



IQCE-NEWS No. 053

◇◇◇◇ 巻頭言 ◇◇◇◇

温故知新

岩田末廣

大野公男先生をしのぶ会に出席する旅行中にこの文を書き出した。大野先生に初めてお会いしたのは 1964 年と記憶している。先生が北大理学部化学科に理論化学の講座を持たれた直前か直後で、小谷正雄先生が主宰された「湯ヶ島温泉」勉強会に出席させて頂いた時だ。当時ようやく使い始めることが出来るようになった電子計算機を活用して分子の非経験的電子状態計算を推進するための研究会に、東大物性研の長倉三郎(分子研第二代所長・総研大初代学長)研究室から細矢治夫(お茶大)さん、私、松下利樹さんが出席を許された。出席者中大学院生は我々だけだった(当時東京近辺に興味を持つ学生が他にいなかった)。この会で、Tables of Molecular Integrals を作られた小谷門下の石黒英一(お茶大)先生、土方克法(電通大)先生などの諸先生や、さらに、藤永茂(当時九大)先生、大旗淳(九大)先生などにも顔を覚えてもらうことが出来た。竹田宏(九大)先生がおられたか記憶にないが、年代的にみて九大グループが 1966 年に出版した Gauss 関数に関する 2 論文(“Gaussian Expansion of Atomic Orbitals”, “Gaussian-Expansion Methods for Molecular Integrals”, JPSJ)の研究を進めておられた頃だ。この 2 論文はあまり引用されていないが、Gaussian70 の開発に大きな影響を与え、世界の量子化学計算史上忘れてはならない論文だ。土方先生は分子研設立時からその時代の最高性能の計算機を導入するために多大な功績を残され、また東大に大学共同利用という形で大型計算機センターを設立するのもに尽力された。ほとんどの先生が鬼籍に入られた中、藤永先生はシリアでの軍事作戦について USA を厳しく告発するブログを今も発信し続けておられる。「湯ヶ島温泉」勉強会で大野公男先生に記憶して頂いた私は、1972 年には、諸熊奎治(当時 Rochester 大)先生の元に行くきっかけを作って頂いた。

大野公男研究室は、講座制の下で化学科に初めて作られた「一講座」まるごとの理論(実験をしない)講座だった。札幌での「しのぶ会」では、初代助手で JAMOL を開発した柏木浩(分子研計算機センター初代助教授)さんを始め多くの方と旧交を温める事ができた。あらためて大野公男先生が、多方面で活躍した(している)人材を育てられたことを実感した。先生の功績の一つとして QCDB (Quantum Chemistry DataBase)・QCLDB(Quantum Chemistry Literature DataBase)を設計・作成するグループの推進・指導も忘れることが出来ない(QCLDB は 2017 年で幕を閉じることになった)。大野研に始まる北大の理論化学はその後、山口兆研、田中皓研、武次徹也研に継承され、最近には前田理研究室が新しく加わり、北大理学部化学科は世界的に見ても大きな理論化学センターとなった。研究はもとより人材養成という面でも世界的センターに発展していくことが期待される。

この文を送ろうとした時、諸熊先生の訃報が飛び込んできた。2017 年には、すでに私は、研究面だけでなく生活の指針も示して下さった志田忠正京大名誉教授と茅幸二分子研第五代所長・理研中央研元所長を失っている。お二人は実験グループを主宰しながら理論化学・量子化学にも深い理解を持ち力強い支援を送って下さった。この場を借りて哀悼の意を捧げたい。