



# 量子の世界

No. 6

## - 目次 -

	ページ
1. 紅葉とメタンとシュレーディンガー方程式 長谷川 淳也 (北海道大学 触媒科学研究所 教授)	1
2. 日本女子大学と計算科学に身をおいて 村岡 梓 (日本女子大学 理学部数物科学科 講師)	3
3. 「第 11 回 革新的量子化学シンポジウム」のご報告	7
4. 「第 7 回 JCS 理論化学シンポジウム」のお知らせ	9
5. 志田先生、Parr 先生、諸熊先生のこと 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)	14
6. 編集後記	
1. 量子化学研究協会研究所のアクティビティ	16
2. 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	
3. 「量子の世界」へご寄稿のお願い	

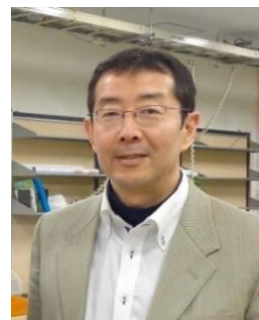
## 紅葉とメタンとシュレーディンガー方程式

長谷川 淳也

北海道大学 触媒科学研究所 教授

「北海道の季節感のあるもの」とのご依頼を賜りましたので、本州より一足早い紅葉のお写真をお届けします。この原稿を作成している11月初旬は既に初冬の趣で、紅葉は落葉し、山には積雪を見ることができます。

この写真は、タイから来られたラタナサーク博士が撮影したものです。紅葉を見て美しいと感じる美意識は万国共通のようです。建物は近代的な外観ではありますが、玄関へのアプローチに並ぶ楓の植え込みは、昔ながらのお寺の眺めを思い起こします。紅葉の美しさは、時間と空間を超えた普遍的な価値として共有されてきたことが分かります。



長谷川 淳也 先生



普遍的な価値と言え、シンプルな方程式が美しいと感じるのは私だけでしょうか。高校物理で習う方程式にはじまり、大学に進学してからはゴチャゴチャな凝縮系で起きている化学反応であっても、電子状態の基礎方程式が  $H\Psi=E\Psi$  であると聞いて素直に驚いていました。方程式の簡潔さに加えて、ハミルトニアン演算子にエネルギーの式を詰めこんで、固有値問題を解



10月中旬に北海道大学創成科学研究棟前にて

けばよいというプロセスの簡潔さ（これが科学の一大難問であることを研究室配属された後に知ることになるのですが）に感心しました。近年、中辻先生が厳密な波動関数理論を構築されましたが、簡潔でありながら力強い方程式には美しさだけでなく、普遍的な価値があると思います。

触媒科学研究所に異動して5年が経ちました。触媒分野には、新奇で特異な物質構造と電子構造を創出し、新しい化学を見出すことに基盤を置く純粋学問の側面がありますが、他の学術分野と比較すると産業界との距離が近いために、社会的要請と直面しています。



近年、シェールガス採掘が産業化したこともあり、メタン化学が再び脚光を浴びています。C1 化学の歴史は古く、学問として不朽の価値があると考えますが、社会的要請による価値が付与されると、再び科学のフロンティアとしての研究開発が求められることを目の当たりにしています。

リヤドロの「Scientia」。台座には様々な方程式に加えて、時間に依存するシュレーディンガー方程式が彫り込まれている。

さて、ご存知の方も多いと思いますが、最近、サイエンス誌において密度汎関数理論の開発に関する議論がありました。John P. Perdue 博士らのグループによると、交換-相関汎関数の開発が始まって以来、ベンチマーク・データセットと比較した際のエネルギー精度は向上した一方で、Coupled Cluster Singles and Doubles (CCSD)を評価基準として電子密度を比較すると、その精度は2000年辺りを境に悪化しているとのことです。所謂ミネソタ汎関数への批判が含まれているともとれますが、ベンチマーク・データセットへの最適化プロセスにおいて過適合が起きており、電子密度の精度が犠牲になっているとのことです。内挿の精度は上がっても、外挿の精度が下がることには問題がありますし、right answer for the wrong reasons ですので、化学現象を理解するために電子構造を研究したい私のような研究者にとっては不安な状況と言え、違和感を禁じえません。

また先日、実験グループとの共著論文を投稿した際に、実験家と思われる査読者からのコメントがあり、ミネソタ汎関数を使って再計算するよう勧められました。この形成されつつある、或いは形成されてしまったスタンダードには違和感が残っています。

