

NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会

Vol. 2

No. 1

目 次

第6回情報化学討論会を終わって	大崎健次	1
データベースと著作権について	石田嘉明	1
関 連 行 事		
化学研究における予知・予測のシンポジウム		3
第49春季年会情報化学関係プログラム抜粋		5
そ の 他		6
研究グループ紹介(海外編)		6
部会員名簿		7

第6回情報化学討論会を終わって

大崎 健次

(京都大学薬学部)

上記討論会は、このニュースの前号に予告された通り、1983年12月6日(火)、7日(水)の両日にわたり、京都大学薬学部講堂および京大会館において開催された。予想をはるかに上回る延330人の参加者を得たことについては、前回同様に構造活性相関シンポジウムと続けて開催したこと、医薬系会社の多い関西地区であったことなどが寄与したと思われる。我々のほうで受付けた参加者のうち、ほぼ半数が両方への参加を希望されたことにも、それが表われている。

講演内容については、学会誌等に予告したものに1件の追加があっただけで、取り消しはなかった。特筆すべきは、討論が非常に活発で座長の御努力がなければ予定通りの進行が出来ず、運営上の支障を来したかも知れないぐらいであったこと、それも建設的なコメントの多かったことであろう。この討論会を育てて来られた先達の方々のお人柄と御尽力に基づく良い伝統と考えている。

この機会を利用して、3社にお願いしてデータベースのデモンストレーションをしていただいたが、お客さんが少なくて、説明係は手持ち無沙汰にみえた。それほど熱心に参加者が討論会場に出席されたということであろうが、データベースのデモンストレーションというだけでは、もう珍らしくなくなったということかも知れない。この次にもし同様なことを計画するなら、もっと特色のある内容を用意する必要があるように思う。

部会長の御尽力もあって、今回は大阪で、やはり構造活性相関シンポジウムと連合して開かれることが決った。

12月の情報化学討論会の折、話題となったデータベースの著作権について、下記のような調査・見解が寄せられました。

データベースと著作権について

石田 嘉明

(宇部興産(株)中央研究所)

コンピュータソフトウェアの開発に関係する研究者にとって、プログラムの法的保護やデータベースの所有権の問題は重大な関心事である。昨年12月京都での第6回情報化学討論会においても、データベースの中に格納したオリジナルデータの著作権の問題が話題となり、結局、情報化学部会で統一見解をまとめる方向の形で、宿題が残された。これには法律的な解釈の問題があるので、筆者も少なからず頭を痛めた経験から、皆様の御参考になればと思い筆を取った。

ここにソフトウェアに関する特許制度、著作権法および裁判所の判例についての早稲田大学・土井輝生教授(著作権審議会委員)の講演内容の記事¹⁾と、特許庁発行のコンピュータプログラムに関する発明についての審査基準²⁾の2つの資料がある。いずれも、プログラムの法的保護を目的とする立場で、まとめられた資料であるから、データベースの著作権には言及されていないが、これらの資料からおのずとこの問題に対する基本的考え方をうかがい知ることができる。

土井教授は、著作権審議会の見解として、「コンピュータプログラムは、作成者の思想を創作的に表現したものであって、学術の範囲に属する著作物の概念に入る」と述べ、特に「複製」と「二次的著作物」の区別が重要であ

るが、「いずれの行為も著作権の中に含まれる権利なので、このような行為をするには、原作者の許諾が必要である。」と主張している。ここで「複製」とは、「プログラミング言語を変えて作成したものや、ソースプログラムをオブジェクト（相対番地など）または機械語に変換したもの、およびそれを他の記憶媒体へコピーしたもの」などであり、「二次的著作物」とは、「著作物を変形、脚色など翻案することにより創作した著作物」である。両者の区別は創作性の有無にあるが、上記の通りいずれの行為も原作者の了解を得る必要がある。注目すべき点は裁判所の判例において、「記憶装置は著作物を“固定”したものにとすぎず、著作権法上の複製物に相当する。」と判断されていること、「プログラムの実行スピードのアップなどを目的とした、いわゆる改良品は原著作物の派生著作物なので、その無断製作は禁止する。」という判例である。

特許庁の審査基準の方も、表現は異なるが考え方は同じである。ここでは発明の成立性について解説する余裕が無いが、やはり複製物と二次的創作物は発明の要件を満たさないと考えられているようであり、データベースに関連して注目すべき項目は、同基準書3.42「計算機で処理されるデータ」の条文である。要約すると、「データとは、社会現象、自然現象など、さまざまな現象を数字や記号の集合により表現するものにとすぎず、抽象的な情報の域を出ないので、これ自体は技術的思想を形成せず、発明としての要件を欠いている。」と言うものである。

すなわち、データベースの作成に非常に努力がはらわれ、効率化などをねらってデータの持ち方などの表現形式をいかに工夫したとしても、データベースの内容自体はやはりコンピュータで処理されるデータと見なされ、記憶装置に“固定”した抽象的な情報と見なされるようである。従ってこれらの見解のもとでは、データベース内に納めたデータに、すでに著作物が存在する時には、所有権はその著作者に属し、事前に許諾を得た上で作成もしくは利用することが必要となる。データベースはそのデータのオリジンが複数箇所になることも多いが、いずれも何らかの契約を要する点は同様に解釈されるであろう。

ここで、土井教授が「著作権保護は、プログラム（データベースも同様と思われるが）の複製物を第三者がコピーすることができる状態に置かれた時に初めて問題になる。」と述べていることも記憶しておく必要があろう。つまり開発や試作研究の段階では、第三者がコピーできない状態に保たれるのであれば、権利の侵害にはならない。しかし、データベースを含むプログラムの共同利用やその技術の第三者への開示が行なわれる場合には、それより前の時点で原作者の許諾を得る契約を交して置く必要がある。

以上のように、ソフトウェア保護の問題は法律的にも次第に明確になって来るのであろうし、その考え方が世間一般に次第に浸透して来るであろう。これに付随してデータベースの所有権や利用権についても、無断複製の禁止が明確にされて行くように思う。しかし、ここで注意すべきことは、法的保護が裏を返せば法的規制に取って代り、時に化学における情報処理のようなまだまだ未開拓の学問分野での、自由であるべき研究活動を阻害するようになるのではないかという懸念が生ずる。データベース自体の作成にいくら苦勞をしても、その権利が原作者に残るのではつまらない。データベースの効率的利用法を研究しても、いちいち利用許可を得るのではわずらわしい。また、データベースから高次情報を引き出しても、それが派生的著作物と見なされるのではやりきれない話である。

従って、他の所有する権利を侵害しないように注意しながら、自由活発な研究や開発を進められるような、何らかの対策が必要ではないかと思う。その対策のキーポイントは「利用許諾に関する契約をいかにするか」という点にあるものと思われる。その契約には、ソフトウェアを開発する研究者やその法人が行なう契約、ソフトウェアの利用者が行なうべき契約など、それぞれ性格の異なるものが考えられるが、化学関係のソフトウェアに関するものは日本化学会が交渉の窓口となり、使用許諾の手続きを代行することによって、研究者の労力の軽減を計るなども、一つの方策かも知れない。昨年の6月にはジュネーブの世界知的所有権機関(WIPO)本部で「コンピュータ・ソフトウェア保護に関する条約草案」が検討されているようなので、このような情勢も考慮した上での対策を具体化し、研究者の意欲低下を防止することが大切である。

なお、コンピュータプログラムの保護に関しては、通産省が「プログラム権法」と呼ぶ新しい法律制度の準備を進めていることが伝えられており、著作権法、特許法などとの関連が、どのようになるのか注目されるところである。

- 1) 土井輝生「ソフトウェアと著作権」ユニバック・ニュース1983年5月号No.265 p.8~9
- 2) 特許庁「コンピュータ・プログラムに関する発明についての審査基準(その1)」昭和50年12月26日評議会決定。〔1〕-11-1~28.

関 連 行 事

化学研究における予知・予測のシンポジウム

標記シンポジウムが情報化学部の活動の一環として昭和59年1月20日、豊橋技術科学大学にて開催された。当部会に期待されている最大の課題でもあり、多くの化学者がコンピュータに期待している分野であったため、当日は100名を越す参加者があり、4つの講演とデモンストレーションに対し熱心な質疑応答が繰りひろげられた。以下に講演の概要を記す。いづれも一時間を越す内容豊富なものだったので、簡略に過ぎるとのお叱りを受けそうであるが、紙面の都合で御容赦いただきたい。

合成経路予測に役立つ立体化学計算法

北海道大学理学部 大沢 映二

合成経路の予知・予測という研究に関して、Coreyらの計算機支援合成設計解析システム(LHASA)に代表されるいくつかのプログラムシステムの概要と、分子力場計算(いわゆるモレキュラメカニクス)を合成反応に応用した事例についての報告がなされた。本来分子力場計算は合成経路予測とは必ずしも密接に関連しないとしながらも、力場計算を積極的に応用すると配座解析等の立体化学的問題以外に化学反応を含む場合にも役に立つことを実際の応用として以下の4項目をとりあげて例証した。

1. 反応の生成物分布の予測

多成分系の平衡反応に対して可能な生成物の相対的热力学的安定性を正確に予測できるなら、生成物分布は予測できるとして、実際に分子力場計算による反応により得られるであろう構造の熱力学的安定性の評価を行ない最も安定な構造として予測した構造と実際の反応により得られた結果が合致することを検証した。

2. 多環系における最安定異性体の探索

1の方法と同じ原理であるが、特に多環炭化水素のカルボニウムイオン転移においては、いわゆる“no mechanism”機構によって事実上いかなる構造も生成する可能性があり、可能な生成物の数は極めて多い。その中で最安定な異性体を探索し、合成経路を予測する。

3. 遅い遷移状態をもつ反応

不可逆反応であっても遷移状態が生成物に充分近ければ期待される生成物の相対エネルギーが遷移状態の目安となり、生成物予測が可能となる。このような反応例として $[2+2]$ 光付加による高ひずみ多環分子の生成、多環炭化水素の接触水素添加によるC-C結合の開裂及びびなめ橋かけ反応が知られている。

4. 分子軌道法を併用した電子効果の予測

分子力場計算は軌道相互作用など電子効果を一般に無視するが、この欠点を逆に利用して実測値あるいは精度の高い分子軌道法の計算結果と大きく矛盾する結果を力場計算が与えたときには何か特別な電子効果を発見する手がかりとなる(異常結合伸長の予測と合成への利用等)。

