QCRI

量子の世界

No. 9
2019 年春号

－ 目次 －

	ページ
1．理論の先導する化学研究を目指して 吉澤 一成 (九州大学 先導物質化学研究所 教授)	1
2．量子化学は呪いを乗り越えられるか？ 重田 育照 (筑波大学 計算科学研究センター 教授)	8
3．「第 13 回 革新的量子化学シンポジウム」(4/20(土),京都テルサ) のご案内	
3.1. シンポジウム・プログラム	10
3.2. 懇親会のご案内	10
3.3. 講演のアブストラクト	11
4. 京都の桜: 鴨川公園の散策	15
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	19
6.「量子の世界」へご寄稿のお願い	21

理論の先導する化学研究を目指して

吉澤 一成
九州大学 先導物質化学研究所 教授

はじめに

今回、中辻先生の主宰する「量子の世界」への寄稿依頼を受けて、たいへん嬉しく感じている。喜んでお引き受けしたものの、原稿が少し遅れて先生にはご迷惑をおかけしている。ここでは学生時代から今に至る時間を少しふり返ってみようと思う。

私の卒業した京大石油化学科では、４回生になると研究室配属があった。理論研究をしたいと思っていたので、福井研にしようか、新進気鋭の中辻先生の理論グループのある米澤

吉澤 一成 先生

QCRI ©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

研にしようかと迷った。福井研では当時助教授であった山邊先生に導電性高分子ポリアセチレンを見せて頂き、その光り輝く有機物の薄膜に感激した。中辻先生のお部屋に伺うと、残念ながら先生はちょうどお留守で大学院生から研究内容の説明を受けた。あの時、中辻先生が部屋にいらっしゃったら、米澤研に進んでいたかもしれないと思うのである。

理論と実験

いろいろ考えて福井研に入ったのだが、とくに人気があったという記憶はなく、配属はすんなり定員どおりに決まった。私は学生実験も好きで未知試料の分析で良い点を取ったので、理論と実験の両方を学べる山邊グループに入れて頂いた。福井先生は研究室に理論部門と実験部門の両方を設け、学生に「理論をやるなら実験をやれ」と指導していたようである[1)]。当時、そのようなことは知る由もないことであった。理論グループでは、博士、修士、４回生で藤永茂著「分子軌道法」を一年間かけて輪読した。自分の番では、引用文献まで丁寧に調べて発表した。ごちゃごちゃしているなとは思ったが、難しいとは思わなかった。

研究室に配属された 1981 年当時、山邊先生と東工大から筑波に移られた白川先生は共同研究を行っていた。ポリアセチレンは最も単純なπ共役系高分子で、バンドギャップがあるのかないのか、どの程度の電気伝導度があるのかなど、理論的にも興味の尽きない物質である。その電子物性はπ電子近似で古くから理論的に研究されていた。ポリアセチレンはいわゆるチーグラー・ナッタ触媒（$Ti(OBu)_4 + Al(Et)_3$）で合成する。この触媒は空気中で火を吹いてたいへん危険であるため、実験中にはとても緊張した。ドライアイス/メタノールの-78℃の低温で重合溶媒として使うトルエンは、ナトリウムで完全に脱水されなければならない。これも危ない実験である。先輩の赤木さん（京大名誉）、松井さん（現パナソニック）、大関さん（現名大）に厳しく指導されて実験を行った。ベンゼンは 5 ℃で凍るのに、トルエンは-95 ℃まで凍らない。これはたいへん不思議である。

４回生の秋に田中一義先生が留学先から戻られて、ポリアセチレンの実験を行いつつ、バンド計算などを習った。卒論のテーマは、ポリアセチレンのドーピングによる *cis-trans* 異性化の研究であった。これは田中先生に英語論文にして頂き、私の最初の論文になった。

福井先生の受賞

1981 年 10 月 19 日の夜、福井先生にノーベル化学賞受賞の知らせが届いた。日本ではじめてのノーベル化学賞であった。その時はもう下宿に帰っていたが、隣の理学部生が「福井って理学部にはいないな」と言ったので、「あほ、自分の先生や！」と言ったことを覚えている。その後の研究室は大騒ぎになり、研究どころではなくなった。この年の忘年会の写真がある（図 1）。福井先生の周りの先生方は正座をしているのに、学生の上ノ山さん（現横浜国大）と長岡君（現名大）はあぐらをかいている。

この中のほとんどのメンバーは後に研究者になっている。私たちは福井先生の最後の 4 回生である。同級生には浅井君（現産総研）、小出君（現神奈川大）、長岡君（現名大）、畑上君（現東京都市大）がいた。先生の受賞を間近で見た我々５人は、道はそれぞれ違っていても、博士号を取得して研究の道を歩むことになった。三つ子の魂百までというが、私たちにはノーベル賞のインパクトはたいへん大きかったのである。

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

図 1　1981 年、福井研の忘年会（天寅で）

ホフマン先生との出会い

図 2　1995 年、帰国時にホフマン先生から
コーネル大学ネクタイをいただく

修士課程を修了して、将来どうしようかと悩んだが企業に就職することにした。鉄鋼会社での開発研究の経験を経て、30 歳を前にして博士課程の学生として再び研究室に戻った。博士課程に進んだ同級生は既に博士号を取っていたので、これはまずいと思った。博士課程では導電性高分子や磁性分子などの π 共役系物質の物性研究を続けた。高スピン分子の一例として、芳香族アミン系分子のカチオンラジカルに注目し、ESR 実験や分子軌道計算を行った。この研究成果は JACS に掲載され [2)]、とても嬉しかった記憶がある。現在の有機 LED 分子に近い化合物であったが、当時はそのようなことに思いもよらなかった。C_{60} 分子の磁性の研究も行った。徹夜で実験して試料を作製し、翌朝岡崎の分子研に行き磁気測定を行ったこともある。