もし、これらの違和感を私だけでなく多くの研究者が感じているとすれば、社会的要請に近い研究ニーズがあるのではないのでしょうか。今や、量子化学計算は多くの分野におけ

る学術研究や技術開発に利用され、非専門家が日常的に利用するツールになっており、明確な信頼性と簡潔さを必要とするように思います。もちろん、情報科学分野との学際的な展開として、汎関数パラメータを再最適化するアプローチや、Perdue 博士が主張されるように exact constraint を課するアプローチはあり、実用上の利便が要求される密度汎関数理論においては必要な開発と考えることができます。しかし、現状の密度汎関数理論とは異なるレベルの信頼性がなければ、私が述べている違和感は根源的に解消されないように思えます。シュレーディンガー方程式の解析解に「はしご」が架かる中辻理論がある以上、厳密な波動関数理論の研究領域に更に新しい価値が認識され、世界中で研究が活発化する状況は、そう遠い未来ではないと期待しています。



JAPAN WOMEN'S UNIVERSITY

## 日本女子大学と計算科学に身をおいて

村岡 梓

日本女子大学 理学部数物科学科 講師

“年 2 回の発行で「量子の世界」と題する機関誌を発行しています。村岡様よりご寄稿をお願いできませんでしょうか？”ある朝届いた気品あふれる中辻先生からのメールを読み、私が書いていいものかという不安と、中辻先生よりお声をかけていただけた喜びで私はデスクに顔を伏せました。そしてしばし顔をあげることができませんでした。中辻先生よりこのような話を頂きましたこと光栄に大変ありがたく存じます。この場を借りてお礼申し上げます。そして、何よりも期日を押ししてしまいましたことを心よりお詫びいたします。



村岡 梓 先生

私は日本女子大学 理学部 数物科学科に着任して早 3 年が経ちました。着任当初、幼稚園、小学校、中学校、高等学校、大学と私の人生の半分以上過ごした学び舎に、教員として戻るとは思ってもみませんでした。これから定年まで約 30 年。学生だった期間を合わせると計 52 年。半世紀は日本女子大に関わることになるのだと気がついたとき愕然としました。私のような教育環境に身を置いた卒業生は“スーパー内部”と呼ばれていますが、私は自分を数物科の“レア・イベント”と呼んでいます。世の中には沢山の本女の卒業生は居るけれど、学内では卒業生は言うほど多くなくまして内部生は少ない。新しい環境への適応能力の柔軟さによって、未知の化学反応を起こすかも？！。

私は、東大院総合 永田敬教授(現・総研大副学長)の指導の元博士号を取得した後、ヴェルサイユ・サンカンタン・アン・イヴリーヌ大学 Prof. K. Boukheddaden、東大院工 山下晃一教授の元で博士研究員、明治大学理工学部物理学科で助教を経て現職に就きました。博士研究員時代に出会い心奪われた、「動的な螺旋分子の電子状態と光学活性」と「スピン







【写真 1】 開校に向けて  
(左)「女子教育」(1896 年 2 月)  
(右) 日本女子大学校寄付金簿



【写真 2】 評議員らの記念撮影  
(後列左) 成瀬仁蔵・広岡浅子・  
村尾吉兵衛・塘茂太郎  
(前列左) 久保田譲・森村市左衛門・  
森村菊子・大隈重信・  
西園寺公望



【写真 3】 授業風景(1907 年)  
長井長義教授による化学実験

クロスオーバー錯体の物性理論に関する分子磁性」の研究に現在も取組み、「物質の電子状態」や「物質の動的挙動」の解明を目指し、外部誘起された分子内・分子間の相互作用や応答に伴う反応は何故起こるのかなどの一連の「素過程の組立て」を明らかにすることを研究課題としています。特に、複数の安定構造、遷移構造による多段階反転経路をたどる動的な螺旋分子(具体例としてオルトフェニレン誘導体分子)が示す、反転反応のポテンシャル面の反転反応経路は、反応の活性障壁が高い反応自体がレア・イベントとなってしまう「動的な螺旋分子」として機能しません。そこで螺旋分子の反転反応の実時間シミュレーションにより、「動的な螺旋分子」の反転反応機構を探索や、レア・イベントな反応を持つのであれば、電子状態が変化したらどのような反転反応をおこすのかに興味があります。“レア・イベント人間”が“レア・イベント現象”に興味を持っている。あなたもレア・イベントの電子状態の解明への扉を一緒に開けませんか?これをうたい文句に、3年生向けの卒業研究配属研究室紹介で演説をしています。

ここで、少し本学の紹介をさせていただきたいと思います。日本女子大学(通称:本女)は、1901年に成瀬仁蔵を創設者として日本最初にできた女子高等教育機関です。“女子を人として教育すること”“女子を婦人として教育すること”“女子を国民として教育すること”という建学の精神を基本に、発展・充実に努め、2020年に120周年を迎えます。創立にあたっては、