合成手順・実験条件の予測

東京薬科大学 原 昭二

膨大な実験データと多くの直観的な発想に支えられてきた実験先導型の有機合成も、現在の加速されつつある研究・開発の現状に対応するため、予測を先導する型へと軌道修正することが求められつつある。合成化学の実験室では、文献検索、合成目標化合物の設定、合成経路の設計から、反応の実施、その記録にいたるまでの種々の作業が必要とされる。しかも、実際に実験を行なうと必ずしも予期した結果が得られない場合が少なくなく、実験から得られた新たな知見と合成設計の段階にフィードバックさせることが必要となってくる場合もあり、これら一連の作業は実際にはかなり繁雑である。そこでこれら一連の作業を円滑に行なうためマイクロコンピュータの利用を考え、合成化学者にとって使い易くしかも有用なシステム(プログラム流れ合成システム)を開発することを目指した。実際には論理的な思考・考察に基づく合成経路設計、実験条件の充分な最適化、反応生成物の回収率の正確な評価、系統的な生成物の単離・精製過程を行なうために従来の実験法を見直し、有機合成に含まれる各工程をシステム化することが必要になる。系統的な実験法を適用し、的確なデータを得て、これをデータベースとすれば有機合成は高効率化されるし、実験法をシステム化することにより合成の自動化も容易となる。自動合成は単に省力化という目的のみならず、合成の実施における論理的方法論の確立や実験結果の再現性・信頼性を向上させるという点でも有意義であるし、パイロットランにより速やかに最適条件を見出し、実験的検証を効率化できる。実際に標的化合物としてイボガミン、エストロンを選び合成経路ならびに前駆体の候補化合物を予測した。その結果既に合成経路として知られている方法も含めた経路が予測されシステムの妥当性が検証された。今後このプログラムシステムにより、従来見落とされていた合成経路を見出したり、新しい型の合成反応が示唆される可能性も期待される。

分子設計法(構造予測としての合成)

名古屋大学工学部 佐々木 正

役に立つものをつくるための合成化学と分子設計法との関連について、合成化学の歴史的背景、天然物合成、現在の有機合成の問題、更に分子設計という観点から見たこれからの有機合成の進むべき方向など、幅広い視野からの機知に富む考察を行なった。当初、合成は天然物の構造確認をするための方法として発展してきたという歴史的背景をもち、天然物の部分構造や構造骨格が確認されて、今度は天然物の全合成を行なうための方法として新しい反応機構に根ざした反応化学が発展してきた。そういう意味においても合成と反応とは異なるものであり、合成とは原料及び中間体となる化合物がもつ無数の反応性(動性性質)の中から、目的化合物をつくるうえで利用できる反応性を選び出し(無論、そのような都合の良い性質はないことが多く、いかにして行なうのかmethodologyであろう)、それに1つの方向性をもたせて目的化合物を設計(plan-design)したものである。合成は天然物の構造確認をする方法として発展してきた背景はもつものの、既に合成は単なる天然物の構造確

認法ではなく、“合成のための合成”であることが一層要求されるであろう。そのためには何を目的にして合成を行ない、いかに役立たないものをつくらないかということが肝要であろうし、有機資源の枯渇が叫ばれている現在、本当に必要なものだけをつくらねばならない。これからの有機合成は synthesis という名のとおりに化学者が明確な目的意識をもち、常に構造というものを予測しながら行なわなければならない。そして合成された構造がいかなる機能を有するのかというところまで予測・追求する合成こそが真の分子設計であろうと提言した。

定量的構造活性相関による分子設計

京都大学農学部 藤田 稔夫

定量的構造活性相関 (QSAR) の考え方、直線的自由エネルギー関係の応用としての Hansch-Fujita 法、活性の変化を決する物理化学的パラメータの分離と同定といった QSAR の根本となる概念から、Hansch-Fujita 法を用いた実例を数多くとりあげることでその意義と実用性についてふれた。Hansch-Fujita 法がはじめられた当初は、分子あるいは分子の構成成分の疎水性パラメータとして 1-オクタノール/水系の分配係数

と電子の性質を表わすハメットの δ 定数が解析に用いられたが、その後現在にいたるまで物理化学的性質ばかりでなく、構造上のパラメータとして立体的因子 (Taft の E_s 、STERIMOL パラメータ等) が導入され、Hansch-Fujita 法の適用範囲は飛躍的に高まった。これにより、従来解釈の不可能であった特異な構造と活性との関係が明確になった例、agonistic な活性と antagonistic な活性を定量的に区別することができた例、receptor mapping の成功例、生理活性物質の作用機構に関し分子あるいは分子下レベルでの貴重な情報をもたらす研究例が数多く公表されている。また合理的なドラッグデザインに対しても相関関係の外挿による構造の最適化によって、医薬・農薬の創製に実際に成功した例、内挿によって最適化構造の確認と類縁体合成計画の一応の終了を決断した例など、多数の実績をもつ。また最近の研究では、X線結晶解析とコンピュータグラフィックスとを用い、酵素・阻害剤のみならず酵素・基質複合体の結晶解析によって、両者の原子レベルでの認識機構をディスプレイ上で検討し、Hansch-Fujita 法による結果との比較を行ない、寄与の有意なパラメータ項の分子下レベルでの意義を解明する試みがなされている。

情報化学部会員の皆様へ

部会からのお願い

ニュースレターでは、国内及び海外の情報化学・計算機化学の分野で活躍している研究グループの紹介をして行く予定です。紹介の体裁は自由ですが、グループの具体的な目標と活動状況連絡先と会費などを含めた原稿を部会員からお送りいただければ幸いです。

情報化学討論会も回を重ねる毎に盛況になってまいりました。昨年の第6回情報化学討論会終了後の部会会合の時にも話が出ましたが、今後は従来通り特定のテーマを設定しないで部会員の自由な研究成果を発表討論するセッションと併せて、その時々々の社会状況などもふまえたテーマを設定して研究討論するセッションを考慮中です。このテーマ設定に関して本年度第1回部会会合においても部会員の御意見をうけたまわります。

大小にかかわらず海外で開催されるシンポジウムなどのニュース・概要を部会までお知らせ下さい。そして、予稿集や参考となる印刷物をお持ちである旨のアナウンスでも結構ですし、またはそれらのコピーなどをお送りいただければ、部会員がそれらを利用できますよう当部会で取計ります。国際会議とまでいかなくとも御出席の海外の会議の様子やら御感想をお差し支えない程度に部会員に御披露いただければ幸いです。

オリジナリティの主張ということだけでなく、研究途上で、さして体裁はととのではなくても大方の関心に訴えたい情報化学関連の研究テーマをお持ちの場合や、自分では遂行する時間等の余裕がないので何方かに協力をお願いしたいような時に公募をしたい場合等がありましたら、ニュースレターの紙面を御利用下さい。

また、当部会では、会員の増加運動を現在積極的に行なっております。

日本化学会会員の方で、まだ当部会に未入会の方がお近くにおられましたら、是非とも入会をご勧誘下さいますようお願い申し上げます。

昭和59年分部会費(年額)は、つぎの通りでございます。

正部会員(日本化学会会員) 2,000 円

法人部会員 (1口) 30,000 円(1口以上)

入会申込カードなどは下記あてにご請求くだされば直ちに送付致します。

さらに、会員の方で、住所、勤務先、ニュースレター送本先等変更の場合は、ハガキまたは封書にて下記あてご連絡下さい。

(社) 日本化学会 会員部

101 東京都千代田区神田駿河台 1-5

電話 03-292-6163 (直通)

皆様のご協力をお願い申し上げます。

日本化学会第49春季年会

情報化学関係プログラム抜粋

会 期 4月1日(日)～4日(水)
会 場 青山学院大学(渋谷区渋谷4-4-25)

第3会場

9 号 館 930 教室

[特定テーマー化学における データ・ベースの意味と役割]

4 月 2 日 午前

座長 藤原 鎮男(9:00～9:50)

特3201 世界における化学データベースとわが国の立場(阪大理)千原秀昭

座長 内田 尚子(10:00～10:50)

特3202 文献情報データベースの意義と役割(図書館情報大)山本毅雄

座長 工藤 喜弘(11:00～11:50)

特3203 化合物構造検索の現状と将来(富士フィルム)花井荘輔

4 月 2 日 午後

座長 藤原 譲(13:00～14:20)

特3204 (1) 化技研における総合スペクトルデータベース(化技研)山本 修

(2) スペクトルデータ検索システムSPIRES(豊橋技科大)阿部英次

座長 米田 幸夫(14:40～15:30)

特3205 定量的構造活性相関におけるパラメーターデータベースの利用(京大農)西岡孝明・藤田稔夫

総合討論 (15:40～17:00)

司会(豊橋技科大)佐々木慎一

T 会場

9 号 館 932 教室

[化学情報・計算機化学]

4 月 1 日 午前

座長 時実 象一(10:00～11:00)

1 T 07 テクトケイ酸塩構造のトポロジー(5)配位ネット

ワークにおけるトポロジカルナンバーの系統的導出(群馬大工)佐藤満雄

1 T 08 スーパー・コンピュータCRAY-1によるX線結晶構造解析の自動化の現状(2)(CRC・東京理大工・塩野義研)岡田健二・岡田幸子・小山裕三

1 T 09 化学のためのプログラミング言語(東工大資源研)内野正弘

1 T 10 分枝状スピロ多環系炭化水素のMOST-3SR法による命名(群馬大教育・学習大計セ・学習大理)飯塚 健・田中伸英・今井 賢・菅 忠義・三浦 均

1 T 11 学術雑誌の著者付与キーワードの検討(5)「薬剤学」「衛生化学」および「J. Pharm. Dyn.」(電通大・北里大薬)山崎 昶・上野かおり・川口晶子・平賀やよい・水下俊夫

1 T 12 オンライン文献検索のためのファイル収録率および検索効率評価法とその環境科学への応用(日本化物安全情報セ)大島輝夫・立花 肇・吉本和代

座長 阿部 英次(11:00～12:00)

1 T 13 CAS Registry Nomenclature ファイルを利用したCAS登録番号付与の実験システム(化情協・阪大理)門篠司・時実象一・千原秀昭

1 T 14 Markush 式の検索(化情協・阪大理)工藤喜弘・千原秀昭

1 T 15 反応知識グラフィック・エディタにおける総称構造の表現と操作(国際科振財・筑波大学)中山 堯・藤原 譲

1 T 16 分子構造データ作成プログラム-MOLDA3(東大教養)吉田 弘・小川桂一郎

1 T 17 情報化学システム間の結合(1)パソコンとホスト計算機TSSによる分子模型のグラフィックと、立体化学を表示した結合表のCHEMO入力への記号化(東海大開発技研)米田幸夫

1 T 18 インタカレーションとコンピューターグラフィックス(臨床研)鈴木 勇・栗田教子・神沼二真・伊藤由美子・細矢治夫・中田吉郎

4 月 1 日 午後

座長 藤原 譲(13:00～14:00)

