

# IQCE-NEWS

No. 107

## ◇◇◇◇ 巻頭言 ◇◇◇◇

IQCE のますますのご発展を祈念して

台湾・国立陽明交通大学 増原 宏

大野先生からこの巻頭言を書く機会を与えていただき、何を書こうかと考え始めた矢先に先生の訃報が届いた。お元気なご様子でメールのやり取りをしていたので、驚愕し今も信じられない。そのメールの最後に、「片山正夫先生が初代の東北大学「理論化学研究室」の出身者として、国際的視点から書くように」とあったので、お言葉に甘えて私的な経験を書かせていただき、IQCE のご発展を大いに期待するとともに、大野先生のご冥福を心からお祈り申し上げます。

大野先生は主宰されていた東北大学理論化学講座を誇りに思われ、講座同窓会も開き、世代の違う卒業生ともお話しする機会を作られたので、学界以外でも大野先生と意見交換することができた。私が卒論を開始した1965年当時は、小泉正夫先生が理論化学講座を担当され、日本で最初のフラッシュホトリシスを駆使し、光化学反応初期過程の動力学的研究を展開されていた。私は色素のラジカル反応中間体の電子スペクトルを測定し、その理論的帰属をするように奥田典夫助教授から指導を受けた。当時の理学部化学には量子化学系の研究室として安積宏教授、中島威教授がおられたが、私は独自に量子化学を勉強しながら、日本にはないと思って開設型Pariser-Parr-Pople近似パイ電子状態計算のプログラムをFortranで800行くらい書いた。そのなかで福井謙一先生と長倉三郎先生の量子化学研究の大きな流れを認識し、また能力のなさを自覚し、100%の実験屋になるべく、心機一転阪大基礎工(又賀昇研究室)の博士課程に転学した。55年前のことである。

以来レーザーを駆使して分子新現象の探索と解明の研究を展開し、2007年に大阪大学応用物理を退職した。その後は、台湾は新竹にある国立陽明交通大学に講座教授として勤務し、現在では顕微鏡下の集光レーザービームに誘起される光圧を用いて、溶液界面に特異的なナノ粒子やたんぱく質の集合体形成とそのダイナミクスの研究をしている。この光圧化学の研究を可能にする場として15年前に台湾の大学を選んだ私にとって、退職後に特定非営利活動法人を設立し、独自に研究活動を展開してこられた同年輩の大野公一先生のIQCEと中辻博先生のQCRIは衝撃的なニュースであり、感動し心から敬意を表してきた。

IQCEの研究の独自性また具体的な問題の予測解決における高いポテンシャルは、まさに東北大学理論化学研究室の名前にふさわしい活動といえよう。このIQCE Newsは、GRRMプログラムの状況、開発、応用などを中心に、門外漢の私のサイエンス心をくすぐる。英語版も併せて発刊することにより、アジアの研究者も大いに発奮することになるのではなかろうか。15年前に私が台湾に誘われた時には、10年から20年台湾のサイエンスは遅れているからと言われたが、いまでは台湾はもとよりアジアの実力は高い。また第三次世界大戦が始まったとも感じられる状況下、半導体、AIを中心に科学技術のパラダイムシフトが起こっているように思われ[1, 2]、IQCEが世界に、アジアに確固たる地位を確立する絶好のチャンスであると感じている。

[1]増原宏、光化学、53, 94 (2022)、[2]増原宏、高分子、71, 102 (2022)

## 理事長 大野公一先生 ご逝去のお知らせ

NPO 法人量子化学探索研究所 理事長・研究所長である東北大学名誉教授 大野公一先生が令和 4 年 10 月 31 日に逝去されました。

大野公一先生は、東京大学理学部化学科卒業ののち東京大学大学院理学系研究科に入学後、1972 年に東京大学教養学部助手として着任され、1973 年に理学博士 (東京大学) を取得後、助教授 (1980 年)、教授 (1989 年) を歴任されました。1994 年に東北大学理学部化学科教授に着任され、理論化学講座を担当されました。2009 年に東北大学を定年退職後 (東北大学名誉教授 称号授与)、豊田理化学研究所常勤フェロー (2013 年 3 月まで) を務められました。2013 年 2 月に NPO 法人量子化学探索研究所を設立され、理事長・研究所長に就任されました。



大野公一先生の御研究はポテンシャル表面を解析する新たな研究手法を独自に開発し、理論化学分野における新パラダイムを構築したもので以下の 3 つのカテゴリーに大別されます。

