祖先のサヘラントロプスが誕生した。40 万年前　ネアンデルタール人が誕生し、4 万年前以降姿を消した
- 20 万年前　ホモ・サピエンスが誕生した。　ホモ・サピエンスの頭脳に、認知革命が起こった
- 8～5 万年前に出アフリカ
- 1 万年前　ヒトが農耕・牧畜生活を始めた。

人体は生物進化の歴史的産物である [7)]

各器官の歴史について述べる。

最も起源が古い器官は腸で、ヒドラ（刺胞動物）は全身が腸である。腸は食物が入ってくると適切な分解酵素を分泌して消化する。逆に、有害な物が入ってくると排出する。このためのセンサー細胞（基底顆粒細胞）が食物の成分を見分け、周囲に信号物質を分泌し、指令を与える。腸の入り口の神経細胞の集合が脳の起源と考えられる。腸と脳はセロトニンなどのホルモンを分泌しており、腸は第二の脳とも言われている。

ヒトは噛みながら呼吸もできる。まず、哺乳類は咀嚼ができる口を獲得した。次に、道具と火の使用をおぼえたヒトは咀嚼機能が退化した。鼻の出っ張りもヒト独特の特徴である。哺乳類は、一般に鼻面が大きく前に突き出ているが、ヒトは咀嚼機能が退化した結果、顎が縮小し、外鼻が取り残された。

脊椎動物の眼の進化は謎のままである。水晶体には若いときにはビタミン C が多く含まれているが、年をとるにつれ、しだいに減ってきて若いときの半分ぐらいになる。他方、過酸化物がたまってくる。昼間行動性の動物は、水晶体や房水にビタミン C が多く含まれるが、夜間行動性の動物には少ない。したがって、ビタミン C は目の機能維持のためにも重要である。

心臓は肺の誕生によって役割を変えた。心臓は魚類の段階ではエラに酸素を送るポンプであった。しかし、肺が誕生すると、心臓は全身から戻ってきた酸素不足の血液を肺に送り、肺で酸素を受け取った血液を全身に送るポンプへと変化した。両生類になると、2 心房 1 心室となり、動脈血と静脈血が混じり合っているが、ほ乳類になると、2 心房 2 心室となり、混じり合わなくなり、効率的になった。

直立二足歩行の利点と欠点

ヒトは直立二足歩行が可能となり、直立二足歩行の結果、犬歯の退化や脳の発達があった。直立二足歩行になったのは、いくつか理由があるが、1 つに、遠方から果物などの食べ物を運んでメスにプレゼントするためというのがある。

直立二足歩行の結果、背骨構造が変化し、重い頭部を背骨の真上にのせて支えることができるようになった。開発途上国では今でも頭の上に物をのせて運ぶ習慣がある。

一方、頭部が真上に来たことで、心臓は負担を強いられ、高血圧症、心臓病や脳卒中になりやすくなった。

直立二足歩行の結果、骨盤の形状が変化した。幅広で、縦の長さが短く、奥行きが深くなった、その結果、重い内臓を下からお椀のように支えることができるようになった。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

しかし、産道が狭くなり、また、頭が大きくなったので、未熟児でしか出産できなくなり、産後の教育の重要性が増した。

膝関節のロック機構が生まれ、筋力に頼らず足をまっすぐに伸ばして長時間立てる様になった。左右の大腿骨が内側に傾いていると接地点が中心線に近いので、まっすぐ安定して歩きやすくなる。

老人になると O 脚となり、類人猿に近づく。O 脚だと膝痛を起こして歩行が不自由になる。土踏まずは、アーチ状の骨の配列とそれを支える靭帯や筋肉からできており、足にかかる荷重を吸収、分散し、歩行を助けている。

かかとから接地し親指で蹴るようにして歩くと、O 脚が改善される。

ヒトが言葉を操れる理由

第一の理由は、高い知性を実現できる脳があるからで、ヒトの大脳皮質には、①運動性言語中枢（ブローカー中枢）と②感覚性言語中枢（ウエルニッケ中枢）がある。ブローカー中枢から出ている神経線維は、手足を動かす運動野からの神経線維の近くにあるので、脳梗塞や脳出血がこの部位で起こると言葉が出なくなり、同時に手足が不自由になる。

直立二足歩行はヒト特有ののどの構造を作った。ヒト以外の哺乳類の喉頭の先端は高い位置にあり、鼻腔のすぐ後ろまで来ている。そのため声帯で作られた空気の振動は鼻へ無駄に抜ける。

一方、ヒトの場合は、直立二足歩行の結果、背骨が頭部の中央に寄り、さらに、咀嚼機能の退化により歯列が後退した。その結果、その間にはさまれたスペースが減少し、喉頭が下がらざるを得なくなった。そこで、嚥下時（物を飲み込む時）には、軟口蓋が跳ね上がり、鼻腔に食べ物が逆流しないようにふたをする。また、喉頭が上がって喉頭蓋でふたをし、気管へ食べ物が誤って入らないようにしている。

ところが、老人になると、この反射運動が上手く行かなくなり、誤嚥して、肺炎になりやすくなる。呼吸時は、軟口蓋は垂れ下がった状態で、喉頭が下がって、気道を開け、空気の流れを確保している。

ヒトの声は、喉頭の中にある「声帯」が振動して発せられる。声帯で作られた空気の振動は、喉頭から口に抜け、その際に舌やくちびる、歯などによって振動にさらに変化が与えられ、多彩な音声となる。そこで、複雑な言葉を話せるようになった。このようなことは、喉頭が下がっているヒトだからこそ可能である。

ユヴァル著『サピエンス全史』[8)]

「サピエンス（ヒト）の勝因」が書かれている。それは、１．虚構を信じる力。２．虚構の共有により高度な分業が可能となった結果、今やごく単調な仕事を分担することだけで命の存続が可能となった。３．我々は個人の生きる力において古代狩猟採集民にはるかに及ばない。４．サバイバルできない凡庸な者も子孫を残せるようになったことは人類が手にした成果。５．人類の DNA は、現在も狩猟採集時代のまま。６．現代人が感じるストレス、イライラ、プレッシャーなどは、その時代の生活とのズレから来ているとも考えられる。

文明が生み出した病気

約 1 万年前から人類の食生活は、狩猟・採集生活から農耕・牧畜生活に変わった。たんぱく質、脂質と繊維質の多い食べ物から糖質の多い穀類に変わった。現代になって、運動不足が重なり、糖尿病の発生が激増した。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

日本国民の糖尿病患者（予備軍も含む）は約 2000 万人～4000 万人と推測されている。虫歯・歯周病も糖質を大量に摂るようになって増加した。歯周病は糖尿病と深い関係がある。