1 T 25 薬物代謝予測プログラム(1)データファイルの構築と構造類似性による比較(三共分析代謝研)渡辺弘子・田村千尋

1 T 26 高活性薬剤デザインのための計算機システム(豊橋技科大・京大農・住友化学)今城春生・宮下芳勝・高橋由雅・阿部英次・佐々木慎一・西岡孝明・高山代蔵

1 T 27 主成分分析法によるミッシングデータ予測方法(豊橋技科大)中塚和也・宮下芳勝・高橋由雅・阿部英次・佐々木慎一

1 T 28 パターン認識を開いたスルファミン酸ナトリウム類の構造と甘味の相関(豊橋技科大・住友化学)大久保雄比古・宮下芳勝・高橋由雅・高山千代蔵・阿部英次・佐々木慎一

1 T 29 パターン認識における最少データ数(豊橋技科大)湯田浩太郎

1 T 30* 遺伝情報と遺伝暗号の解説。高等真核生物における

exon-intron 接合部位の認識シグナル(北大理)・飯田陽一
・佐々木不可止

この後部会会合を同会場にて開催します。

8月27日, 28日

第1回分析化学浜名湖夏季セミナー

主催 日本分析化学会中部支部

協賛 日本化学会情報化学部会

会場 浜名湖地方公務員共済組合保養所浜名荘

(内容の詳細につきましては、追ってお知らせ致します。)

昭和59年秋(大阪にて)

第7回情報化学討論会

第11回構造活性相関シンポジウム

12月16日~21日

PAC CHEM' 84; Symposium on Chemical Information
Science (Honoluluにて)

情報化学関連のシンポジウムは下記の通り決定されました。

化学教育・化学情報・計算機・化学史

Information Transfer/Computation

a. Chemical Information Science

b. Computers in Chemical Education (中止)

c. Non-Numerical Computetation; Its Role in Scientific Problem Solving

シンポジウム関連の講演締切は4月20日(金)必着となっております。

講演申込用紙などを未入手の方は至急下記あてご連絡下さい。

101 東京都千代田区神田駿河台1-5

日本化学会 PAC CHEM係 電話(03) 292-6162

研究グループ 紹介

CSA(The Chemical Structure Association)は英国の化学構造に関する情報処理に興味をもっている人達のグループである。

事務局は, Miss S. H. Brand

Compound Information Section

Wellcome Research Laboratories,

Langley Court, Bekenham, Kent BR3 3BS,
U. K.

年会費は10ポンドでニュースレターを4回送付する。次の4項目に研究の力点を置いている。

1) 化学構造の表現法(名称, 線型表示, 化学構造図, フラグメント・コード, 結合表など)および異なった表現間の変換方法や参照方法を研究する。

2) 化学構造処理のコンピュータシステムの研究。

最近商業的に利用できる電話システムが到来したので, この研究は著しく重要になってきた。

3) 化学反応に関する情報を人間および機械の両方で検索でき

るシステムの研究。

ある分子を合成するのに可能性のある方法をコンピュータが示唆する"Synthesis Analysis"と呼ばれるプログラムがある。

4) 化合物の物性に関する情報の研究。

印刷体および機械可読体で化合物の物理的および生物学的性質に関する多くのデータベースがある。毒性データは特に重要である。会員はこれらのデータベースの設計や活用に精力的に取り組んでいる。化学構造図だけからコンピュータにより予測することも行なわれてきた。

CSAはコンピュータにだけ関わっているのかというそうではない。現代は情報システムがコンピュータ化されているものの, 人手によるシステム・バイルシュタイン, メルクなどの印刷された索引およびCSAの印刷体などに現在もお取り組んでいる。

会は何を開催してきたか?

セミナーや会議: CSAはこの分野の現在の研究状況を知ってもらうセミナーや会議を積極的に主催してきた。特定の話題の概要を参加者に提供しそれによって現存のシステムおよびサービスに対し意見の交換が可能となる。

会合は最近では次のような題目で行なわれた: 化学情報処理の将来, 構造表現の相互変換, オンライン部分構造検索, 命名法, 印刷物の索引の構造検索。これらは時として他の団体と共催されてきた。

研修コース: CSAは一日のものから数週間に及ぶ研修コースを開講している。ここで参加者に化学構造情報の取り扱い, 使用されている多くの方法および利用できるシステムとサービスについて紹介される。将来再び同じようなコースが開催されることも希望されている。

WLNの個人指導: Chemical Notation Associationと組んで, かなりの数の線型表示の専門家を擁している。個人教師は各地で化学者および情報科学者のWLNの使用訓練ができるように配置されている。

誰が参加できるか?

CSAの活動に興味のある人は誰もが参加できる。会員は, 化学産業, 情報および出版産業, 大学および工業専門学校, 政府の各省といった広汎多岐な組織に属している。CSAはCNAのWLN部会と協同しており, その会員はWLN則の改訂に参加することもできる。

参加の特典は何か?

CSAの会員は, 会の催す会合およびセミナーに全て参加できる。そこで同じ関心を抱く他の会員と接触する機会がある。会員には化学構造処理に関する世界的な専門家が多いので, 他の会員は種々の問題で適切な助言が受けられるようになっている。システムの製作者や売り手に対して, 会員は利用しているシステムのサービスの改善を要求することができる。

活発なニュースレターが年4回発行されて会員に送付される。種々のニュース項目, 会員に興味ある最近の会議に関する報告刊行物の解説などが盛り込まれている。

(この記事はCSAより送られてきたパンフレットを抄記したものです。 文責: 群馬大学教育学部 飯塚 健)

NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会

Vol. 2

No. 2

目 次

情報還元主義の諸相	名 和 小太郎	1
-----------------	---------	---

部会行事

第7回情報化学討論会		2
第12回構造活性相関シンポジウム		2

関連行事

分析化学夏季セミナー		2
日本分光学会夏季セミナー		2

学会報告

国際情報知識コンファレンスー 1984 からの報告		3
第11回構造活性相関シンポジウム		4

部会員名簿		5
-------------	--	---

情報還元主義の諸相

名和 小太郎

(嵯峨リサーチセンター)

記号論とやらが、このところ大流行である。この理論の祖述者の言葉をさらに孫びきすれば、記号論とは、人間の作りあげた文化財をすべてテキストとみなし、そこに制作者の意図を読みとろう、という方法を指すもののようなのだ。だから記号論の対象は、文学はもちろん、身振り、したがって演劇やサーカスなど、あるいは物語から神話、夢、絵画、映画、さらには街並木から都市の景観まで、またそこに住む人びとの習慣、たとえば婚姻関係にまで至るらしい。

つまり、人間の製作物はすべてだれかからのメッセージであり、そのコードを解読しようというわけだ。いわば記号還元主義、はっきりいえば情報還元主義といってもよいだろう。しかし、ここに見られるのはなんだろう。あえて素人の感想を述べれば、いかがわしき雑談と言ったら言いすぎだろうか。

ところで情報還元主義というものは、どうやらいろいろな領域で流行している。そのよい例が最近の著作権騒ぎである。たとえば、出版物の無断コピー、貸しレコード、貸しソフトウェア、ソフトウェアの盗みなど、いろいろと話題になっている。とくにソフトウェアの権利保護にかんしては、役所間の鞘当てがあったりして、私のような一知半解の徒まで審議会やシンポジウムに引き出された。こんな機会を通じて門前の小僧なみに勉強してみると、この著作権というものは、これまた情報還元主義の権化のようなものである。

現行著作権法によれば、著作物とは「思想又は感情を創作的に表現したものであって、文芸、学術、美術又は音楽の範囲に属するものをいう」とある。さらに法律を子細に読んでみると、講演、舞踊、無言劇、建築、地図、模型など、人間の表現したもののはなんでも対象となる。しかも、これらの著作物を翻訳し、編曲し、変形し、脚色し、映画化し、翻案したのも、また著作物になる。そのうえ、発表のメディアは問わない。複製、上演、演奏、放送、口述、展示、上映、頒布などにわたる。まさに、この法律は現代の記号論の発想を先取りしたものといえる。

なにしろ、その発想が情報還元主義である。だから、どんな対象も情報と解釈し、これに対応することができる。著作権法は「表現」のみを相手にするといいいながら、「翻案権」によって物語の筋がき、つまりプロットも著作物である、と主張する。それだけではない。建築にかんしては、図面だけではなく、建築本体も著作物である、とみなしている。まさに記号論そのものである。

こうした情報還元主義からなにが導かれるか。たとえば、コンピュータ可読型媒体上の情報にかかわるはてしなないスコラの論議は、いまなお記憶に新しい。

とまあいささか局外者的な放談を試みたわけだが、考えてみれば、私たちコンピュータ関係者たるもの、情報還元主義に侵されていないと、言いきるだけの自信があるだろうか。

とかくコンピュータというものには、魔性がある。たとえば、ローレンス・リヴァモア研究所は、超大形コンピュータをふんだんに使ってきたところだが、ここには膨大な量の私的データベースがある。というのも、つぎのようなデータの扱い手順があるためだろう。

- ① 固有のデータか。「イエス」であれば保管する。「ノー」であれば②に進む。
- ② 大量のデータか。「イエス」であれば保管する。「ノー」であれば③に進む。
- ③ 開発中のデータか。「イエス」であれば保管する。「ノー」であれば④に進む。
- ④ 法律上で保管を要求されているデータか。「イエス」であれば保管する。「ノー」であれば⑤に進む。
- ⑤ あとで使う可能性のあるデータか。「イエス」であれば保管する。

この手順に注釈を付ける必要はないだろう。

もちろん、データに溺れることが、コンピュータの魔性のすべてではない。もうひとつ、アルゴリズムの洗練を競う、という楽しみもある。情報還元主義の魅力は、およそこのようなものだろう。だが、これを記号論のいかがわしさ、著作権法のスコラの論議と区別することは、どうだろう、難しいのではないか。

ある学会で研究のルーチン化、制度化について議論があったとき、私はこのように考えた。その学会にはコンピュータの名手がおおぜいた。

筆者について

現職 嵯峨リサーチセンター・取締役。1956年、東京大学・理学部・物理学科卒業。同年 嵯峨石油資源開発入社、1960年、嵯峨化成工業入社、システム管理部等に勤務。1977年、嵯峨リサーチセンター出向現在に至る。

著書「変りゆく情報システム部」企画センター1980年、「コンピュータ利用の座標軸」コンピュータ・エージ1982年など多数。

部 会 行 事

第7回情報化学討論会

主催 日本化学会 共催 日本薬学会ほか
日 時 11月19日(月), 20日(火)
会 場 大阪科学技術センター8階大ホールおよび4階
401号室(大阪市西区靱本町1-8-4, 電話(06)
443-5321)

本討論会は、第12回構造活性相関シンポジウム(11月20日(火), 21日(水))と一部重複して、上記会場において開催されます。
討論主題 1) 化学におけるコンピューターの利用一般, 2) 化学情報システム, 3) 情報化学一般。

講演申込締切 8月4日(土)

講演申込者は、B5判用紙に横書きで次の事項を記入してお申し込み下さい。1) 題目, 2) 発表者氏名(所属機関略名, 講演者に○印), 3) 連絡先(郵便番号, 住所, 氏名, 電話番号), 4) 講演内容の要約(100字程度)。

講演要旨原稿締切 10月6日(土)

要旨集原稿用紙は所定のもの(1,400字詰)を講演申込者に8月下旬発送の予定ですが、図表を含め4枚以内とします。参加登録費 要旨集代を含めて4,000円。ただし、第12回構造活性相関シンポジウムに同時登録のときは6,000円。