### (1) 分子内ポテンシャル：分子振動解析法の開発

分子振動のヒュッケル法ともよぶべき新手法(MO/8 法)を開発し、六角形の炭素環を含む多環芳香族炭化水素やハニカム状ナノカーボンネットワークの振動状態および振動電子状態の予測を簡便かつ高精度で行う計算法へと発展させられました。また、ポテンシャルの非調和性を効率的に考慮し、基本音のみならず従来取り扱いが非常に困難であった結合音および倍音をも高精度で計算することができる振動解析法を開発されました。

### (2) 分子間ポテンシャル：分子表面解析法の開発

原子をプローブに用いて分子表面特性を実験的に観測する 2 次元ペニングイオン化電子分光法 (2D-PIES 法) を開発し、さらに原子・分子間ポテンシャルの新しい解析手法として重なり積分展開法 (OE(overlap expansion)法) を開発して、原子が分子表面に接近した際の分子と原子の相互作用ポテンシャルの特性 (硬軟粘着性) を実験的に明らかにするとともに、理論的に評価することを可能にされました。また、原子衝突イオン化電子分光実験からイオン化状態と衝突方向を特定し、理論解析を加えることで、複数の電子波動関数 (Dyson 軌道) の空間的広がりを決定されました。

### (3) 反応系ポテンシャル：反応経路解析法の開発

反応が関係するポテンシャル表面の特徴を分析して、反応経路がポテンシャルの非調和下方歪 (Anharmonic downward distortion, ADD) に誘導されることを発見されました。量子化学計算で求められるポテンシャルエネルギー表面において、ADD を指標として、平衡構造から遷移構造や解離構造へと反応経路を登坂するアルゴリズム (超球面探索法: Scaled hypersphere search (SHS)法) を創出し、従来殆ど不可能とされていたコンピュータによる化学反応経路の自動探索を実現することに成功されました。これによって、従来報告されてこなかった多くの反応経路やプリズム型炭素単体、BCNOS の 5 原子で構成される異性体などの発見に至りました。この理論化学計算法の確立により、更なる環境調和型省資源合成経路や有用な新触媒・新化合物の分子設計に資することが期待されます。

大野先生はこれらの御研究に関して、原著論文 280 報、総説 28 報ならびに多数の著書を発表されました。これらのご功績に対して日本化学会学術賞が授与されております。また、日本化学会フェロー、分子科学会名誉会員として表彰されております。特に (3) に基づく GRRM プロ

プログラムの開発と普及が、当法人設立の主要目的となっております。現在では、GRRM ユーザーグループは 309 (国内 192、海外 117) に至り、活発な研究が展開されております。大野先生はご逝去の直前まで、ご自身の研究を推進されるとともに、研究助成、奨学助成を通じて若手からシニアに至る研究者への支援や関連分野の学術交流に尽力してこられました。大野先生の理論化学へのご貢献、並びに当法人設立と発展への多大なるご尽力に感謝いたしますとともに、謹んでご冥福をお祈り申し上げます。今後とも、当法人に対して格別のご支援、ご協力を賜りますようお願い申し上げます。

NPO 法人量子化学探索研究所 役員一同

## 大野公一先生から教わったこと

東北大学 岸本直樹

大野先生とは昨年9月の学会でお会いしたのが最後になってしまいました。不出来な教え子をまだまだ叱咤激励していただけるものと思っていたのですが、残念でなりません。今回、機会を頂きましたので、大野先生から教わったことの中から、思い出を2つほど書かせていただこうと思います。

大学院に進学し、駒場キャンパスの大野研究室の一員にさせていただいて間もない頃、毎週月曜日の午前に開かれていた勉強会(輪講)では、「量子物理化学(大野公一著、東京大学出版会)」を題材に、テキストを深く読み深く考えることを教わりました。あるとき、水素原子の発光スペクトルの波長の規則性をバルマーがどのように考えて発見したのかと大野先生が疑問を呈されました。助手の山門英雄さんと一緒にあれこれ考え、しどろもどろになりながら珍説を述べたことを覚えています。翌週だったか記憶が曖昧ですが、少し後に大野先生がご自身の解答を披露され、極めて自然な流れに魅了されました。この「バルマーの謎」は大野先生が若い頃から考えていた問題らしく、先生のウェブサイト([https://iqce.jp/ohno/KOICHI\\_OHNO.HTM](https://iqce.jp/ohno/KOICHI_OHNO.HTM))にサイエンスパズルへの挑戦として纏められています。大野先生の、書物や論文を深く読み深く考える態度は、後に GRRM プログラムとして開花する非調和下方歪み追跡(ADDF)法の発想にも繋がっているように思います。