博士課程を修了して、学振の特別研究員として京大や福井先生が所長をされていた基礎化学研究所で研究を続けた。研究所の 10 周年記念講演会にコーネル大学のホフマン先生が

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

招かれ、しばらく京都に滞在された。私はブライトンホテルから研究所への送り迎えを担当した。ある日、山邊先生に教授室に呼ばれ、来年からコーネル大学に留学するようにとのアドバイスを受けた。急なことで驚いたが、とても嬉しかった。

ホフマン先生は天才であることに違いはないが、その努力もすさまじい。朝は 8 時頃に研究室にやってくる。お昼はサンドイッチか何かを学生に買いにやらせて教授室で食べる。夕方は 5 時に一旦帰宅して、夕食後の 8 時頃また研究室に戻ってくる。だいたい夜 12 時過ぎに帰宅する。私も先生より早くは帰れないと思いつつ粘った。土日も休まず研究室とアパートを往復した。コーネル大学では、分子磁性の軌道理論と金属酵素によるメタン活性化の研究を行った。

図 3　ロアルド・ホフマン、吉澤みか、きむらゆういち著「ざっそう」

ホフマン先生は芸術的センスにも溢れ、論文の図の描き方にもたいへんうるさかった。ChemDraw の軌道の図が気に入らなくて、綺麗に直さなければドラフターに手描きさせるとまで言い出されて困ったこともある。日本画家である家内をグループミーティングに招き、なんとか投影法とかさまざまな図の描き方のレクチャーをさせた。その講義でメンバーの図が綺麗になったかどうかは定かではない。しかしそれ以来、私も学生の雑な図には腹を立てて描き直させている。それらの縁もあり、ホフマン先生と家内の絵本「ざっそう」が昨年出版されている [3)]。

助手、助教授時代

山邊先生から京大に戻ってこいと言われ、助手になれて嬉しかった。福井先生に着任の挨拶に伺うと「山邊君は人使いが荒いから」（笑）とか「良い学生が来た時に仕事は進みますよ」とアドバイスを頂いた。研究室では何でも自由に研究することができた。金属酵素やある種の金属酸化物によるメタンの酸化過程の研究、金属ゼオライトによるベンゼンの直接酸化の研究、π 共役系分子の磁気的相互作用や振電相互作用の研究、有機ケイ素化合物の構造と反応の研究、スピンクロスオーバー錯体の研究、縮合多環芳香族のリチウム電池への

図 4　山邊研の花見（賀茂川）

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

応用研究など多方面の研究を行った。とくに、メタンの酸化反応の研究は今も続いている。

若い時は集中力があるもので、研究をしていると帰宅時間を忘れるほどであった。毎日、阪急の最終電車で高槻の自宅に帰った。京大では、助手として 2 年、助教授として 4 年過ごした。優秀な学生諸君と一緒に研究できたことは一生の宝である。

九大で研究室を立ち上げる

九大から来ないかと声がかかったので行くことにした。京都からは、塩田君（現九大）、立花君（現カネカ）、湯村君（現京都工繊大）、蒲池君（現福工大）、近藤君（現 JNC 石油化学）の 5 名が福岡に来てくれて、とても心強かった。おかげで九大での研究も順調にスタートできた。塩田君には助手として研究以外でも研究室の立ち上げやその他いろいろなことで助けてもらった。実験器具の散乱する部屋を整理整頓して計算部屋に改築するとか手荒なこともした。4 名の学生は、特別研究学生として九大で研究を行い、京大で学位を取った。その後、多くの優秀なメンバーが研究室に加わった。研究員では、多田君（現東工大）、田中君（現大同大）、スタイコフ君（現九大）、ユーハス君（現東工大）、比多岡君（現エーザイ）、森田君（現中央大）、堀君（現筑波大）らがいい仕事をして、その後ポストを得て研究者の道を歩んでいる。学生では野崎君（現パナソニック）、辻君（現九大）が研究者として大きく成長し、頼もしい限りである。

図 5　吉澤研の立ち上げ（2001 年）

研究内容についての詳細な記述ができなくなってしまったが、現在吉澤研で行っている研究テーマは以下のようなものである。

(1) 金属酵素、金属ゼオライトなどによるメタンの酸化過程の理論的研究、インフォマティクス、および実験との連携 [4]。これは JST-CREST「革新的触媒」のテーマとして採択されている。
(2) QM/MM 計算による酵素反応の解析。ジオールデヒドラターゼやヘムオキシゲナーゼの研究 [5]。とくにジオールデヒドラターゼの基質結合部位が、従来言われていた K^+ではなく、Ca^{2+}であることを計算から示した意義は大きい。
(3) 東大の西林先生（京大石油出身）との窒素固定錯体の反応機構に関する共同研究（西林先生の JST-CREST に参画）[6]。
(4) 単一分子伝導の軌道理論を中心とする物性研究。分子中の電子輸送過程が軌道位相で説明できるという定性的軌道理論 [7]。今後、分子エレクトロニクス分野などで多くの展開が期待できると考えている。

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

(5) 接着の分子機構に関する理論的研究（JST 未来研究に参画中）。接着といえば古臭い技術のように思われるが、接着界面にどのような相互作用が働いているかという興味深い研究。例えば、水素結合は接着現象の重要なメインプレーヤーであると考えられる [8)]。
(6) 反応と物性の研究での多くの実験研究者との連携。主として金属錯体の構造と反応性の研究および新規磁気物性の研究。
(7) 企業との共同研究。