歯周病の予防法は、①口内を清潔にすることで、その結果、誤嚥性肺炎を予防する、②ビタミン C を多く摂ることで歯肉を強くする。

糖尿病の問題点

ここで、現代日本人に急増している糖尿病の問題点を述べる。

日本人の重大病因は、がん、脳卒中、心筋梗塞、肺炎、認知症である。この全てで糖尿病患者は高い。糖尿病の合併症は、腎症（人工透析）、網膜症（失明）、神経症（壊疽、足の切断）である。

合併症の原因は、グルコースと体たんぱく質とのアミノカルボニル反応の生成物(AGEs)とその受容体（RAGE）が引き起こす炎症である。

腎症の人工透析患者は全国で約 33 万人いるが、その大半は糖尿病性腎症である。平均余命は 5 年である。人工透析は、週 3 回、1 回 4 時間の治療で患者にも大きな負担がかかる。患者の医療費は一人 1 年に約 500 万円、全員で約 1 兆 4000 億円以上かかっている。これは、日本の医療費の 5%である。年間約 4 万人が透析を導入し、約 3 万人が死亡している。結果として、年間 1 万人以上が増加している。

糖尿病には、2 種類あり、1 型糖尿病は、感染症、自己免疫疾患などで起こる。原因は膵島β細胞が破壊されており、インスリンが分泌されない。2 型糖尿病は、生活習慣病である。原因は、①インスリンの分泌が低下と②インスリン抵抗性である。こちらは、インスリンは分泌されているが効かない。

治療法には、以下の 3 種がある。1．薬物治療は、インスリン注射、インスリン分泌促進薬、インクレチン分解酵素阻害剤などがある。

2．食事療法には、以下の 2 種類がある。①カロリーを制限して糖質は十分に摂る。②糖質を制限して、たんぱく質、脂質は十分に摂る。どちらが有利かは、後に述べる。

3．運動療法では、筋収縮はインスリンを介せず糖を取り込むのですぐれている。

薬物治療法では以下の 8 種の薬が使われている [9]。1．インスリン製剤、2．スルホニル尿素薬（SU 薬）、3．ビグアナイド薬、5．速効型インスリン分泌促進薬、6．チアゾリジンジオン誘導体は、インスリン抵抗性改善薬です。7．DPP－4 阻害薬と GLP－1 受容体作動薬、8．ＳＧＬＴ２阻害薬である。

糖質制限食事療法の真実 [10]

現在、日本ではカロリー制限食が主流である。しかし、2012 年からは、糖質制限食が糖尿病患者の注目を集めている。

米国では、2013 年 10 月の米国糖尿病学会（ADA）は、「全ての糖尿病患者に適した唯一無二の食事パターンは存在しない」との見解を表明した。糖質制限食も選択肢の 1 つとして、認められている。スウェーデンでは、2008 年 1 月に、糖尿病や肥満の治療に関して、糖質制限食を社会保険庁が公式に認めた。また、英国糖尿病学会は 2011 年、食事療法ガイドラインの改定に当たり、糖質制限食を選択肢の1つとして認める旨を医学雑誌に記載した。

なお、糖質制限食を適用できない例 [10]は、1．肝硬変、活動性膵炎、長鎖脂肪酸代謝異常症のある人は適用外、2．腎不全は個別相談が必要、3．インスリン注射や経口血糖降下剤の内服を行っている人は必ず医師の指導の下で実施などである。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

私の糖尿病治療研究

私は5年前(2013年)に糖尿病を発症した。私の糖尿病は、遺伝的要素が大きいと考える。祖父は糖尿病で亡くなり、父も糖尿病患者であった。父方の親戚にも糖尿病の人が数多くいる。私は、36 歳(体重 67.5kg　BMI 21.5)の時の 50g ブドウ糖負荷試験では異常はなかったが、40 歳(体重 76.0kg　BMI 24.2)での同試験では、異常が出て、境界型糖尿病と診断された。そこで、毎朝歩くようにして運動していたら、ヘモグロビン A1c(HbA1c)の値は、正常値の上限付近で、安定した。この状態を定年退職(2013 年 3 月)まで維持した。ところが、退職後、通勤が無くなり、歩いて大学まで行かなくなり、運動不足になり、加えて教科書を書いたりして寝不足をしていたら、とうとう糖尿病になってしまった(表 1)。

そこで、2016 年 10 月から糖質制限食の実験を始めた。実験動物が自分であるから、幸いにして無料で研究できる。その結果、HbA1c の値は、順調に低下し、6.3 付近で止まった。そこで、運動を強化したところ、6.1 まで低下して、その値を維持している（表 1)。

糖質制限と運動の併用は効果が高いことを確認した。糖質制限は食後高血糖を抑え、運動はインスリン抵抗性を抑えた結果と思われる。

6.2 以下を正常値と呼ぶなら、私の糖尿病は、目標値に達して、治ったと言うことになる。

表 1　私の糖質制限効果

糖質制限	HbA1c	空腹時血糖値	血中中性脂肪	HDL-C	LDL-C	クレアチニン	尿酸	備考(検査日)
なし	7.2	147	115	56.0	122.5	0.72	6.2	2015年3月
なし	7.0	143	91	58.5	122.4	0.73	6.0	2015年12月
開始1ヶ月後	6.5	141	93	58.1	100.9	0.65	5.3	2016年11月
開始9ヶ月後	6.3	128	58	54.3	104.6	0.82	6.1	2017年7月
開始1年7ヶ月後	6.3	128	56	58.5	97.3	0.82	5.6	2018年5月
運動強化1ヶ月後	6.1	126	90	58.8	113.2	0.82	6.1	2018年8月
開始ほぼ2年後	6.1	129	65	59.5	105.5	0.87	6.7	2018年10月

基準値と目標値：HbA1c　(基準値、5.5%以下）(目標値、6.2%以下)、空腹時血糖値　(基準値、99mg/dl 以下）（目標値、109mg/dl 以下)、血中中性脂肪　(基準値、149mg/dl 以下)、HDL-C　（基準値 40.0～70)、LDL-C　(基準値 70.0～139.9)、クレアチニン　(基準値、男：0.60～1.10)、尿酸　(基準値、男：3.0～7.0)

糖質制限食事療法のリスク記事について

糖質制限食の危険性をあおる記事が週刊誌に時々掲載される。2018 年 4 月 5 日の週刊新潮に「糖質制限で老ける寿命が縮まる」と 4 月 12 日には「糖質制限」「がん」「認知症」リスクという記事が載った。そこで、その記事を検証した。

マウス実験で、糖質制限したマウスでは老化が早まったとの東北大学大学院農学研究科のグループでの実験結果がある。記事から判断すると普通のマウスで実験しているようである。これでは糖質制限の効果が分からない。なぜならマウスは、自分でビタミン C を合成できるため、マウスの餌にはビタミン C が入っていない。ビタミン C はグルコースを原料として体内で合成される。ところが、糖質制限食のマウスでは原料不足で十分にビタミン C を合成できず、ビタミン C の不足が起こったと推測される。