東北大学大野研究室のスタッフとして衝突イオン化電子分光の実験テーマを考えている時、大野先生から「こっそり試薬を買って自分で実験して確認してから学生にテーマを渡すぐらいでないと駄目だ」と言われました。「とにかくやってみよう」のような曖昧な態度で学生を指導することをたしなめられたように感じ、身が引き締まる思いがしました。その頃の私は、紫外光電子分光法では観測されにくい電子相関バンドが衝突イオン化電子分光法で観測されることに興味を持っていましたが、大野先生はサテライトバンドよりもメインバンドに興味があり、ご自身が提唱されていた分子軌道の空間的広がりや立体異方性の研究を進展させることを常に考えておられました。いま思えば、様々な化学分野の研究者にも評価されるような研究を常に心掛けておられたのだと痛感しています。

大野先生のご研究を振り返った時、特に「分子軌道の空間分布」と「化学反応に関わるポテンシャルエネルギー曲面」の2つのテーマに於いて、素晴らしい成果を残されたと感じています。分子の物理化学研究に携わった者であれば、これが大変な業績であることは理解できるのではな



いかと思います。また、大野先生が尊敬する福井謙一先生のご業績に少し通じるものがあるような気がします。あちらで何かお話されているかもしれませんね。また、大野先生はご自身の才能を出し惜しみすることなく、多くの教え子を研究者に導かれました。私も研究と教育の様々な場面で大野先生から教わったことを思い出すことが今後たくさんあると思います。人生の様々な場面でご指導いただき、本当に感謝の念に堪えません。大野公一先生のご冥福を心よりお祈りしております。

## 化学反応経路探索のニューフロンティア 2022 の開催

慶應義塾大学理工学部化学科 畑中美穂

シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2022」(SRPS2022)を9月18日に慶應義塾大学矢上キャンパスで開催しました。SRPS2022の実行委員は、慶應義塾大学理工学部化学科の稲垣泰一先生、慶應義塾大学量子コンピューターセンター(KQCC)の渡邊宙志先生、JSR株式会社の大西裕也様と私の4名で務めさせていただきました。この4名は、全員理論化学出身で、現在KQCCと一緒に活動しています。招待講演には8名の先生をお招きし、触媒反応や生体分子の反応、電気化学界面反応、星間分子の反応など、幅広い物質の化学反応の反応経路のお話を伺うことができました。また、2件の一般講演と40件のポスター発表があり、とても活発なご議論をいただきました。台風が接近する中での開催でしたが、92名の皆様に参加していただいたこと、厚く御礼申し上げたいと思います。

SRPSはIQCE初代理事長の大野公一先生が2009年に始められたもので、今回で14回目の開催となりました。第12回、13回がコロナ禍でオンライン開催となったため、3年ぶりのオンサイト開催となりました。私事ですが、慶應に着任したのが3年前、丁度コロナ禍でキャンパスが閉鎖になるタイミングでした。そのため、私の研究室に配属された第1期生たちはオンラインでの卒論発表や学会発表しか経験していない状態で、彼らが修士課程を修了する前に、一度だけでも対面発表で揉まれる経験を積ませてあげたいと切に願っていたところでした。実際に、口頭会場、ポスター会場での白熱した議論の様子を目にし、改めて顔と顔を突き合わせて議論を交わすことの重要さをかみしめました。

SRPS2022開催にあたり、大野公一先生には、多くのご助言をいただきました。SRPS当日も、議論を盛り上げていただき、これからも様々な面でご教授賜りたいと思っていた矢先に、ご逝去の報に接したため、まだ信じられない気持ちです。大野先生は、IQCE設立時から反応経路自動探索(GRRM)プログラムの開発、普及、教育活動にご尽力されており、現在、GRRMはアカデミアの理論化学者だけでなく、多くの実験化学者、企業研究者にも広く利用されるようになりました。実際に、SRPS2022の招待講演者の先生方のうち、3名の先生が実験化学を主戦場としながら、GRRMも活用されている方でした。大野先生のご尽力なくして、現在のような普及はなかったと思います。まだまだ大野先生から学びたいことはたくさんありました。先生の示唆に富んだお話を直接うかがうことができなくなることが、残念でなりません。これからも、大野先生から学んだことを胸に、理論化学の発展のために尽くしていきたいと思います。