2016 年には藤原財団のサポートを得て、物理有機化学の国際会議を開催することができた。当該分野の理論研究者と実験研究者が一堂に会する有意義な会議であった。

図 6　第 70 回藤原セミナー（福岡海の中道）

むすび

現在、私は量子化学による幅広い応用研究を行っているが、できれば最先端の化学研究に貢献したいと考えている。学生時代の実験や鉄鋼会社での開発研究の経験は、今の研究に大いに役立っている。「吉澤さんは系の選び方がうまいですね」と言われたことがある。しかし、系を選ぶという発想は私にはない。優秀な理論化学者は自分オリジナルの強力な武器を持っており、何かいい獲物がいれば撃ってみたいと考えるのであろう。系を選ぶという言い方はそこから来るものだ。私はそのようないい銃を持たないので、興味の湧いた面白そうな研究テーマを見つける（スタッフ、学生に計算してもらう）だけである。逆にどんな手法を使おうかと考えている。最も単純にヒュッケル法で解決すれば一番いい。分子伝導は軌道位相で理解できるといった理論研究は、実験的にも検証されている。今は医療で使われるある薬物反応について考えているが、モデル化が難しく停滞している。

1) 古川安，化学者たちの京都学派，京都大学学術出版会，2017.
2) K. Yoshizawa, A. Chano, A. Ito, K. Tanaka, T. Yamabe, H. Fujita, J. Yamauchi, and M. Shiro, *J. Am. Chem. Soc.*, **114**, 5994-5998 (1992).
3) ロアルド・ホフマン，吉澤みか，きむらゆういち，ざっそう，今人舎, 2018.
4) K. Yoshizawa, T. Ohta, T. Yamabe, and R. Hoffmann, *J. Am. Chem. Soc.*, **119**, 12311-12321 (1997); K. Yoshizawa, Y. Shiota, and T. Yamabe, *J. Am. Chem. Soc.*, **120**, 564-572 (1998); Y. Shiota and K. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **122**, 12317-12326 (2000); K. Yoshizawa and T. Yumura, *Chem. Eur. J.*, **9**, 2347-

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

2358 (2003); K. Yoshizawa and Y. Shiota, *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 9873-9881 (2006); K. Yoshizawa, *Acc. Chem. Res.*, **39**, 375-382 (2006); Y. Shiota, G. Juhász, and K. Yoshizawa, *Inorg. Chem.*, **52**, 7907-7917 (2013); M. H. Mahyuddin, A. Staykov, Y. Shiota, and K. Yoshizawa, *ACS Catal.*, **6** (12), 8321-8331 (2016); M. H. Mahyuddin, Y. Shiota, A. Staykov, and K. Yoshizawa, *Acc. Chem. Res.*, **51**, 2382-2390 (2018).

5) T. Kamachi, A. F. Shestakov, and K. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 3672-3673 (2004); T. Kamachi, T. Toraya, and K. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 16207-16216 (2004); T. Kamachi and K. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 10686-10692 (2005); P. M. Kozlowski, T. Kamachi, T. Toraya, and K. Yoshizawa, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **46**, 980-983 (2007); T. Kamachi, T. Toraya, and K. Yoshizawa, *Chem. Eur. J.*, **13**, 7864-7873 (2007); T. Kamachi, M. Takahata, T. Toraya, and K. Yoshizawa, *J. Phys. Chem. B*, **113**, 8435-8438 (2009); K. Doitomi, T. Kamachi, T. Toraya, and K. Yoshizawa, *Biochemistry*, **51**, 9202-9210 (2012).

6) H. Tanaka, A. Sasada, T. Kouno, M. Yuki, Y. Miyake, H. Nakanishi, Y. Nishibayashi, and K. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 3498-3506 (2011); H. Tanaka, K. Arashiba, S. Kuriyama, A. Sasada, K. Nakajima, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Nature Commun.*, **5**, 3737/1-11 (2014); H. Tanaka, Y. Nishibayashi, and K. Yoshizawa, *Acc. Chem. Res.*, **49**, 987-995 (2016).

7) T. Tada and K. Yoshizawa, *ChemPhysChem*, **3**, 1035-1037 (2002); K. Yoshizawa, T. Tada, and A. Staykov, *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 9406-9413 (2008); Y. Tsuji, A. Staykov, and K. Yoshizawa, *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 5955-5960 (2011); M. Taniguchi, M. Tsutsui, R. Mogi, T. Sugawara, Y. Tsuji, K. Y oshizawa, and T. Kawai, *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 11426-11429 (2011); K. Yoshizawa, *Acc. Chem. Res.*, **45**, 1612-1621 (2012).

8) T. Semoto, Y. Tsuji, and K. Yoshizawa, *J. Phys. Chem. C*, **115**, 11701-11708 (2011); T. Semoto, Y. Tsuji, H. Tanaka, and K. Yoshizawa, *J. Phys. Chem. C*, **117**, 24830-24835 (2013); K. Yoshizawa, T. Semoto, S. Hitaoka, C. Higuchi, Y. Shiota, and H. Tanaka, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **90**, 500-505 (2017); K. Yoshizawa, H. Murata, and H. Tanaka, *Langmuir*, **34** (47), 14428-14438 (2018); Y. Tsuji, Y. Kitamura, M. Someya, T. Takano, M. Yaginuma, K. Nakanishi, and K. Yoshizawa, *ACS Omega*, **4**, 4491-4504 (2019).