ヒトと同様に、ビタミン C を合成できないようにしたノックアウトマウスにビタミン C 不足の餌を与えて飼育すると急速に老化して死んでしまう。これは、ヒトがビタミン C 不

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

足の食事をしていると陥る老化現象を示している。したがって、人の場合にも、ビタミン C の大量摂取による老化防止が期待されている。記事の内容は、単にビタミン C 欠乏で老化現象が起こったマウスを糖質制限の結果と誤認したとものと考えられる。上記ノックアウトマウスをつかい、ビタミン C を十分に与えて糖質制限食を与えれば、ヒトの糖質制限食と同じ条件となり、糖質制限食の真の結果が得られると思われる。

さらに、記事の中では、医者が糖質制限で老化して、脳梗塞の一歩手前まで行ったという体験談が記載されているが、要するに糖質制限を過信して、栄養素を十分に摂っていなかったのが原因と考えられる。栄養不足になると体は老化して病気になり死亡する。糖質制限は、血糖値の上昇を抑えるには有効な方法であるので、たんぱく質や脂質、ビタミンや食物繊維を十分にとって、微量栄養素を不足させないようにする必要がある。食物繊維は、腸内細菌の餌として重要で、腸内細菌は、免疫機構やビタミンの合成に関与しているので大切にしなければならない。

食後高血糖（血糖値スパイク）の危険性について

HbA1C が正常でも、血糖値スパイクがあると、活性酸素がでて、血管を痛める。その結果、動脈硬化を引き起こす。血糖値の乱高下が原因である。糖尿病で少し正常値より高血糖でも、血糖値が変動しなければ、活性酸素は発生しないとのことである。また、以前から動脈硬化は、LDL-コレステロール値が高いと起こると言われていたが、実は酸化されたコレステロールが原因であった。酸化されたコレステロールはマクロファージが異物と見なし、食べて血管壁の中で死んでしまい、粥状動脈硬化を起こす。

そこで、コレステロールを酸化させないためには、血液中に十分な抗酸化物質を供給すると良い。その目的のために、最も安価で、安全な抗酸化物質は、ビタミン C である。お茶のカテキンもよい。

免疫の暴走とその予防法

免疫機構が暴走することで、炎症を起こし血管や組織がダメージを受ける。これが生活習慣病の原因である。そこで、この暴走を起こさないようにする方法が望まれる。生物進化から考えると、ヒトは昼行性動物である。そこで、早寝・早起きする事はストレスを低減する。また、ヒトは動物であるから、日常生活で、できるだけ体を動かすように心がけることが大切である。このことがストレスの発散となる。全てを忘れて意識を集中できる趣味を持つこともストレスの解消になる。また、腸には免疫細胞が集まっている。その細胞と共存する腸内細菌をうまく活用することが、免疫機構の暴走を起こさないために重要である。

量子化学者に必要な健康法とは？

化学者には実験化学者と理論化学者がいる。どちらも、健康維持についてはそれぞれの問題点を抱えている。

実験化学者は、実験で体を動かすが、溶媒などの危険な薬品に接することが多く、こちらの方で健康を害する危険性がある。私の尊敬する故丸山和博京大名誉教授(理学部有機化学)は、骨髄がんで逝去されたが、若い頃ベンゼンをよく使われていて、「自分のがんはベンゼンが原因の職業病だ」と奥様にいわれたそうである。

一方、量子化学者は理論化学者で、頭脳とコンピュータを活用して研究を進めるので、体を使うことが少なく、運動不足になりやすい傾向にある。そこで、積極的に運動する必要がある。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

健康法とは 「最高の医者は自分自身」と心得て、理論を学び、実践することである。これが、表題の「セルフ・ヘルスケアのすすめ」である。

おわりに

老化の原因と結果および防止法を以下にまとめる。

老化の原因

1．酸化

血管の老化、細胞膜の老化、テロメアの短縮をもたらす。

その防止法は、①たばこは吸わない、②ストレスを解消する（ストレスは、活性酸素を生み出す)、③抗酸化物質を摂る　カテキン、ビタミン C、E、カロテノイドなど。現在は、水素水なども候補に挙がっている。

2．糖化（アミノカルボニル反応、AGEs、RAGE）

防止法は、①食後高血糖を抑える、②糖尿病を抑える、③肥満を避ける。

3．炎症（免疫の暴走）

防止法は、①n－3 系（ω3 系）の油を摂取する。アマニ油、シソ油、魚油（DHA、IPA（EPA))、(この系列の脂肪酸から作られるホルモン、プロスタグランジンは炎症を抑える)、②ビタミン C を摂取する、③生活のリズムを守る（昼間活動、夜間睡眠）

老化の結果

サルコペニア、骨粗しょう症、認知症などが起きる。寝たきりになっては健康寿命を保てない。

防止法は、適度な運動をして、栄養（たんぱく質(十分に摂る)、脂質、糖質(摂りすぎない)、ビタミン(特にビタミン C)とミネラルを摂る。そして、良質の睡眠を取る。

糖尿病と喫煙はそれぞれ健康寿命を縮める(15 年という説がある)。ともに体の酸化を促進する。

認知症の予防法　（細矢治夫　お茶の水女子大学名誉教授の実践例）

①好奇心を持つ、②戦う（討論する)、③上からの目線で人を見ない（我以外皆師－吉川英治）

主要参考文献

1) 村田 晃著『ライナス・ポーリングの八十三年』共立出版(1984)
2) 水上 治著『希望の新･抗がん剤！超高濃度ビタミン C 点滴療法』PHP 研究所（2008）
3) 石神昭人著『ビタミン C の事典』東京堂出版(2011)
4) 村田 晃著『新ビタミン C と健康　21 世紀のヘルスケア』共立出版(1999)
5) 三石 巌著『脳細胞は甦る　分子栄養学が明かす活性化の原理』クレスト選書(1995)
6) 若原正己著『ヒトはなぜ病み、老いるのか　寿命の生物学』新日本出版社(2017)
7) Newton ムック『人体を支配するしくみ　起源･遺伝子からナノテク医療まで』ニュートンプレス（2006）
8) ユヴァル・ノア・ハラリ著　柴田裕之訳『サピエンス全史　文明の構造と人類の幸福』河出書房新社(2016)
9) 春日雅人監修 綿田裕孝､松本道宏編集『糖尿病の分子標的と治療薬事典』羊土社(2013)
10) 江部康二著『江部先生、「糖質制限は危ない」って本当ですか？』洋泉社(2015)
11) 中西浩一郎:「1 世紀をつらぬいた大化学者 Hildebrand　知的冒険なおおとろえず！」化学 37 巻 7 号(1982)

