

京都大学教育研究振興財団助成事業  
成 果 報 告 書

平成28年11月24日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団  
会 長 辻 井 昭 雄 様

所 属 部 局 福井謙一記念研究センター

職 名 センター長

氏 名 赤木和夫

助成の種類	<b>平成28年度・国際会議開催助成</b>			
国際会議名	複雑・複合系の理論計算科学に関する日・仏・スペイン合同シンポジウム Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems			
開催期間	平成28年10月26日 ～ 平成28年10月28日			
開催場所	京都大学福井謙一記念研究センター			
参加者	総数 95名	内訳 Speaker 34名, ポスター参加者 51名, その他 10名		
成果の概要	<b>タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input type="checkbox"/> 無 <input checked="" type="checkbox"/> 有(要旨集,ポスター,開催風景の写真)</b>			
会計報告	事業に要した経費総額	2,014,246 円		
	うち当財団からの助成額	1,000,000 円		
	その他の資金の出所	(機関や資金の名称) 京都大学福井謙一記念研究センター、参加費		
	経費の内訳と助成金の使途について			
	費 目	金 額 (円)	財団助成充当額 (円)	
	旅費交通費	819,600	819,600	
	印刷製本費(要旨集,ポスター)	217,540	112,154	
	謝金(所得税含む)	90,046	68,246	
	懇親会費	237,217		
夕食会(講演者、司会など)	195,923			
ポスターボード借用	49,140			
ノートPC、レーザーポインター文房具	257,217			
コーヒーブレイクなど	147,563			
当財団の助成について	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。) 助成金は本シンポジウムの実行に、大きな援助であった。この経費により旅費・宿泊費の補助、Plenary speakerの謝金等が可能となった。ただ、シンポジウムの運営にはコーヒーブレイクや招待者の懇親会費などを組織委員会が負担することが通常行われており、本補助金もそれらにも使用することができれば、運営が一層楽になったと思います。			

## 成果の概要

福井謙一記念研究センター  
センター長 赤木和夫

### シンポジウム名：

複雑・複合系の理論計算科学に関する日・仏・スペイン合同シンポジウム  
Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational  
Science of Complex Systems

開催期間：平成28年10月26日—28日

### 概要：

本シンポジウムは、化学を中心とし、生物、物理にまたがる複雑な系にたいする理論・計算科学研究に関する最近の話題に焦点を絞り、京都大学福井謙一記念研究センターにおいて、平成28年10月26日(水)から28日(金)の3日間に亘り、開催された。Plenary Talk 3件、Invited Talk 31件、ポスター発表52件、総参加者95名(内、日本からは日本在住の外国人ポスドク12名を含む76名、フランスから10名、スペインから9名)の予想以上の参加者を得て、盛会裏に終了した。

### シンポジウムの内容：

理論計算科学は、理論的手法、計算機、計算アルゴリズムの進歩により、長足の発展を遂げ、今や化学、物理、生命科学分野の研究で欠くことの出来ない研究手法となっている。特に、**実験的な手段が限られている複雑・複合系の研究分野では、理論計算科学への期待が大きい**。特に、化学分野ではそのような複雑系が、最近の研究の中心となっている。例えば、健康的な環境を保持するために必要不可欠な触媒のほとんどは複雑な構造を持つ複合系である。例えば、自動車排気ガス浄化触媒では、金属微粒子や複合金属微粒子が金属酸化物に担持されており、その上で複雑な化学反応が進行している。そのような複雑・複合系を研究し、新しい触媒を開発するためには、化学と物理の融合研究が必要である。また、生命科学では、酵素や細胞などが研究対象であるが、それらの生体の中での機能は化学反応に基づく場合が多い。しかし、分子のレベルから酵素や細胞の科学を解明することは依然として容易でなく、生物、医学、化学の融合が不可欠である。

これらの研究対象は、複雑であり、**実験的手法のみでは分子レベルでの理解を達成することは困難である**。したがって、**実験化学、物理、生命科学と同時に、理論計算科学的研究の進展が不可欠である**。化学、物理、生命科学における理論的研究手法には共通性も多く、理論計算を中心とした、これらの領域の融合は科学の進展のため不可欠である。

