CICSJ Bulletin Vol.18, No.1, February 2000

このページは「日本化学会・情報化学部会」の責任において運営されています。

目次

・追悼：佐々木　慎一先生
佐々木さんを悼む・・・



平成十一年十二月十五日逝去
享年七十四歳

故　佐々木愼一　元部会長・名誉部会員

故　佐々木慎一　略歴

大正１４年１１月２５日生
豊橋市羽根井西町 6-12-1-508
（出生地　東京）

専攻分野　化学情報学（理学博士）

最終学歴　昭和２４年３月　東北大学理学部化学教室卒業

主要経歴

昭和２６年５月	東北大学理学部	助手
〃３８年４月	〃	助教授
〃４５年６月	宮城教育大学教育学部附属理科教育研究施設教授	
〃５４年４月	豊橋技術科学大学教授	
〃５９年４月	〃	副学長
平成　２年４月	〃	学長
〃　８年３月	〃	退任
〃　８年６月	株式会社サイエンス・クリエイト取締役副会長就任	

主要研究業績等

天然物化学、化学反応機構、立体化学の領域で優れた業績を挙げたのち、有機質量分析の研究を精力的におこない、その第一人者として有機質量分析法の紹介と普及に大きく貢献した。この功績により昭和５３年日本質量分析学会から有機マススペクトロメトリー部会賞を受賞した。

さらに、化学構造の決定にコンピュータを駆使する斬新な方法論を確立し、CHEMICS と名付けられたシステムを完成させ、「計算機化学」の開拓者として外国からも高い評価を得た。

これらの業績により、昭和４９年日本分析化学会賞、昭和５５年日本科学技術情報センターから丹羽賞・学術賞を受賞し、また平成元年、イタリア ICCCRE （コンピュータ化学国際会議）において表彰された。

学会活動

日本工学アカデミー会員
日本化学会、日本分析化学会、米国化学会所属

情報化学部会との関わり

部会設立時より昭和５９年まで部会長
その後も顧問、副部会長、監査として永年部会活動に貢献される。
平成８年　名誉部会員推戴（第１９回情報化学討論会（阪大）にて）

佐々木さんを悼む

情報化学部会 元部会長　米田　幸夫

巨星　ついに墜つ.

佐々木　慎一さんが亡くなった.　世界の，そして日本の情報化学の分野に大きな大きな足跡を遺して，佐々木さんは昨年の暮れにこの世を去った.　７４歳を迎えてまもなく，最愛の奥さまとご家族，それに我われを遺して静かに消え去っていかれた.

佐々木さんは，その初期（東北大学理学部～宮城教育大学時代）は，天然有機化学，化学反応機構，立体化学の領域で優れた業績をあげた後，有機質量分析の研究を精力的に行い，その第一人者として有機質量分析法の紹介と普及に大きく貢献された.

続く中期（宮城教育大学～豊橋技術科学大学時代)には，化学構造決定にコンピュータを駆使する斬新な方法論を確立し，自らがCHEMICSと名付けた分析支援システムを完成させ，パターン・ダイナミックスとあわせて，計算機化学あるいは情報化学の，本来の意味での，開拓者として国内外で高い評価を得たのであった.

後期は，豊橋に移って早くも５年目で副学長に就任し，引き続き６年間の学長の重責を担われた.　学長を退任後は，地元の新科学技術振興のための第３セクター，サイエンス・クリエイトの副会長に就任されたと聞いている.　この間も，多くの俊敏な共同研究者とともに，ライフワークの一つであった有機赤外データベースの作成，材料設計のシステムとしてのCHEMICSの拡充，新しい合成設計と反応設計のシステム，AIPHOS，SOPHIAの構築，その他の輝かしい業績を挙げられた.

今私は１７年前の，当時のNewsletter No.1の巻頭，佐々木部会長の情報部会発足の挨拶を手に，創世記のころをしのんでいる.　1972年，情報化学討論会が日本化学会年会のたびに毎年開催されるようになった.　また分析化学国際会議のあとに，佐々木さんの活躍によって開催された，＜化学と情報＞の仙台ポスト・シンポジウムが，初めての国際集会であった.　これらの催しの成功は，その名が表に出ないときでも佐々木さんの統率力，主客ともの動員力によるところ大であった.　やがて討論会と構造活性相関シンポジウムとの共催や，佐々木さん主催の，豊橋でのICCCRE(Int'l Conf. on Comput. in Chem. Res. and Edu.)開催などへとつながる.　またその国際的な豊かな人脈が，世界的な活動の舞台，数多くの国際会議と，日本の情報化学との密接な関係をもたらしたといえよう.

佐々木さんはこの間に，日本電子（株）の風戸社長の知遇を得て，宮城教育大学の付属施設に，当時の大学・企業の化学者には夢のような高級な装置を備えて，その研究の手勢が討論会をCHEMICSで席巻したものである.　やがて新設の豊橋技術科学大学では，我が国最初の計算機化学専門の講座を，これもすばらしい規模で建設された.　これらの大学で，研究生，学部・大学院学生の，幾多の有能な人材を企業に送り出された.

佐々木さんは井戸を掘る人であった.　水脈を発見した人，掘る技術を開発した人，さらに渇く人をその井戸辺に導いた人でもあった.　製薬企業をはじめ，日本の化学関連企業は情報化学を研究・開発に活用するため，少なからぬ人材と資金を投下してきた.　いま，まさに情報化学の収穫期が始まるといわれている.

中国のことわざは，水を飲む人は掘った人を忘れてはならない，というそうだ.

GEN$0-3　000201

佐々木愼一先生を偲んで

(社)化学情報協会　千原秀昭
hchihara@jaici.or.jp

佐々木先生とのそもそもの出会いは今となってははっきりしないが，40年近いのではないだろうか．なんとなく出会い，いつの間にかお互いに旧知のように感じていた．印象に残っているできごともいろいろあるが，私はいつも，第三者的な立場だった．つまり共同研究をしたわけでもなく，同僚だったこともないが，折にふれて互いに夢を聞いてもらい，いっしょにグチるといった関係だったように思う．

それでも岩波書店の講座「現代化学」の一冊として「化学情報」を共同編集したのは数少ない共同作業だった．CHEMICSが形を見せ始めた頃，つまりCとHだけで，Nなどはまだ対象になっていなかったころ，私が先生に無断で，雑誌「現代化学」に匿名で見開き2ページの紹介記事を書いたことがあった．コンピュータの強みと化学者の夢を結ぶすてきなテーマだと強く印象づけられたからだったが，先生はどうやって探り出されたのか，「とてもいいタイミングで，研究を進めるのに非常に助けになった」とお礼を言われたことがあった．それ以来，CHEMICSとその延長線上のいろいろなシステム構築について，外野応援団の団長みたいなことになって，CHEMICS研究会に講師として招いて頂いたり，私が化情協の講演会にお招きして話をして頂いたりした．その行き着く先が，共立出版から船津さんと共著でお出しになったCHEMICSの本に，掲載趣旨不明の“扉文”(?)を書けということになった．

それでも，なかなか意見が折り合わなかったことが一つだけあった．それは情報化学部会をつくろうという相談のときで，大勢としては，部会の名称は「情報化学部会」だった．しかし私は，まるで無機化学，有機化学と横一列で，情報を研究対象にする化学みたいだから，「化学情報部会」として化学全般の情報を扱うことを打ち出した方がいいと主張した．そのときはさすがに先生も大変悩まれたようで，結果はみなさんのご承知の通りになったが，先生は律儀にその結果をもって弁明にお見えになった．