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

二十年を経て

安田 耕二
名古屋大学 未来材料・システム研究所 情報学研究科 准教授

安田 耕二 先生

大学を卒業してから四半世紀、中辻研を去ってから 20 年強を経た今、自分の狭い視野と経験を通して、過去を振り返る機会が与えられた。この非常に主観的な文章が、何かしら皆さんのお役に立てば、共感が得られたら嬉しく思う。

理論化学の進歩を喜ぶ

まずこの 20 年の量子化学の変化を見ると、電子状態を計算できる自信が深まり、化学者が想像していた分子の振る舞いを簡単に確かめる事ができるようになった。パソコンなど情報技術の進歩や色々なソフトウェアの開発で、その気があれば誰でも分子軌道を見られる。量子化学と固体物理の垣根も随分下がり、金属や半導体の計算もできる。私が学生だった頃は中辻研の何百万円の UNIX ワークステーションを共用して SCF 計算をしたが、まさに別世界だ。リニアスケーリング法、フラグメント分子軌道法、分割統治法など、大きな分子用の特殊計算法が開発され使われるようになった。溶媒効果、相対論、非断熱遷移など小さくても独特な効果が正確に扱えるようになった。伝統的な基底関数展開を超えた、シュレーディンガー方程式の厳密解に迫る計算も、中辻先生を始め有望な結果が得られている。密度行列繰り込み群で一次元強相関系や難しい分子電子状態を何とか手なずけたし、動的平均場法で高次元強相関が理解できるようになった。量子化学理論の主骨格は 1970 年迄に完成していたが、それらが本当に使えるようになった。

このように、理論、アルゴリズム、計算機の進歩により「量子力学に基づいて化学現象を解明する」という量子化学の目的に着実に近づくと同時に、量子化学は自然科学から工学に近づきつつある。皮肉な事に、化学の諸現象に適用できる一般法を探す量子化学者の努力は、狭い意味での量子化学者の仕事を奪っていく。最先端の計算手順は、実験家も実行できるよう簡略化され、最先端の理論やプログラムも、数年後には有料、無料のプログラムに搭載されているかもしれない。しかし、量子化学者が研究に参加しなくても量子化学の目的が達成できる事、自分を言わば「不要」にする事は、正しい進歩だと思う。そして我々は安逸を捨てて新しい課題に挑戦しよう。

イノベーション

先日テレビで安倍首相が「大学や企業の研究者を競わせて、日本を引っ張る新しい技術を開発します」と演説しているのを聞いた。競わせる？　自分達は競っていたのか？　競わせるとひらめくのか？　首相の言葉と私の見方はかなり違い戸惑った。目の前に未知の現象や解決したい課題があり、その言わば巨岩の中心に隠された真実を、色々な人達が各自工夫したやり方で、少しずつ削り取って迫っていく。課題が難しすぎ、目的地が遥か彼方の場合は、その途上にあるぎりぎり解決可能な課題を見つけ、それと苦闘する。研究のあり方はそんなものだったと思う。もちろん競争相手がいた事に後で気づくかもしれないが。しかし、

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

経済に貢献したり国富を増やすイノベーションに貢献する事が、今日の研究には求められる。国や大学が次第に貧乏になるので、残念だがやむを得ないのかもしれない。

私も 2014-15 年に太陽電池関係のテーマで補助金を頂き、1 名のポスドクと研究をした。太陽電池は、Si や化合物半導体、有機半導体、色素増感半導体と区別できる。二年間に限られていたので量子化学で取り組み易い色素増感型を扱った。これはスイスの Grätzel らが 20 年以上前に発明したもので、紫外線しか吸収しないバンドギャップが広い半導体表面に、可視光を吸収する色素分子を吸着して、光励起電子を半導体の空バンドに電子移動させるものだ。今日までに沢山の実験結果が報告されており、例えば Grätzel の最初の論文は一万回以上引用され、電子状態の計算結果も 600 件以上報告されている。Si や化合物半導体は光エネルギー変換効率は 25%以上だが作るのが難しい。色素増感太陽電池は簡単に作れるが、効率は 15%に届かず進歩は足踏みしていた。

分子の励起状態が固体表面の連続バンドに埋もれた場合、電子状態理論をどう適用したら良いか、に私は興味があったので、色素増感太陽電池を題材として研究をした。不安定原子核や高エネルギー分子励起状態の理論に昔から使われていた、共鳴状態波動関数として計算でき、この目的は達したと思う。これは波動関数の境界条件を無限遠でゼロではなく発散波にするというアイデアに基づく。数学に注意が要るが基礎的な枠組みなので、応用範囲は広くまだ変奏曲が幾つか出せるだろう。藪下先生や諸先輩方の理論を進めたという嬉しさもある。しかし太陽電池の改良には余り貢献していないのも事実だ。産業イノベーション用の資金を基礎化学に使ったと非難されるかもしれない。

2012 年頃の最盛期にはシャープを始め国内企業でも研究が行われ、その様子は新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の 100 件以上の成果報告書から窺い知る事ができる。しかしその後研究者は、頑張っても進歩の気配がない色素増感太陽電池をあきらめ、2013 年彗星のように現れた、効率 20%超のペロブスカイト太陽電池の研究に移っていった。600 件以上の増感色素の電子状態計算の大半が、溶媒中での色素分子の HOMO、LUMO や光学吸収の計算で、理論に特徴は無い。例えば De Angelis らは商用ソフトを使って色素計算を多数出版したが、10 年後には歴史価値だけかもしれない。計算構造の絵しか示さず追試不可能の物や、構造最適化を追試するとより安定な構造が見つかったりと、酷い論文もある。幸いなことに、分子と固体の電子移動の動力学理論に興味を持ち、色素増感太陽電池を題材とした研究は幾つかあり、これは今後も価値を保つし参考にされると思う。現在では、イノベーションを起こすために特定テーマに研究費が集中投下されており、研究費が私の何十倍という金持ち理論研究室を見かける。画期的発見があり理論がそれに貢献できるかもしれないし、新規アイデアが視界外から突如現れ研究費は無駄になるかもしれない。色素増感太陽電池の様子を振り返ると、人海戦術で既存理論を適用する研究は、失敗時に無価値となるから、新理論も同時に開発して欲しいと思う。

機械学習

機械学習が大流行である。機械学習のプログラムを扱うのは、多分 Gaussian や GAMESS で電子状態計算するのと同じ位簡単だ。また機械学習に適したデータを解析するのは、Gaussian での構造最適化や、分子軌道や励起状態の計算位に簡単だ。機械学習のプログラムは無料で、図書館に教科書が、web 上に情報があるので、試してみたら神秘のベールが剥がれて良いと思う。私は anaconda という python 言語パッケージで、色々な機械学習

