QCRI

量子の世界

No. 7

– 目次 –

	ページ
1．記憶と記録 岩田 末廣 (分子科学研究所・総合研究大学院大学 名誉教授)	1
2．日本、アメリカ、フランスのフロンティアから量子化学の未来を考える 中谷 直輝 (首都大学東京 理工学研究科 准教授)	6
3．「第 12 回 革新的量子化学シンポジウム」のご案内	9
4．「第 7 回 JCS 理論化学シンポジウム」のご案内	15
5. 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	18
6.「量子の世界」へご寄稿のお願い	19

記憶と記録

岩田 末廣

分子科学研究所・総合研究大学院大学 名誉教授

岩田 末廣 先生

4歳年上の大江健三郎が「晩年様式集 In Late Style」を書き出したのは、東日本大震災の後だから、今の私より若かった。まさに晩年になっている私に、寄稿依頼が立て続けに舞い込んできた。始めは大野公一さんが主宰している量子化学探索研究所(http://iqce.jp)の IQCE-NEWS No.53 号の巻頭言だった[1]。次は、分子研レターズから茅幸二第五代分子研所長への追悼文[2]、そしてこの「量子の世界」への寄稿依頼だ。これらは「私の晩年漫筆」となる。

昨年は、公私ともに私が大きな影響を受けた四人の方が亡くなられた。志田忠正京大名誉教授には理研時代に、半経験的電子状態理論 PPP 法による開殻系 SCF CI プログラムの活用を通じて共同研究をさせて頂いた。組合活動に忙殺されていた私

[1] 私のホームページ http://home.n08.itscom.net/iwatasue/ に掲載(予定)。
[2] 分子研レターズ 77 号(上記 URL にも置く予定)

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

を厳しく研究に引き繋いでくれた。最近まで、山田財団の審査委員に入れて頂きご一緒する機会が多かった。茅さんと志田さんが並んでいる写真を見つけた。長倉三郎分子研第二代所長·総研大初代学長の米寿のお祝いの折の集合写真だ。また、終活の一環で留学時代の書類を片付けていたら、茅さんの手書き便が出てきた。大変珍しいのでコピーした。1973 年頃のアメリカ留学の雰囲気を知ることが出来よう。分子研設立準備の状況も報告してくれている。お二人は実験物理化学の方だが、理論化学·量子化学を研究に活用すると同時に、様々な形でその振興を支援して下さった。

前略、

今日、図書室で Chem. Phys. Lett. を読んで君の論文を見つけ、急に手紙を書く事にしました。論文から察すると、かなり活発に研究されているようですが、お元気ですか。

小生も、仙台に移ってから、いつのまにやら2年半過ぎ、やっと東北大に移ったという実感を持ち始めた次第で、何やらあっという間に時が過ぎていった感じです。

東北大では、金も研究設備も乏しく、理研がいかに立派な研究所であったかをしみじみ感じましたが、始め皆目予定の立たなかった共鳴ラマンの問題も、いくつか現象顕著な例を見つける事も出来、予想以上にまとまった研究になる目安もつき、現在やっと一安心した状態です。

処で、小生今年の9月1日から1年間 Bell Labs. の Robin の処に1年留学(?)する事になりました。現在あわてて英会話の練習をしている次第です。Bell では、opto-acoustic spectrometry の研究を Robin とやることになるようですが、まだ始ったばかりの研究で、色々問題点も多いようで、特に小生がやる予定の VUV での研究は色々技術上の問題点が多く、新しい研究に対する期待と共に心配もしています。ともかく Bell は N.J. 州の Murray Hill ですので、

に買うのだと云って意気込んでいます。分子研の設立については、ほとんど情報がありませんが、今年当然出る筈の調査費が、つかなかったとの事で、先行やゝ不安な感じです。

その他色々小さな話題がありますが、いずれにせよ面白い事はあまりありません。

以上とりとめもなく書きましたが、奥様によろしくお伝え下さい。

尚、8月～9月の予定御一報下されば幸です。

1973.5.30　茅幸二

大野公男先生は療養中と伺っていたが昨年夏亡くなられ、10 月には大野研の卒業生を中心とした「偲ぶ会」が開かれた。私も参加させて頂き、旧友に久しぶりに会い、大野先生の量子化学研究への貢献をあらためて実感した。先生は、1964 年、北大理学部化学科に典型的な『講座制』(教授·助教授に二人の助手)の「理論化学講座」をはじめて作られ、多くの研究者を輩出された。私にとっては、1972 年にロチェスター大学におら