【写真 1】【写真 2】にあるように、東京専門学校(現・早稲田大学)創立者大隈重信氏が創立委員長となり、総理大臣 伊藤博文氏、学習院院長 近衛篤磨氏、文部大臣 西園寺公望氏、

財界人 渋沢栄一氏、岩崎弥之助氏等各界の重鎮の多大な支援を受けました。そして、NHKの朝の連続ドラマ「あさがきた」のモデルとなった実業家広岡浅子氏の働きかけで、彼女の実家である三井財閥から東京・目白(現在地)を寄贈され開校しました。開校時は家政学部、国文学部、英文学部の三学部が設置され、再編の後現在では、家政学部、文学部、人間社会学部、理学部の4学部から成ります。新制大学に移行した1948年に家政学部理



【写真 4】 目白キャンパス  
是非お出かけください

学科 1 部（数学・物理・化学）、2 部（生物・農芸）が設立され、1992 年に、再編によって数物科学科・物質生物科学科の 2 学科を持つ私立女子大で初の理学部として誕生しました。学部としては新しいですが、大学設立当時より本学の自然教育環境は重要視されており、【写真 3】にあるように化学実験、生動物学実験や、理科教育が活発に行われていました。（割烹着で実験をしている当時の女子学生の姿より、ある話題を彷彿させます。）

本学の歴史の中で、計算科学・理論化学を専門となさる先生はいらっしゃらなく私が初代になります。講座名は計算分子物理研究室と名づけました。一部の学生は本研究室を略して「分子研」と呼んでいます。ビッグな名前をつけてしまったものです。理論計算は、密度汎関数法などの理論モデルの改善やスーパーコンピュータにみられる計算機能力の向上に伴い、半導体・磁性体・生体分子の分野でもその有用性が認められ、「物性物理」から「分子科学」に至る広範な学際領域でこれを活用した研究が盛んに行われています。理論計算に基づく、分野横断的な研究構想を実行することで、物性物理学的観点や量子論的観点から、ミクロスケールでの幾何構造解析、そしてシミュレーションによる分子機能とその制御機構の詳細な理解、生体分子・エネルギー変換材料・分子磁石などの機能性分子の創成といった、生命科学や有機エレクトロニクスの分野に携わることができるでしょう。計算分子科学における新規で重要な研究分野の開拓も可能であり、物理化学のテーマへの発展に寄与できるに違いない。理論化学は夢の世界！と考えています。理論計算に携わる者として、非力ながらも理論計算の面白さを学生に伝えたいと思っています。多くの本学学生を分子科学討論会に参加・発表させたい、本女から計算科学・理論化学の世界に踏み入れる学生を一人でも多く輩出したい、これが私の夢であり野望です。

我が国の今後を考えるに、少子高齢化の更なる進行に伴い、女性の社会的用登用と地位向上が重要な課題となるでしょう。現在日本政府は「女性が輝く日本」という目標を掲げ、男女共同参画を始め企業等における役員・管理職への女性の比率拡大、仕事と家庭生活の両立の推進を目指しています。こうした背景に十分応えるために女性の質的向上は急務です。女子教育、とりわけ女子の高等教育の重要性は益々増大していくものと考え、本学はこれを見据えて、現代女性キャリアに対する教養課程があります。このために、私は『人間』として、『女性』として、『社会人』としての教育がバランス良く行われることが必要不可欠であり、まさに女性のためだけにある女子大学こそ果たすべき役割は益々大きくなっていくものと思っています。「自らの人格を高め、使命を見出して前進する」ために、変化の激しい時代にあって様々な環境に柔軟に適應できる能力や、高い専門性、独創性を身に付け、誇りと高い志を持った人間・女性を育てるぞ。幸いにも特に好奇心旺盛な学生が本研究室に希望し所属してくれています。卒業生として、研究者として、教育者として様々な道へ進む学生にとってローモデルになりたいと密かに思います。