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

を試したが、これらを使うのは難しくない。それは「EXCEL でグラフを作り近似直線を引く」ことの延長線上にあるので、むしろ「どんなデータをどのように解析し何を見出すか」アイデアが要る。Web 上にある sample を参考にデータ解析ができる能力は、数年後には陳腐化しているだろう。使う際には、ニューラルネットが学習データを丸暗記してしまう「過学習」や、知りたい目的量を多数の特徴量で説明する時、無意味な関係を発見する「偶然相関」に、特に注意が必要だ。

今回の機械学習のブームは、web 上に画像、テキスト、リンクデータが蓄積された中、畳み込みニューラルネットワーク（CNN）による画像分類が 2011 年に見直されたことが発端だ。人間は、犬や猫の画像を正確には定義できないが、それらを正確に分類できる。しかし定義が不明だから分類プログラムは作れなかった。CNN は、入力画像から小さな特定パターンを検出する一層目フィルタ、その特定パターンの大局的配置を検出する二層目フィルタ、など多層（深層）で構成され、最後は画像分類信号を出力する。人間の画像分類を再現するようにフィルタを最適化つまり「学習」すると、初見の画像も分類でき、途中のフィルタには画像中に犬がいる確率マップが見えたりする。こうして画像の内容を数値化できるようになった。安価になった計算機で、分子構造からエネルギーなどのデータを大量に作れる現代では、このデータを機械学習させるのは成り行きである。しかし機械学習で構造から物理量を予測する事自体は、我々がその手順を知っており別プログラムで可能だという意味で、画像分類ほど不可欠ではない。ただ何のデータを画素と見るかは少々面白い課題だと思う。

情報学者は柔軟で万能な機械学習法を見つけたいと思う。他方私は、問題の背景知識を組み込んだ学習器に興味がある。人だろうと学習器だろうと化学を教える相手には量子化学を知っていて欲しいからだ。柔軟な学習器に化学の知識を教えると、この世界の構造とは無関係に、知識中のパターンを見つけると思うが、量子化学しか理解できない奴は、丸暗記できず苦労しながらも、化学をより正しく理解するかもしれない。ところで文章は文法に従って書かれているが、文章の機械学習では文法は重要でないという意見がある。単語に分けさえすれば、多数の文章中での単語の出現パターンから、その意味を表す高次元ベクトルを学習できるからだ。とすると例えば沢山の化学反応を学習させると、量子化学という背景知識が無くても、分子や官能基の性質を表すベクトル中に、HOMO/LUMO などが見えてくるかもしれない。

数学のみに根拠を置く機械学習法は、量子力学の謎ルールがなくパズルとして勉強できる。この分野では日々新しい研究が公開されており、新しい研究結果を得るのは簡単ではない。研究論文は、商業誌に投稿されたりもするが、多くが ArXiv などに投稿される。そのため web of Science 検索で見つからない論文が多数あるし、自分の研究が本当に新しいか確かめるのも一苦労だ。ベンチャー企業もニューラルネットに興味があるので、似た研究が多数報告され続けている。画像の機械学習の研究は成熟し、今始めても遅いだろう。最近では敵対的生成ネットワーク（GAN）でプログラムが作った絵画や動画が話題になっている。多数の自画像を学習した GAN が描いた自画像が、高額で落札されたと先日のニュースで聞いた。別の話題として、画像以外の構造化データ（グラフ等）の機械学習に興味が移り、グラフを入力して数値を出力する方法が提案された。そのライブラリーは Chainer Chemistry 等で手に入るが、これを使うと構造式からエネルギー等を学習・予想できる訳

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

だ。さて、私達は数年前から逆問題つまり性質から構造を作る事に興味を持っていた。量子化学者が昔から取り組んできた分子設計を機械学習させたいのだ。先日学会でやっと発表でき、修士二年の学生も卒業できそうでホッとしたし、しばらく楽しめそうだ。

超並列計算機と量子化学

十年ほど前にグラフィックスボード（GPU）というゲーム機の画像描画装置を使って、電子状態を計算する研究をした。当時計算機（CPU）の高速化が難しくなっており、コアつまり小型 CPU を多数集積して、一桁以上高速な計算機を作る提案があった。一般消費者用の最も安価なものが GPU だった。例えるなら、数人の賢いポスドクではなく、簡単な事しかできない 1000 人の小学生に、難しい作業をさせるようなものだ。補助金も無く数年間一人で大変苦労し、何とか目的を達成し、学会発表と論文出版を幾つかした。GPU による科学技術計算はその後海外では主流となり、スーパーコンピューターに備えられるようになった。しかし日本政府は、京やポスト京スパコンの主力に富士通製国産 CPU を使う事に決めた。この種の研究は経済や国策に左右され易い。その後 GPU は順調に発展し、分子動力学シミュレーションでは一般に使われている。

GPU の研究分野には不公平な比較で自分の結果を盛る、残念な習慣がある。GPU は同世代同価格の CPU の 10 倍しか速くないのに、論文には「何百倍も速くなりました」と書いてある。そのタネは、ベクトル化していないダメなプログラムを、古い CPU の 1 core 上で走らせた、超遅い計算と比較しているからだ。Gaussian や GAMESS など幾つかの電子状態計算プログラムは GPU も使えるが速くない。GPU 中の各コアは（世代により違うが）30 変数程度しか扱えず、CPU プログラムを移植してもだめなのだ。実は Gaussian や GAMESS は（石村さん達の努力にも関わらず）CPU の一割の能力しか使っていないので、どちらも改良の余地は大きい。だが二電子積分の仕事は論文数が出ないので、この意味ある仕事を若者に勧められないのが残念だ。量子化学では GPU はただの行列積計算機、つまり BLAS や INTEL MKL というライブラリの代用、となってしまうかもしれない。最新 GPU は一台百万円の高級品と十万円の一般庶民用に分かれた。ブルジョア用高級品はメモリーと倍精度計算が速い。庶民向けのものは、機械学習で必要な低精度の行列積演算が強化された。「誰でも量子化学を高速に」という私の宿題は完遂していないのだが、ここに発展の余地があるかもしれない。

社会に何を残すか

私は人間情報学研究科→情報科学研究科→情報学研究科、エコトピア科学研究所→未来材料・システム研究所に所属している（た）。情報や環境や材料の工学的嗜好を持った、量子論が分かるのが数人という集団だ。50 歳に近づくにつれ、学問や社会に自分がどんな貢献ができるか、しばしば考えるようになった。研究は（一応）任期無しポストに就く者として、重要で見通しが不明な、つまり高リスクのをやろうと思っている。少なくとも私は、理論の美しさや目的の遠大さを、社会への貢献度や論文の被引用度より高く評価するように心がけ、挑戦する若者を励ましたいと思う。例えば B3LYP や DFT-D3 は使うかもしれないが、どうでもいいかなと思う。Nature や Physical Review Letters というブランドも一歩引いて眺めようと思う。遺産を相続したのではなく自ら開拓した若者を尊敬する。また研究テーマは学生の就職に影響するので、情報学研究科の学生に相応しいものを作る責任もあり、ここが化学系の研究室より難しい点だ。ここの学生から見ると我々は「変な先生」なのだ。

