

その他 Other

追悼 森 和 英

Memorial Bibliography of Kazuhide Mori

永 井 喜 則¹, 香 川 浩^{2,3}

国土舘大学情報科学センター非常勤講師、森和英先生は2009年1月4日、急性心不全により逝去されました。森和英先生は大学の専任ポストに固執することなく、早稲田計算科学コンソーシアムという有志の集まりを作って研究を進められました。生活の糧は大学の非常勤講師や企業研究をその能力で助けることに依って得られる報酬等で得て居られました。量子化学の分野で分極率等の原子、分子の性質を Born-Oppenheimer 近似で計算するプログラムから出発して、原子核を含む構成要素を総て考慮して変分原理に従って量子力学的に物理化学的量の期待値を計算する方法の理論的考察とそれを基にしたプログラムを開発して、計算機化学という方向から研究されました。ミオシンの ATP 加水分解に関する香川の研究を強く援助して、Protein Data Bank のミオシン結晶データの分子軌道法による研究によって、分子軌道関数が ATP 加水分解の反応中心を示しているということを見付け、反応過程を考察する仕事を香川と共に致しました。永井は森先生と量子化学計算や分子軌道法の議論を楽しみました。分極率とフロンガスの沸点との間の関係を見つけ、その重要性を得々と話された事を思い出します。森先生は独自の道を歩まれ、第一原理に基づいた量子化学的計算の重要性を認識し、Car-Parinello とは異なる方法を考えていた様に見受けられました。先駆的な仕事をしていても、特にそれを意識していたとは見受けられませんでした。それは森先生の興味に従ったものだと思います。54年と4ヶ月余りの歳月を駆け抜けた森先生が為された研究成果を踏襲し、それを土台とした研究を今後進められる人々の為に森先生が発表した論文を知り得る限りのリストを作成して、森先生の冥福を祈るのが良いと思い、情報科学センター紀要に追悼の文章の掲載を乞うた次第であります。ここに森先生への哀悼の意を表すると共に、森和英先生の略歴と発表論文を紹介致します。

森 和 英 氏の略歴

1954年9月26日 静岡県静岡市四番町27の地に誕生

¹ 国土舘大学情報科学センター

² 日本医科大学物理学教室

³ WCSC (早稲田計算科学コンソーシアム)

1973年 3 月 静岡県立静岡東高等学校 卒業
1977年 3 月 早稲田大学理工学部化学科 卒業
1979年 3 月 早稲田大学大学院理工学研究科博士前期課程 修了
1979年 4 月
—1983年 3 月 早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程

森 和 英 氏の発表論文 (現在から過去へ遡る順に, 10年区切りで並べてあります。)

謝辞: リスト作成に関して WCSC (早稲田計算科学コンソーシアム) に御協力頂きました。

2000年代

1. Gotoh M^{1,2}, Tachikawa M³, Ryuo K³, Sasagane K⁴, Suzuki K^{2,5}, **Mori K**², Nakamura S⁶
(¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University, ²Waseda Computational Science Consortium, ³Quantum Chemistry Division, Graduate School of Science, Yokohama-City University; JST-PRESTO, ⁴Faculty of Business Management, Takachiho University, ⁵Information Media Center, Takachiho University, ⁶Mitsubishi Chemical Corporation, MCC – Group Science and Technology Research Center; JST-CREST): The First and Second Derivative Matrices in the Random Phase Approximation Scheme by Using the Lagrangian Technique. *Int. J. Quantum Chem.* **105** (2005) 225–231.
2. **Mori K**¹, Nagai Y¹ (¹Center for Information Science, Kokushikan University): Relationship between Boiling Temperatures and Electric Dipole Moment for Chlorofluorocarbons. *Mem. Kokushikan Univ. Cent. Inform. Sci.* **25** (2004) 1–20.
3. **Mori K**¹, Kawauchi S², Tachikawa M³, Kagawa H⁴ (¹Information Science, Kokushikan University, ²Department of Polymer Chemistry, Tokyo Institute of Technology, ³Molecular Photochemistry Laboratory, RIKEN, ⁴Physics Laboratory, Nippon Medical School): AM1-RPA Calculation for Proton Tunneling in Excited States of Hydrogen Bonding Systems Using the Program "RADON". *Mem. Kokushikan Univ. Cent. Inform. Sci.* **24** (2003) 44–52.
4. **Mori K**¹, Ichimura A², Kagawa H³ (¹WCSC, ²Faculty of Physical Education and Center for Information Science, Kokushikan University, ³Physics Laboratory, Nippon Medical School): Study of Tunneling Splitting with Symmetrically-Combined Morse Potential Model Using Associated Laguerre Basis Functions. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **581**