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

量子化学は呪いを乗り越えられるか？

重田 育照
筑波大学 計算科学研究センター 教授

重田 育照 先生

今回、巻頭言を書かせていただけることになって、改めてどのようなことを書けば良いか以前の記事を読み直してみた。現在、自分の専門として研究を進めている「量子生命化学（科学）」にするか、当該タイトルにするかかなりの時間悩んだ。私の尊敬する安田先生がかなりラジカルかつ赤裸々なことを書かれていたので、常日頃心に留めていることを少し言葉に写してみることにする。タイトルに「呪い」という言葉があるとおどろおどろしい感じがするが、学問としての「宿命」と言い換えても良いかもしれない。つまり高度に成熟した量子化学の未来はどうなるかということを考察できればと思う。

物理化学はそもそも「物理学的手法」を用いた「化学系（狭義には分子）」の測定および理論解析をカバーしている学問分野である。２０世紀に入って、様々な測定技術、および分子論的な理論解析手法が格段に進展してきた。今や化学分野においてなくてはならない測定・解析技術をいくつも開発・高度化してきており、化学分野だけでなく周辺分野の発展に大きく寄与しているのはいうまでもない。例えば、X 線構造解析、ESR/NMR、各種レーザー分光、分子動力学計算、電子状態計算など枚挙に遑がない。ノーベル賞の受賞も理論だけでも４件もある。しかしながら、一旦、それらの技術が確立すると、学問の主戦場はどんどん流れていく傾向があり、そしてそれにともないその学問を専門とする研究者がいなくなって（その分野に少なくなって）しまう。

例えば、X 線構造解析を例に挙げる。ご存知の通り X 線はレントゲンが発見した放射線であり、1912 にラウエが硫化亜鉛結晶による X 線回折を発見、その翌年にはブラッグ親子がその基礎理論であるブラッグの法則を発表し構造解析の基礎を与えた。彼らは全て物理学者であり、学問の創始は物理から始まっていると言える。やがて、様々な結晶が X 線結晶構造解析できることは、それらの結晶を作る化学者へと引き継がれた。そして、20 世紀の中頃にはタンパク質や DNA の結晶構造が解かれるのに端を発し、構造生物学という新しい学問分野ができた。複雑なタンパク質の構造を明らかにするため、解析法の試行錯誤が構造生物学や生物物理学分野で進められてきた。それらの技術はもちろん他の分野へもフィードバックされ、X 線結晶構造解析は今やあらゆる分野の基礎と言っても過言ではない。一方で、物理→化学→生物と学問の裾野が広がるにつれ、上流の方では専門の測定技術・理論研究者が減るということになる。

同様のことは NMR にも言えて、スペクトルから構造を構築するのは、今や有機化学者の方が理論化学者よりも長けているといえ、NMR の理論研究という分野は重要にも関わらずメインストリームとはなり得ない。また、機器メーカーが便利な測定装置を作成し、ボタン一つで測れるようになっている現状では、NMR の装置開発を行なっている物理化学者もほとんどいないのではないだろうか？分光学もまた然りと友人の分光学者も言っている。特に分光学では、新しい装置を考案・作成するためには多額の研究費が必要であり、アメリカ

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

では新しい分光学研究室を立ち上げる際には１億くらいのスタートアップを用意する必要があるとのことである（日本だとできないことであろう）。つまり、学問を始める敷居すら高くなり、新米研究者が増えていかない雰囲気が醸成される。こうやって研究者の数が減少し研究分野が先細りになる。つまり、（１）技術の汎用化による非専門家も容易に測定・計算可能、（２）学問がマチュアになることによる参入障壁の向上、この２点が物理化学分野共通の宿命であり、呪いとも言える。

翻って量子化学である。特に電子状態計算は私が勉強・研究を始めた 90 年代中頃は、ベンゼンの MP2 計算ですら数日かかっていた。今や手元にある数コアの計算機で２時間程度である。Gaussian と Gauss View、さらにその他のプログラムパッケージを用いれば、おおよその計算（構造最適化、反応解析、励起状態計算、振動解析）ができるようになっている。理論体系も、CI、CC、MPn、DFT、さらには量子モンテカルロ法など、その振る舞い等の習得すべき手法は極めて多く、さらに１電子・２電子積分計算、微分（応答）量の計算、溶媒効果など、それらを全て実装するのは、すでに個人のレベルの研究のキャパシティーを超えつつある。また、若手が独創性の高い研究をする余地も狭くなっている。つまり、上記の呪いが発動する条件を十分備えている。

さて、どうしたらその呪いを払拭できるであろうか？ひとつはやはり王道であるオリジナリティーの高い研究を貫くことである。伝統的に日本の量子化学は基礎理論を重視した研究を進めていることから、これを伸ばすことはこれからも続けるべきである。ただし、これは一握りのゲームチェンジャーとなる研究者が必須である。一方は量子化学の分野に居たままで、化学に貢献するだけでなく積極的に他の分野（物理、生物、地球、宇宙など）にどんどんチャレンジすることである。私のような王道を真っ直ぐに進めない研究者にとっては、後者は非常に現実的な選択肢である。特に私の研究室では、化学、生物物理、宇宙生命科学、創薬と幅広い分野に量子化学を含む応用・理論研究を展開している。その上で一番重要なのは量子化学者としての専門性（信頼）とそれに基づく説得力（実績）であるのではないかと考え、学際共同研究を進めている。

指導教員である山口兆先生は、私の在学中に「うちの研究室はタマネギ型」とおっしゃっていた。分子磁性の応用に近い研究（タマネギの表面）の裏で、理論・プログラム開発を好む学生には自由に研究（タマネギの芯）をさせていた（私もそのうちの一人である）。研究グループ内の多様化が競争に打ち勝つ実績と将来の種の創出を両立させる鍵であると言うことと、PI となった今では理解している。これは日本全体に言えることでもあると私は感じる。量子化学は適用範囲も懐もとても広い学問分野である。応用から理論まで多様な若手研究者を自由闊達な議論を通じてコミュニティーで育てて行き、さらに各々が他分野に踏み出すことで、少なくとも日本の量子化学分野は呪いに打ち勝つことができるものと信じている。そのためには、個々の高い能力も必要であるが、分野全体のコンセンサス共有・協力は必須である。今後もその一員として、量子化学の発展の下支えが（牽引というのはおこがましいので）できれば幸いである。

