

# NPO 法人 量子化学探索研究所

## 設立趣旨書

### 1. 趣旨

化学は、ありふれた物質から有用な物質をつくりだすことや有害な物質を安全な物質へと変換することによって、人類社会の要請に応えてきた。人類の生活の場である地球環境において、人類が利用しうる資源は有限であり、資源の枯渇や有害物質の蓄積等の問題が深刻である。有限な資源をいかにして有効かつ安全に活用するか、化学を中心とする科学や技術の進歩に委ねられている。化学は、物質をその構成要素である原子に着目して研究し、原⼦どうしの結合の形成と解離を制御することによって、問題の解決を図る学問である。したがって、原子間の結合・解離の仕組みを解き明かし、それを自在に操ることが、物質を対象とする化学の究極の目標である。こうした化学の目標に向かって、世界中の化学者が化学の可能性を精力的に追求し、いまや約 7000 万種類もの化合物がつくりだされている。しかしながら、原子を組み合わせてつくりだすことができる化合物の数は、人類が既に手に入れた化合物の数をはるかに超えると予想され、化学の可能性は未だほとんど無尽蔵に眠っている。

化学の可能性は、量子力学の理論を化学に応用した量子化学によって原理的には解き明かすことが可能であり、未だ明らかにされていない化学の可能性、いわば未知の化学的な宝物をコンピュータで探索する「量子化学探索」という、新しい研究分野の誕生が希求される状況にある。このような新分野の研究活動は、短期間に経済的効果を生み出すことを期待する営利的な活動や具体的な目標を設定して期間内に終了することが求められる学術研究プロジェクトとは一線を画した柔軟な研究体制によって進めることが適切である。その目的のために、「量子化学探索研究所」を特定非営利活動法人として設立することとした。

新しい学術分野の振興を企図するため、大学や各種の研究機関との連携も視野に入れながら、研究交流も活発にしつつ、新しいパラダイムの建設に向けて、チャレンジしていくことが求められる。このため、当研究所は、所内の活動にとどまらず、広く研究の振興を図るために支援活動および人材育成活動も展開する。また、研究の成果を広く世界中に還元するために、その普及活動を広範に進めていく。

この趣旨をご理解いただき、ご賛同並びにご支援いただくようお願い申し上げる。

### 2. 申請に至るまでの経過

代表者らは、量子化学計算に基づきコンピュータによって化学の可能性を自動探索することを初めて可能にする新しい計算手法を 2004 年に発表した。その後、試作された計算プログラムは、代表者及び多数の研究者によって利用され、化学の新しい世界の探求に役立ち始めており、2009 年からは、毎年、「化学反応経路探索のニューフロンティア」と題するシンポジウムを開催し、新研究分野の立ち上げに向けて、その活動を広げてきた。試作段階の上記計算プログラムの利用は、内外合わせた研究グループ数で 100 を超え、研究者数は数百人を超えていている。また、上記シンポジウムも、参加者数が延べ約 400 人に達する勢いを示している。こうした準備状況を踏まえ、当研究所設立の基盤整備は十分に整っていると考えられ、ここに特定非営利活動法人量子化学探索研究所の設立を発起し、申請するに至った。