中辻先生から与えて頂いたこの機会に、今後少しでも多くの先生方に、本女の計算科学ここにあり。と印象つけられることができれば幸いです。

最後になりましたが、量子化学研究協会研究所の益々のご発展を心よりお祈り申し上げます。



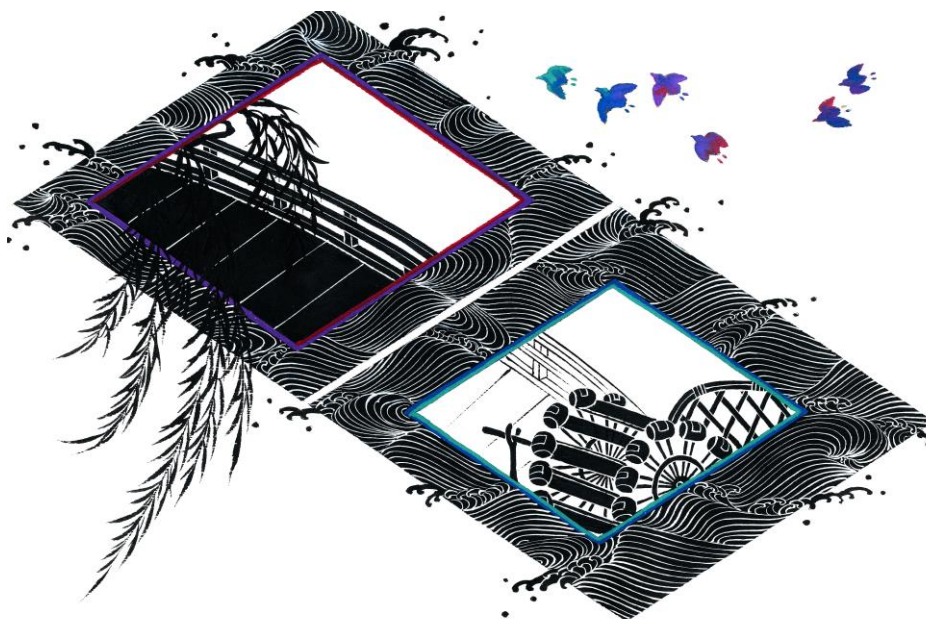
本年度研究室メンバーと共に。感謝の意を込めて

参考文献：『わたしの大学 日本女子大学』

『写真が語る 日本女子大学の 100 年』

『日本女子大学学園事典 創立 100 年の軌跡』

諸熊奎治先生の訃報に接し心よりお悔み申し上げます。初めて螺旋分子の成果を分子科学討論会名古屋で発表したときにお声をかけていただいたこと、北海道の分子科学討論会の帰りの飛行機で偶然にもお席が隣になり話ながら帰ったことが懐かしく思い出されます。





— ご報告 —

「第 11 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: 2017 年 5 月 13 日 (土) 13:00～16:40

場所: キャンパスプラザ京都、第 1 会議室(2 階)

毎年恒例の「第 11 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、2017 年 5 月 13 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 – 13:50 尾崎 幸洋 (関西学院大学)

「量子化学と分子分光学」

13:50 – 14:30 奥村 久士 (分子科学研究所 計算科学研究センター)

「アミロイド線維のシミュレーション

– 構造サンプリングと非平衡分子動力学 –」

14:30 – 15:20 休憩

司会 中井 浩巳

15:20 – 16:00 畑中 美穂 (奈良先端科学技術大学院大学)

「自動反応経路探索を用いる不斉触媒反応の機構解明と  
機械学習による解析」

16:00 – 16:40 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)

「原子・分子のシュレーディンガー解による予言的量子化学の設計」

懇親会

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」

講演して頂いた先生方



尾崎 幸洋 先生



奥村 久士 先生



畑中 美穂 先生



中辻 博 先生



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

波田先生によるご挨拶

## — 次回シンポジウムの予定 —

### 「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 5 月頃 (予定)

場所: キャンパスプラザ京都 (京都駅前北西すぐ)

「革新的量子化学シンポジウム」は、例年 4 月末～5 月に京都駅前のキャンパスプラザ京都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 2018 年 4 - 5 月頃開催する予定です。是非、お誘い合わせの上ご参加ください。





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

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 21-24 日、チェコ共和国・プラハ・IOCB にて開催されます。このシンポジウムは、チェコの理論化学者 R. Zahradnik 教授、Z. Havlas 教授と日本の中辻が、相互の尊敬と友情を基礎に始めたもので、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)で開催されました。「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。



主催者の Zdeněk Havlas 教授

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新しい企画も検討され、JCS 以外の国から 5 人の Plenary Lecture も計画されています。詳しくは、Web ページ(<http://jcs2018.cz/>)をご覧ください。

### Invitation letter from Prof. Zdeněk Havlas

JCS Symposium 2018

Dear Japanese colleagues and friends:

It is my privilege and honor to invite you to the 7<sup>th</sup> JCS Symposium, which will be held in Prague on May 21 to May 24, 2018.

The JCS (Japan-Czech-Slovak) Symposium series has already a long tradition, suggested first by the prominent Czech quantum chemist Prof. Rudolf Zahradnik, during visit of Prof. Hiroshi Nakatsuji to the institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences. It is always a meeting with excellent atmosphere among friends.

The Symposium topic is quantum chemistry, from methodology to applications in organic, inorganic, biochemistry and material sciences.

The Symposium venue will return to the Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, where the first symposium was held. Comparing to the first Symposium, the institute is currently completely renovated, and it offers a pleasant atmosphere. More pieces of information you will find at the Symposium web pages [www.JCS2018.cz](http://www.JCS2018.cz).