懇親会 11月20日(火)18時から大阪科学技術センター8階中ホールで、第12回構造活性相関シンポジウムと合同で行ないます。会費4,000円。

参加予約申込方法 ハガキ大の用紙の上半分に、情報化学、構造活性相関、懇親会のうち参加を希望されるものの名前を、下半分に氏名、連絡先を記入し、参加費を同封してお申し込み下さい。送金は、現金書留をご利用下さい。また要旨集を郵送希望される方は、1冊につき送料300円と、ハガキ大用紙に宛名を書いたものを添えてお申し込み下さい。なお、当日の受付事務の混雑をさけるため、なるべく予約申込みをお願いします。

申込・連絡先 565 吹田市山田丘1-6 大阪大学薬学部 富田研一(電話(06) 877-5111, 内線6211, 6213)

第12回構造活性相関シンポジウム

共催 日本化学会・日本薬学会・日本農芸化学会ほか
日 時 11月20日(火), 21日(水)
会 場 大阪科学技術センター大ホール(550 大阪市西区靱本町1-8-4, 電話(06) 443-5321)

本シンポジウムは、第7回情報化学討論会(11月19日(月)~20日(火))と一部重複して、上記会場において開催されます。
討論主題 生理活性の解析ならびに関連事項に関する定量的取扱い。

講演申込締切 8月4日(土)

講演申込みは、B-5横書き原稿用紙に次の事項を記入。1) 題目, 2) 発表者氏名(所属機関略名, 講演者○印), 3) 連絡先(郵便番号, 住所, 氏名, 電話番号), 4) 講演内容の要約100字程度。

講演要旨原稿締切 10月6日(土)

要旨集原稿用紙は所定のもの(1,400字)を講演申込者あて8月下旬発送の予定。図表を含めて4枚以内。
参加登録費 要旨集代を含めて4,000円。ただし、第7回情報化学討論会に同時登録のときは6,000円。

懇親会 11月20日(火)18時から中ホールで、第7回情報化学討論会と合同で行ないます。会費4,000円。

参加予約申込方法 ハガキ大用紙の上半分に構造活性相関、情報化学、懇親会のうち参加希望のものを記載し、下半分に氏名、連絡先を記入、参加費を同封してお申し込み下さい。

い。送金は、現金書留をご利用下さい。また要旨集の郵送を希望のときは、別に送料300円、宛名を書いたハガキ大用紙を追加のこと。当日の受付事務の混雑をさけるため、なるべく予約申込みをお願いします。

申込・連絡先 565吹田市山田丘1-6 大阪大学薬学部製薬化学科 佐々木喜男(電話(06) 877-5111, 内線6131, 6133)



関 連 行 事

分析化学夏期セミナーについて

日本分析化学会中部支部主催、本部会協賛の標記セミナーが8月27, 28日の両日浜名湖において開催されます。プログラムの概要は下記の通りです。

A コース HPLC

1. 超臨界流体クロマトグラフィ
豊橋技科大工 平田 幸夫
2. キャピラリー液クロ電気泳動検出
京大工 寺部 茂
3. ポルフィリン錯体の液体クロマトグラフィ
東北大 理 齊藤 統一
4. レーザーケイ光検出による液体クロマトグラフィ
九大工 今坂藤太郎

B コース 分子設計の可能性を求めて

1. 薬物設計のためのソフトウェア SARD について
豊橋技科大工 高橋 由雅 佐々木慎一
2. コンピュータシステム「ACACS」について
住友化学計数センター 吉田 元二
3. 化合物体系名から立体特異的な原子結合表の作成
日本科学技術情報センター 荒木 啓介
4. パーソナルコンピュータと分析化学
福井 高専 吉村忠与志

日本分光学会の夏期セミナー

(分光学とコンピュータ) について

標記セミナーが8月23日~26日の間、白樺湖において開催されます。プログラムの概要は下記の通りです。

1. コンピュータでデータをとる
A/Dを通して 名大・工 河口 広司
TACを通して 理 研 木下 一彦
採取したデータのしまい方 三菱油化・中研 酒井 稔夫
2. コンピュータでデータを処理する
大量高速処理 埼玉大・工 山田 興治
どんな言葉で処理するか ESD Lab. 水島 敏雄
3. コンピュータでデータを編集、分析する。
絵を見ながら結果を見る 電 総 研 亀井 裕孟
今までの結果と比較する 電 総 研 前田浩五郎
分析結果を高次情報へ 北大・工 大沢 映二
4. コンピュータに分析をまかせるには
知識工学と分光学 豊橋技科大 佐々木慎一
パネルディスカッション 山形大・工 鎌田 仁

学会報告

国際情報知識コンファレンス—1984からの報告

表記会議(委員長・藤原鎮男教授)が(財)国際科学振興財団の主催により5月6日—5月8日にわたってプレスセンターホールで開催された。以下は藤原委員長が情報通信学会誌に寄稿された報告の抜粋である。転載をお許し下さった同委員長はじめ関係の各位に御礼を申し上げる。

この会議の主要議題は、情報化社会、情報収集、表現標準化、構造化、情報アクセス、高機能化、情報流通、利用、知識工学、高速情報通信、分散データベースシステムなどであるが、その背景をなすモチーフは、異なる立場に立つ「情報」の関係者が一堂に会し、研究成果を交換し、問題点を提示しあって今後の協力の態勢をつくることにある。

会議の準備の冒頭に当たってわれわれはまず、上記の趣旨によって斯界の代表的立場に立つ内外の方々に招待講演への出講を依頼したが、これらの方々は即座にわれわれの意をくまれ快諾、協力の意を示され、これにより会議の骨格が決つたのであった。かくて実際の会議はまず情報学の立場から Zloof 博士(IBM)と Chen 教授(ルイジアナ大)が得意の情報モデルを焦点とする基調講演をされ、データベース構築に強力な指針を与えられた。ついで、海外からの参加者の注視する第五世代計算機の動向を中心に、計算機の将来像について元岡 達教授(東大)、洲 一博博士(ICOT)が明快なプレゼンテーションをされ、さらに、通信科学の立場から、北原安定電電公社副総裁がシャノンのビットによる情報の定量化以来の歴史的展望から説きおこし最新の電電公社の技術開発の現状と社会へのインパクト、さらには南北格差の解消を含め国際協調の必要について、熱のこもった発表をされた。これを受けて、同横須賀電通研、高村真司部長がより詳細な技術面の紹介をされ、これに対し、DuBois 教授は情報の知識の定義から論を起し、同氏が開発し、欧米で実用化が進み、わが国にも実用レベルの紹介が進んでいる DARC システムの紹介をされ、さらにまた、英国図書館の一部である科学参考資料、特許情報図書館の館長であり、FID の副会長でもある Hill 氏は、新時代の図書館界のあり方について、示唆、含蓄に富む講演をプレゼントされた。私事を述べて恐縮であるが、筆者は DuBois 教授と化学情報の組織化を主題とする国際純正応用化学連合の委員会で十年余席を共にし、アメリカ主導の大勢の中で DARC の誕生から今日の展開に至る経過を知る身であり、同氏の講演の一語一語がわが国の情報関係者への助言のごときかれた。また Hill 氏とは現在筆者も FID の副会長として用語、分類の標準化などの問題で悩みを共にする身であり、同氏の思慮深い発言はこれまた傾聴させられるところであった。情報サイドからは、さらに、長尾 真教授(京大)から、先年来同氏が進めておられる日英自動翻訳の事業の全容の紹介があり、この発表に対しては、仏・DuBois 教授、タイ・Chit racorn 女史、その他から多くの讃辞と感銘の言葉がよせられた。以上に加え、JICST の鳥海 剛氏からは、JICST のシソーラスの紹介がなされた。

公募論文は、多くの発表の希望がよせられたが、時間の制約を考え、最精鋭の論文を一機関当たり一件の発表に願うことを原則にしたいとプログラム委員会の意向により厳選した選択が行われた。その結果、内外の発表すべてが重要な成果や問題点の指摘の提示となった。すなわち米田教授(東海大、京大)の化学反応推算システムについての発表、東大情報センター根岸氏の学術情報誌の管理システム、理研菅原氏の生物科学情報データベース、東大岩田氏の物質科学とくに原子

炉材料工学データベース、図書館情報大石塚氏と東大大型計測小沢氏の化合物データベース、筑波大藤原(議)、大保氏と国際科学振興財団中山(堯)氏による高分子データベースなどの発表は、わが国にもいよいよ独自の構想、方式ないし材料によるデータベースの構築と、その処理システムの開発が始まったとの感を懐かせるものであった。これに加え、九大上林氏、横浜国大有沢氏は情報モデルについて近年精力的に進められている研究成果を報告され、山本毅雄教授は図書館情報大の教育課程からの問題提起をされた。

これに対して海外からは、Keenan が FID の活動の焦点を紹介し、国連大から Ploman 副学長、Wesrey 女史が全球規模の視点より見た情報の流れの問題点、ブラジル中央図書館長 Miranda 氏からはさらに鋭く南北の情報流通の格差の是正の要望がなされた。国連大情報部長の箕輪成男氏は、同氏の多年の経験に立脚した出版の観点からの今後の情報流通の問題点を指摘され、またさらに、同氏の認識としてわが国の情報関係者が東南アジア諸国との間に、より緊密な連帯を図るべきであること、そのための科学技術の展開上の配慮が必要であることを指摘された。また、ドイツ情報センターの Wattenberg 博士、スウェーデンの Ljungberg 博士からは、それぞれ、自国のシステムに即しての紹介発表があった。

企業サイドからの発表もまた何れも特長をもち、意欲にみちたものであった。順不同に発表者名のみをあげれば、日立からは酒井氏、沖からは吉田氏、東芝より毛利氏、日電から畑崎氏、IBM から足立、大橋氏から発表があり、それらは内外の参加者の興味と関心をよぶところが多く、わが国の情報学の高い水準を紹介しえたものと思う。発表後、OECD の Gibbons 博士、イラクの Razaak 博士などが個別に会社での実地見学を申し出られたことなどを見るにつけ、国際会議の意義を思った次第である。

海外からの参加者は、英、米、仏、独、ソ連、蘭、スウェーデン、スペイン、イラク、中国、ホンコン、タイ、インドネシア、ナイジェリア、アルゼンチン、ブラジル、メキシコ、カナダなどわが国を含めて20ヶ国の構成であり、文字どおり、東洋と西洋、南北米大陸、アフリカ圏、オセアニア圏の代表を含むこととなった。また、国際機関という視点でいうと、ユネスコ、OECD、FID、CODATA の代表者の会となったとはいえ、さらに専門家の立場から見れば、情報理論、計算機設計、データベース処理、数値情報、文献情報、図書館を専門とする諸氏が会合し、自らの専門的研究成果を発表し、討論に加わり、さらに懇親会をもち相互の理解と今後の協力の約束をしたのであった。このようなことは始めての試みであり、参加者が均しくその意義と成果を認め、今後の展開を期そうと約するところであった。