(2002) 31-36.

5. Kagawa H¹, Tamura Y², Kawauchi S³, **Mori K**⁴, Suzuki K⁵ (¹Physics Laboratory, Nippon Medical School, ²Scalable Systems Technology Center, SGI Japan, Ltd., ³Department of Polymer Chemistry, Tokyo Institute of Technology, ⁴WCSC, ⁵Information Media Center, Takachiho University): Molecular Orbital Study on Dissociation of Phosphoric Acid. *Bull. Lib. Arts & Sci. Nippon Med. Sch.* **31** (2001) 1-10.
6. Kagawa H¹, Ichimura A², Kamka N A³, Mori K⁴ (¹Physics Laboratory, Nippon Medical School, ²Faculty of Physical Education and Center for Information Science, Kokushikan University, ³PT Matsushita Gobel Electric Works Manufacturing, ⁴WCSC): Parameters of Average Molecular Polarizability in the MNDO, AM1 and PM3 Methods. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **546** (2001) 127-141.
7. Kawauchi S¹, Muta H¹, Satoh M¹, Komiyama J¹, Watanabe J¹, Tamura Y², **Mori K**³, Suzuki K^{3,4} (¹Department of Polymer Chemistry, Tokyo Institute of Technology, ²SGI Japan, ³Waseda Computational Science Consortium, ⁴Information Media Center, Takachiho University): AM1-RPA Calculation for Predicting UV-Visible Spectra of Some Dyes. *Nonlinear Optics* **26** (2000) 221-228.
8. 森 和英^{1,2} (¹国土館大情報科学センター, ²早稲田計算科学コンソーシアム): 量子系における状態遷移理論とボルン・オッペンハイマー断熱近似 I BO 近似と遷移モーメント. *国土館大情報科学センター紀要* **21** (2000) 34-49.
9. 森 和英^{1,2} (¹国土館大情報科学センター, ²早稲田計算科学コンソーシアム): 量子系における状態遷移理論とボルン・オッペンハイマー断熱近似 II BO 近似と通常ラマン散乱強度. *国土館大情報科学センター紀要* **21** (2000) 50-61.

1990年代

10. Kagawa H¹, **Mori K**² (¹Physics Laboratory, Nippon Medical School, ²Waseda Computational Science Consortium): Molecular Orbital Study of the Interaction between MgATP and the Myosin Motor Domain: The Highest Occupied Molecular Orbitals Indicate the Reaction Site of ATP Hydrolysis. *J. Phys. Chem. B* **103** (1999) 7346-7352.
11. Kagawa H¹, **Mori K**² (¹Physics Laboratory, Nippon Medical School, ²Waseda Computational Science Consortium): Molecular Orbital Calculations Indicate the Hydrolytic Water of ATP Hydrolysis in the MgATP-Myosin Motor Domain Complex. *Bull. Lib. Arts & Sci. Nippon Med. Sch.* **26** (1999) 1-6.