QCRI ©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

自分の無能さをさらけ出すようだが、年間で論文を二報書くのは難しい。論文は最終目的地の途上にある一里塚を発見する報告であるべきだが、研究計画、実行、発表を各二か月で終わらせねば、一年で二報は書けない。新テーマの研究計画と下調べに二か月かかる。データチェックしつつ英文を書いて推敲すると、やはり二か月かかる。この状態では科研費などを獲得するのは不可能だろう。元審査委員に聞くと、100 通の申請書類を一週間で見るため、10 分で書類を読み、10 分で web 検索し、10 分で審査意見を作文し、上位 15%がパスするらしい。業績リストの論文は当然読んで貰えないので、研究内容が分かり易く書かれ検索にヒットする web ページを作ったり、同じ研究内容を色々な学会で何回も発表して、審査委員に予め理解してもらう事が、今更必要だと分かった。「速報性が重要だ」から同じ研究結果を letter と full paper に分けたり、一連のまとまった研究を分割発表したり、他人のお手伝いをしたりしなければ、論文数は増やせそうにない。年間一報しか論文が書けない状態では、立派な研究計画を立てても実現性がないと判断されるだろうと思い、この話を聞いてから科研費に申請するのをやめた。私の所属している未来材料・システム研究所では 7 年毎に執行部に発表をして人事審査を受ける。嫌な予感がするがやむを得ない。

改めて振り返ってみると、社会への影響という点で、中辻先生や諸先輩方、後輩諸君に遥かに及ばない気がする。そんな訳で胸を張ってお会いできずにいる。

名古屋大学に赴任してから十年強、全学の大学一年生に化学実験を教えた。また医学部一年生に、熱力学、量子力学、物理化学の核心を 14 回の授業で、八年に渡り教えた。将来医者になる彼らの仕事には、この種の知識の過半は役に立たないだろう。他方、名古屋大学で最も賢い学部である彼らが、前世紀に発見された世界の基本法則について、全く無知で良いとは思わない。自分が大学一回生の頃の物理化学の授業を振り返ると、メイアンの「大学の化学」を使ったことしか覚えていない。自分が熱意を持って出席したのは、後期木二限の林先生の電磁気学だけで、残りは名著を勉強して済ました。こういう訳で、彼らが教養に興味を持ってくれたか、林先生のレベルに達したか心配だ。授業に関しては私は損な役が多く、工夫してきた物理化学の授業も今期で交代し、来年からは同僚が辞退した、文系一年生諸君に化学を教えることになった。

学部や大学院の授業では、私の努力は空回りで時間を使いすぎた。まず二年前まで学部担当でなかった。次に我々の専攻では、多体量子論や第二量子化を大学院で講義する事は実質不可能だ。また（数学の）群の表現論や微分方程式への応用の講義では、良くてマンツーマン指導の状態で、理論化学の長岡研からも受講者がいない状態だ。非ゼロのプランク定数を必要とする同僚が、同じ建物に五人しかいないから、私が学生の頃好きだった事柄を教えられないのは、やむを得ないのかもしれない。幸い化学情報学の講義は、有機の先生の強力な指導により、四名程度の受講生がいる。少しでも彼らに役立つ事を願っている。

学生やポスドクは社会から託されている

博士課程の学生どころか修士課程や四年生すら殆ど来ない状態で、二十年間研究をしてしみじみ感じるのは、学生の大切さだ。四年生や修士課程の学生にとって卒業研究とは、就職までの通過儀式に過ぎないかもしれない。しかし短い期間でも研究の一翼を共に担う仲間がいる事は（たとえ足手まといでも）大きな励みになる。研究を通じて彼らが学んだ知識は、今後直接役立つ事は無いかもしれないが、私達は彼らを通して、社会に対する貢献というか何某かの影響を与えることができる。だから、多くの学生がいる有名大学の理、工学部

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

の研究室は、特別重要な義務を負っているのだ。理論化学分野に配分される総研究費や入ってくる総学生数は、社会的条件のため極端に増減しない。つまり未知との境界線を前進させる戦いでは、多くの「資源」が主戦力であるこれら研究室に投下される。教授などの Principal Investigator (PI)は作戦立案者であり、共に戦う大学院生やポスドクに、永続的価値のある追及に値するテーマを示すという、極めて大きな責任がある。これもまた自分の無能さの裏返しかもしれないが、永続的価値があり適切な難易度のテーマを、毎年二個以上考えるのは、私には難しい。これでいけると思ったアイデアも十中八九は失敗する。そして失敗した原因を当たり前に思えるまで考える。 すると研究とは自分の浅はかさを再確認する行為ではないか、と思えてくる。こんな経験から十人近い学生やポスドクを一人で指導している PI を、私はある種疑いの目で見ている。 それは本当に一里塚となるテーマなのか？　いやお前ももっと働けと言われそうだからこの辺りにしたい。いずれにせよ、若者が私達より長生きするのは確かだ。

　東大路通を往復していた日々は遠くなり、有名な科学者を身近に感じ、その理論に感心していた青年は、写真のような立派なおじさんになってしまった。しかし純粋な心を忘れず生きていきたいと思う。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

― ご報告 ―

「第 12 回 革新的量子化学シンポジウム～量子的自然の叡智と美～」

開催日時: 2018 年 4 月 21 日 (土) 13:00～16:40
場所: 京都テルサ (京都駅南)、第 2 会議室 (西館 3 階)

毎年恒例の「第 12 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、2018 年 4 月 21 日 (土)に、以下のプログラムで開催されました。

プログラム

13:05 挨拶・司会 中辻 博

13:05 – 13:45 奥村 光隆 (大阪大学)
「金ナノクラスター触媒に関する理論計算：
ヘテロ接合界面が開く触媒機能」

13:45 – 14:25 Nurbosyn U. Zhanpeisov (東北大学)
「Structure and Chemical Activity of Selected Metal Oxide Catalysts, Metal-Organic Frameworks and Gold Structures: Theoretical DFT Study」

14:25 – 15:20 休憩

司会 長谷川 淳也

15:20 – 16:00 Jen-Shiang Kenny Yu (國立交通大学 (台湾))
「Theoretical Study on the Reversible Cleavage/Formation of the Cr–Cr Quintuple Bond in the Highly Regioselective Alkyne Cyclotrimerization」

16:00 – 16:40 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)
「General Electronic Structure Theory Covering Exact and Variational Solutions of the Schrödinger Equation」