データベースの構築から，その利用法，ソフトウエアシステムの開発まで，幅広く情報のほとんどすべての側面に並外れて造詣が深く，ご自身でも汗をかいて働いておられたという点では，世界でも数少ない能力の持ち主であった．欧州，米国，ロシアに広く人脈をもっておられ，日本の「情報化学」を代表する立場が自然に生まれていた．日本ではどんなに優れた，役に立つデータベースを作っても，業績として評価されない風土を嘆いておられた．その一つのbreakthroughを意識して，阪大理学部で情報分野で最初の論文博士の審査をすることになったとき，快く外部審査員を引き受けて下さった．それが契機になって，豊橋技科大から阪大へ学位申請を送って下さったこともあった．

1991年に化学情報協会（JAICI）の理事への就任をお願いしたときは，名誉なことだからと二つ返事で引き受けて下さった．それまで，そういうふうに考えて下さった方がなかったので，お願いした私の方がびっくりした記憶がある．同時に協会が果たすべき社会的な役割について改めて考える契機となった．実はJAICIの設立当初から子飼いの優秀なお弟子さんを3名送り込んで下さるなどのご援助を頂いていた．1997年にJAICI会長に就任いただいてからは，情報専門家として実質的にいろいろとアドバイスを頂いた．情報産業が世界的に‘戦国時代’に突入している現在，先生のバランス感覚はいっそう威力を発揮するはずだったのに，誠に残念である．

先生のバランス感覚は抜群で，それが豊橋技科大の学長に選出された大きな要因であったと思う．また豊橋に移られたのち，地域の振興に援助を惜しまれなかったことと相まって，驚くほど広範な人脈が自然に形成されてきたのであろうと推察される．どのようなお役目にあっても，名目だけにとどまらずに，実質的に関与なさる姿勢を持ち続けておられた．学長として「いろいろびっくりするような制度とか仕事があるんだよ」とグチりながらも一所懸命につとめておられた．もう少しで豊橋市長に選ばれたかもしれなかったのも，お人柄を偲ばせるのに充分である．ほんとに，豊橋市長をなさっていたら…と惜しい気がするのは私だけではないだろう．

「初代部会長　佐々木愼一先生を偲んで」

部会長　吉田元二

昨年の十月には、岩国で開催されたCACフォーラムの合宿研究会と大阪での弊社の後輩（豊橋技術科学大学の卒業生）の結婚式と二度も佐々木先生とお目に掛かれるはずでしたのに急に体調を崩されたとのことで果たすことができませんでした。そして、畏友高山千代蔵君と先生のお見舞いに伺おうと電話で奥様に先生のご様態をお尋ね申し上げた日の深夜、お亡くなりになったとのことで驚愕の念を禁じ得ませんでした。

私が佐々木先生と親しくさせて戴きましたのは、1981年に高山千代蔵君が豊橋技科大の助教授として赴任した頃からだと思いますので、もう二十年程前になります。この間先生には色々とご指導賜りますとともに、数多くの楽しい思い出を頂戴いたしました。

先生は、コンピュータを活用した有機化合物の構造解析や合成経路探索など、ユニークな視点と方法論に基づく「情報化学」という分野を切り開かれた先達であることは言うまでございませんが、学問上のご業績については、他の方がお書きになると存じますので、ここでは、私的な思い出を中心に先生を偲びたいと存じます。

先生は、告別式の時にご子息がおっしゃったように、大の愛妻家でいらっしゃいました。「うちの婆さんが…」とあの象さんのような目を細めて奥様のことをお話になるお姿が思い出されます。1984年のハワイでの環太平洋化学会、1989年のイタリアのリバ・デル・ガルダでのICCCREと二回の海外での国際会議にも奥様をご同伴の先生とご一緒させて戴きましたが、お二人で早朝テニスを楽しまれるお姿など仲睦まじくされていたご様子が目に浮かんでまいります。

先生と特に親しくさせて戴きましたのは、1990年に先生の開発された構造解析システムCHEMICSの発展と普及のために「CHEMICS研究会」を設立されるに当たり、現在旭硝子財団におられる石田嘉明氏らとともに幹事役を仰せつかった頃からでございました。

「CHEMICS研究会」はその後順調に発展を遂げ、単にCHEMICSの発展･普及に留まらず、合成経路設計システムやケモメトリックスの研究も包含するようになってまいりました。そして、先生が豊橋技術科学大学学長を辞された1996年に名称を「CACフォーラム」と改め再出発することとなりました。その時、先生より「この際、後進に道を譲るべきと考えており、ひとつ君に会の代表を引き受けて戴きたい」とのご相談がありました。

とても先生の後を引き継ぐのは重荷であり、器でもないと固辞いたしましたが、「潔く辞したい」とのご意志は固く、そこに先生の美学を垣間見たような気がいたしました。そこで、先生に引き続きご後見戴くこと、お茶の水女子大学の藤枝周子先生、豊橋技科大の船津先生に副代表になって戴くという条件の下でお引き受けいたしました。その後、CACフォーラムの活動自体は活発に行われておりますが、佐々木先生はご多忙を極めておられましたので、ご参加戴けないことが多くなり、心細く思っておりました。それが、冒頭に述べましたように、岩国での会合に久しぶりにお顔を出して戴けると楽しみにしておりましたのに…。

佐々木先生の蒔かれた「情報化学」の種が二十一世紀に花咲く様に、われわれ後進は今、何をなすべきかを改めて考えなくてはならないと身の引き締まる思いでございます。

あの威風堂々としたご容貌と優しい眼差しの先生のお姿を思い浮かべながら、佐々木先生のご冥福をお祈り申し上げます。

厳しく、優しかった佐々木慎一先生を偲ぶ

住友化学工業㈱　高山 千代蔵

「夕焼け小焼けの赤とんぼ」、先生と最後のお別れをした昨年師走の26日、先生が生前追悼歌として望まれていたこの歌を、私は“小焼け”あたりから声が詰まってしまって歌うことが出来ませんでした。後は、涙を堪えながら、他の方々が心を込めて合唱されているのを聞いていました。そして、優しくご指導頂き、また色々とご心配をお掛けした先生との懐かしい想い出が、子供の頃稲刈りをしているときに見た夕陽をバックに飛び交う赤とんぼという情景と、複雑に交錯しながら走馬灯のように浮かんできました。

先生と初めて親しくお話をさせて頂いたのは、今から20年ほど前の昭和56年に先生が阿部さん、今は亡き宮下さんと一緒に住友化学でパターン認識などについての講演をされたときでした。この住友化学でのご講演は、先生の東北大学の後輩で、私にとっては就職の時以来の恩人である、当時農薬事業部の技術部長だった（故）西澤吉彦様が依頼されたものでした。昭和49年の入社以来、QSAR手法を利用しながら農薬の創製研究を行っていた私は、活性の有無や、段階的な数値で表された活性強度と化学構造との間の関係を解析するための手法として、パターン認識法に興味を持っており、講演の後色々と質問をし、ディスカッションをさせて頂きました。

この年、先生と西澤様は、私に、豊橋技術科学大学の先生の研究室「化学情報学研究室」で勉強するという大きなチャンスを与えて下さいました。8月頃に大学への赴任が決まり、10月から翌々年3月末までの1年半、豊橋で家族と共に楽しく、充実した日々を送ることが出来ました。