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

れた諸熊先生のもとに博士研究員として送り出して下さった恩人である。量子化学データベース·量子化学文献データベースの設計から作成に至る研究会でのご指導も忘れがたいが、国際会議でもいろいろと思い出すことがある。先生が主宰された 76 年の王子 conference もその一つである。上の写真は 75 年のサニベル会議の先生だ。この時先生に議論の仕方で厳しく注意されたことが忘れられない。大野先生は日本語でも英語でも激さずに静かに説得力ある話をされる方であった。

ロチェスターには、1972 年二月末、飛行機が空港に着陸出来ない程の大雪の日に到着した。当時、諸熊研でも、ハードデイスクに保存は出来るが、編集はカードを使って行うという状況だった。まだ、Gaussian 70 は公開されていなかった。諸熊研にはこの年の夏、Pople の所から博士研究員として来た W. Lathan が持ってきた。四月には論文を投稿することが出来たので、「褒美」として六月末、Boulder で開かれた"Conference on Theoretical Chemistry"に連れて行って頂いた。この研究会への出席が私の「理論化学」への転向を決意させた[3]。写真には、諸熊さん、 E. Davidson、T. Dunning 等が写っている[4]。この研究会でシカゴ大学の Karl Freed と知り合い、翌年彼の博士研究員になることが出来た。諸熊さんの三人のお子さんや、諸熊ご夫婦にお世話になっていた経済や物理の日本からの留学生のフィルム·写真も沢山発掘した。この機会にデジタル化しようと思ったが、原稿の締め切りがきてしまった。

この作文に苦闘している最中に、化学科同期の岡田勲(東工大名誉教授)さんから問合せの電子メールが舞い込んできた。慶應義塾大理工学部時代に開いていた理論化学の「セミナの正式名、第 1 回の講演者、岡田の演題、何回続いたのか」教えろという問合せである。彼も関連学会の機関誌に思い出話を書かされているようだ。当時の書類は DVD に焼いてはあるが、windows でしか読めない。この十数年はもっぱら Mac に遊んでもらっているので、VMware Fusion から Window10 を立ち上げなければならなかった。少し手間がかかったが、記録が保存されているところにたどりつくことができた。81 年に私が慶応理工学部に着任した秋からほぼ毎月「理論化学セミナ」を矢上校舎で開き、東京近辺の方々に案内を出

[3] 屋根裏に、この Conference の abstract 集が残っていた！1972 年の量子化学の状況がわかる。同じ箱の中には、79 年の京都 ICQC のサテライト研究会として、福留さんを中心として開かれたシンポジウム"Many-Body Theoretical Approaches to Electron Correlation in Molecules"の要旨集もあった。共に欲しい方に差し上げます。閲覧後廃棄してくださって結構です。

[4] すでに、髭の諸熊さんである。髭のない諸熊さんには、分子科学若手の会夏の学校５０周年記念文集の 1961, 1962 の集合写真で会うことができる(1962 年の写真は私が提供)。
https://www.ims.ac.jp/publications/natsu.pdf

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

していた。案内状のフォルダーを見つける事は出来たが、当時日本語の書類は「一太郎」で作成していたから、今の私には読むすべがない。いろいろと探してようやく、全リストを txt ファイルにまとめたものを発見することが出来た[5]。92 年 6 月までに 105 回開いている。第 1 回は、加藤重樹さん(まだ分子研の助手)、第 105 回は Debashis Mukherjee さんであった。

記録を残すには記録方法の選択が大切なことを実体験した。上記の作業中、「一太郎」ファイルの一番古い時刻印は 1985 年 11 月であることを確認した。wikipedia によれば PC9800 用 jXWORD の発売が 1985 年 2 月というから、早い時期から導入していたことになる。これも終活の一環で屋根裏を漁って見つけた最古の日記の日付は 1953 年 10 月であった。中 2 の秋だ。紙と筆は古代から現代に至るまで日記を記録する媒体だった。ドナルド･キーンが「百代の過客(正続)」(講談社学術文庫)で紹介しているように、日記文学は日本文学の一分野をなしている。「昭和天皇実録」は、多くの日記を基礎資料としているという[6]。「平成天皇実録」の基礎資料にはどんな媒体の記録が使われるか興味がある。電子メールや Line での通信、SNS の記録がどのように扱われるのだろう(天皇家の人々は SNS を使っている？)。昨年からしばしば報道で話題になっているように日本の政府や官僚機構内では、電子メールは歴史的資料価値が低いようだ。ヒラリー･クリントンが国務長官時代に「私用メール」で公的なやり取りをしていたことが、大統領選で不利な材料になったのは、公的な電子メールが歴史的資料として残されるからだという。