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

「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～

日時: 2019 年 4 月 20 日（土） 13:00～16:40
場所: 京都テルサ（京都駅南）、D 会議室（東館 3 階）
例年と会場が異なります。(次ページ地図参照)
参加費: 無料、申し込み・問合せ: office@qcri.or.jp

プログラム

13:00 挨拶・司会 中辻 博

13:05－13:45 長谷川 淳也 (北海道大学)
「メタン・カップリングにおける液体金属の触媒作用」

13:45－14:25 山門 英雄 (和歌山大学)
「超球面探索法を用いた結晶構造予測 ～未解決問題への挑戦～」

14:25－15:20 休憩

司会 牛尾 二郎

15:20－16:00 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)
「シュレーディンガー方程式の正確な解法に基づく新しい量子化学の建設」

16:00－16:40 中嶋 浩之 (量子化学研究協会研究所)
「FC 理論による exact 計算のための Slater 型関数の積分法と計算プログラムパッケージの開発」

懇親会

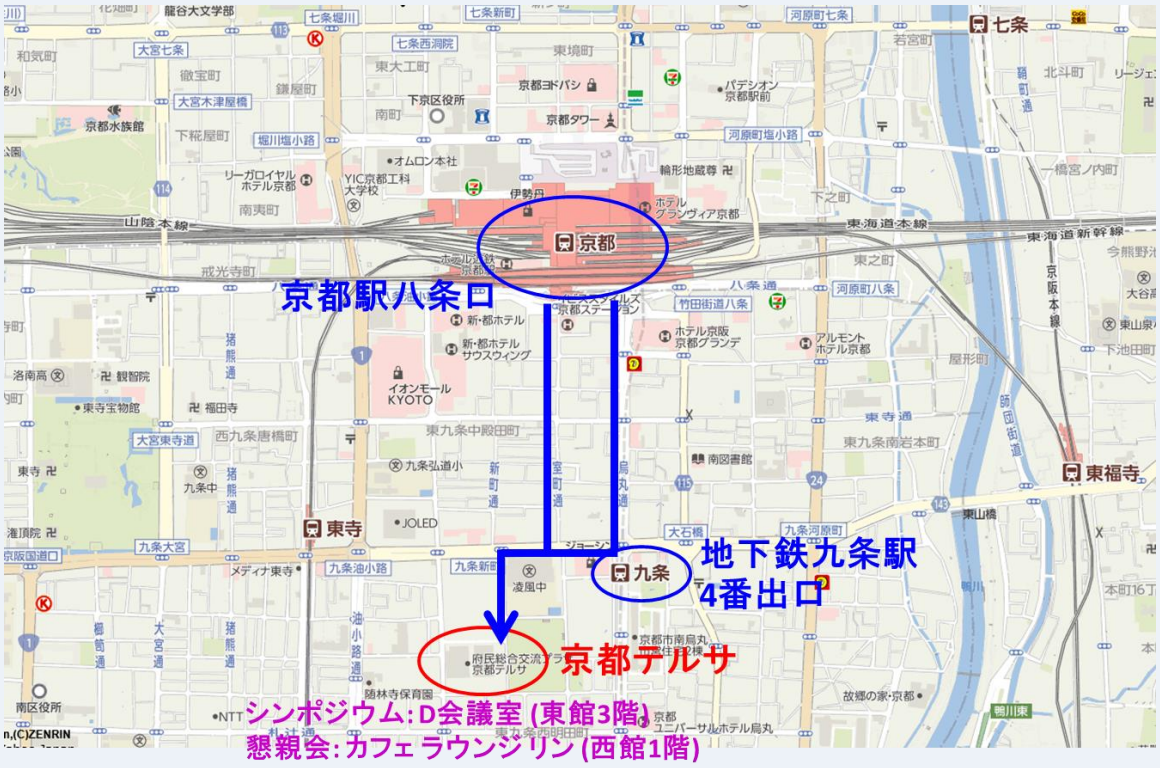
日時: 2019 年 4 月 20 日（土） 17:00～19:30
場所: カフェ ラウンジ リン「Cafe Lounge 凛」
（京都テルサ内、西館 1 階）
参加費: 5,000 円 (着席ビュッフェ形式)

例年、講演者, 参加者同士の交流が活発に行われる、和やかな雰囲気の懇親会となっています。シンポジウムと併せて是非ご参加ください。

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

会場(京都テルサ)へのアクセス

- JR 京都駅(八条口)より南へ徒歩 15 分
- 地下鉄(烏丸線)九条駅 4 番出口より西へ徒歩 5 分



講演要旨

メタン・カップリングにおける液体金属の触媒作用

長谷川 淳也
北海道大学 触媒科学研究所

化学工業の原料はナフサであるが、石油への依存度を低減するためには多様な天然炭素資源を利用する物質変換の体系を開発しなければならない。メタンを原料とする反応は、その究極として位置づけられている。メタンからエタンを合成するための新しいアプローチとして、東工大・山中グループはインジウムの触媒作用を見出しており、我々と共同研究を行っている。触媒反応の動作温度下において、インジウムは液体であるため、ab initio 分子動力学計算によるサンプリングを行うことで素過程の反応障壁を評価している。本講演では、同研究の一端を紹介し、液体触媒による反応メカニズムについて議論したい。

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

超球面探索法を用いた結晶構造予測 ～未解決問題への挑戦～

山門 英雄
和歌山大学 システム工学部

以下に私見を述べる。

自然科学、科学技術、学問を発展させるということにおいては、

- 何が未知、問題、謎であり、そして解決すべきであるのかを提示する
- 提示されている(あるいは自分で提示した)上記のことを解明する、改善・解決案を提示する

という 2 つの部分が本質的であろう。(なおその提示形式としては、歴史的にはおそらく仲間内での個人的会話、専門家間での手紙でのやりとり(素朴な牧歌的時代)、その後確立されてきた著書や査読付き論文・特許での公表(職業としての学問の時代)、そして今日インターネットの発達に伴い、学会での発表や、ネットを利用した(必ずしも査読は無くとも)投稿という方向性も見られるようになってきていると言えよう。(例えば、ポアンカレ予想を解決したペレルマン(ロシアの数学者)の 2002 年の arXiv への投稿が象徴的。即時性、及び原則的には誰でも参加できるという方向性。)