赴任が決まって先生から大学での教育・研究について色々とご指導頂きました。その中で、先生から「12月に始まる3学期から大学院の学生への特論（化学情報学特論）を講義してもらいます。講義時間は、1週間に一度2コマ、2時間半です。講義内容については任せます」と言い渡されました。12月までの間、講義の準備をしたわけですが、その内容としては、生理活性化合物の話や構造活性相関を選びました。最初の講義の日、先生は忙しい中窓際の一番前の机に席を取られ、私の拙い講義を最後まで聴き、質問もして下さいました。終始緊張しながら講義をしたのを今でも鮮やかに思い出します。

この大学での1年半（更に住友化学へ戻ってからも）、赴任した10月に東大工学部で開催された第4回情報化学討論会、山上会館での懇親会など、折りある毎に先生から紹介して頂き、米田先生を始め、化学情報学・情報化学分野の多くの先生、研究者の方たちとお近付きになることが出来ました。

情報化学討論会は、周知の通り、昭和57年11月の豊橋技術科学大学での第5回以降、昨年の米沢市での第22回まで毎年秋に構造活性相関シンポジウムと併催されてきています。この併催は両会の相乗的発展を考えられた先生が発案され、構造活性相関懇話会の代表であった藤田先生と相談されて実現したものです。佐々木研究室総出で第5回討論会・第9回シンポジウム・懇親会のお世話をし、成功裏に終わったときは、世話役の一人としてホッとし、また充実した気分を味わうことが出来ました。

豊橋時代に、先生のお力添えで初めて海外での学会に出席することが出来ました。それ

は、Heller、Potenzone 両博士の尽力により昭和 57 年 7 月にワシントン・ジョージタウン大学で開かれた第 6 回 ICCCRE 会議です（第 5 回会議の VICCCRE は昭和 55 年に豊橋技科大で開催されています）。高橋さん、当時計算機センターにおられた藤原さん（現、大日本製薬）達に留守をお願いし、先生ご夫妻、阿部さん、宮下さんと一緒に参加しました。ニューヨーク経由でワシントンの空港に降り立ち、Potenzone 博士の迎えの車で大学の寄宿舎へ行きました。学会の間の数日間、先生ご夫妻は、Varmuza 教授ご家族と一緒の宿舎で滞在され、私は宮下さん達と同じ所でした。常々鶏より早起きだと言っておられた先生が、早朝の一時奥様と一緒に運動をし、一汗流してから講演会場に臨まれていたのを、往きの飛行機で先生が持ってこられたワインの瓶がスーツケースの中で割れてしまうというハプニングなどと共に、思い出します。

大学の休みの日にも研究室の楽しい行事がいくつもありました。先生ご夫妻はもちろん、学生さんや家族みんなで行った奥三河のキャンプ場での芋煮の会は、秋の木洩れ日の許、和気藹々とした楽しい 1 日でした。また、暮れには、高橋さん持ち込みの臼、杵を使っての餅つき会が、大学の分析計測センターの前でありました。小さかった 2 人の子供にとっても楽しい思い出になりました。

夕陽が進んでいく西の彼方では、いつも何匹もの赤とんぼが飛んでいることでしょう。あるものは先生の肩の上で羽根を休めているかも知れません。そこで先生はきっと、後に残された奥様はじめご家族の皆様、それに、先生のご指導を賜った沢山の弟子のことを暖かい眼差しで見守って下さっていることと思います。ご冥福をお祈りいたします。

「特集　続・材料をさぐる（触媒分野）」を企画するにあたって

東北大学大学院工学研究科　久保百司
momoji@aki.che.tohoku.ac.jp

２１世紀を目の前にして今回の特集で取り上げる「触媒」の重要性は益々高まってきています。石油精製、石油化学などの大規模な工業プロセスに大きな地位を築いてきた触媒も、１９８０年代からは環境浄化触媒としての役割が急増し、近年ではダイオキシン分解、ディーゼル排ガス浄化、VOC（揮発性有機化合物）分解などの環境問題の解決、クリーンな水素製造や燃料電池など省資源、省エネルギープロセスを実現する手段として大きく期待されています。特に最近ではメソポーラス材料など新しい構造を持った触媒材料が開発されるとともに、コンビナトリアルケミストリーの導入などによって実験的にも大きな進展が見られています。

しかし、触媒開発は従来、絨毯爆撃と言われる研究開発が主体でした。例えば、固体触媒の多くは担体、活性金属、助触媒と言われる多成分添加物から構成され、触媒を構成する元素が５～１０成分以上になることも普通であり、設計と言われる技術には全く無縁と考えられていました。しかし、近年のコンピュータの進歩と計算化学の進歩により、貴金属を含む触媒系についても精度の高い理論計算が可能になってきたことを背景に、触媒に対する理論計算がここ数年で急速に発展しつつあります。最初は実験的には得られない原子・電子レベルの情報、反応メカニズムの解明が主であった計算化学も、触媒設計手段としての予測的な役割を担うようになってきています。また最近話題となっているダイオキシン問題では、ダイオキシンが口からのみならず皮膚からも体内に侵入するために実験的な触媒開発自体が危険性を持つことから、計算化学は実験が困難な系に対する仮想的研究開発手段（バーチャルラボラトリー）としての役割も期待されています。

実際、計算化学の専門家のみならず、実験家が触媒の理論計算を始める環境も急速に整備されてきており、密度汎関数法、第一原理分子動力学法、分子動力学法など様々なプログラムが市販され、誰でも簡単に触媒の理論計算が始められる時代になってきました。その一方で固体物理や半導体を専門とする計算化学者が、触媒の持つ大きな工業的・産業的インパクトに触発され、触媒の理論計算を始められる例も数多くなってきています。このような傾向は、触媒の計算化学を専門にする我々にとって非常に喜ばしい傾向であります。しかし実際には、どの分野でも同じですがマニュアルや論文には書かれていない各々の分野のテクニックが存在するはずです。触媒の理論計算においては

（１）　自分の計算目的にあった理論計算手法やプログラムの選択

（２）　各々の理論化学計算手法の適用限界の適切な把握

（3）　理論計算から得られた大量の数値を如何に料理して、自分の知りたい情報を引き出すか

（4）　触媒全体をコンピュータで計算することは不可能なので、実際の系を適切に表現するモデルの構築方法

（5）　遷移状態を正確に計算するためのテクニック

のような経験で培われた技術・知識がその例です。このテクニックさえもっと早く知っておけば簡単に計算あるいは実験ができたのにという感想は、全ての研究者が何度も感じたことがあるのではないでしょうか。

そこで本特集では、上記のようなテクニック・知識について、触媒の理論計算を最先端で実践されておられる６人の方々に本号と次号の２回に渡って紹介して頂こうと企画しました。本特集を読まれて、触媒以外の計算化学を専門にしておられる方々、または計算化学をやったことはないという方々の一人でも多くが、触媒の理論計算を始めてみようと思って頂ければ本特集を企画したものの一人として非常に大きな喜びであります。

私自身としては、触媒分野の計算化学の今後のあり方として、上記のようなテクニックを組み込んだ「触媒系に特化した理論計算手法、理論計算プログラム」の開発が必須だと考えています。これは計算プログラム本体のみならず、モデリングプログラム、解析プログラムなどにも共通な課題です。さらには、触媒分野の中でもゼオライト、担持金属触媒、メタロセン触媒など各々の触媒系に対応した理論計算手法、理論計算プログラムの開発が必須になってくるはずです。触媒分野の計算化学を専門とする研究者の一人として、触媒計算化学のすそ野が広がるとともに、新規な触媒系専用理論計算プログラムの開発によって、計算化学に先導された「触媒」が続々と開発される時代が来ることを願ってやみません。