第11回構造活性相関シンポジウム

本部会と密接なつながりをもつ構造活性相関懇話会(代表・藤田稔夫 京大農学部教授)主催の標記シンポジウムが、昭和59年5月25日、京都大学において開催された。今回は定量的構造活性相関(QSAR)の生みの親とも言える米国 Pomona College の C. Hansch 教授を迎え、特にこの時期に開催された。当日は200名を越す参加者があり、この分野への期待の大きさを窺うことができた。以下に講演の概要を記す。

1. Cyclodextrin 包接反応における置換基効果

京大、農 西岡 孝明

酵素モデル化合物として知られているサイクロデキストリン(α -CD, β -CD)のいくつかの構造上の特徴が基質認識機能あるいは QSAR 式にどのように反映しているかについて、メタ置換フェニルアセートの α -CD, β -CD による取り込みおよび包接化合物のエステル加水分解速度の加速における置換基効果の検討が行われ、基質認識は脱溶媒和、水素結合、置換基と内孔直径との相対的大きさ等に支配され CD 形状は QSAR 式に立体効果として反映している事が明らかにされた。

2. 昆虫幼若ホルモンミックスの構造活性相関と分子設計

京大、農 岩村 俊

一連のテルペン型 JH 誘導体で示唆された JH ミックスの活性発現における分子の立体的因子、疎水性の有意性が Oxime O-ether および carbamate を部分構造にもつテルペン誘導体により検証された。この結果に基づき、methoprene に匹敵する高活性化合物が Oxime ether と非テルペン型 carbamate との組み合わせにより合成された。

3. Estratriene-17 β -ol 類の Androgen および Estragen Receptor への Binding Affinity の定量的構造活性相関

シオノギ研 江角清志 堀部 功
加藤五郎 鈴木哲郎
武田健一 小川真透

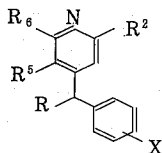
Estratriene-17 β -ol の A 環置換誘導体のラット estrogen および androgen receptor への相対的結合能の Hansch-Fujita 法による解析の結果、estrogen および androgen receptor それぞれに対して、Estratriene-17 β -ol は置換基の大きさ、置換基中の水素結合性水素原子の存在および π 電子密度に関する特異な作用部位を持つ事が明らかにされた。

4. 抗うつ活性を持つ 4-Anilinopyrimidines の定量的構造活性相関

三共・化学研 吉本昌文 渡辺英俊
宮本秀一

生物研 上岡利香 中山 勲
宇部興産・中研 本田建夫 古林隆司

59種の 4-Anilinopyrimidine 類(I)に関するマウスのレゼルピン若起眼瞼下垂の阻外作用に対する QSAR 式が得られた。この結果より、アニリン部分の P-位での X の電子吸引性および (R^5 , R^6) = (CH_3)₂ について活性への大きな寄与が予測され、これにもとづいた合成の結果、 R^2 = R = H, (R^5 , R^6) = (CH_3)₂, X = 4-CN の高活性化合物がデザインされた。



5. 液体クロマトグラフィーによる疎水性薬物の分配係数の決定

徳島大、薬 寺田 弘

疎水性の高い薬物の分配係数の決定に対する逆相高速液体クロマトグラフィー(RP-HPLC)の応用が述べられた。Poct 既知の物質を用いてクロマトグラフィーを行ないその保持時間より算出されたパラメータから次式の a, b を決定する。

$$\log \text{Poct} = a \log k' + b$$

この相関式を利用して目的の薬物の k' からその Poct を決定する。この方法により、 $a > 1$ の条件下で benzoic acids, phenols, N-phenylanthranilates および N-phenylsuccinimides に対して ~6 までの log Poct 値が簡便かつ正確に決定された。 $a > 1$ の条件は10%メタノール水溶液による溶出で glyceryl-coated glass column を用いて達成された。

6. 適応最小二乗法による構造活性相関: カプトプリル類縁体(少数データ)および水質汚染有機化合物(多数データ)への適用

北里大、薬 森口郁生 広野修一
小松克一郎

26種の captopril 類縁体の angiotensin 変換酵素(ACE)阻害活性データを適応最小二乗法(ALS法)により解析した結果、従来の相互作用モデルを支持する次のような識別関数を得た。

$$L = 8.77 Q_s - 3.44 Q_{01} - 1.98 Q_{02} + 2.02 D_{Me} - 2.36 n = 26 (4 \text{ 群}), \quad nmis = 0, \quad R_s = 1.00$$

L は 4 群で表わされた活性強度を示す。Q は net charge で添字 01, 02 はそれぞれ carbonyl 酸素, carboxyl 酸素を表わす。また D_{Me} は S 配置 β -methyl の有無を表わす。

また、280 種の水質汚染有機化合物の Aquatic toxicity rating に対する ALS 解析の結果、3 等級に分けられた毒性クラスを27個のパラメータを用いることにより、約86%の化合物の毒性クラスが正しく認識された。

7. On the Use of QSAR and Molecular Graphics in Enzyme-Ligand Interactions. Corwin Hansch(Pomona College)

The QSAR paradigm (quantitative structure-activity relationships) has during the last two decades become increasingly important in our understanding of how organic compounds interact with living systems or parts thereof (eg. enzymes, organelles, etc.). The most difficult task in such work is to understand how sets of congeners react with the critical bioreceptors. To develop background on this problem as well as to better understand the meaning contained in correlation equations we have formulated QSAR for ligand interactions with enzymes whose structures have been established by X-ray crystallography. The coordinates of these studies can be used to construct color stereo computer graphics models of the receptors of the enzymes. The QSAR can then be checked against these independently derived models. Not only have we found excellent correspondence between the two models, but in addition, we find consistent behavior for similar molecular features in different receptors. For example, when substituents bind in a hydrophobic cleft or hole a coefficient with π or log P of 1 is expected and found. When binding occurs on a surface only 50% desolvation can occur and we find coefficients near 0.5 as expected.

Stereo graphics and QSAR will be discussed for the following enzymes: Chymotrypsin, papain, actinidin, carbonic anhydrase, trypsin, alcohol dehydrogenase, subtilisin, carboxypeptidase and dihydrofolate reductase.

情報化学部会員の皆様へ

部会からのお願い

本ニュースレターでは、部会員の方々からの投稿をお待ちしております。

大小にかかわらず海外で開催されるシンポジウムなどのニュース・概要を部会までお知らせ下さい。そして予稿集や参考となる印刷物をお持ちである旨のアナウンスでも結構ですし、またはそれらのコピーなどをお送りいただければ、部会員がそれらを利用できますよう部会で取計ります。国際会議とまでいかなくとも御出席の海外の会議の様子やら御感想をお差し支えない程度に部会員に御披露いただければ幸いです。

オリジナリティの主張ということではなく、研究途上で、さして体裁はととのわなくても大方の関心に訴えたい情報化学関連の研究テーマをお持ちの場合や、自分では遂行する時間等の余裕がないので何方かに協力をお願いしたいような時に公募をしたい場合等がありましたら、ニュースレターの紙面を御利用下さい。

また、当部会では、会員の増加運動を現在積極的に行なっております。

日本化学会会員の方で、まだ当部会に未入会の方がお近くにおられましたら、是非とも入会をご勧誘下さいますようお願い申し上げます。

昭和59年分部会費（年額）は、つぎの通りでございます。

正部会員（日本化学会会員） 2,000 円

法人部会員 （1口） 30,000 円（1口以上）

入会申込カードなどは下記あてにご請求くだされば直ちにお送り致します。

さらに、会員の方で、住所、勤務先、ニュースレター送本先等変更の場合は、ハガキまたは封書にて下記あてにご連絡下さい。

（社）日本化学会 会員部

101 東京都千代田区神田駿河台 1-5

電話 03-292-6163（直通）

皆様のご協力をお願い申し上げます。

NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会

Vol. 2
No. 3

目 次

分析結果を高次情報へ

- 分子構造と振動スペクトルを例として— 大 沢 映 二 1

部会行事

- 第7回情報化学討論会プログラム 4
第12回構造活性相関シンポジウムプログラム 5

情報化学雑学講座

- 「情報」とはなんだろう? 細 矢 治 夫 6

- 海外ニュース 7

- 部会員名簿 7

分析結果を高次情報へ

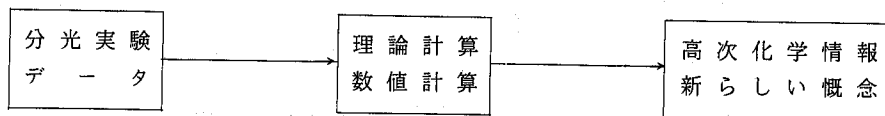
——分子構造と振動スペクトルを例として——

北海道大学理学部 大沢 映二

1. はじめに

各種の分光学的方法によって得られる分子に関する精密データは化学における最も有用な情報源の一つである。分光データは従来主として理論化学者によって利用されてきたが、最近有機化学や生物化学の実験においても単に化合物の同定に用いる以外に有益な使い途のあることがわかって来た。好例はNMRで、今や溶液および生体内環境内における分子の動的挙動を知る為に不可欠の道具として独自の発達を遂げつつある。¹ また光電子分光は分子軌道の準位と相互作用に関する情報を得るための殆んど唯一の手段であるし、² 分子軌道の空間的広がりに関して Penning イオン化電子分光が有用であることがわかってきて、³ いずれも実験に対する分子軌道法の適用に関して大きな役割を果しつつある。

これらの華々しいトピックについては既に解説¹⁻³ が公にされているので、ここでは古くから良く知られている二つの方法——X線結晶解析と赤外吸収スペクトル——から高次の化学的情報をひき出す方法について紹介する。この方法の特徴はコンピュータを駆使する数値計算を介在させることである。



2. 分子構造データを如何に利用するか？

(a) 古典的アプローチ

分子構造の情報に基いて反応性を論じた初めての例としてDunitzの仕事⁴ が良く知られている。これは互いに結合していないカルボニル基とアミノ基が接近して存在する一連の環状分子の結晶解析を行ってカルボニル基の面外変角と C...N 非結合距離の間に一義的な関係があることからカルボニル基への親核付加に際して試薬は従来漠然と考えられていたように垂直上方からではなく、109°に近い方向から進入すると推論したものである。⁵

(b) ケンブリッジ構造データベース (CSD)

CSDは有機化合物、有機金属、金属錯体のX線および中性子線回折結果を集めたデータベースで1982年1月1日現在 28,978の化合物が登録されている。⁶ 我国では東大大型計算センターに登録されている。固相に関する数値という制限はあるが、文献、結合表および原子座標を能率良く検索してSPSSのような統計処理パッケージと組み合わせることによって信頼度の確かな構造パラメーターを容易に得ることが出来る。^{7,8} この為、(a)に述べたような類推が容易に行われることになり、計算機化学における有力な手法として注目されているが、一般化学者にはあまり利用されていない。コンピュータアレルギーが原因の一つかも知れない。⁹

(c) 蛋白質の構造データベース

蛋白質の結晶解析結果が約160件集められてデータベースとなっている。これを利用して蛋白分子の立体構造をグラフィックス表示して、立体配座や相互作用の研究を行うことができる。⁹ このような研究はドラッグデザインの領域で有用である。¹⁰

