特定非営利活動法人量子化学探索研究所 (Institute for Quantum Chemical Exploration)

IQCE-NEWS No. 001

IQCE-NEWS は量子化学探索研究所の活動に関連する最新情報を会員の皆様へお伝えするものです。今回はその第一号ですので会員以外の方々にもお届けいたします。併せて IQCE ホームページ http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/IQCE/ もご利用ください。

◇◇◇◇ 巻 頭 言 ◇◇◇◇

埼玉大学 高柳 敏幸

NPO法人量子化学探索研究所の設立に際して
－化学反応研究の活性化への期待－

このたびの量子化学探索研究所設立、心よりお祝いを申し上げます。大野先生、前田先生を始めとして、関係者の方々におかれましては、設立に際し大変なご苦労があったものと想像します。私は今回の研究所設立をきっかけとして、日本の化学反応研究が活性化されるものとおおいに期待しております。

言うまでもありませんが、研究所の設立のきっかけは、何と言っても GRRM プログラムに組み込まれている新しい反応経路探索のアルゴリズムの開発にあります。これにより、これまで人間の直感に頼っていたポテンシャルエネルギー曲面上の反応経路探索が、計算機を使って自動的に、しかもすべての経路を余すことなく見つけられるようになりました。私は数年前 HCl が数個の水分子と結合して、H^+と Cl^-にどのように酸解離するかを原子レベルで理解するために、GRRM を使わせていただきました。このとき、経路探索のアルゴリズムの素晴らしさに触れることができ、その有効性を目の当たりにした次第です。さらに、ここ数年の大野先生、前田先生、諸熊先生の反応経路探索に関する研究の発展には目覚ましいものがあります。複雑な触媒サイクルの反応機構を完全に解き明かしたり、教科書に載っているような反応機構が間違っていることを示したりと、飛躍的な進歩を遂げています。その意味で、今回の研究所の設立は全く自然な流れであると感じています。

反応経路探索の成功は化学反応の研究をさらに先へと進めるきっかけとなるでしょう。反応経路がわかるということは、反応を原子レベルで理解する極めて重要な最初のステップであることは言うまでもありません。しかしながら、化学反応にはまだまだ未知なことが多いのが実態です。最近の研究では、反応の動力学は固有反応座標(IRC: Intrinsic Reaction Coordinate)に沿って必ずしも起こる訳ではないことが徐々に明らかになってきています。反応の生成物を決めるには、Bifurcation 点と呼ばれるポテンシャル曲面上の分岐点が重要であることが予測されていますが、この付近でのどのような動力学が分岐を決めるのかはまだよくわかっていません。これは、化学反応の理解の根幹に関わる極めて重要な問題です。生物ではある種のタンパク質が反応の分岐をコントロールしているはずですが、こうした問題にも深く関連しているはずです。最近話題のローミング反応と呼ばれる現象もこれまで考えられてきた反応経路とは違った場所で起こります。これら以外にも化学反応に関わる様々な重要な問題がまだまだ未開拓です。

お問合せ先：ohnok@m.tohoku.ac.jp
©2013 Koichi OHNO

繰り返しになりますが、研究所設立がきっかけとなって、化学反応の重要な問題を解き明かす研究がますます盛んになることを期待します。微力ながら研究所の今後の発展に貢献できることを願い、さらに日本の化学反応研究の発展に少しでも役に立てたらうれしく思います。

最後に記念すべき第一号のニュースレターの巻頭言執筆の機会を与えていただいた大野先生に大変感謝いたします。

◆ 量子化学探索研究所設立記念講演会･祝賀会

IQCE の最初の公式行事として、設立記念講演会・祝賀会が３月２７日学士会館で開催されました。年度末の平日にもかかわらず、多数の方々が講演会及び祝賀会に参加されました。

講演会:

武次徹也先生（北海道大学教授、IQCE 副理事長）の司会で、IQCE 設立記念講演会が開始され、以下の講演が行われました。

「量子化学探索とその拠点形成」　大野公一（東北大学名誉教授・IQCE 理事長）
量子化学に基づいて化学の可能性を探索する「量子化学探索」という新しい学問領域が誕生しつつあること、および、その端緒となった反応経路自動探索法の創始から IQCE 研究所誕生までの経緯について述べられ、企業と学界とを相互に結んで世界に貢献する新しいタイプの組織として､NPO 法人 IQCE が量子化学探索の世界的拠点となることを目指していることが紹介されました。

「GRRM 戦略とその応用」　前田理（北海道大学助教・IQCE 役員）
化学反応経路自動探索法（GRRM 戦略）の現状とその応用について、わかりやすい解説がなされ、数々の画期的かつ魅力的研究例が紹介されるとともに、GRRM 戦略のさらなる応用・発展の可能性について、新しい化学を切り拓く「量子化学探索」の未来が展望されました。