12. Tachikawa M^{1,2,3}, Taneda K³, **Mori K**³ (¹Department of Chemistry, School of Science, Rikkyo University, ²Research Fellow of the Japan Society for the Promotion of Science for Young Scientists, ³Waseda Computational Science Consortium): Simultaneous Optimization of GTF Exponents and Their Centers with Fully Variational Treatment of Hartree-Fock Molecular Orbital Calculation. *Int. J. Quant. Chem.* **75** (1999) 497–510.
13. Tachikawa M^{1,2,3}, **Mori K**³, Osamura Y¹ (¹Department of Chemistry, School of Science, Rikkyo University, ²Research Fellow of the Japan Society for the Promotion of Science for Young Scientists, ³Waseda Computational Science Consortium): Isotope Effect of Hydrated Clusters of Hydrogen Chloride, $\text{HCl}(\text{H}_2\text{O})_n$ and $\text{DCl}(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=0-4$): Application of Dynamic Extended Molecular Orbital Method. *Mol. Phys.* **96** (1999) 1207–1215.
14. Ishida M¹, Tachikawa M^{1,2}, Tokiwa H¹, **Mori K**², Ishii A³ (¹Department of Chemistry, Faculty of Science, Rikkyo University, ²Waseda Computational Science Consortium, ³Department of Applied Mathematics and Physics, Tottori University): First Principles Calculation for Hydrogen/Positronium Adsorption on an Si(111) Surface Using the Dynamical Extended Molecular Orbital Method. *Surface Science* **438** (1999) 47–57.
15. 森 和英^{1,2} (¹国土館大情報科学センター, ²早稲田計算科学コンソーシアム): Born-Oppenheimer 近似によらない時間依存完全変分型分子軌道法の提案とその概略. *国土館大情報科学センター紀要* **20** (1999) 50–67.
16. Taneda K¹, **Mori K**² (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University, ²Waseda Computational Science Consortium): Full-variational Treatment of GTF Basis Sets for Molecular Orbitals: Application to Interactions in the Helium Dimer under an Electrostatic Field. *Chem. Phys. Lett.* **298** (1998) 293–301.
17. Tachikawa M^{1,2}, **Mori K**², Suzuki K^{2,3}, Iguchi K¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University, ²Waseda Computational Science Consortium, ³Information Media Center, Takachiho University): Full Variational Molecular Orbital Method: Application to the Positron-Molecule Complexes. *Int. J. Quant. Chem.* **70** (1998) 491–501.
18. Tachikawa M^{1,2,3}, **Mori K**³, Nakai H^{1,2}, Iguchi K^{1,3} (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University, ²Advanced Research Center for Science and Engineering, ³Waseda Computational Science Consortium): An Extension of Ab Initio Molecular Orbital Theory to Nuclear Motion. *Chem. Phys. Lett.* **290** (1998)

- 437-442.
19. 香川 浩¹, 永井喜則², 森 和英³ (¹日本医科大学・物理学教室, ²国土館大情報科学センター及び政経学部, ³早稲田計算科学コンソーシアム): イオン化アデノシン三リン酸の最適化構造. *日医大基礎科学紀要* **22** (1997) 79-93.
 20. 森 和英^{1,2}, 大江親臣² (¹国土館大情報科学センター, ²早稲田計算科学コンソーシアム, ³早稲田大学理工学部化学科): 完全変分型分子軌道法プログラム GAMERA におけるエネルギーの微分表式. *国土館大情報科学センター紀要* **18** (1997) 62-100.
 21. 森 和英¹ (¹国土館大情報科学センター): 量子化学計算での非線形最適化問題への並列分散処理の利用. *国土館大情報科学センター紀要* **17** (1996) 50-57.
 22. Gotoh M¹, Mori K¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): Method of Computer Algebraic Calculation of the Matrix Elements in the Second Quantization Language. *Int. J. Quant. Chem.* **56** (1995) 163-173.
 23. Nakajima K¹, Munakata T¹, Mori K¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): A Theoretical Study of Ethylene Insertion Mechanism in Kaminsky Catalysts (M=Ti, Zr). *Bull. Cent. Inform. Waseda Univ.* **17** (1994) 19-27.
 24. Kamka N A¹, Mori K¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): Polarizability Calculation by MNDO Method. *Bull. Sci. Engin. Res. Lab. Waseda Univ.* **134** (1991) 12-20.
 25. 伊藤礼吉¹, 斎藤俊和¹, 森 和英¹ (¹早稲田大学理工学部化学科): 2次元シュレディンガー方程式の数値解法 (Y4/TC/TWOVIB). *東大大型計算機センターニュース* **22** Supplement 2 ライブラリープログラム説明書 (1990) 105-127.
 26. 伊藤礼吉¹, 斎藤俊和¹, 森 和英¹, 笹金光徳¹ (¹早稲田大学理工学部化学科): スメロフ-コーリー (シュテルマー-レビー) 差分法による1次元シュレディンガー方程式の解法 (Y4/TC/ONEVIB). *東大大型計算機センターニュース* **22** Supplement 2 ライブラリープログラム説明書 (1990) 92-104.
 27. 鷺山潤一郎¹, 植田忠夫¹, 森 和英¹ (¹昭和電工): 新材料の開発にコンピュータはどのように使われているか(4) プラスチック光学材料, *材料技術* **8** (1990) 24-28.
 28. Sasagane K¹, Mori K¹, Ichihara A¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): The Multiconfiguration Time-dependent Hartree-Fock Method Based on a Closed-shell-type Multiconfiguration Self-consis-