最後になりましたが、ご多忙な中、今回の特集を執筆して頂きました方々にこの場をお借りしまして厚くお礼申し上げます。本特集は最初、本号のみの企画でしたが、執筆者の方々が非常に熱心にまた詳しく原稿を書いて頂きましたためにページ数が多くなり２号に分割することになりました。企画者の一人としましては嬉しいかぎりです。また、私は今回の特集を少しお手伝いさせて頂いただけであり、本特集の企画は旭硝子株式会社の高田章氏が中心となってまとめられてものであり、そのご努力にこの場を借りて感謝の意を評させて頂きます。

クラスターモデルの光と陰

（株）豊田中央研究所　兵頭志明

1．はじめに

材料中の原子配列や材料物性を電子レベルから検討することの意義は多くの人が認めるところとなっている。この目的のために、分子軌道法をはじめとする計算物理・計算化学の手法が国内の企業に導入され始めて久しい。利用可能なソフトウエアも様々なレベルのものが販売されてきている。計算機能力の飛躍的な増大とともに、電子状態計算法の新しい理論およびモデリングによって計算可能な系の規模は増大の一途をたどっており、巨大分子もしくは分子の環境までを含めた電子状態計算が実現されるようになってきている。 しかし、複雑な構造を有する材料の電子構造をそのままの形で数値的評価に供することは、一般には不可能である。かつては想像すらし得なかった大きな分子の電子状態計算が可能になってきてはいるが、「材料設計」という立場で見ると、まだまだ実用に耐えるものとはいえないのが実情である。

このような制限があるにもかかわらず、電子状態計算の結果として得られる情報の豊富さは魅力的である。基本的な計算結果である波動関数からは、原理的には物質中の電子が関係するあらゆる物理量が算出されるからである。上記の問題を回避するためのアプローチとして、注目している現象に対して最も寄与が大きいと考えられる部分を抽出し、その局所構造における電子状態計算から様々な予測、推論を行なおうというやり方がある。部分構造モデルやクラスターモデルと呼ばれるものである[1, 2, 3]。これらのモデル化は、選びだした部分構造が注目している現象の本質を支配しているという立場に立って行なわれるものである。しかしながらクラスターモデルを用いた電子状態の計算では、計算が実行できる範囲で選ばれたモデルであるという側面が強調され、そこで行なわれているモデル化の意味が不明確になることがしばしばある。いきおい、クラスターのサイズを出来る限り大きく取る方向で研究が進められることになる。この方向では、計算機の能力が計算結果の質を左右することになる。 このような制限を打開するための検討は積極的に行われており、例えば溶媒効果に対する Onsager model の適用、金属表面における吸着状態に対する Dipped Adcluster Model の開発など有効なモデル化の手法が提案されてきている。広域での分子および分子配置の構造最適化をねらった ONIOM も注目すべき方法と考えられる。しかしながら、これらの方法は適用対象が限定されており、また計算対象とする領域のサイズが従来よりも大きくとれるようになっているとはいえ、いずれもクラスターモデルの範疇に属するものであることには変わりがない。

本稿では、このような性格を持つクラスターモデルが採用されている背景について考察し、分子軌道計算におけるクラスターモデルの位置付け、計算結果を一般化し得る要素などについて検討することを目的とする。定性的にではあるが、クラスターモデルの持つ性格をある程度整理することをねらっている。

2．代表構造としてのクラスターモデル

クラスターモデルを用いた電子状態計算では、計算が実行できる範囲でモデル構造が選ばれているという側面が強調されていると指摘した。このことは、計算対象が目的の材料の代用物であるといういくぶん消極的な要素を強調している。注目している材料の性質を代表し得るという視点でモデル構造が選択されると、より積極的に捉えられるはずである。以下では、このような視点で選ばれたモデル構造を「代表構造」と呼ぶことにする。ここでは、このような意味合いの「代表構造」というものが概念として成立し得るものかどうかについて解釈、検討しておきたい。

化学の基本的な考え方のひとつに、官能基の概念がある。いくつかの、分子の性質を表す物理量には官能基に固有な値が提案され、これらの間に加成則を仮定することによって分子個々の値が近似的に再現できることが知られている。例えば、グループ電気陰性度[4]や、結合モーメント[5]などといった仮説である。また、赤外吸収分光や核磁気共鳴分光などの化学物質の構造同定に利用される分光法では、官能基ごとの特性吸収帯が整理されており、特定のエネルギー領域に現われる吸収帯の有無によって構造同定が可能であることが認められている[6]。官能基という部分構造が、近似的には電子的に独立な振る舞いを示すことを保証している。従って、官能基に注目することにより、代表構造として意味のあるクラスターを抽出し得ると期待される。現在では、分子軌道計算

などの普及によってこれらの仮説はあまり利用されなくなってきてはいる。しかし、要素還元的な捉え方に基づいて現象を理解するには局所構造への分割は依然として有効であると考えられる。クラスターモデルの使用は、chemical sence に合うモデリングといえよう。

局所的な電子構造が化合物の反応性を支配するというアイディアに対する理論的検討は、福井らによって系統的に行なわれた。一連の成果のひとつとして相互作用フロンティア軌道という概念の提出があげられる[7]。相互作用フロンティア軌道は、通常イメージされる分子軌道とは異なり、相互作用し合う相手分子に近い部位に局在化している。相互作用による安定化が軌道の重なりの大きい状態ほど有利に行なわれることによる。極端な類例を挙げれば、s-、p-型の原子軌道が化合物を形成する際に sp2 や sp3 といった混成軌道を形成すると考えることによって様々な化合物の電子構造が比較的単純に理解できることは良く知られている。孤立原子では不安定な混成軌道が化合物で安定になるのも、相互作用する相手の軌道との重なりが大きくなるためである。同様のことは大きな分子の反応の過程でも成立しており、このことを理論的に説明したのが福井らの理論であると言える。相互作用フロンティア軌道の概念は、特別な官能基を含まない分子の反応でも成立している[8]。

実際に分子軌道法などを用いたクラスターモデルでの検討を行なうには、クラスターを終端する必要があることは良く知られている。クラスターモデルを終端しないと結合する相手を与えないことになり、非結合電子対のような高いエネルギー状態にある軌道を生成する。この状況は、クラスターが元の系内に埋め込まれているときとはかなり異なった状態に対応する。従って、クラスターの抽出によって余った「結合の手」は、何らかの形で終端しておかなければならない。有機分子を対象にするときには、メチレン鎖部分を水素原子で置き換えることがよく行なわれている。この終端方法に理論的な保証はないが、電気陰性度を比較してみるとある程度は納得できる。Hinze らが整理した結果[4]によると、水素とメチレンの電気陰性度はそれぞれ 2.20 と 2.30 である。これらの値は、アミノ基の 2.82、水酸基の 3.53 などと比べると互いにかなり近い値となっている。電気陰性度は、電子の引き付け易さ、すなわち電子分布に対する変化の与え易さを示す指標である。電気陰性度が近い値になっているということは、それぞれを置き換えても電子分布はかなり似かよったものになると期待出来る。