本学は、福井謙一博士の存在により、特に化学および生命科学分野で計算科学研究が歴史的に盛んであり、わが国はもとより世界レベルで先導的な研究を進めてきた。フランスでは伝統的に、材料化学や触媒、生命化学と理論化学研究が結びついており、また、スペインでは、触媒化学と量子化学研究が結びついた研究が行われている。本シンポジウムでは、**当センターが**

わが国の窓口となり、本学を中心としたわが国の若手、中堅研究者に、フランス、スペインからの若手、中堅研究者を加えて、理論計算科学を機軸とする融合研究領域への展開と国際的な共同研究の深化を目指しつつ、触媒や生命科学に関連した複雑・複合系に関する理論計算科学に関する研究成果を互いに紹介しあい、議論を深めた。

Plenary Talk は中辻博博士(京大名誉教授)、Odile Eisenstein 博士 (仏 Montpellier 大学名誉教授)、Feliu Maseras 教授 (スペイン Institute of Chemical Research of Catalonia) が行った。中辻博士は、材料化学とその応用において重要な基盤となる励起エネルギーの高精度理論計算法である SAC-CI 法の基礎と最近の展開、応用を講演し、聴衆を魅了した。Eisenstein 博士は実験化学で重要な解析手法である NMR スペクトルを最新の相対論効果を考慮した計算法から検討し、化学的視点から、どのように重要な知見を得るか、講演した。Maseras 教授は最近の実験化学分野で注目されている、金属錯体を用いた水からの酸素発生メカニズムの理論的研究を紹介した。この反応は人工光合成系の開発に関連した基礎的なものであり、何れも聴衆から多くの質問が出され、活発な質疑応答が行われた。

招待講演は日本から若手研究者を含む 15 名、フランスから 8 名(当初、9 名予定していたが、体調不良のため 1 名欠席し 8 名となった)、スペインから 8 名で行われた。

第 1 日目では中井浩巳教授が DFTB 法と DC 法を組み合わせた高速第一原理 MD シミュレーションによる二酸化炭素の塩基への吸収反応の理論的研究を、倉重祐輝が DMRG-CASPT2 法による擬縮体系の電子論研究を、A. Lledos 教授が有機金属と酵素を組み合わせた人工酵素による化学反応の理論的研究、N. Lopez 教授が担体上の単原子金属による触媒反応の理論的研究を紹介した。夕方からは、ポスターセッション参加者の 12 名による Poster Short Talk が行われ、主に若手研究者が各自の研究のハイライトと要点を紹介し、その後、ポスターセッションが行われた。軽食をとりながら、熱心な議論が行われ、予定をオーバーして 9 時近くまで続いた。

第 2 日目では、材料系の講演が行われ藤井幹也博士が有機太陽電池の電子-ホール移動過程を分子動力学計算と量子化学計算を組み合わせ解析した結果を紹介し、生命科学関係では、林重彦教授が分子動力学計算と量子化学計算を自己無撞着的に使用した酵素反応の理論解析を、高田彰二教授が疎視化ダイナミクスによる膜タンパクの理論研究を、V. Moliner 教授が QM-MM 法を用いた抗体触媒反応の理論研究を、S. Matrin-Santamaria 教授が抗体に関する分子動力学研究成果を紹介した。

第 3 日目では、主に、物理との境界領域の理論研究の発表が行われ、例えば、福田良一博士が圧力効果を取り込んだ SAC-CI 法の開発と高压化での吸収スペクトル研究を、阿部穰里博士は原子核の Charge Conjugation Parity の破れに関する精密な量子化学計算結果を、常行真司教授は凝縮系物質の熱伝導に関する理論的アプローチを、M. Swart 教授は遷移金属化学種のスピン状態に関する DFT 研究成果を、J. Contreras-Garcia 教授は量子化学計算結果を電子対結合の古典的概念に対応した解析で理解する理論研究を紹介した。

以上の 3 日間のシンポジウムにより、化学を中心とした複雑系物質の理論計算研究に関する集中的な議論を行い、現時点での成果を確認すると共に、次世代への展開の方向性を明らかにすることが出来た。

## 会場風景



集合写真



赤木和夫（センター長） opening address



O. Eisenstein による Plenary Talk



中辻博による Plenary Talk



S. Martin-Santamaria (Madrid)



阿部穰里（首都大東京）