

## Keiji Morokuma (1934-2017)

### *In memoriam*

El pasado 27 de noviembre de 2017 falleció, a los 83 años de edad, Keiji Morokuma. Había sido uno de los líderes mundiales en la química teórica y computacional durante las últimas cinco décadas.

Nació en 1934 en la prefectura de Kagoshima, en el sur de Japón. Discípulo aventajado de los Premios Nobel Fukui y Karplus, realizó la mayor parte de su carrera científica entre Japón y Estados Unidos. Después de doctorarse en la Universidad de Kyoto en 1963, realizó estancias postdoctorales en Columbia y Harvard, y trabajó como profesor en la Universidad de Rochester (1967-1976), el Institute of Molecular Science (Okazaki) (1977-1992), Emory University (Atlanta) (1993-2006) y el Instituto Fukui de la Universidad de Kyoto (2006-2017).

Sus datos bibliométricos certifican su posición de vanguardia en la química teórica desde los años 1960 hasta su fallecimiento. Fue autor de más de 900 publicaciones, ha sido citado más de 40.000 veces, y tiene más de 80 artículos por encima de las cien citas.

Sus contribuciones tienen lugar tanto en el campo del desarrollo metodológico como en el de las aplicaciones. Diseñador de las aproximaciones iniciales de métodos para el análisis de descomposición de la energía. Responsable del desarrollo del método multicapa ONIOM para la combinación de cálculos de mecánica cuántica y mecánica molecular. Pionero en gran número de aplicaciones: el primer cálculo ab initio sobre el dímero de agua en 1968, la primera determinación de un ciclo catalítico completo en catálisis homogénea en 1988. Experto en campos diversos: superficies de potencial para estados excitados, formación de nanoestructuras tipo nanotubo, procesos fotoquímicos en sistemas biomoleculares.

La comunidad científica reconoció su valía y sus contribuciones en numerosas ocasiones. Recibió, entre otras distinciones, el Annual Prize de la IAQMS en 1978, la Schrödinger Medal del WATOC en 1993, y el Imperial Prize de la Japan Academy en 2008.

Mentor de una amplia red de colaboradores alrededor del mundo, ejerció como anfitrión, tanto en Japón como en Estados Unidos, de una larga lista de investigadores es-



Keiji Morokuma

pañoles, demasiado extensa como para ser citada en este breve texto. Visitó nuestro país en repetidas ocasiones, una de las últimas en noviembre de 2015 con motivo del “Japan-Spain symposium on theoretical and computational chemistry for complex systems”, que tuvo lugar en Madrid y Tarragona, y cuya celebración impulsó personalmente.

Aquellos que tuvimos la suerte de trabajar con él ya echamos de menos su inspiración y liderazgo. Descansa en paz, Prof. Keiji Morokuma.

FELIU MASERAS  
Institut Català d'Investigació Química  
The Barcelona Institute of Science and Technology