これらの背景を受け入れると、「系の性質を代表する部分構造」は具体的に指定し得ると期待できる。代表構造としてクラスターモデルを抽出すると、後の計算ではそのクラスターを孤立系として取り扱うことになる。このようなモデルに基づいた計算結果には絶対値そのものよりも、何らかのパラメーターの変化に対する系の状態の変化傾向に意味がある。クラスターを切り出すことによって遠方の電子分布の影響を切り捨ててしまうわけなので、クラスターモデルでの計算結果を大きな系での計算結果と厳密に結び付けることは不可能である。単純な意味での「近似」と捉えるよりは系の性質の本質を調べるためのモデルシステムであるという捉え方を強く意識しないと、代用物であることの不満から有効な結論を見捨ててしまうことになりかねない。パラメーター変化に対してクラスターが周囲とは独立な応答を示すときには孤立系としての取り扱いには何ら問題はないはずである。この場合、クラスターモデルに基づく計算の結果は、代表構造としての性質を十分に表現しているといえる。

上記の考察は主に有機化合物における従来の知見を拠り所にして導いた楽観的な予想である。無機化合物でも共有結合性の物質にならば同様に考えることが可能であると期待できる。配位子場理論のように局所的な対称性によって系の特徴的な性質が記述できていることを考えれば、ある程度のイオン的性質を有する化合物でも類似の期待を持つことは許されるであろう。金属表面の場合でも、Dipped Adcluster Model のように切り出したモデルクラスターの価電子を周囲の「電子浴」における価電子と熱的に接触させることで、金属中の価電子が伝導性を持つことをモデルの中に取り入れることができる。このように考えると、物質の化学的な分類によらずにクラスターモデルに系の性質の本質を調べるためのモデルシステムという地位を与えることがそれほどひいき目のことではないといって良いはずである。計算機の制限から止むなく採用したモデルであるといった消極的な捉え方をせずに、「これこそが問題の本質を捉えたモデルシステムである」と考えられるようなモデリングを行いたい。

3．クラスターモデルの拡張に関する問題点

前節ではクラスターモデルに対する optimistic な捉え方を紹介した。いわばクラスターモデルの陽なたの側面である。本節では陰に当たる問題点を示してみたい。本節で紹介する問題点は、筆者の知る限りは具体的な形で指摘している文章を見たことがない。

採用したモデルクラスターを本来の計算対象の代用物であるという不満を持ちながら計算を行っていると、クラスターのサイズを大きくしていった時の振る舞いがどうしても気になる。そこで心ある人は、実行できる範囲でサイズを拡張し、計算結果のサイズ依存性をチェックすることになる。本質的な振る舞いがクラスターサイズに依存しなければ良しとするが、通常は大きなサイズの方のクラスターでの結果を基準にとって考察を進める。このような手続きは一見正当な方法であると思われるが、筆者の感覚から言うと問題がある。これをごく単純なモデルシステムを用いて説明してみたい。

モデルとして x 方向に並ぶ1次元の原子鎖を考える。問題をクリアーにするため、各原子の原子軌道は1個の s-軌道のみで構成されるとする。この原子鎖の中央の原子には後で px-と pz-軌道のみを有する一つの原子を on top 型で乗せることにする。ここで、各原子軌道のエネルギー順位はそれぞれ等しいとする。1次元原子鎖を構成する原子数を1、3、5,... と奇数個で順次増加させた時の分子軌道の振る舞いを調べてみる。複雑さを避けるため、分子軌道は tight binding 近似の範囲で構成する。図1に模式的に示したように、1次元原子鎖の HOMO は原子数の増加に伴って、分子鎖の中心で腹を持つ場合と節を持つ場合とが交互にくり返される。この中心の原子に px-と pz-軌道のみを有する原子を on top 吸着させると、1次元原子鎖の HOMO とは pz-軌道のみが相互作用する場合と px-軌道のみが相互作用する場合とが交互にくり返されることが軌道の対称性を考えれば容易に分かる。HOMO よりも下のエネルギーレベルにある分子軌道はエネルギー差の大きさから HOMO に比べて軌道の混合が起こりにくい。原子数を増加させると分子軌道の順位が混んで来るので、次第にエネルギー差の小さな軌道が増え、on top 吸着した原子の px-と pz-軌道双方と混ざりやすい成分数が増加する。中心原子の位置で節を持つ軌道と px-軌道との相互作用は、両脇の原子の軌道が逆位相で重ね合わさっている成分であるので、中心原子の位置で腹を持つ軌道と pz-軌道との相互作用に比べて明らかに小さい。1次元原子鎖における原子が無限個になる極限を考えると、このままでは腹タイプと節タイプとのそれぞれの相互作用の寄与の違いが想像しにくい。しかし、これらに Wannier 変換をして互いに直行する局在軌道を

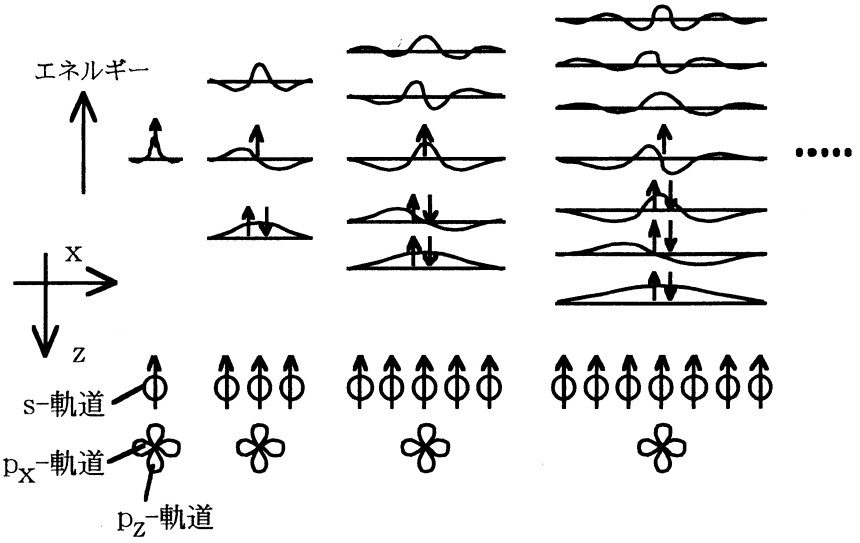


図1．s-軌道を持つ1次元原子鎖の軌道の形と中心原子に on top で相互作用するp_X-, p_Z-軌道を持つ原子の配置.

作ってやればほぼ元の s-型の軌道に近い軌道関数が得られることが分かるので（図２参照)、基本的には腹タイプの軌道と pz-軌道との相互作用がこの系の吸着状態を規制していることが想像できる。

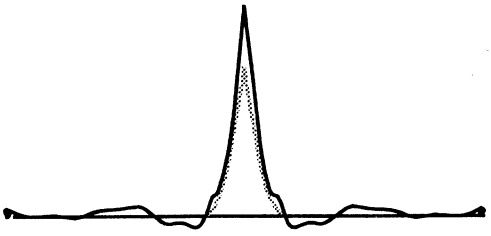


図２．s-軌道を持つ１次元原子鎖の Wannier 軌道（実線)と構成原子の s-軌道（薄線).