(d) 分子構造の理論計算

小分子の分子構造に関する限り、実測データの収集に頼らずとも非経験的MO法あるいは経験的ポテンシャルエネルギー計算法などによって“作り出す”ことが或る程度可能になってきた。とくにab initio 勾配法は強力である。¹¹ C, H, O, Nから成る分子にたいして結合距離0.01 Å, 結合角1°程度の絶対精度が達成されている。経験的方法の代表であるMolecular mechanics 適用できる化合物のタイプに関して巾が狭く、また予言能力に関して一貫性を欠く場合があるが、計算時間が短いので実用性は可成り高い。¹² 理論計算で得られる分子構造は一般には真空中凍結状態の孤立分子に関するもので、熱振動励起状態にある実在の分子とは必ずしも対応しない。このギャップを埋めるものが後に述べる力場計算(CFF)である。

さて分子構造に関するデータから高次情報をひき出す。すなわち“chemistry”を行うという立場に立ってみると、実測分析データだけでは不足である。化学では分子の静的な構造よりもむしろ動的挙動や反応性のようなダイナミックな性質を知りたいことが多い。そこで実測分析データに理論計算による肉付けをして、より精密な情報を補足することが行われる。¹³

3. 振動スペクトルの帰属から何を期待するか？

赤外分光法はかつて化学分析法として非常に広く用いられたが、現在ではあまりかえりみられない。それは赤外吸収スペクトルが化合物同定の道具として限定された情報しか与えないからである。ところが最近、分子の熱振動情報がステレオダイナミックスの解釈や熱力学函数の計算に威力を発揮することが再認識されつつある。それはコンピュータの発達に伴って台頭した計算化学 (Computational chemistry) に負うところが大きい。

(a) MO法と赤外吸収スペクトル

何らかの理論的方法によって任意の分子の赤外振動を迅速かつ正確に再現することができれば、最早同定以外の目的には実験データを必要としない上に、未知物質の性質の推定に役立つ、この分野は先に触れた *ab initio* 勾配法の出現によって著しい進歩が見られつつある。この計算法から得られるポテンシャルの原子座標に関する二次微分のマトリックス (F)^{*} だけからの振動数を計算すると (後述) 誤差が大きい。しかし誤差は系統的に現われるのでスケールリングを行うことによって実測振動数に相当良く合うように補正することは可能である。スケールリング係数はよく似た分子の間では移動可能である。たとえばベンゼンの振動数を再現するように定めたスケールリング係数の組を用いてピリジンの面内振動数を平均誤差 5.7 cm^{-1} で再現できる。¹⁴

(b) 経験的力場法と赤外吸収スペクトル

力場とは、分子のポテンシャルを原子座標を用いて解析的に表現したものである。分子力場は異なる種類の分子の間で完全に transferable であると仮定し、そのパラメーターを実測の赤外振動数をできるだけ正しく再現するように定める方が、3(a)の方法よりも現在のところ実用性の点において優れている。炭化水素とオレフィンに関するこのような力場が実現している。有機化学一般によく用いられている Molecular mechanics が分子の構造とポテンシャルエネルギーの再現のみを目標としている¹² のに比べて、構造とエネルギー以外に赤外振動数を再現する力場を Consistent Force Field (CFF) と呼ぶ。¹⁵ CFF は調和振動モデルを主体としているが、これは重要な非対角振動項と非結合相互作用項をつけ加えることによってできている。MO法に比べるとポテンシャル式が簡単のために核座標に関するポテンシャルの一次および二次微分を速やかに求めることができ、これを利用してエネルギー表面上の重要な点 (極小点や鞍点) を見出すことができる。

CFF はつぎのように表現される：

$$V = \frac{1}{2} \sum k_b (b - b_r)^2 + \frac{1}{2} \sum H_\theta (\theta - \theta_r)^2 + \frac{1}{2} \sum H_x X^2 \\ + \frac{1}{2} \sum H_\phi (1 + S \cos \phi) + \sum F_{\text{pipj}} (P_i - P_{ri}) (P_j - P_{rj}) \\ + \sum_{i>j} V_{\text{nbi}}(r_{ij})$$

V : ポテンシャルエネルギー

k_b , H_θ , H_x , H_ϕ : ポテンシャルパラメーター, b は結合長, θ は結合角, x は平面状三価原子 (Csp^2) の面外変角, ϕ はねぢれ角 (二面角)。

s : エクリプス配座 ($\phi = 0$) でねぢれエネルギーが極大になる場合に $+1$, 極小になる場合に -1 。

n : ねぢれ函数の周期性。例, エタン $s=1$, $n=3$, エチレン $s=1$, $n=2$ 。

F_{pipj} : 交叉項のポテンシャルパラメーター, p_i は任意の分子内座標, p_{ri} , p_{rj} は標準値

V_{nbi} : 非結合原子間相互作用ポテンシャル, r_{ij} は3つ以上の結合をへだてている2つの原子 i, j の間の距離
CFF でば Lennard-Jones 式

$$\epsilon \left[\left(2 \left(\frac{r^*}{r} \right)^9 - 3 \left(\frac{r^*}{r} \right)^6 \right) \right]$$

を用いる。この項は一般の振動解析においては考慮されない。後者において求められる力定数が transferable でないのはこのためである。

b_r , θ_r : 標準結合長と標準原子価角

CFF では現在のところ炭化水素のみを扱うので静電相互作用 ($q_i q_j / r_{ij}$) を考慮しない。上に掲げたパラメーターの値は振動解析の方法によって分光法で得られる力定数の値に似ているが等しくはない。

(1) 式が 313 ケの実験値 (構造データ 44, エネルギー 10, 赤外振動数 259) を再現するように 39 ケのパラメーターの組を最小二乗法を用いて定めた。最小二乗最適化において重みづけ (構造データ 16%, エネルギー 9%, 振動数 75%) を行っている。実験値採用に使われた化合物は簡単な脂環式および非環式アルカン, およびオレフィンである。計算値の絶対誤差は振動数 15 cm^{-1} , 結合長 $0.003 \text{ \AA}$, 結合角 0.5° , 二面角 1.0° , ΔH_f 0.9 kcal/mol である。

つぎにエネルギー最適化法について述べる。一般に最安定配座や遷移状態の構造を求めるに当たって *a priori* の方法は存在しないので、何らかの根拠に基づいて出発構造をつくり、その最適化操作を行って目的とする構造を探すという手順を経る必要がある。現在用いられている方法はすべて繰返し法であって収斂条件は

* 二重下線は行列を, また一本下線はベクトルを意味する。

$$\frac{\partial V}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, 3N \quad (1)$$

N は原子数, x_i は原子のカルテシアン座標。(1)においては V の表現に内部座標を用いたが, ここで外部座標 x_i を用いているのは, x_i がすべて独立変数であってその為数学的処理が簡単だからである。振動数の計算も外部座標を用いる方が便利である。欠点は V と座標の間に単純な関係がないことである。

(2)の収束条件は, 真のエネルギー極小点ばかりでなく部分極大点 (partial maxima) においても満足される。たとえばエネルギー表面において最も重要な遷移状態は一次元の部分極大である。この為, エネルギー最適化が収束後, 常に V の外部座標 x_i に関する二次微分行列 $\underline{F}$ を作って対角化を行わねばならない。 $\underline{F}$ の成分 F_{ij} は次式で与えられる:

$$F_{ij} = \partial^2 V / \partial x_i \partial x_j, \quad i, j = 1, 2, \dots, 3N \quad (2)$$

(2)式を満足する点 (定常点) の $\underline{F}$ は6重に特異的である。即ち並進と回転の6ケの自由度に相当して $\underline{F}$ の固有値のうち6ケはゼロである。真の極小点においては $\underline{F}$ は $3N - 6$ ケの正の固有値をもつ, L 次元部分極大点では負の固有値が L ケ, 正の固有値が $3N - 6 - L$ ケ存在する。遷移状態は一次元部分極大だからその $\underline{F}$ 行列は1ケの負の固有値と $3N - 7$ ケの正の固有値をもつ, ほかにゼロの固有値を生じる場合がある。一つは変曲点で, もう一つは擬回転 (pseudorotation) である。後者の場合, 並進でも回転でもないある自由度に沿って V が変化せず, この自由度に関する一次および二次微分はゼロとなり, $\underline{F}$ は7つのゼロ固有値をもつ。

振動解析を含む力場計算法はこの他にも幾多の優れた配座解析法としての特徴を備えている。紙数の都合でエネルギー極小化のアルゴリズム, 遷移状態等の多次元極大点の解析的性質および応用例などについて述べる事ができないが, これらについては引用文献を参照して頂きたい。

- (1) (a) "Dynamic Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy", L. M. Jackman, F. A. Cotton, Eds., Academic Press, New York, 1975. (b) 化学と工業, 特集「NMRの新しいうごき」, 33, No. 8 (1980); 特集「パルスとフーリエ変換」, 34, No. 6, (1981).
- (2) (a) H. -D. Martin, B. Mayer, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 22, 283-314 (1983). (b) "Handbook of HeI Photoelectron Spectra of Fundamental Organic Molecules," K. Kimura, S. Katsumata, Y. Achiba, T. Yamazaki, S. Iwata, Japan Sci. Soc. Press, Tokyo, 1981. (c) M. Klessinger, P. Rademacher, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 18, 826-837 (1979). (d) R. Gleiter, *Top. C. rr. Chem.*, 86, 197 (1979).
- (3) K. Ohno, H. Mutoh, Y. Harada, *J. Am. Chem. Soc.*, 105, 4555-4561 (1983).
- (4) J. D. Dunitz, "X-Ray Analysis and the Structure of Organic Molecules", Cornell University Press, Ithaca, New York, 1979, pp. 366-368.
- (5) 最近の発展: R. V. Cernik, G.-A. Craze, O. S. Mills, I. watt, S. N. Whittleton, *J. Chem. Soc., Perkin II*, 685-690 (1984); R. Cernik, G.-A. Craze, O. S. Mills, I. Watt, *Ibid.*, 361-367 (1982); G.-A. Craze, I. Watt, *Ibid.*, 175-184 (1981).
- (6) F. H. Allen, O. Kennard, R. Taylor, *Accts. Chem. Res.*, 16, 146-153 (1983).
- (7) (a) P. Murray-Rust, S. Motherwell, *Acta Cryst.*, B34, 2518-2526, (1978); P. Murray-Rust, R. Bland, *Ibid.*, B34, 2527-2533 (1978). (b) R. Taylor, O. Kennard, *Acta Cryst.*, B39, 517-525 (1983).
- (8) 最近の応用例: P. Chakrabarti, J. D. Dunitz, *Helv. Chim. Acta*, 65, 1555-1562 (1982).
- (9) (a) N. L. Max, D. Malhotra, A. Hopfinger, *Comput. & Chem.*, 5, 19-27 (1981); (b) A. M. Lesk, *J. Mol. Graphics*, 1, 118-121 (1983). (c) 安岡則武, *Molecular Design* (国際科学振興財団) 1, 2-33 (1983).
- (10) 大沢映二, 化学, 39, 510 (1984).
- (11) L. Schafer, *J. Mol. Struct.*, 100, 51-73 (1983).
- (12) (a) U. Burkert, N. L. Allinger, "Molecular Mechanics", ACS Monograph Series No. 177, 1982. (b) E. Ōsawa and H. Musso, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 22, 1-12 (1983); *Top. Stereochem.*, 13, 117-193 (1982).
- (13) ステレオダイナミックスに関する例: (a) 大沢映二, 化学, 39, 66-67 (1984). (b) K. Ogawa, Y. Takeuchi, H. Suzuki, Y. Nomura, *J. Am. Chem. Soc.*, 106, 831-841 (1984). (c) C. Jaime, E. Ōsawa, *Chem. Commun.*, 708-709 (1983); *J. Chem. Soc., Perkin II*, 995 (1984).
- (14) G. Pongor, P. Pulay, G. Fogarasi, J. E. Boggs, *J. Am. Chem. Soc.*, 106, 2765-2769 (1984).
- (15) (a) O. Ermer, *Struct. & Bonding*, 27, 161-211 (1976). (b) O. Ermer, "Aspekte von Kraftfeldrechnungen", Wolfgang Baur Verlag, München, 1981.
- (16) (a) O. Ermer, P. M. Ivanov, E. Ōsawa, *J. Am. Chem. Soc.* 投稿中. (b) C. M. Ivanov, E. Ōsawa, *J. Comput. Chem.* 印刷中.