©2017 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

The month of May is one of the most pleasant months in Czech Republic, with fresh green and blooming. During the Symposium there will be also time to show the participants beauties of historical city of Prague, connected with famous Czech beer testing and scientific discussions.

Please, do not hesitate and join us for the Symposium.

With the best wishes, looking forward to meeting you in Prague,

Zdenek Havlas  
Chairman of the 7<sup>th</sup> JCS Symposium  
Vice-president of the Czech Academy of Sciences

### Local organizing committee (Czech)

Zdeněk Havlas    Lubomir Rulíšek    Jiří Pittner    Irena Krumlová



第 4 回 JCS(プラハ開催)での写真

(左)左から、Jiří Pittner, Vladimír Špirko, 中辻博, Petr Čársky, 長谷川淳也

(右)左から、Petr Čársky, 中辻博, Lubomir Rulíšek

### 第 7 回 JCS シンポジウムへの参加・発表ご希望の方へ

現在、第 7 回 JCS シンポジウムに参加ご希望の方を公募しております。量子化学、理論化学とその応用分野はもちろんのこと、関連する実験分野の方のご応募も歓迎いたします。ご希望の方は、以下の内容を、[jcs@qcri.or.jp](mailto:jcs@qcri.or.jp) (全角@を半角に変更して下さい) まで、お知らせください。

- ・ ご芳名
- ・ ご所属
- ・ e-mail アドレス
- ・ 発表タイトル・内容(暫定的なもので構いません)
- ・ ご希望の発表形態(口頭、ポスターなど。ただしプログラムの構成上、ご変更をお願いすることもあるかと思ひます。ご了承ください。)

これまでのシンポジウムと同様、第 7 回 JCS も上記の理念の元、美しいプラハの街で、素晴らしい会になると思われます。奮ってご参加ください。過去の JCS 理論化学シンポジウムの報告・写真等は、Web サイト([http://www.qcrl.or.jp/ja/event\\_ja/jcs1105](http://www.qcrl.or.jp/ja/event_ja/jcs1105))をご覧ください。なお、「量子の世界」第 5 号 (前号の春号) にも、第 7 回 JCS シンポジウムの記事があります。



## IOCB (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry) について

第 7 回 JCS シンポジウムは、チェコの首都プラハにある IOCB (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry) で開催されます。IOCB は、チェコ科学アカデミーの機関で、有機化学、生化学、分子細胞生物学、計算化学、物理有機化学、生物物理化学、及びこれらの関連分野の科学研究がおこなわれています。また、大学卒業生を対象に学位取得のための基礎研究が行われています。

IOCB ホームページ: <https://www.uochb.cz/>

IOCB の紹介: [https://www.youtube.com/channel/UCJGkWwXm0v41ZPTcY1y7\\_uQ](https://www.youtube.com/channel/UCJGkWwXm0v41ZPTcY1y7_uQ)

IOCB には、シンポジウムに参加される以下の著名な先生方がおられます。

### Computational Chemistry

Zdeněk Havlas (IOCB Honorary Chair)  
Pavel Hobza (IOCB Distinguished Chair)  
Pavel Jungwirth (IOCB Distinguished Chair)  
Lubomír Rulíšek (Senior research group)

### Organic Chemistry

Josef Michl (Senior research group)

シンポジウム会場のキャパシティは、120～130 名ほどで、日本からの参加者は例年なら 30～50 名ですが、今回はさらに多くても可能とのことです。



開催場所(IOCB メイン棟)



IOCB に新しくできた有機合成棟

## プラハについて

プラハは、チェコ共和国の首都であり、同国最大の都市です。また、中央ヨーロッパ有数の世界都市です。世界で最も美しい街に数えられ、市内中心部をヴルタヴァ川（ドイツ語名：モルダウ）が流れ、古い町並み・建物が数多く現存しており、毎年海外から多くの観光客が訪れています。

(Wikipedia より)





- 交通：郊外にヴァーツラフ・ハヴェル・プラハ国際空港があり、CSA チェコ航空のハブ空港として機能している。空港を発着する鉄道や地下鉄はないが、バスを利用して 2 種類のラインの地下鉄駅にアクセス可能。また、エアポート・エクスプレス(空港シャトルバス)やタクシーでも市内まで移動が可能。
- 気候：プラハの 5 月の平均気温 13.6 度, 降水量 77mm  
(平均最高気温 18.8 度, 平均最低気温 8.4 度)  
(参考) 東京の 5 月の平均気温 18.2 度, 降水量 138mm
- 通貨：チェコ・コルナ(CZK) (1CZK=約 5.2 円)
- 時差：3 月 4 週目～10 月 4 週目(サマータイム期間中)は時差 -7 時間
- 公用語：チェコ語 (Wikipedia より)