筆者がここ 10 年ほど携わっている結晶構造予測という問題は、物理学において古くから知られている問題で、基本的な考え方としては、「原子種や分子種を指定すれば、それらがどのような結晶構造をとるかは予言できるはず (∵原子や分子のふるまいは、基本的に量子力学で記述できるはずであるから)」ということである。

確かに従来、種々の優れた方法(紙幅の都合により引用を省略するが)、例えば MD シミュレーションや焼きなまし法、ランダムサンプリング、遺伝的/進化的アルゴリズムによる方法などにより、かなり解決されてきていると言えるものの、

1. 量子化学計算部分における精度、及び計算に要する時間
2. 特に分子の場合、結晶格子内で分子がとりうる位置や配向の「場合の数」が非常に多いため、全座標空間を調べ尽くすことが難しい

という問題があり、今日でも、まだ完全な解決には至っていない。

1 については、世界中で今日多くの研究が進められており(例えば中辻らによる、exact な解を目指す方法もその一つ)、計算機のハードウエアの進歩も相まって将来解決されてくる可能性に筆者は期待している。2 については、筆者は、2004 年に大野・前田により開発され化学反応経路探索や分子の異性体探索に威力を発揮する超球面探索法を結晶に適用することを 2008 年に共同研究者(大野、前田)に提案し、またその後、2010 年に大野、長田、前田により発表されている一般化超球面探索法も用い、研究室の学生ら(時子山、澤田、高田谷、勝野、箕土路、浜口、向日、沖)とも共に研究を進めてきている。

その中で、エネルギー計算に SCC-DFTB 法を用いること(主に時子山)や、より簡単な経験的ポテンシャルを用いること、分子形状の固定による独立座標数の削減、四元数を用いた分子の回転、乗数法を用いた分子形状への束縛条件の導入などを試みてきており(主に高田谷)、また探索する変数の数を大幅に削減するために RNM(Rapid Nuclear Motion)法を導入することも (主に箕土路) 試みてきている。

また最近では(昨秋の SRPS2018 や今春の日本化学会第 99 春季年会(2019)において沖

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

らが)、原子や分子中の原子を剛体球的に扱い(なお、結合長は制限するが例えば結合角等には制限を入れないことにより、分子に柔軟性を持たせた探索も可能)、結晶中における充填率(相当の関数)を極大化することにより結晶構造(の初期構造候補)を高速で探索する試みを始めており、例えば高校の教科書に出てくるような、面心立方格子や六方最密格子に相当する構造を芋蔓的に得ることができ始めている。イメージしているのは、形状・サイズ可変な箱の中に、空間充填型の分子模型を、所定の個数だけ滑らかに詰めながら箱のサイズを絞り、得られた安定構造から、またじわじわと分子の相対配置を変えて滑らせ、次の安定構造を探すという操作を繰り返すということである。(なお目的関数として"充填率"(の例えば逆数)を採用するということは、原子や分子間に働く引力的相互作用を、あたかも積分的にエネルギーの如く目的関数に繰り込むことに相当するような意味があるものと考えている。)また筆者らは今後本手法を RNM 法と組み合わせることにより、更に探索スピードを上げることを考えている。

講演では、上記の話との関連という意味で、数学界におけるかつての未解決問題であった球の最密充填に関するケプラー予想(1611 年に提示→1998 年頃解決(約 387 年後))、ニュートンの予想(1694 年頃提示→1953 年に解決(約 259 年後))の話、及び研究室の学生(高田谷 et al.)他による、この他の最近の研究 (多角柱炭素チューブの構造と熱的安定性 (CPL, 2019, 718, 32)、BCNOS 分子を例とした異性体探索の効率 (BCSJ, 2018, 91, 1625)) についても紹介する予定である。

シュレーディンガー方程式の正確な解法に基づく新しい量子化学の建設

中辻　博
量子化学研究協会研究所

私たちの量子化学研究協会では演者が京都大学の在職時代に導いたシュレーディンガー方程式の正確な解法、特に Free Complement (FC) theory(自由完員関数理論)に基づき、精度の高い予言を可能にする量子化学理論の構築に向けて努力してきた。この理論は任意の初期関数から、その構造を保ちつつ、シュレーディンガー方程式の正確な解を導く理論である。そのため、用いる初期関数に化学的直観の働きやすいものを用いれば、化学的理解の得やすいシュレーディンガー解が得られる。そこで、化学者の直感の源泉である Chemical Formula (化学構造式や化学反応式)に忠実な初期関数の生成法を開発して、その結果を使えば、数値的正確性の上に、正確な化学概念をももたらす量子化学が構築される。この方法を開発すると、分子の基底状態と電子励起状態の両方を同時に構築していく量子化学にたどり着いた。これを Chemical Formula theory と呼んでいる。さらに一般的な計算の容易さから、積分法で解く方法に照準を当て、変分法で化学精度を目指す方針を採用した。目指すところは、誰でも簡単に使えて、信頼性も高く、分かりやすい近似的量子化学で基底・励起状態を同時に扱い、それらを基に必要ならいつでも exact なシュレーディンガー解をも得ることのできる、統一的な理論体系を構築する事である。ここでは、このような理論を説明し、得られた結果を紹介する。