tent Field Reference State and Its Application to the LiH Molecule. *J. Chem. Phys.* **92** (1990) 3619–3632.

1980年代

29. 森 和英¹, 笹金光徳¹, 岩田久道¹, 竹村佳昭¹, 田鍋文雄¹, 小松義典¹, 伊藤礼吉¹ (¹早稲田大学理工学部化学科): 数式処理言語を用いた ET-MCSCF 行列要素の計算法. 早大理工研報告 **109** (1985) 60–67.
30. Saitoh T¹, **Mori K**¹, Sasagane K¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): *Ab Initio* SCF–SDCI Prediction of Type II Spectra and Geometry of (ClHCl)– Hydrogen Bond Complex. I. One Dimensional Vibrational Analysis. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **56** (1983) 2877–2888.
31. Saitoh T¹, **Mori K**¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): Model of Linear Hydrogen-Bonding Species with Weakly Interacting $\nu(\text{XH})$ and $\nu(\text{XH}-\text{Y})$ Modes. II: Dimethylether–HCl Complex in Gas Phase. *Bull. Sci. Engin. Res. Lab. Waseda Univ.* **99** (1982) 1–12.
32. Saitoh T¹, **Mori K**¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): Two Dimensional Vibrational Analysis of Lippincott–Schroeder Potential for OH..O, NH..O and NH..N Hydrogen Bond and Deuterium Isotope Effects. *Chem. Phys.* **60** (1981) 161–180.
33. Saitoh T¹, **Mori K**¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): Deuterium Isotope Effect on IR Stretching Mode of OH–O Hydrogen Bond. *Contrib. Res. Group Atoms Mol.* **16** (1981) 80–86.
34. 森 和英¹, 笹金光徳¹, 伊藤礼吉¹ (¹早稲田大学理工学部化学科): いくつかの簡単な分子の SDSR–CI 計算. 早大理工研報告 **93** (1980) 60–65.
35. Saitoh T¹, **Mori K**¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): Approximate Methods for the Coupled Two Oscillators in the Stationary State. *Bull. Sci. Engin. Res. Lab. Waseda Univ.* **91** (1980) 122–134.

1970年代

36. **Mori K**¹, Maeda K¹, Itoh R¹ (¹Department of Chemistry, School of Science and Engineering, Waseda University): Improvement of Hartree-Fock Energy Curve for Diatomic Molecule. *Contrib. Res. Group Atoms Mol.* **15** (1979) 76–81.

追悼 森 和英

37. 森 和英¹, 前田宗治¹, 伊藤礼吉¹ (¹早稲田大学理工学部化学科): ラゲール陪関数展開を用いた対称二極小ポテンシャルの振動解析. 早大理工研報告 **87** (1979) 58-63.