## GRRM 情報

### ●GRRM 商用版

- ・周期構造への対応、速度論を考慮した探索、探索手順をカスタマイズする新機能を装備し大幅に機能強化された [GRRM20](#) が市販されています。

各種の GRRM プログラムの機能比較は[こちら](#)をご参照ください。

- ・GRRM17 とそれ以前の非商用版の配布方式は従来通りです。
- ・GRRM1.22 に multinode 並列・node 内並列機能を加えた [GRRM-Basic](#) と GRRM11 の multinode 対応版 [GRRM-Neo11](#) が [HPC システムズ](#) から頒布されています。

- GRRM プログラム Web ページ [IQCE Web ページ](#)内に [GRRM のページ](#)が開設されています。

### ●GRRM の利用申請

- ・GRRM17 : アカデミック利用申請は [Science Technology 社](#) で行えます。GRRM17 利用申請後 [AFIR ホームページ](#)で AFIR 利用登録が必要です。[AFIR ホームページ](#)では GRRM17 のマニュアルや全 option の説明が閲覧でき、GRRM17 のフォーラムやチュートリアルがあります。
- ・GRRM1.22, 11, 14 : アカデミック研究者は、GRRM1.22, 11, 14 については [GRRM ホームページ](#)で利用申請フォームをダウンロードして申請できます。GRRM14, 17 では、プログラムの不正使用防止の[セキュリティーツール](#)(有料)が必要になります (GRRM1.22, 11 は不要)。
- ・GRRM1.22 は研究者以外の学生・教師・技術者にも利用できるよう[利用条件が緩和](#)されました。

### ●GRRM 関連論文集「化学反応経路自動探索 論文集」

Vol.10 で発刊を停止しましたが、残部 (Vol.4-8 等) は、イベント時に配布いたします。

### ●GRRM 関連論文リスト・被引用ランキング

GRRM Web ページに [GRRM 関連論文リスト\(265 件\)・被引用ランキング](#)が掲載されています。被引用回数 300 回以上 2 報、100 回以上 12 報、50 回以上 24 報となっています。論文リストに未収録論文情報を [mail@iqce.jp](mailto:mail@iqce.jp) 宛ご連絡下さい。リストを up-date いたします。

### ●GRRM ユーザガイド補遺

[会員ページ](#) (会員ページ: ID=IQCE2022)で閲覧できます。Q&A に GRRM 利用上の様々な問題解決に役立つノウハウや注意点が多数(88 項目)掲載されています (Last-update: 2022.10.21)。

- GRRM 出力データ可視化ツール [GRRM-GDSP](#) 最新版 2.05(2022.10.27 更新)を download できます。探索結果 127 件が Web 上に公開されており、面白い反応経路や構造、他の手法で得られない情報を閲覧できます。[GDSP 初版](#)では JMOL を利用しますが [JAVA の設定](#)が複雑ですので Menu 右上の[[version02](#)]をクリックし [GDSP-02](#) をご利用下さい。GRRM-GDSP2.05 は DCn.log・TSn.log 仕様変更で一部不具合あった SC-AFIR にも適用できるようになりました。

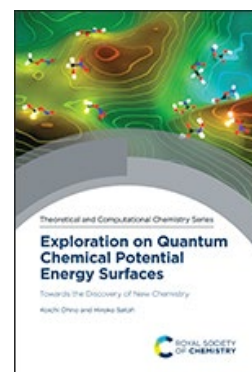
- [GRRM ユーザグループ数](#)が、309 (国内 192、海外 117) になりました (商用版・大型センター利用者を除く)。なお、GRRM20 等の商用版ユーザも急増中です。

### ●大型スパコン用 GRRM17 公開

GRRM17 が東北大と分子研 RCCS に導入され、各計算センター登録者にご利用いただけます。分子研 RCCS での GRRM ユーザ数は、数年前から上位 5 位以内を継続中で、GRRM14・17 を合わせ 40 グループ以上となり、GRRM 年間 JOB 数は千数百件に達しています。分子研 RCCS の新計算システムでも、引き続き GRRM14・17 をご利用いただける予定です。