さてここで、１次元原子鎖の原子数が少ない場合に立ち戻ってみよう。原子数が無限個の場合の Wannier 軌道に最も近い形を示しているのは原子数１の場合の軌道であり、３や５では様子が随分異なることが分かる。もちろん、Wannier 変換が唯一無二の局在軌道へのユニタリー変換の方法とは言い切れない。今考察しているモデルシステムにおいて、どのような変換が最も系の特徴を表現するのに有利な表現であるかということが最良の criterion になる。この意味で、１次元原子鎖の一つの原子に別の原子が on top 吸着する場合には、吸着する原子から見て最近接距離にある１次元原子鎖中の原子は一つに特定できるので、このモデルシステムでの Wannier 変換が最も有利なユニタリー変換であると予想することには問題はないと考えられる。Wannier 軌道に最も近い形を示しているのが原子数１の場合の軌道であり原子数が３や５では様子が随分異なることから、 モデルをリファインする積もりで原子数を増やしても、数が少ないうちは全く改善されていないという予想が成り立つ。３原子クラスターや５原子クラスターそのものの振る舞いを調べるのでない限りは、中途半端なクラスターサイズの拡張は無意味であると考えられる。実在系での軌道成分は上記よりも多岐にわっており、表面構造の対称性によって周期の単位は原子ではなくなる。このような事情から、実在系で上記のような問題を意識するのは難しい問題であると思われる。

結局のところ、切り出したモデルクラスターの周囲の影響を effective に取り込んだ、最少原子数での計算モデルが最も現実的なモデルである、と筆者は考えている。また、周期境界条件を利用したモデルシステムでも、計算に用いる周期単位でバンドが折り返されるので、状況としてはクラスターモデルにおける上記のような問題が解消できているとは言い難い。しかしながら、上述した状況を具体的な系で理論的に保証することは相当な難問である。上記のようなモデルシステムならば比較的単純な道筋で問題を考察することが可能であるが、実在するシステムをモデル化した系では無限の広がりを持った状態を計算することが事実上不可能であり、定量的な評価のための基準となる計算結果が得られないのが現実である。同時に、上述したモデルクラスターの問題点が、より現実的な系において解消されているという保証もまた、理論的に導くことは現状としては不可能であると思われる。

４．担持金属微粒子表面における粒径効果/ 担体効果の問題

少数の原子からなるクラスターモデルを用いて異種材料間の接触の影響（例えば、担持金属微粒子表面への担体効果）を調べる場合、小クラスターで得られた定性的結論は、程度の差こそあれ、大規模クラスターでも残っていると考えられがちである。しかし、クラスターサイズを大きくしていった時に、小クラスターと同様の傾向が定性的にすら得られないかも知れないということは前節の考察からも予想される。

Ponec らの考察によれば、担持金属微粒子表面への、金属微粒子と担体との接触の影響は電子移動量としてはごくわずかであり、金属微粒子表面に吸着した分子の電子状態に有意な差異を生じる原因になるとは考えにくい[9]。さらに、吸着分子側から見ても、金属微粒子全体の電子数変化の影響を受けるとは考えにくい。中辻らによる Dipped Adcluster Model [10]に基づいて、モデルクラスターを部分系とみなし、価電子の化学ポテンシャルを見積もってみると、電子浴とみなせるバルク金属の価電子の化学ポテンシャル（Fermi エネルギー）とのバランスは熱的接触による電子移動の可能性を否定する場合がしばしば見られる。すなわち、少数の原子からなるモデ

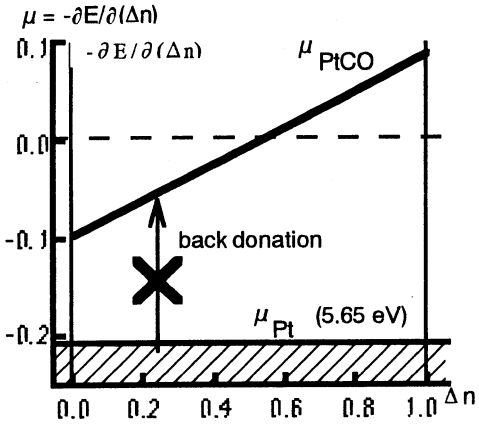


図３．PtCO における価電子の化学ポテンシャル（μ_{PtCO}）とPt バルクのフェルミエネルギー（μ_{Pt}）

ルクラスターの計算結果によって得られる酸化・還元的振る舞いに基づいて大きなサイズの金属微粒子表面での分子吸着を予測することは、必ずしも保証された手続きではない。

例として、吸着状態への担体効果が盛んに議論されてきた担持金属微粒子表面への on top CO 吸着を考えてみる。金属表面に on top 吸着した CO 分子は金属から反結合性 π 軌道への電子の back donation によって結合性が低下し、振動数が低波数シフトする。この事実に基づいて担持金属微粒子表面での 吸着 CO における分子振動の振動数シフトを考察すると、例えば金属に対して電子供与性の担体を用いると反結合性 π 軌道への back donation が増大し振動数はより低波数シフトすることになる。担持金属微粒子の粒径が小さくなる場合にも、担体から金属微粒子へ供与される電子の全価電子に対する割合が増大することになるので、やはり反結合性 π 軌道への back donation が増大し振動数はより低波数シフトするはずである。いくつもの実験結果はこの予想と一致しており、担持金属微粒子表面に on top 吸着した CO 分子への担体効果は担体の電子供与性の大小（もしくは還元的性質の大小）で整理されると結論されることが多い。ところが、Dipped Adcluster Model を用いて PtCO の分子軌道計算からこの系の価電子の化学ポテンシャルを見積もってみると、バルク Pt の Fermi エネルギーよりも高い値を示し金属 Pt の伝導電子は表面の PtCO クラスターには流れ込まないという結果を得た。この結果を図３に示す。同様の結果は PdNO でも得られている。一方、Ponec らの考察では仮に担体・金属微粒子界面で酸化・還元が起こったとしてもその際に移動する電子数は金属中の伝導電子の総数からすればごくわずかであり、事実上金属の Fermi エネルギーを増減させる効果は見込めないと結論されている[9]。すなわち、上記の常識的な予想は２段階の障壁によって疑問視されていることになる。

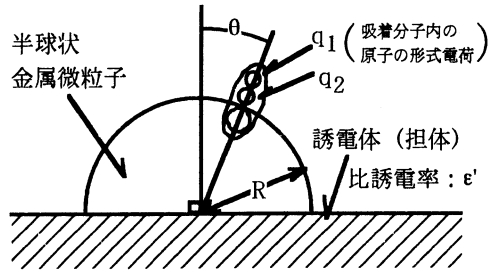


図４．静電誘導エネルギー計算の形状モデル（半球状導体モデル）．

実験的に得られている on top 吸着 CO 分子の振動数シフトにおける担体／粒径効果の機構を考察するためのモデルとして、我々は静電誘導エネルギーによる吸着エネルギーの補正を考えてみた[11]。基本的な考え方は Dipped Adcluster Model と同様であるが、担持金属微粒子表面という特徴を計算モデルに取り入れるために、図４に示した構造に沿った境界条件を満たす静電誘導ポテンシャルを見積り、PtCO モデルクラスターの分子軌道計算の結果を補正するようにした。ここでは計算式の詳細は省かせていただくが、このモデルで見積もった on top 吸着 CO 分子の振動数シフトにおける担体／粒径効果は、図５に示すように実験値[12]の定性的な変化傾向を良く再現するものとなっている。ただし図５の実験値は CO/Rh/ 担体での結果である。これだけの情報がそろった実験結果はなかなか公表されていない。我々は Pt 系での実験を試みたが、粒径制御がうまくいかずに適切なプロットが得られていないのが現状である。また、吸着 CO 分子どうしの遷移双極子モーメント間の相互作用によっても振動数シフトが生じるという事実もある[13]ので、この系における担体/粒径効果を実験的に調べるためには、本来は同位体による無限希釈状態