また、プラハは京都市の姉妹都市です。1960 年(昭和 35 年)、プラハ側から京都市へ姉妹都市提携の申し込みがあり、それ以来、1991 年(平成 3 年)にチェコスロバキア大統領・プラハ市長が京都を訪問、京都市長がプラハを訪問し、次第に姉妹都市提携の話が具体化していきました。1996 年(平成 8 年)、京都市長がプラハを訪問し、姉妹都市盟約を締結しました。  
(京都市のページより (<http://www.city.kyoto.lg.jp/sogo/page/0000067528.html>))

## プラハの観光

プラハ城は、ルネッサンスやゴシック、バロック様式といった様々な建築様式で建てられているのが特徴。近くには、バロック様式の建築物として名高い聖ミクラーシュ教会や、ストラホフ修道院などもあります。ユダヤ人街では、歴史あるシナゴグ(ユダヤ教の会堂)も多くみられ、新市街にはプラハ随一の繁華街ヴァーツラフ広場があります。スメタナ、ドヴォルザークを生んだ音楽の都でもあるプラハは、チェコ・フィルハーモニーの本拠地としても知られ、多くのホールや劇場があり、毎年 5 月にあるプラハの春音楽祭は有名。また、絵画やポスターで有名なミュシャの美術館もあります。

(JTB プラハの観光情報より ([http://www.jtb.co.jp/kaigai\\_guide/e.europe-russia-c.asia/czech\\_republic/PRG/](http://www.jtb.co.jp/kaigai_guide/e.europe-russia-c.asia/czech_republic/PRG/)))



プラハ城とカレル橋 (7th JCS ホームページより)

ストラホフ修道院は、見事な図書コレクションを誇る稀有な修道院として知られています。プラハ城正門から徒歩 10 分ぐらいのペトシーンの丘の高台にあり、12 世紀中ごろに創立されたボヘミア最古のプレモンストラート会の修道院です。ここを歴史ある修道院と

いう以上に有名にしているのが、その見事な図書コレクション。入口から階段を登って 2 階へ上がると、ゴージャスなスタッコ細工やフレスコ画の天井に囲まれ、壁いっぱいに蔵書が並ぶ「哲学の間」と「神学の間」の二つの部屋に仕切られた図書室が現れ、その荘厳さにひきこまれます。

(AB-ROAD の観光情報より (<https://www.ab-road.net/europe/czech/prague/guide/03158.html>))



ストラホフ修道院近くのカフェより



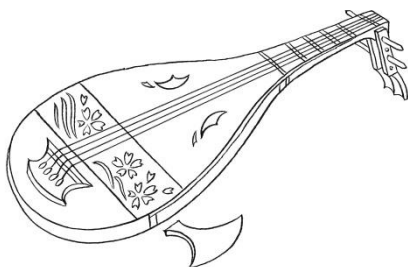
ストラホフ修道院 (図書室)

## チェコのビール

チェコと言えば、ビールが世界的に有名。世界的に普及しているピルスナースタイルの発祥の地です。ビールの国民一人当たりの年間消費量は世界一です。すっきりとした飲み口のピルスナービールはヨーロッパでは珍しい軟水のチェコで生まれ、日本人の口にもピッタリです。 (阪急交通社のページより (<http://www.hankyu-travel.com/heritage/czech/prague.php>))

ピルスナー・ウルケル: チェコのブルゼニ (ピルゼン) で 1842 年から生産されているビール。現在は SAB ミラーがピルスナー・ウルケルのブランドを所有しており、デコクションと言う、古典的な糖化方法を 3 回繰り返す事により品質を維持している。コクが強いが、一般的なラガービールよりもアルコール濃度は低く、ホップの苦味が強い。ホップが風味の重要な要素であり、また、軟水が醸造に利用されている。 (Wikipedia より)

ブドヴァイゼル・ブドヴァル: チェコ・南ボヘミア州のチェスケー・ブジェヨヴィツェ市で作られるビール銘柄「ブドヴァイゼル」(Budweiser) の 1 ブランド。ブドヴァイゼル・ブドヴァルは地下 320 メートルより汲み上げた軟水と、粉末にした麦、高品質で知られるザーツホップを使用。オーソドックスではあるが、厳選された原料を使ったプレミアムビールであると言える。ピルスナーの特徴である淡い黄金色をしておりドライで爽快感がある。ボディはやや強め。喉ごし後にホップの苦みと豊かな香りが広がる。 (Wikipedia より)



## 志田先生、Parr 先生、諸熊先生のこと

中辻 博

量子化学研究協会研究所

最近、私にとって大切な先生や大先輩をなくしました。志田先生、Parr 先生、諸熊先生です。いずれの先生も私にとってかけがえのない方で、若い時から今日に至るまで陰に陽にお世話になり私を導いてくださった方々です。