歳をとると直近のことを忘れるようになるということを日々実体験している。対策として、evernote と dropbox を多用している。共に iPad でどこでも使える。広島大、千葉工大、長崎西高校の化学部との共同研究には、dropbox で資料･原稿を共有している。evernote 上には、3 個の「ノートブック」、memo、日記、読書･鑑賞、を用意して、適宜その中に「ノート」を作っている。研究や計算機関連は memo に作ったノートに書き込み、適当な間隔で LaTeX で編集し、pdf 化している。この作業は記憶を戻すのに非常に役立っている。他はノート単位でマックに保存すると html に変換されるので年単位のフォルダーに格納している。このような形で、OS やソフトウエアに依存しない環境にすることが出来ている。電子メールは保存用のソフトを導入はしたけれど定期的な処理はしていない。保存が必要なものは txt(pdf)にして関連したフォルダーに移している。これだけ整理したつもりでも、毎日何かを探している。

研究者にとって最も大切な記録とは、出版論文である。ごく最近研究論文を書くときの基本的措置(measures)を簡潔に整理している文献を見つけたので紹介する[7]。World Economic Forum が若い科学者向けに作成した Code of Ethics for Researcher[8]の 6.Pursue the truth に記載されている。研究者としての倫理をまとめたもので、まだ完成品と言うよりも、これを元に議論して欲しいという趣旨のようだ。一読に値する。実際ま

[5] これも私の HP に載せます。
[6] 原武史、『「昭和天皇実録」を読む』、岩波新書；半藤一利ら、『「昭和天皇実録」の謎を解く』、文春新書。
[7] Nature 555, 5 (2018)
[8] http://wef.ch/coe

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.

だ大切な事が記されていないと思う。論文の基礎になったデータの保存や公開法などは、最近では、付属資料と言う形でかなり解決されている。問題が多いのは、「共著者」との記録･記憶･理解の共有だと思う。最近頻繁に問題になる fake 論文はほとんど(すべて？)共著論文である。最近では、多くの学術雑誌が、共著者の寄与･分担を論文内や添え状(cover letter)に記述することを要求するようになった。それでもなお共著者は少なくとも論文近接分野の研究者の常識人として「異常な」、「新奇な」データや記述を見つけた場合に対処する責任がある。気軽に共著者になるべきではない[9]。担当官庁から提出されてきた資料が実社会の生活人として「変だ」と認識する「常識力」が報道人･政治家に必要なのも同じだと思う。論文審査に当たって、「共著者に精読して頂いてから再投稿して下さい」と書いたことがある。Code of Ethics には、『新知識の創成には、否定的で、不都合で、矛盾した結果も役立つことがあることを認めるように(研究者)評価手順を修正すべきだ』という文がある。判りにくい英文なので私の理解が間違っているかもしれないが、『失敗学』『事故研究』的な意味ではなく、失敗した研究も記録に残し、研究者の評価の際に考慮すべきだということだと思う。

忘れたいが忘れてはならない記憶も記録されなければならない。スピルバーグ監督の最新の映画『ペンタゴン･ペーパーズ（ザ･ポスト)』では、ベトナム戦争の最中に、当時の国防長官マクナマラが「徹底的に資料を残すよう」に部下に命じる場面があるという（毎日新聞夕刊 2018/02/19)。また、昨年暮れ、NHK BS1 スペシャル『なぜ日本は焼き尽くされたか』は、現 US Air Force に残されている日本への空爆に関する膨大な聞き取り記録を報道していた。8 月 14 日の夜まで続いた軍事施設のない街々まで焼き尽くした空爆は今なら戦争犯罪に問われかねない。日本では、記録を放棄するのは最近始まったことではない。終戦が決まった直後に大量の「文書焼却」が行われた。当時官庁街に近い内幸町の NHK で働いていた 私の一回り年上の姉は『おとめさんの思い出話』[10]に「翌 16 日から周辺の官公庁で書類を焼く煙が立ち登り、それが何日か続き」と記している。

私達の記録も科学史の一場面になっている。菊池好行博士が分子研レターズ 74 号に「分子科学とは何か－科学史からのアプローチ」では、私達が残した文書を資料として「科学史」の一断面が語っている[11]。中辻さんの五〇年余にわたる多電子理論研究を、ひ孫弟子当たりの、ちょと離れた若い方が、他のグループの研究と関連付けながら科学研究史的な観点からまとめたら、大変価値あるものになると思うのだが。いまなら、聞き取り史(oral history)も可能だし。どなたか、IQCE の研究資金に応募して挑戦しませんか？

---

[9] 知らないうちに共著者になっている場合もある。ResearchGate からの通知の中に私の論文リストにないものがあった。若かりし時にはそのことを契機にある友人と絶交してしまった。

[10] 私の HP の中の『おとめさんの思い出話』p.16

[11]「分子科学, Molecular Science」という言葉は、小谷正雄先生や森野米三先生達の造語だと私も思っていたが、菊池博士によると一九世紀から使われていたという。

©2018 Quantum Chemistry Research Institute, All Rights Reserved.