での振動数をプロットするなどの必要がある。粒径効果に関してこのような実験が系統的に行われた例は、筆者はまだ見たことがない。

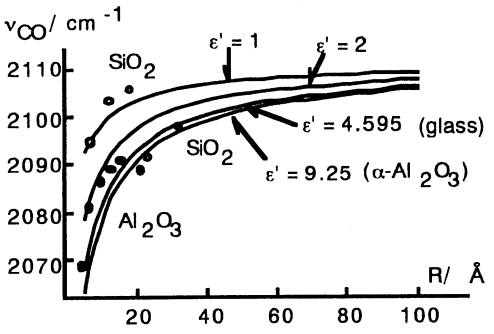


図５．半球状導体モデルを用いて算出した担持 Pt 微粒子に吸着した CO 分子の振動数（ν_{CO}）の微粒子半径（R）および比誘電率依存性. ⊘ 、◉ 、● は CO/Rh/担体の実測値[12]を 26 cm^{-1} 平行移動させたもの。

ここで採用したモデルクラスターは PtCO という最小単位である。上記の結果を見ると Pt の数を２個、３個と増やして結論が変わらないことをチェックしてみたくなるのが人情ではあるが、先に述べたように中途半端なモデルの拡張はもともとの問題から焦点をずらす可能性が高いので、ここではぐっと押さえるべきであると考えている。担持金属微粒子の場合には結晶面やステップなどの影響も大いに気になる点であるが、図５の実験値の変化の仕方から考えて、そのような問題が全体的な変化傾向を支配している様子は見当たらない。やはりぐっと押さえるべき問題であると考えている。また、本稿では具体的に述べていないが、静電誘導ポテンシャルの見積りの際には金属や誘電体表面と静電誘導ポテンシャルを見積もる領域に存在する電荷との距離は十分に離れているという仮定がなされている。この仮定が成立しているかどうかも問題にすべきことであるが、このモデルでは CO 分子と最近接 Pt 原子との相互作用は分子軌道計算によって見積もっているので、ここで問題になる静電誘導ポテンシャルの見積りからは除外されている。厳密とは言えないが、上記の仮定は良く成立していると考えられる。

通常のクラスターモデルの範疇で担持金属微粒子系を考えると、少数の原子から成るモデルクラスターを使って計算することになる。この場合には、金属微粒子/担体間の電子移動が吸着分子に直接の影響を与えることは、採用したモデルの性格によって明白であり、化学的感覚からの期待を裏切らない結果が得られる。しかし上で述べたように、このようなモデルと現実との対応関係は必ずしも論理的に保証された結果とは言えない。結局のところ筆者がとりあえず持っている結論は、「切り出したモデルクラスターの周囲の影響を effective に取り込んだ、最少原子数での計算モデルが最も現実的なモデルである」ということである。どのような影響を effective に取り込むかという問題が残るが、電子が「感じる」ことができるポテンシャルは古典的には静電ポテンシャルのみであるので、電子状態の記述を局所的なポテンシャルで押し切ってしまう限りは、切り出したモデルクラスターの周囲の影響を静電ポテンシャルの境界値問題を満足するように取り入れてやればまずまずのモデル化が可能なのではないかと考えている。

５．おわりに

本校執筆に当たり編集委員会からいただいたご要望は、ツールの使い手側の立場からの経験を成否を問わずに紹介して欲しいという内容であったと思う。このようなご要望にどこまで応えられているのか、はなはだ心もとないところであるが、電子状態計算を利用して触媒の問題にアプローチして行く際に不可欠なモデル化の手法であるクラスターモデルについて、筆者の考え方を紹介させていただいた。

筆者の考えでは、使えるツールはどんどん使えばよいし、不足している点があれば要望するなり自分で開発するなりすればよいと思っている。既存のプログラムの枠の中だけで物事を考えていると、とてもフットワークの良い研究にはならないと思う。市販ソフトを使っている場合でも、入出力データのフォーマットをある程度把握していれば、オリジナルな計算が行えるように出来るのではないだろうか。筆者は、必要となったときのベースとするために、分子軌道計算のためのプログラムをひとわたり開発してある。本稿の４で紹介させていただいた計算結果はこのプログラム（*QuantumProbe* と呼んでいる）を用いて行ったものである。

本稿で述べたことは、ツールという意味での問題というよりは、我々が計算対象をどのように捉えるかという、より本質的な問題であると考えている。同じモデルを用いた計算を行っても依って立つ立場が異なればそこから導かれる結論も変わってくるという主張であるが、ともすれば単なる気持ちの問題として片づけられなくもない。しかし、このような立場の違いは、パラメータの振り方や結論の導き方に強く影響する問題だと思う。勿論、このような議論がモデルの貧弱さを肯定するための奇弁にすり替わってしまっては困るのは言うまでもない。なお、本稿の3で述べたWannier 関数の性質に基づく議論びついては、クラスターモデルの範疇からは外れはするが、Kohn [14] および Aoki and Imamura [15] による重要な報告があるので文献だけでも紹介しておきたい。本稿の4では、クラスターモデルを用いた電子状態計算に関連して筆者自らが行った計算結果を紹介さていただいた。正直を言うと筆者も、当初は金属微粒子と担体の界面での電子移動によって微粒子表面に吸着した分子の状態に変化が現れるようなモデルを考えていた。担体の化学的性質について議論が出来るので、実はこのほうが計算として面白いはずなのである。しかし、仕事を進めるうちにこのような機構には一般性が無いことが分かってきたので、前述したようなモデルの導入を図ったわけである。微粒子の粒径と担体の誘電率のみで吸着 CO の状態が記述できてしまうと主張しているので、化学屋としてはあまり面白くない結論ではある。

計算化学的なプログラムのツールとしての完成度は現在における計算理論の到達点にどこまで迫れているかによって判断されるものであると思う。しかし使う側からそれを判断する場合には、計算理論の到達点に対する不満や、本稿で述べたような利用できるモデルに対する不満などが混在する。ツールとしての積極的な活用を図るならば、このような問題の区別をもっと意識的に行ってやる必要があるのではないだろうかと感じている。

参考文献

[1] 電子状態計算におけるクラスターモデルの適用法については、次の重要な文献がある。
X.Lü, X. Xu, N. Wang, Q. Zhang, M. Ehara, and H. Nakatsuji, Chem. Phys. Lett., **291**, 445 (1998); X. Xu, H. Nakatsuji, M. Ehara, X.Lü, N. Q. Wang, and Q. E. Zhang, Chem. Phys. Lett., **291**, 445 (1998)

[2] 固体表面の問題へのクラスターモデルに基づく分子軌道計算の応用については、S.Yoshida, 表面科学,11,390(1990) で議論されている。

[3] 兵頭志明、豊田中央研究所 R&D レビュー、**29**, 59 (1994) では本稿の立場でクラスターモデルを捉えた時の実例のいくつかを紹介した。

[4] J. Hinze, et al., J. Am. Chem. Soc., **85**, 148 (1963).

[5] C. P. Smyth, Dielectric Behavior and Structure *(McGraw-Hill, 1955).*

[6] 例えば、J. R. Dyer, Application of Absorption Spectroscopy of Organic Compounds *(Prentice-Hall, 1965).*

[7] K. Fukui, N. Koga, and H. Fujimoto, J. Am. Chem. Soc., **103**, 196 (1981).

[8] 藤本博、化学総説、**38**, 180 (1983).

[9] L. E. Y. Nonneman and V. Ponec, Catal. Lett., **7**, 197 (1990).

[10] H. Nakatsuji, J. Chem. Phys., **87**, 4995 (1987).