志田忠正先生は、京都大学理学部化学科の先生で私が SAC-CI を完成させてそれで有機ラジカルのハイパーファインカップリング定数を計算していたころ、実験的にいろいろな基本的な有機ラジカルのそれを測定され、「あなたの SAC-CI でこの大きな値を説明できますか？」と、当時米澤先生の研究室にいた私を訪問されたことから始まります。まだ、赤レンガのころだったように思います。その質問には SAC-CI が難なく答えを出してくれて、以来いくつかの共同研究をさせていただき、とても勉強になりました。先生は有機分子を壊すことなくカチオンやアニオンにする素晴らしい溶媒を発見され、次々と重要な化合物のカチオン、アニオンラジカルを作り、その ESR スペクトルなどを測定されました。素晴らしいご研究です。後に京大広報に書かれた先生の文の中に「ここで（新渡戸稲造の）「武士道」を持ち出したのは、「武士は金銭そのものを卑しめ…、教育において第一に重んじられたのは、品性を確立することであった…」というくだりを紹介したかったからである。」との言葉があるが、先生はまさにそのような品格の方でおられました。先生には、京大在職中は言うに及ばず、私たちが量子化学研究協会研究所を開いてからも、折につけご助力いただき、いつも感謝いたしておりました。また研究所の 5 月のシンポジウムにはいつもご出席頂き、ご講演、ご挨拶なども頂戴いたしました。その先生は 2017 年 3 月 2 日に他界されました。その 4 月 11 日に「量子の世界」春号をお送りしたところ、奥様より先生がお亡くなりになったとのお知らせを受け驚くとともにぼうぜんとなりました。

Robert G. Parr 先生は、私が 30 歳のとき、ポスドクとして留学先の New York の Yeshiva Univ. の Jeremy I. Musher 先生の所から Univ. North Carolina に移りお世話になって以来の「アメリカの先生」です。Musher 先生は私が Chapel Hill に移ってからしばらくして惜しくもお亡くなりになりました。私が Parr 先生の研究室にいたころ先生は Density Functional Theory の研究を開始されたところで、同じ部屋にいた Mel Levy さんはじめ多くのお弟子さんを育てられ、その分野を開拓されました。誰もが口をそろえて「Parr 先生は良き研究者であるだけでなく良き教育者である」といわれますが、まさにその通りです。私にもいつも“Be optimistic”といわれ、おかげで私はずっと「楽天主」でとおしてきました。怖いもの知らずに難しい問題にも挑戦できたのも、生来のアホさとともに、先生のおかげなのだと思います。私が 2003 年のクリスマスカードに「シュレディンガー方程式も解けたように思う」と書いたらいつも何の返事もない先生から直ちに返事が来て「これはどういうことか直ちに知らせてくれ」とのお返事をいただきました。ちょうどその時 PRL に投稿中だった論文をお送りしたらとてもお褒め頂き、その後いつも encourage していただきました。その先生も、私がその関連のパリでの学会に Parr 先生のお弟子さんたちと一緒に出席の最中、2017 年 3 月 27 日に亡くられました。先生に「その後仕事はどうなっている？」と聞いていただけないと思うととても寂しい思いです。





諸熊奎治先生は、京都大学工学部の古川淳二先生の研究室の大先輩で、笛野高之先生の共通の教え子であるとともに、福井謙一先生、米澤貞次郎先生の共通の弟子でもあります。諸熊先生のスゴサは学生時代から加藤博史先生からも常々伺っていましたが、実際に親しくお会いしたのは私が New York に居ました 1973 年に Rochester のお宅にお伺いした時です。そのころの先生はまだとてもお若く素晴らしい研究を次々発表しておられました。以来分子研にお帰りになってからも計算機利用のたびにご訪問しいつも議論させていただきました。イギリスの Cambridge で Nick Handy 先生が organize された国際会議の時、先生は ONIOM 法の構築に夢中で、「ちょっと聞いてくれ」といわれて、外庭で 4 角形の formulation を伺い、とても面白いアイデアだと思いました。その後数年でその方法も完成され Gaussian の上で広く利用されています。先生は研究にいつも邁進しておられお忙しくしておられましたが、そんな中でも私には心優しいお兄さんのような存在でした。何かあるたびにいつも相談させていただき正しい答えに導いていただきました。諸熊先生はずっと私たち研究者のお見本でおられ、その高度な activity は高い尊敬の的でした。その先生も 2016 年 4 月に心臓のご病気になられ、かなりご回復になっておられたにもかかわらず、2017 年 11 月 27 日に他界されました。世界・日本の量子化学にとってもさることながら、私にとってとても寂しい限りです。