※ 現在、量子化学研究協会研究所では、この研究テーマに関連する研究を行う JSPS 特別研究員を募集しています。ご興味のある方はご連絡ください。

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

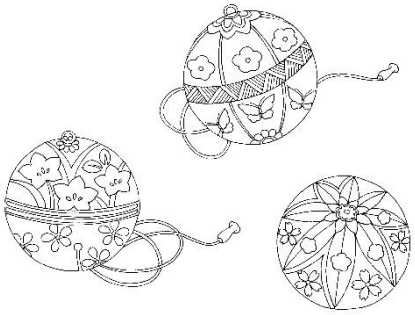
FC 理論による exact 計算のための Slater 型関数の積分法と計算プログラムパッケージの開発

中嶋 浩之、黒川 悠索、中辻 博
量子化学研究協会研究所

中辻により提案された Free Complement (FC) 理論は、適当な初期関数からハミルトニアンに基づき完員関数 (Complement Function: cf)を生成し、変分法によってシュレーディンガー・レベルの exact 解まで解き進めることができる。例えば、簡単な He 原子で 40 桁以上の正確なエネルギー値を算出することなどで実証してきたように、cf に対する積分法が確立すれば、変分法によって安定かつ容易に FC 理論の展開が可能である。我々は、積分を要しないサンプリング法(Local Schrödinger Equation (LSE) 法)も開発し、第二周期原子や簡単な有機分子で絶対解として化学精度(1 kcal/mol 以下)を満足する計算にも成功した。しかし、その一般化には更なる理論開発が必要である。

一方、FC 理論による信頼度の高い計算や exact 計算を、誰もが簡単に遂行できる方法としては、やはり積分法に基づく方法が適している。現代量子化学の主流は Gauss 型関数であり、その基底関数, 積分法などは長年の蓄積があり、その高速計算プログラムも普及しているが、exact に繋がる正確な理論に必要な r-Gauss 関数の正確な積分法はない。原子・分子の exact 解に繋がる計算には、Slater 型関数が適している。Slater 型関数の積分は、例えば、MOLPRO に実装されている SMILES など、幾つかのプログラムパッケージが存在するが、どれも FC 理論の exact 計算の要件を満たさない。そこで、我々は、Slater 型関数の積分法とそのオリジナル計算プログラムパッケージを開発し、特に、変数 r を含む関数の積分、露わな二電子相関項を含む cf に対する積分の解析的計算を実装した。本講演では、これらの積分計算法とプログラムを紹介し、その制約や今後の可能性なども議論したい。また、FC 理論の計算において、Locality のある cf の効率的な関数空間 Selection 法や、二電子相関項を含む非直交完員関数に対する行列要素の演算法なども簡単に紹介する。また、現代量子化学の一般的な方法との接点として、FC 理論による基底関数系の構築、Gauss 型関数による計算や Full CI 法と FC 理論との比較なども議論したい。

これらの計算プログラムの構築によって、近似的な理論から exact 理論を統一的に内包する理論の構築が可能になることが期待される。



©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

京都の桜: 鴨川公園の散策

桜をはじめ多くの花々が開花する４月、京都は多くの観光客が訪れ(近年は外国人観光客が非常に多く)、大変賑わっています。神社, 仏閣, 観光名所には、素晴らしいものがありますが、京都の街を歩いてみるだけでもなかなかいいものがあります。

例えば、四条河原町から量子化学研究協会研究所や京都大学(吉田キャンパス)を訪問されるとき、京阪電車, バス, タクシーなどで移動される方が多いと思いますが、時間がある方は、鴨川沿いを歩いてみては如何でしょうか？四条から歩くなんてすごく遠いのでは？と感じられるかもしれませんが、実はそれほどでもないのです。

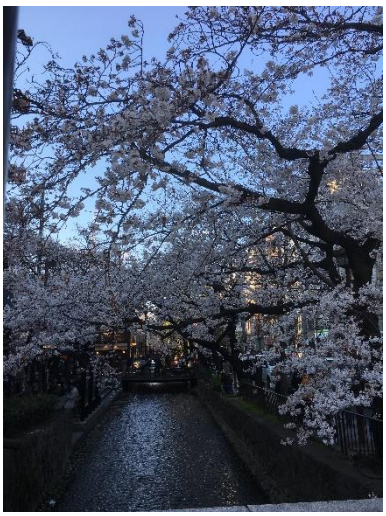
- 四条大橋 → 量子化学研究協会研究所: 約 30～35 分
- 四条大橋 → 京都大学吉田キャンパス: 約 40～45 分

ここでは、四条通から量子化学研究協会研究所に至る鴨川沿いの風景や桜を紹介したいと思います。

1. 木屋町通

阪急河原町駅を出るとすぐ、京都の「飲み屋街」として知られる木屋町通があります。木屋町通のすぐ横には高瀬川が流れ、この季節、川に被さる桜がとても綺麗です。夜は、飲み屋街の明かりにライトアップされ、幻想的な雰囲気でますますお酒が進みます(木屋町通隣の先斗町の飲み屋さんもお薦めですよ)。

高瀬川(四条通南側)



夕闇の高瀬川(四条通北側)

2. 四条大橋

四条大橋を渡れば、対岸の京阪祇園四条駅ですが、橋を渡る前に、橋の北西角から鴨川へ降りてみましょう。川沿いへ降りると、視界がいっきに広がります。左側(みそそぎ川の上)には、夏(5～9 月)にいわゆる鴨川納涼床で賑わいます。川沿いは、夜には"カップルが等間隔に並ぶ"という伝統がありましたが、最近、その伝統は少しなくなってきたようにも感じます。これも外国人観光客が多くなったからでしょうか？

四条大橋: 橋を渡る手前に鴨川へ降りる階段がある。

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

四条から三条を望む

川面にかかる桜(満開までもう少し)