懇親会

場所: 京都テルサ内、カフェ ラウンジ リン「Cafe Lounge 凛」

講演して頂いた先生方

奥村 光隆 先生

Nurbosyn U. Zhanpeisov 先生

Jen-Shiang Kenny Yu 先生

中辻 博 先生

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

シンポジウムの様子

休憩時間の参加者同士の交流

廣田先生の ご挨拶　尾崎先生による 乾杯のご発声　江藤先生の 締めのご挨拶

懇親会の様子

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

― 次回シンポジウムの予定 ―

「第 13 回 革新的量子化学シンポジウム～量子的自然の叡智と美～」

開催日時: 2019 年 5 月頃 (予定)

場所: キャンパスプラザ京都 または 京都テルサ (京都駅近く)

「革新的量子化学シンポジウム」は、例年 4 月末～5 月初めの連休を外した時期に京都駅近くのキャンパスプラザ京都または京都テルサにて開催しています。量子化学分野に限らず、色々な分野の先生方や企業の方をお招きしてご講演いただき、皆様にご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。休憩時間や夕刻の懇親会では、講師の先生と参加者の皆様が互いにざっくばらんな交流が持てるよう、計画しています。

次回のシンポジウムも例年と同様に開催する予定です。是非、お誘い合わせの上ご参加ください。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

― ご報告 ―

「第 7 回 JCS 理論化学シンポジウム」
7th JCS (Japan-Czech-Slovak) Symposium on Theoretical Chemistry

2018 年 5 月 21 日～5 月 24 日
IOCB (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry), プラハ, チェコ共和国

Web ページ: http://jcs2018.cz/

第 7 回 JCS 理論化学シンポジウムが 2018 年 5 月 21 日 (月) -24 日 (木)に、チェコのプラハの IOCB (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry) にて開催されました。このシンポジウムは、チェコの理論化学者 R. Zahradnik 教授、Z. Havlas 教授、日本の中辻が、相互の尊敬と友情を基礎に始めたもので、「Friendship is our principle, Science will follow with us.」という理念のもと、学術的なレベルの高さと、研究者同士の温かい研究交流を育むことを最も重視しています。第 1 回(2005)は日本とチェコの 2 国間で、第 2 回からスロバキアも参加して、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) 、奈良 (2013) 、ブラティスラヴァ近郊 (Smolenice Castle)(2015)、そしてプラハ(2018) にて開催されました。

Lectures

今回の第 7 回 JCS では、これまでの JCS シンポジウムの伝統を保持した上で、JCS 以外の国(スイス,ハンガリー,ドイツ,ポーランド)からも 5 人の Plenary Lecture がありました。日本からは 46 名の方が参加され、日本(奈良)で開催した第 5 回を除けば、日本からの最多の参加者となりました。日程の都合上、日本からの口頭発表(Lecture)は 21 名に限られましたが、JCS で初めて口頭発表される方や若手も多く発表しました。シンポジウムは、Havlas 教授による Welcome Address によって始まり、Gernot Frenking 氏の招待講演、中辻、Josef Michl 氏の講演に続き、どの発表も世界トップレベルの Science で、質問も活発に行われました。120～130 名が収容できる会場はいつもほぼ満席で、講演時間内で議論できなかったことは、休憩時間や食事の時間でも活発に議論や交流が展開されていました。

シンポジウムの様子

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

G. Frenking 教授の招待講演

中辻 博 教授の講演

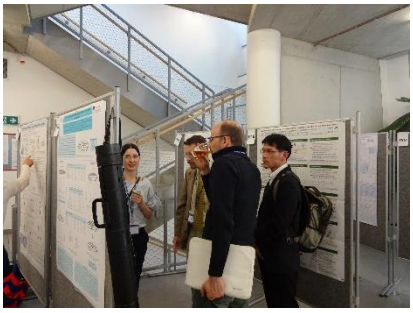
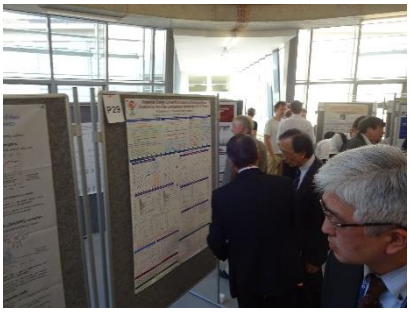
J. Michl 教授の講演

ポスターセッション & Welcome reception

ポスターセッションは、科学的つながりと温かい友情を育むことを目的とした JCS シンポジウムにおいて、最も重要なプログラムです。今回のチェコ側オーガナイザーからも、

The poster session will be "high-profile" part of the conference. It will be on Monday evening, connected with "welcome reception". I hope Monday will be a long evening full of scientific discussions.

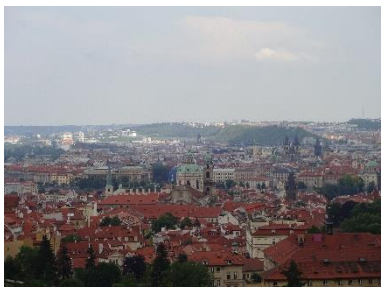
として予め伝えられていました。実際に、5/21(月)の夕刻から開始されたポスターセッションは、会場はほぼエンドレスに開放され、美味しいワインやスナックと共に、Lecture ではなかなかできない熱いディスカッションがあちこちで展開されていました。議論が白熱し、また互いに打ち解け合い、その後、さらにプラハの街に繰り出した人も多くいたはず！

ポスターセッションの様子、参加者同士の交流

エクスカーション

5/23(水)は午前中で Lecture が終了し、その日の午後は、バンケットの前にプラハの街の Excursion がありました。プラハは、中央ヨーロッパ有数の世界都市で、世界で最も美しい街に数えられ、旧市街地には古い町並みや建物が数多く現存しています。多くの観光客が訪れ、レストランやお土産屋さんも多数あります。Excursion では、高台からプラハの街を眺め、プラハ城を通り、カレル橋まで散策しました。


高台からのプラハの街の眺望

プラハ城内の教会

ジョン・レノンの壁

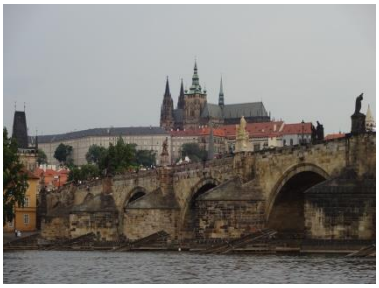
©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

途中には、フランツ・カフカゆかりの場所や、自由と希望の象徴として描かれたジョン・レノンの壁などがありました。Excursion の休憩は、”Coffee Break”ならぬ”Beer Break”で一服です！カレル橋からのプラハ城の眺めは大変美しく、また、カレル橋には、量子化学者として馴染み深い”AB INITIO”の文字が刻み込まれた像がありました。

“Coffee Break”ならぬ”Beer Break”を楽しむ。 →

カレル橋とプラハ城とその夜景 ↓

↑ “AB INITIO”と刻まれたカレル橋の像とそれを撮影する量子化学者



中辻 博 所長 チェコ共和国科学アカデミーより「De Scientia et Humanitate Optime Meritis (Honorary Medal)」受章