祝賀会:

佐々木岳彦先生（東京大学准教授、IQCE 役員）の司会で、IQCE 設立記念祝賀会が開催されました。
来賓からの御祝辞・乾杯御発声に続き、あいにく御欠席された諸先生からの祝電やメッセージの披露、IQCE 役員および出席者からの御挨拶・御祝辞があり、最後に IQCE 理事長から御礼の挨拶が行われ、そのあと記念撮影があり、たいへんなごやかなうちに祝賀会を散会する運びとなりました。

来賓祝辞:

原田義也 先生（東京大学名誉教授）

荻野博 先生（東北大学名誉教授・元放送大学副学長）

乾杯(御発声):

朽津耕三 先生（東京大学名誉教授）

お問合せ先：ohnok@m.tohoku.ac.jp
©2013 Koichi OHNO

お花：

東北大学理論化学研究室（美齊津文典教授）
御一同様

大阪大名誉教授 笠井俊夫先生

祝電：

Quantum Chemistry Research Institute

Kyodai Katsura Venture Plaza, North Building 107
1-36 Goryo Oohara, Nishikyo-ku
Kyoto 615-8245, JAPAN

Tel: +81-75-634-3211
Fax: +81-75-634-3211

御祝電

東京都港区海岸三丁目9番15号 LOOP－X
量子化学探索研究所
研究所長、理事長
大野 公一 殿

今年は例年になく桜の花もあでやかで、量子化学探索研究所の門出を祝うかの様です。

大野 公一先生、このたびは、NPO法人・量子化学探索研究所の開設、誠におめでとう存じます。本日はあいにく出席できなくなり、京都より祝電を送らせていただきます。

先生の反応経路探索のご研究は、その始めのころより興味を持って注目いたしておりましたが、ものの見事に展開され、本日はそのご研究を中心とされる研究所の設立にまでに至りましたこと、誠に慶賀の至りでございます。講演会や祝賀会に名を連ねておられる立派なご同道の先生方にも、心よりお祝い申し上げます。

大学や国の研究所とは違って、ある研究をしていきたいからという純粋な想いだけで設立する研究所は、経済的基盤や運営などにおいて大変なこともあろうかと思います。私達の量子化学研究協会も、設立以後、多くの皆様方の陰に陽にのご支援を頂いて、何とか活動を続けてまいりました。その間、色々の経験をしてまいりましたが、今頃になってやっと当初目的としていた研究の進展を見通せるようになってまいりました。その意味で、私たちの研究所もまったくこれからの研究所であり、先生と手を携えて将来の発展を計ってまいりたいと存じます。今後とも、何卒よろしくお願いいたします。

本日は、貴研究所の門出を心より祝福いたしたいと存じます。本当におめでとうございます。

平成25年3月27日
量子化学研究協会、一同
代表 中辻 博

お問合せ先：ohnok@m.tohoku.ac.jp

©2013 Koichi OHNO

祝賀会記念撮影:

◆ 新会員の皆様へ

この度は、特定非営利活動法人量子化学探索研究所会員に御入会いただき、誠にありがとうございます。会員証・会員番号は、会員としての特典を得るときに必要になることがありますので大切に保管下さい。e-mail address 御登録の会員には、IQCE-News を配信させていただきます。e-mail address に変更がございましたときには、事務部まで御連絡ください。IQCE ホームページにおいて、諸事の御案内、御連絡をさせていただきます。会員限定ページ（非公開資料を含む）の開設も予定されており、さらにホームページ機能を充実させていく予定です。IQCE ホームページをどうぞ御活用ください。

◆ 最初の通常総会

IQCE の活動を今後どのように進めて行くか、会員の皆様のお声を反映させるべく、通常総会が開催されます。第１回の通常総会は、下記の要領で開催されます。なお、議決権は正会員の資格を既にお持ちの方に限られますが、賛助会員および当日までに御入会のお申し込みをされた方もオブザーバーとして参加することができます。

＜IQCE 通常総会＞

日時：５月１５日（水）18:30－19:30（理論化学討論会・講演終了後）
場所：「福岡市健康づくりセンター（あいれふ）」
第 16 回理論化学討論会（http://www.rkk-web.jp/theochem16/）

◆ シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア２０１３」

毎年秋に行われております表記のシンポジム、本年も開催されます。
日時：９月２７日（金）～９月２８日（土）
場所：京都大学福井謙一記念研究センター

お問合せ先：ohnok@m.tohoku.ac.jp

©2013 Koichi OHNO