3. 三条通～御池通～二条通～丸太町通

四条大橋から約 7～8 分で、三条通(三条大橋)を通過します。三条大橋の手前は、昨年の近畿地方で起きた地震と豪雨災害で一部堤防が崩れ、今でもその修復工事が行われています。三条大橋から 2～3 分で御池通(御池大橋)を通過します。御池大橋を通過したところにも、見事な桜があり、桜が散る頃には川を流れる花びらが綺麗です。

御池大橋北側の桜

御池通から 3～4 分で、二条通(二条大橋)を通過します。二条大橋を通過すると、丸太町通まで少し距離があるため、さらに視界がひらけてきます。この季節、白いユキヤナギの花もとても綺麗です。このあたりは、ドラマ(なんとかワイド劇場のような)や映画のロケもときどき行われています。二条通から約 5～6 分で丸太町通(丸太町橋)を通過します。このあたりからは鴨川公園で、芝生の広場も広がり、子供の遊び場としてまた大学のサークルなどがよく活動しています。

みそそぎ川の橋上より(二条～丸太町)

ユキヤナギの植込み(二条～丸太町)

鴨川沿いの桜(二条～丸太町)

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

4. 荒神口通～量子化学研究協会研究所

丸太町通から約 3～4 分で荒神口通(荒神橋)に到着します。荒神橋の次は、今出川通(賀茂大橋)まで橋がないため、量子化学研究協会研究所や京大吉田キャンパスへ行くためには、この橋を渡りましょう・・・、と言いたいところですが、荒神橋をちょっと通過して、こんな石亀段を渡ってみては如何でしょうか？川に落ちてしまいそうに感じますが、大丈夫です。ちなみに、このような石段は鴨川に所々にあります(他には、二条通と丸太町通の間、今出川通を通過したデルタ三角地あたりにもあります)。

石亀段で鴨川を渡る。

石段を渡ると、対岸には京都府立医科大学付属病院が見えます。ここまで来ればもう一歩です。四条大橋から約 25～30 分です。ここから、川端通を北上すれば右側に近畿地方発明センターの看板が見えてきます。ここが、現在の京都技術科学センター、量子化学研究協会研究所があるところです。四条大橋から約 30～35 分です。さらに出町柳周辺まで行くと、桜の花と柳の木の新芽との Collaboration もあり、とても綺麗です。

京都府立医科大学付属病院

東一条通を東に向かえば、約 10～15 分で京都大学吉田キャンパスに到達します。四条大橋からは約 40～45 分です。京都大学の桜も 4/4 現在かなり見頃を迎えていました。

青空に映える出町柳の桜と柳

気候のいい時季、鴨川沿いのウォーキングはとても気持ちが良いです。また、鴨やカモメ、鷺など、多くの水鳥も観察できます。

鴨川の川面に遊ぶ鴨夫婦

量子化学研究協会研究所のある
京都技術科学センターと樟木

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

京都大学(時計台と桜)

京都大学
(懐かしの旧工学部四号館と桜)

四条通(四条大橋)

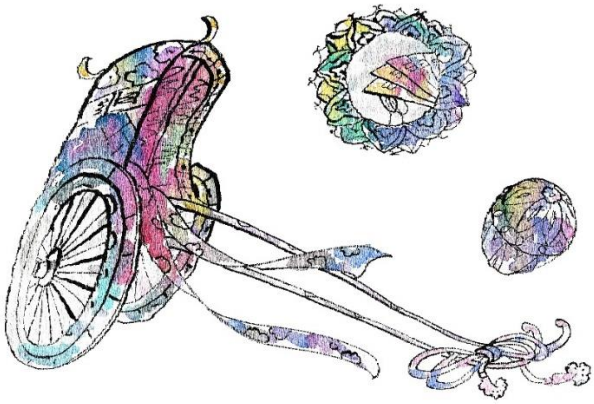
三条通(三条大橋)

御池通(御池大橋)

二条通(二条大橋)

丸太町通(丸太町橋)

荒神口通(荒神橋)



©2019 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 3 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。2016～2018 年度は、総計 187 名からご寄付を賜りました(同一の方でも各年度で 1 名として数えられます)。合計 300 名以上が目標ですが、まだ大きく足りません。そのため、前年まで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。

現状では、私達の活動や成果は、皆様のご好意やご寄付にとうてい見合っていないと存じますが、今後とも、皆さまの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)： ○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

©2019 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。）

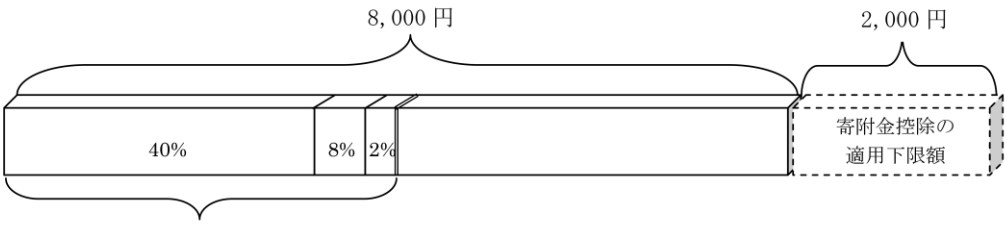
所　得　税	＜対象となる寄附金額は，所得金額の 40%相当額が限度＞ **所得控除と税額控除の選択制** **＊所得控除**：（寄附金額－2,000 円）を総所得金額等から控除 **＊税額控除**：（寄附金額－2,000 円）×40%（所得税額の 25%相当額が限度）を所得税額から控除
個人住民税	＜対象となる寄附金額は，総所得金額等の 30%相当額が限度＞ **＊税額控除**：（寄附金額－2,000 円）×10%（市民税 8%，府民税 2%※）を住民税額から控除

（※）　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。）

©2019 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、その哀歓、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是非お寄せください。

よろしくお願いいたします。

「量子の世界」No.9, 2019 年 春号

2019 年 4 月 5 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

Copyright © 2019 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。

©2019 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.