5/23(水)に、量子化学研究協会・研究所の中辻 博 所長が、チェコ共和国科学アカデミーより「De Scientia et Humanitate Optime Meritis (Honorary Medal)」を受章されました(詳細は、http://www.qcri.or.jp/参照)。このメダルは、チェコ共和国科学アカデミー最高のメダルであり、これまでの中辻所長の科学と Humanity に対する功績に対し授与されたものです。授章式は、チェコ共和国科学アカデミーの荘厳な建物で行われ、Zdeněk Havlas 教授により Laudatio が読み上げられ、チェコ共和国科学アカデミーPresident の Eva Zažímalová 博士よりメダルが授与されました。

Laudatio を読み上げる Havlas 教授(右)と、チェコ共和国科学アカデミー President の Zažímalová 博士(左)

中辻教授の受章後の祝賀会の様子

メダル(左(表),右(裏))と証書

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

バンケット

バンケットは、5/23(水)の夕刻より、カレル橋近くの綺麗なレストランで開催されました。バンケットの前に、Zažímalová 博士と Havlas 教授により、JCS 参加者に中辻所長のメダル受章について紹介され、皆が喜ばしい雰囲気に包まれました。

バンケット前のセレモニー

その後の食事は、着席ビュッフェ形式でチェコ料理の美味をワインと共に楽しみました。料理を楽しんだ後には、レストランの屋上にも上がることができ、少し強いお酒とお菓子と共に、夜風にあたりながらチェコの夜景を楽しみました。

バンケットの料理

バンケットの様子

チェコ料理

チェコと言えば、ビールが世界的に有名です。実際に、すっきりとした飲み口で、日本人の口にもあう飲みやすいものでした。日本からの参加者の皆さまも、思い思いにビールに合う様々なチェコ料理を楽しまれたかと思います。どれもボリューム満点で美味しいものばかりでした！

チェコのビール

チェコ料理

― 次回: 第 8 回 JCS 理論化学シンポジウム の予定 ―

次回の第 8 回 JCS 理論化学シンポジウムは、2020 年 5 月末頃に京都で開催する予定です。日本(奈良)で開催した第 5 回シンポジウムでは、200 名を超える参加者で、大盛況でした。次回も、若葉青葉のすがすがしい京都にて、さらに多くの皆さまにご参加頂けるよう、このシンポジウムの理念をさらに高め広める企画を盛り込んでいきたいと思います。また、京都らしい趣向も凝らして、全員の皆様にお楽しみいただけるよう、努力したいと存じます。是非皆様、ふるってご参加ください。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

認定 NPO 法人 量子化学研究協会への継続的なご寄付のお願い

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」に認定され、約 2 年が経過しました。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あり、社会に認められ社会に貢献する活動を継続するには、認定 NPO を今後も維持することが重要です。

認定 NPO 法人を維持するための条件の一つに、1 年間に 100 名以上の方からのご寄付(3,000 円以上)があること、という決まりがあります。そのため、前年ご寄付を賜りました皆様におかれましても、本年も少額でも継続的にご寄付を頂けますと大変ありがたく存じます。それが、私たちの活動が社会からサポートされている一つの証となります。

ご寄付頂きました御こころざしは、量子化学研究協会の活動を通じて、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。

認定 NPO 法人へ寄付をすると、その寄付額に対して寄付者は、所得税、相続税、法人税から、かなりの率の税の控除を受けることができます。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/や次のページをご覧ください。皆さまの、温かいサポートを、お願い致します。

お振込先： 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、定められた様式の領収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付人名をお書きください。この領収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
口座名称（漢字）： 特定非営利活動法人　量子化学研究協会
口座名称（カナ）： トクヒ）リョウシカガクケンキュウキョウカイ
(手数料につきましてはゆうちょ銀行ホームページをご覧ください。)
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
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
預金： 普通預金
口座番号： 1453553

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

認定 NPO 法人制度による税の優遇措置

(京都市ホームページより抜粋: https://www5.city.kyoto.jp/chiiki-npo/npo/nintei.php)

認定・特例認定ＮＰＯ法人に対する税制上の優遇措置の概要

1　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（特例認定ＮＰＯ法人にも適用される。）

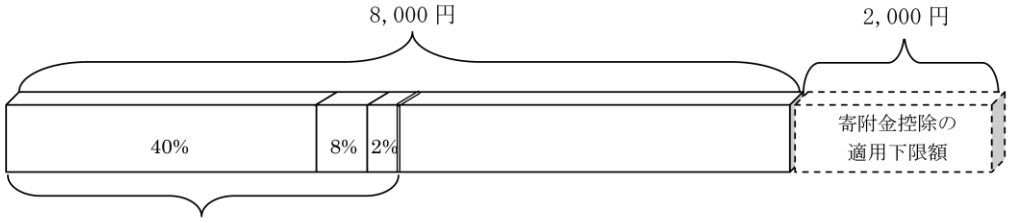
所　得　税	＜対象となる寄附金額は，所得金額の 40%相当額が限度＞ **所得控除と税額控除の選択制** **＊所得控除**：（寄附金額－2,000 円）を総所得金額等から控除 **＊税額控除**：（寄附金額－2,000 円）×40%（所得税額の 25%相当額が限度）を所得税額から控除
個人住民税	＜対象となる寄附金額は，総所得金額等の 30%相当額が限度＞ **＊税額控除**：（寄附金額－2,000 円）×10%（市民税 8%，府民税 2%※）を住民税額から控除

（※）　京都府と京都市がともに条例で当該認定・特例認定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・特例認定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・特例認定ＮＰＯ法人に対する寄附金を指定している場合）

（10,000 円－2，000 円）×40%＝3，200 円（→所得税から控除）
（10,000 円－2，000 円）× 8%＝　640 円（→市民税から控除）
（10,000 円－2，000 円）× 2%＝　160 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（特例認定ＮＰＯ法人にも適用される。）

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

（認定ＮＰＯ法人のみに適用される。）

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。）

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

「量子の世界」 ご寄稿のお願い

「量子の世界」は *quanta* の世界であり、量子論が対象とする電子、原子核、光子その他の粒子の織り成す世界のことです。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そうです。他方、「量子の世界」はそれを如何にうまく映し出そうかと日々悩んでいる人たちの活動の世界でもあります。これら広い意味での「量子の世界」を皆様の力で築き、長く発展し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、そして日々の生活、それらすべてを対象にしており、自由に発想されたことをお寄せください。次号第 9 号の発刊は 2019 年 4 月ごろになる予定です。よろしくお願いいたします。

「量子の世界」No.8, 2018 年 秋号

2018 年 11 月 16 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

©2018 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 (http://www.qcri.or.jp/)にてご覧になれます。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.