※この原稿は御好意により本年8月に開催された(日本分光学会)夏期セミナーのテキストより(一部手直したものを)掲載しました。

部 会 行 事

第 7 回 情 報 化 学 討 論 会

主催 日本化学会 共催 日本薬学会
日本農芸化学会・日本分析化学会

日 時 昭和59年11月19日(月), 20日(火)
会 場 大阪科学技術センター 8 F 大ホールおよび 4 F
401号室(大阪市西区靱本町1-8-4) 電話(06)
443-5321
〔交通〕地下鉄四ツ橋筋本町駅下車, 北へ徒歩4分

講演は1件あたり12分, 討論3分

本討論会と一部重なって, 11月20日, 21日にわたり同じ会場で, 第12回構造活性相関シンポジウムが開かれます。

第1日(11月19日)会場: 8 F 大ホール(9時00分から)

1. 化合物総合データベースの構築(千葉大) 藤原鎮男
2. 化合物辞書データベース検索システム開発(筑波大・J I C S T・F H L) 〇藤原 譲・長谷川昇・小室信三・鈴木一明・相馬 融・日夏健一・西山 宏
3. 立体化学的物質登録および辞書作成システムの開発(筑波大・J I C S T・新技術情報・NBC) 〇藤原 譲・梶原康敬・荒木啓介・南波通宏・梶 正憲・前田知子・永井由美子・高橋啓一・唐沢喜雄・小原百合
4. C A S レジストリーファイルの加工(化情協・山形大工) 〇時実象一・門条 司・工藤喜弘
5. スペクトルデータバンクシステム S D B S の現状(化技研) 〇平石次郎・山本 修
6. 熱物性データベースシステムの開発(生産開発科研・J I C S T・日本総合技研) 大杉治郎・内田尚子・小野寺夏生・〇愛宕隆治・長田孝治(10時40分から)
7. 安全性データベースの設計(日本化学物理安全情報セ・三井東圧化学・ダイヤリサーチ・日本総技研) 〇大島輝夫・立花 肇・森崎謙一・(故)三村博亨・長田孝治
8. バイオロジカル・データベース作成・検索システム(国立衛試・三共・日本総技研) 〇中館正弘・林 真・田中 悟・前川昭彦・橋場茂子・和田忠男・長田孝治・竹中裕典
9. 農薬データベースの作成・検索システムの開発に関する研究(農薬工業会・J I C S T) 〇関根文三・長田孝治
10. 農学関連物質のバイオケミカル特性データベースの作成(食総研・環境研) 〇田島 真・石間紀男・松永隆司・大塚雅雄・玉木佳男
11. 化合物環境データベースシステムの構築について(国立公害研・愛知県公害調査セ) 〇溝口次夫・伊藤裕康・新藤純子・安原昭夫・児玉剛則
12. 医薬品データベース(日本医薬情報セ・紀伊国屋書店) 〇長山泰介・松山さやみ・笹本光雄(13時00分から)
特別講演(60分) 化学情報サービスの最近の情勢(阪大理) 千原秀昭(14時10分から)
13. 急性毒性データベース(日本医薬情報セ・筑波大) 〇長山泰介・太田福子・内藤裕史
14. I R, ¹³C N M R, M S スペクトルの複合検索(化技研) 〇田辺和俊・平石次郎・田村慎夫・山本 修・柳沢 勝・和佐田宣英
15. ¹H N M R スペクトルの同定検索, 推定法(化技研) 〇山本 修・早水紀久子・柳沢 勝
16. 官能基により分類したマススペクトルデータの特性について(大阪府公害監視セ・国立公害研) 〇葉山幸雄・今村清・奥村為男・溝口次夫

17. C n H m, C n H m O 化合物の質量スペクトルデータベース m/z ピークの統計的処理(4)(電総研) 〇小山保二・前田浩五郎(15時35分から)
 18. スペクトル画像情報の高速検索—光ディスクとマイクロコンピュータの結合(職訓大・電総研) 〇加治屋力・大川時夫・前田浩五郎
 19. 大次元格子の特性量の計算(お茶大理) 〇細矢治夫・鷹野景子・内山厚子・木下美子
 20. 16ビットマイクロセッサ応用基本関数(1)メモリー管理関数(東工大資源研) 内野正弘
 21. 大型機用 M T 版 E P A / N I H M S D B のマイクロコンピュータシステムへの移譲(北九工試・電総研) 〇田上真人・矢尾板昭・前田浩五郎
 22. マイクロコンピュータによる化合物名読み取り(2)炭化水素における環状化合物の取り扱い(東京高専・電総研) 〇佐藤真一・六車裕孝・前田浩五郎
- 第2日(11月20日)会場: 4 F 401号室(9時00分から)
23. 実験用 B A S I C コンパイラ(大阪電通大) 藤田岩男
 24. 数値計算ライブラリ N U M P A C のベクトル計算機への適合性(名大大計セ・名大工) 〇桑野甯世・二宮市三
 25. いくつかの多環化合物の慣用名表現をより構造化する提案(群大教) 飯塚 健
 26. 化学研究支援ツールの統合化の試み(東臨床総研・フジミック) 〇鈴木 勇・栗原章浩・神沼二真
 27. A D A P T の移植及びその改良(富士通) 〇高久 隆・河村伴子・湯田浩太郎・松浦幸男・小倉 誠
 28. 有機化合物の自動構造推定システム(CHEMICS)の開発—立体を含んだ部分構造式のグラフィック入力(豊橋技科大) 佐々木慎一・阿部英次・船津公人・〇吉富一之・堀内 真(10時40分から)
 29. コンピュータグラフィックスによる会話型分子構造表示システム M O L E C の開発(豊橋技科大) 〇高橋由雅・堀内 真・鈴木一仁・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一
 30. 分子設計支援システム M O D E S T の構築(武田薬品) 〇高木正幸・山本善雄・神谷和秀・水田栄治・岡 良和
 31. 分子設計のためのコンピュータシステム—A C A C S (住友化学・日本電気) 〇吉田元二・横田彰男
 32. 移植性を考慮した分子構造模型表示プログラムの開発(姫路工大) 〇中野英彦・三軒 斉
 33. 高分子設計システム D T / C A P —高分子用グラフィックエディタ(国際科学振興・築波大) 〇中山 晃・藤原 譲
 34. 3次元ラスターグラフィックによるタンパク質立体構造の対話処理(システム・阪大蛋白研) 〇伊賀祐一・楠木正巳・安岡則武(13時00分から)
 35. 示性式入力方式による分子構造処理システム(1)結合マトリックス・原子座標・分子内座標リスト(京大薬) 〇三輪嘉尚・町田勝之輔
 36. 分子構造図表示パッケージ O R T E P の改良(東臨床総研・川崎製鉄・日本電気・日女大家政) 鈴木 勇・〇井上佐智子・藤巻 緑・浜中祐子・高橋征三・神沼二真
 37. 平面分子図から3次元座標の導出(学習院大計セ・学習院大理・群大教) 〇田中伸英・今井 賢・菅 忠義・飯塚 健
 38. 分子設計のための人工知能システムの設計(1)(東京農工大工) 目黒正憲・〇安川民男
 39. 反応設計支援システム G R A C E の現状(東海大開発技研) 米田幸夫
 40. 反応機構を基幹とする合成経路の設計・評価プログラムの構築(東薬大) 〇内丸忠文・佐藤 浩・原 昭二
 41. Prolog を利用した Carter 型ソリトンバルブのシミュレ

ーション (電電公社茨城通研) ○森 裕平・海老沢文博・田部井久男

42. クラスター分析を用いた港湾環境における重金属元素分布の検討 (化技研・カナエ塗料・東京光電) ○西川利男・小笠原一郎・高橋一暢・大八木義彦 (15時10分から)
43. β -turn の内部回転角変化の予測とそのモレキュラグラフィックス (大正製薬・阪大薬・阪大蛋白研) ○北村一泰・楠木正巳・伊賀祐一・安岡則武・富田研一
44. インターレーション計算におけるサイトプレファレンス (お茶大理・東臨床総研・フジミック・群大教) ○伊藤由美子・鈴木 勇・栗原章浩・中田吉郎・細矢治夫・神沼二真
45. 分子グラフィックスを用いた Tumor Promoter の研究 (フジミック・東臨床総研) ○栗原章浩・鈴木 勇・神沼二真
46. 非電解質希薄水溶液における動的水和構造 (分子研・京大工) 田中秀樹・東原秀和・○中西浩一郎
47. 学術雑誌の著者附与キーワードの検討 Clinical Chemistry (電通大・北里大薬) ○山崎 昶・村瀬伊月・山崎直美・平賀弥生・木下俊夫
48. Chemical Abstract における本邦発行の書籍類の採録状況 (第二報) (電通大) 山崎 昶

懇親会 11月20日 18時から 8F 中ホールにて第12回構造活性相関シンポジウムと合同で行ないます。会費 4000 円
参加登録費 (要旨集代を含む) 4000 円, ただし構造活性相関シンポジウムにも併せて登録される方は, 6000 円で両方に参加登録できます。

参加予約申込方法 ハガキ大の用紙の上半分に, 情報化学, 構造活性相関, 懇親会のうち参加を希望されるものの名前を, 下半分に氏名, 連絡先を記入し, 参加費を同封してお申込み下さい。送金は現金書留を御利用下さい。また要旨集を郵送希望される方は, 一冊につき送料 300 円と, ハガキ大用紙に宛名を書いたものを添えてお申込み下さい。なお当日の受付事務の混乱をさけるため, なるべく予約申込みをお願いします。