最後に、志田成子夫人、Jane Parr 夫人、諸熊盈子夫人およびご家族ご親族の皆様の嘆きはいかばかりかと拝察いたします。心から哀悼の意を表します。

以上、私の半ば私的な立場から、3 人の偉大な先駆者に心からの賛辞と御礼を申し述べるとともに、そのご逝去を深くお悔やみ申し上げます。

2017 年 12 月 4 日記す



## 編集後記

### 1. 量子化学研究協会研究所のアクティビティ

#### (1) シュレーディンガーメダル受賞、WATOC での受賞講演が行われました。

量子化学研究協会研究所の研究所長：中辻 博が、WATOC の 2016 年度 Schrödinger medal を受賞しました。受賞理由は、“For the discovery and development of general methods of solving the Schrödinger equation of atoms and molecules” です。WATOC (World Association of Theoretical and Computational Chemists) は、1982年に設立された実験家も含む理論化学者の権威ある世界組織であり、Schrödinger medal は世界中から1年に1人という権威ある賞です。



( <http://watoc.net/watoc.schroedinger.html> )

2017年8月に Munich, Germany で開催された WATOC Congress にて、授賞式及び受賞講演が行われました。

#### Schrödinger Medal

#### 受賞講演

(Plenary Session F: 2017/08/31 9:00~9:40)

Exact general theory for solving the Schrödinger equations of atoms and molecules: Free-complement theory and applications

Hiroshi Nakatsuji

Quantum Chemistry Research Institute, Kyoto, Japan

#### (2) 「SAC-CI・1日講習会」のご報告

2017年6月25日に、キャンパスプラザ京都(京都駅前)にて、「SAC-CI・1日講習会」を開催しました。本講習会では、Gaussian 搭載の SAC-CI 法の正しい計算方法とノウハウを、実際の演習と共に、1日で伝授しようという目的で行いましたが、好評でした。

次回以降の講習会は、京都だけでなく東京、福岡等での開催も計画しています。また、より高度な応用、テーマを絞った応用や実例等の講習会も計画しています。また、基礎的な量子化学の講習や、シュレーディンガー方程式の正確な解法(Exact 研究)に対する講習も計画しています。

#### (3) 研究所移転のご報告

量子化学研究協会研究所は、2017年6月9日に下記住所に移転いたしました。

〒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

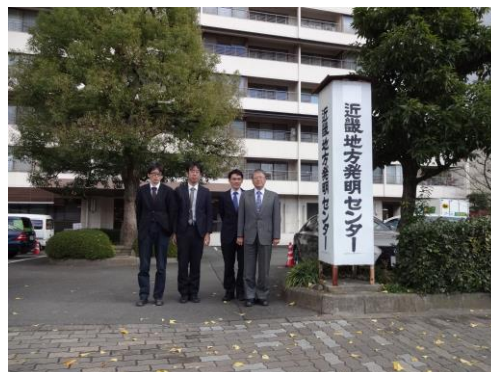
TEL : 075-634-3211 (変更なし)

FAX : 075-634-3211 (変更なし)

アクセス: 京阪電車 出町柳駅より、川端通り沿い下る 徒歩 7 分



研究所のある建物は、近畿地方発明センターといわれたところで、現在は京都技術科学センターと改名されています。ここは、京都大学吉田キャンパスにも近く、大学の雰囲気があり、研究に最適な環境です。鴨川沿い東側に位置し、鴨川公園に面していて、川のせせらぎに野鳥も多く、自然がきれいなところですよ。東一条通りからは大文字山や吉田山も望めます。お近くにお越しになる際は、是非お立ち寄りください。



「近畿地方発明センター」の看板が目印

## 2. 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、昨年の 2016 年 3 月 24 日に京都市より「認定 NPO 法人」に認定され、1 年半が経過しました。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。

私達、量子化学研究協会・研究所は、科学上の大きな夢とそれを実現する研究活動に意義があるとご賛同して頂ける方に、ご寄付をお願いしております。**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があること、**という決まりがあり、少額(3,000 円以上)でも多くの方からの毎年のご寄付が大変ありがたく、それが、私たちが社会からサポートされている一つの証とされています。1 年半の現在で延べ 100 名ほどの方からご寄付をいただいています、心より感謝申し上げます。ご寄付頂きました御ところごしは、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/>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

### 3. 「量子の世界」へご寄稿のお願い

「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、それをいかに生き活きと写しだすかを目的に研究していると言えます。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7号の発刊は2018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.6, 2017 年 秋号

2017 年 12 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@qcrl.or.jp

電話・FAX: 075-634-3211

©2017 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.qcrl.or.jp/>)にてご覧になれます。