### ●GRRM 関連出版物

王立化学協会 (Royal Society of Chemistry) から大野公一・佐藤寛子著・Exploration on Quantum Chemical Potential Energy Surfaces が出版されました。[\(RSC へのリンク\)](#)



## ◆ IQCE 事業予定・報告

### ・ GRRM チュートリアル 2023

GRRM 講習会を 2023 年度も実施を予定しております。

昨年実施された GRRM チュートリアル 2022 の概要は[こちら](#)。

### ・シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア」

SRPS2023 は、2023 年 9 月 11 日 (月) に世話人代表 大阪公立大学 前澤裕之先生により計画されています。(世話人 前澤裕之・山門英雄・満田祐樹・米津鉄平)

過去の SRPS シンポジウムのプログラム等詳細は[SRPS Web ページ](#)をご覧ください。本号 4 ページに SRPS2022 の報告を畑中美穂先生にご執筆いただきました。

### ・ IQCE 講演会 2022: 2022 年 11 月 10 日 (木) に予定されておりました IQCE 講演会 2022 は 2023 年 1 月 21 日 (土) にオンラインで実施されました。

### ・ IQCE 講演会 2023: 2023 年 11 月に開催を予定しております。

以前に実施された講演会のプログラム・講演要旨・参加登録等詳細については、[IQCE Web ページ](#)をご覧ください。

### ・ IQCE 研究助成・人材育成奨学助成 (詳細は IQCE Web ページ[公募情報](#)参照)

#### ・ 2023 年度人材育成奨学助成は 2022 年 11 月 25 日 (金) に締め切れ 1 件採択されました。

#### ・ 2023 年度研究助成シニアフェローは 2022 年 12 月 23 日 (金) に締め切れ、応募者はありませんでした。

#### ・ 2023 年度研究助成(学術交流)は募集中で、締め切りは 2023 年 2 月 3 日 (金) になります。

#### ・ 2023 年度研究助成(一般)は 6 月中旬に募集開始予定です。

#### ・ 通常総会: 第 11 回通常総会は、5 月に予定されております。

これまでの通常総会議事録は、[IQCE 会員ページ](#)をご覧ください。

### ◆ IQCE 会費納入のお願い (IQCE 個人正会員で、2022 年度会費未納入の方は、下記の振込先にご送金願います)

IQCE 個人正会員の年会費は事前納入が原則となっております。年会費 (5000 円) は下記振込先にお振込み下さい (どなたのお振込みかわかるよう振込情報先頭に必ずお名前を記載して下さい)。(2022 年度会費納入状況: 10 月末日現在、納入済 41、未納 3) 未納期間が 2 年になると会員資格が失われます。一度会員資格が失われると再入会に入会金が必要になりますのでご注意願います。

・ 会員資格の変更・退会は、IQCE の Web ページ「[入会案内](#)」をご覧ください。

・ 会費ご納入状況や会員番号について、ご確認の必要がある場合は、mail@iqce.jp 宛、電子メールでお問い合わせください。

**【振り込み先】三菱 UFJ 銀行 田町支店(店番043) 普通0532024 トクヒ)リョウシカガクタンサクケンキュウジ**

領収書が必要な場合は、電子メールで、mail@iqce.jp 宛、領収書の宛名と送り先をご連絡下さい。

IQCE-NEWS 107/ 2023.02.01 (Web 接続状態で[青色のリンク](#)をクリックすると関連ページが開きます。)  
特定非営利活動法人量子化学探索研究所 (Institute for Quantum Chemical Exploration)

◆ IQCE 会員情報 会員情報については、[IQCE Web ページ](#) の「概要・沿革」をご参照下さい。会員用共通 ID は IQCE-News で時々更新されます (現在の会員用共通 ID=IQCE2022)。<会員の特典>[IQCE 会員ページ](#)を利用でき IQCE 有料イベント参加料が割引されます (団体会員は会費口数まで個人会員と同じ扱いになります)。

◆◆◆ IQCE-News の複写・配布

IQCE 発行著作物は、会員自身の利用のための複写・印刷は自由ですが、他への転送・配布はご遠慮下さい。団体会員は年会費口数まで届出た配布先に配布できます。

◆◆◆ IQCE-News のバックナンバーは [IQCE Web ページ](#)中の[会員ページ](#)でご覧いただけます。(現在の会員用共通 ID=IQCE2022、時々変更されるのでご注意下さい。)