予約参加登録締切 11月2日 (金)

申込連絡先 〒568 吹田市山田丘1-6 大阪大学薬学部
富田研一 電話 (06) 877-5111 内線 6211, 6213

第12回構造活性相関シンポジウム

日 時 11月20日 (火), 21日 (水)
会 場 大阪科学技術センター (大阪市西区靱本町1丁目8番4号) [交通] 地下鉄四つ橋線の本町駅下車, 北へ徒歩5分。

研究発表 (講演15分, 討論5分)

第1日 (11月20日) — (10時から) —

- 1-1. ヨウ素系抗カビ物質の構造活性相関解析 (明治製薬・北里大薬) ○小山正夫・大谷典子・甲斐文夫・井上重治・森口郁生
- 1-2. 3置換 α -シアノベンジルピレスロイドの構造活性相関 (II) ノックダウン活性について (住友化学) ○波多腰信・高山千代蔵・松尾憲忠・中山勇・桐野修
- 1-3. α - β 遮断薬イソカルボステリル誘導体の構造活性相関 (日清製粉中研) 小山裕康・田原吉幸・末田憲義・鈴木良邦・○高橋敏博
- 1-4. カルバマゼート類の抗けいれん作用における定量的構造活性相関 (II) (神女薬大・京大農) ○山上佐知子・高尾橋雄・田中光世・堀坂和敬・藤田稔夫
— (13時から) —
- 1-5. Enkephalin 分解酵素に対する有機ゲルマニウムの構造と活性 (浅井ゲルマニウム・東京都臨床医学総研)

○柿本紀博・羽里志彦・小室朝子・片山敬

- 1-6. 置換 benzoxyl phenylurea 類の定量的構造活性相関 (京大農) ○中川好秋・外松朋子・岩村徹・藤田稔夫
- 1-7. 種々の除草剤の Hill 反応阻害活性の定量的構造活性相関 (京大農) 岩村徹○光武賢一郎・藤田稔夫
- 1-8. DD T 誘導体および関連化合物の定量的構造活性相関 (京大農) ○西村勤一郎・藤田稔夫
- 1-9. ヒアルロニダーゼ阻害活性を有する薬物の構造活性相関 (徳大薬・徳島文理大薬) ○寺田弘・平良全栄・松本仁・佐藤利夫
- 1-10. Dimethylsulfonium 化合物の抗腫瘍効果と定量的構造活性相関 (大鵬薬品研・岐大薬) ○多田幸雄・山脇一郎・上田修一・松本宏・山田雄二・安本三治・堀幹夫・江田昭英
- 1-11. ジチオラン化合物の疎水性と肝内挙動 (日本農薬) ○村上信義・内田又左衛門・杉本達芳
- 1-12. 匂い物質の化学構造と受容器との相互作用, ワモンゴキブリの性フェロモン活性物質を用いての研究 (三菱化成生命研) ○真部俊一・西野親生
— (16時から) —

特別講演 I, アセチルコリン受容体の構造と機能 (京大医) 沼正作

第2日 (11月21日) — (9時から) —

- 2-1. ATP の働きの構造と高エネルギー結合 (徳大薬・徳大教養) ○篠原康雄・寺田弘・吉川研一
- 2-2. パターン認識による N 置換ベンズアニリド類の幅広いもろ菌予防効果に関する構造活性相関 (ケイアイ研・豊橋技科大) ○吉田文隆・伊東茂寿・流石正・田丸雅敏・尾崎正美・高橋由雅・佐々木慎一
- 2-3. 離散データの数量化および置換基エントロピー定数を用いた構造活性相関の研究 (阪大薬) ○丹下浩一・高木達也・佐々木喜男
- 2-4. 筆級活性データの判別について (住友化学) 吉田元二
- 2-5. 定量的構造活性相関へのロジスティック回帰モデルの応用 (塩野義解析センター・塩野義研) ○田崎武信・後藤昌司・江角清志・山川真透
— (10時50分から) —

特別講演 II, 分子の振動と化学反応 (京大薬) 町田勝之輔

— (12時40分から) —

- 2-6. 飽和炭化水素の諸物性のトポロジー依存性の解析 (お茶大理・北大理) ○細矢治夫・鳴海英之
- 2-7. 分子構造から得られるパラメータと log P (呉羽化学) ○笠井健二・朝永惇
- 2-8. 溶質の溶解状態と分配係数 (京薬大・京大薬) ○秦さかえ・根矢三郎・舟崎紀昭・町田勝之輔
- 2-9. 脂肪族アミンおよびアンモニウムイオンの1-オクタノール/水係における分配平衡定数の構造パラメータによる解析 (京大農化) 高山千代蔵○赤松美紀・藤田稔夫
- 2-10. ジヒドロ葉酸還元酵素とリガンドとの結合におけるグラフィック表現 (北里大薬・東大工) ○小松克一郎・中村春木・中川節子・梅山秀明
- 2-11. 分子表面上の静電ポテンシャルの QSAR への応用 神経弛緩剤の受容体に対する結合能との相関 (北里大薬) ○広野修一・森口郁生
- 2-12. 薬物受容体間の相互作用エネルギー計算の新方法 (東大薬) ○板井昭子・富岡伸夫
- 2-13. 分子間相互作用シミュレーター SIMP の開発と応用 (2) (阪大薬) ○田中明人・高木達也・藤原英明・佐々木喜男
- 2-14. 生理活性ペプチドの Conformational Analysis (呉

羽化学・Memphis State University) ○中馬寛・F. A. Momany

2-15. 理論化学計算支援システム NAMES と構造活性相関 (呉羽化学) ○朝永惇・中馬寛・熊沢智

2-16. アンフェタミンなどの医薬品のモレキュラーメカニクス (MM) 法によるコンホメーション解析—MMのコンピュータ支援ドラックデザイン (CADD) への応用の可能性 (ユーザイ) 藤田忠男

参加登録、懇親会については前回の会告を御覧下さい。申込メ切11月2日(金)

申込連絡先 565 吹田市山田丘1-6 大阪大学薬学部製薬化学科 佐々木喜男(電話(06)877-5111, 内線6133)

情報化学雑学講座

「情報」とはなんだろう？

お茶大理 細矢 治夫

情報化学部会の世話人に名を連ねながら何もしないので、とうとう佐々木部会長から「罪滅ばしに部会報に連載ものを書け」と命ぜられてしまった。それも部会員の勉強になることを書けというきつい御注文。そこで苦しまぎれに上のようなタイトルをつけてみた次第である。間違いや「新情報があれば、どしどし私か事務局にお知らせ願いたい。

I 「情報」とは何か

情報化学部会員に向かって今更こんな質問もないだろう、とお叱りを受けるかも知れないが、いろいろな人や辞書があだこうだといっているのを知ると一興であろうし、時の流れも感じられて勉強になる。

「なさけのむくい」が何で information の訳語になるのだろうと疑問に思う人は多いだろう。中国語の辞書でも古いものは「情報」は載っていないことがある。「情報員」や「情報局」という使い方をしているから、もしかしたら日本(軍)からの逆輸入かも知れない。一方「情報処理」や「情報理論」のようなときは「情報」という言葉をあてることもあろうである。

驚くべきことに、大槻文彦の「大言海」(富山房、1933)にも、落合、芳賀の「言泉」(大倉書店、1921)にも「情報」という言葉は見当たらない。ただし上田万年の「大日本国語辞典」(富山房、1961)には、「じゃうほう=事情の報告」と、金沢庄三郎の「広辞林」(三省堂、1925)にも「志ようほう=事情の志らせ」と出ている。

このように昭和のはじめまで市民権をもたなかった「情報」という言葉を、「佐藤君は第三の情報を得た。」というような形で短篇「藤袴絵」の中で使った森鷗外(1862-1922)あたりがこの訳語を選んだ張本人ではないと言われる所以ではなかろうか。残念ながらこの発見は私ではない。小学館の日本国語大辞典(1949)にこの用例が引いてあったし、理由は書いてないが、北川敏男のNHK大学講座「情報と認識」(1979)のテキストにも鷗外云々が出ている。なおこのテキストに図1のようなダイアグラムが描いてあった。わかったようでわからないが話の種にはなるだろう。

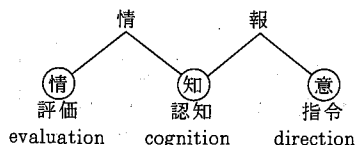


図 1

こういう事情を知った上でなら、新村出の「広辞苑」(岩波書店、1955)に、「あることがらについてのしらせ」と突き離されてもびっくりはしないが、どういふわけか「情報局」と「情報理論」を引いている。後者はともかく、前者は何と、第2次世界大戦の少し前にできた内閣情報局で、言論やマスコミの統制をしたキナ臭い役所である。この時代の「情報活動」は、スパイ活動やそれを取締まる活動であったわけで、大きな声で「情報、情報」と叫べる昨今とは隔世の感がある。なお現在は外務省に情報文化局、文部省の学術国際局に情報図書館課などがある。

さすがに「広辞苑」の第3版(1983)には、「情報」の第2義として「判断を下したり行動を起こしたりするために必要な知識」がつけ加わり、「情報科学」、「情報公開制度」、「情報産業」などの語も追加され、時代の移り変りを示している。われわれいわゆる「情報屋」はこの第2義の方で青くなったり赤くなったりしているのであるが、この説明は金田一京助の「新明解国語辞典」(三省堂、1981)の「状況に応じた適切な判断を下したりするために必要とされる知識。インフォメーション」のにおいがする。これよりは、守随憲治らの「国語辞典」(旺文社、1973)の「④物事の内容・事情の報告。事件のようすの知らせ。②ある意味をもった文字・記号・図形などで、それを受けた人間または機械(電子計算機など)の動作に影響を与えるもの」の方が優れている。

このように時代とともに「情報」の意味の変わってきたことがよくわかるが、最後に高橋秀俊のわかりやすい解説と、飯塚健の描いた「情報のピラミッド」を紹介しよう。

「情報とは「知る」ということの実体化である。われわれがあるものについて「知る」ということは、何かしら得たこと、何かを頭の中に取り込んだことである。その「何かしら」をわれわれは「情報」と呼ぶ。(東大公開講座、「情報とは何か」東大出版会、19)

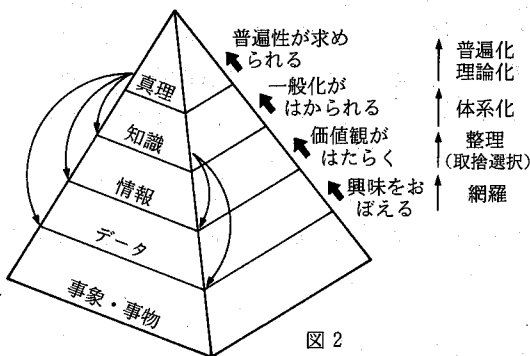


図 2

情報のピラミッド(「化学と生物」20,36 1982)。