[11] S. Hyodo, 投稿準備中.

[12] Y. Mori, T. Mori, A. Miyamoto, N. Takahashi, T. Hattori, and Y. Murakami, J. Phys. Chem., **93**, 2039 (1989).

[13] F. Stoop, F. J. C. M. Toolenaar, and V. Ponec, J. Catal., **73**, 50 (1982).

[14] M. R. Geller and W. Kohn, Phys. Rev. B, **48**, 14085 (1993).

[15] A. Imamura, Y. Aoki, and K. Maekawa, J. Chemi. Phys., **95**, 5419 (1991); Y. Kurihara, Y. Aoki, and A. Imamura, J. Chem. Phys., **108**, 10303 (1998).

密度汎関数法プログラム DMol、TURBOMOL の利用経験： 窒素酸化物の物性計算、及びチタノシリカライト－1 触媒による過酸化水素を用いた酸化反応機構検討

東北大院工材料化学専攻　宗像弘明
hirom@aki.che.tohoku.ac.jp

1． はじめに

化学分野への密度汎関数法 (DFT)の応用は益々盛んになり、有機化学、有機金属錯体、触媒等、その応用の分野も広がっている。手法からみると GAUSSIAN-DFT、DMol、ADF、TURBOMOL、DGauss、deMON 等の種々のプログラムがあり使う立場からは悩ましい。計算目的とプログラムの適用範囲、その経済コストから使用するプログラムを選択し、実際の研究が行われているのが現状であろう。密度汎関数法は当初、交換相関エネルギー項を自由電子ガスモデルにより近似し、その関数形として VWN を用いた局所密度近似密度汎関数法（LDA/VWN）が使われてきたが、その後交換相関エネルギー項に局所電子密度のみならず電子密度勾配を取り入れて近似を上げる方法 (GGA）が開発され、BP 法、BLYP 法として各種プログラムの中で用いられている。理論、手法についての詳細は成書、論文を参照願いたい。[1]

ここで、我々の密度汎関数法応用経験の中から、窒素酸化物に関して、TURBOMOLE を用いた各種の DFT 法、及び MP2 法を適用し計算手法の相違によって得られた平衡構造、振動数、生成熱 等の比較検討を行ったので、[2] その結果及び手法の適用性について紹介する。又、触媒反応機構に関し、DMol (MSI 社)を用いた解析例として、チタノシリカライト－1 (TS-1)を触媒として用い、過酸化水素を酸化剤とした、オレフィンのエポキシ化、アンモニアからヒドロキシルアミン生成について、反応経路エネルギー推移、遷移状態の探索、反応機構について検討したので、[3] その概要について紹介する。 密度汎関数法の各種手法の適用範囲、その限界、問題点等、利用の参考になればと思う次第である。

2． 窒素酸化物物性に関する DFT 計算と MP2 計算の比較検討

地球環境問題の中で大気中の窒素酸化物に起因する大気汚染、酸性雨、オゾン分解によるオゾンホール生成等は大きな問題となっている。又、窒素酸化物は工業的にも基幹物質であるにもかかわらず比較的理論計算があまりされていなかった。我々は、中性の窒素酸化物、NO、NO_2、NO_3、N_2O、N_2O_3、N_2O_4、N_2O_5 についてその平衡構造、調和振動数、生成熱について HF 法、MP2 法を適用し求め、これと密度汎関数法の LDA/SVWN 法、GGA/BP 法、GGA/BLYP 法、更に HF-DFT Hybrid 法である Becke によってパラメーター化された Adiabatic Connection Method（ACM 法）[4] によって得られた値と比較検討した結果について紹介する。

計算法： HF 法、MP2 法は GAUSSIAN92 により、他の密度汎関数法の計算には TURBOMOLE[5] を用いた。基底関数としては Schafer et al. による triple-zeta double-polarization（TZ2P）の GAUSSIAN basis を用いた。

2－1．結果

NO、$NO_2(C_{2v})$、$NO_3(D_{3h})$、N_2O、 N_2O_3(asym; C_s)、$N_2O_4(D_{2h})$、$N_2O_5(C_2)$、$N_2O_5(C_s)$ の夫々について計算を行い。得られた結果から、平衡構造の結合長、調和振動数、生成熱について論じる。

[1] 平衡構造について

平衡構造の結合長誤差について第 2.1 表に示した。 HF 法によって得られた平衡構造原子間の結合長は他の方法によって得られた値と比較して最も短く、BP、BLYP 法では長くなってい

第 2.1 表　結合長誤差　Å

	HF	MP2	SVWN	BP	BLYP	ACM
Average	-0.063	0.017	0.006	0.022	0.032	0.009
Max.	-0.260	0.050	0.021	0.090	0.129	0.025

る。ACM 法で得られた構造の結合長は良い一致がみられ 0.01Å以下であり MP2 法で得られた値よりも半分の誤差であった。一方 SVWN 法で得られた結果は一番良い値を示し、0.006Åの誤差であった。一般的には SVWN 法で得られる構造は GGA/BP、GGA/BLYP 法での構造より良い結果を与えているが MP2 又は ACM 法で得られる構造より劣る傾向がみられている。この系について、特に良い結果が得られたものであろう。しかしながら SVWN 法では比較的良い平衡構造が得られるにも拘わらず SVWN 法で得られるエネルギーの値は後述の如く非常に劣っているので、局所密度近似 (LDA) によって得られる結果について信頼性の欠ける処となっている。

[2] 振動数について

NO_3の振動数については大きく異なる 2系列の実験値が報告されている。またNO_3の基底状態が2E'の励起状態の e' 振動モードとカップリングして影響されるとの報告があり、[6,7] e' 振動数の実験値 (380, 704 cm^{-1}) に 300 cm^{-1}もの差の原因と考えられている。NO_3のデータは除外して得た振動数誤差を第 2.2 表に示した。計算によって得られる振動数は調和振動によるもので、一方観測データには非調和振動の効果が含まれ、計算による振動数は実測値より大きな振動数が得られるのが一般的であり、1より小さい scaling factor を乗じて補正することが行われている。この外に振動数は電子相関の影響、分子の平衡構造の系統的な誤差の影響を受ける。HF法で得られた平衡構造の結合長は系統的に短く見積もられ、したがってover bindingによる力の定数の増加は非調和振動の効果を含まない振動数を更に大きくする。逆に BP、BLYPで結合長は長くなり効果が相殺してこの場合誤差が小さくなる事が見られるが、第 2.2 表での振動数誤差はこの傾向を反映している。BPの結果が最も良い結果を示しているが、この結果は平衡構造に見られる長く見積もられた結合長に基づくものである。実際には DFT法計算の中でより大きな誤差の値を示したACM法の振動数が次の処理を行うことで最善の結果を示した。ACM法の振動数は観測データと比較して振動数の大きい方にずれ、また振動数の増加と伴に大きくなる傾向を示しているので、scaling factor 0.95を乗ずる事により大幅な改善が見られ、平均誤差 15 cm^{-1}、最大誤差 40 cm^{-1}の最も良い一致が見られた。但しN_2O_4の最低の b_{2u}の振動数を除いた。MP2法により得られる振動数の多くは低い値を示している。しかしその誤差は NOの振動数 (誤差+1495 cm^{-1})、NO_2の b_2モード (誤差+1136 cm^{-1})、及び NO_3の最も高い e' モードの振動数 (誤差+875 cm^{-1}) により大きく影響される。これらの窒素酸化物は open-shell radical で MP2 法による振動数は構造変化による spin contamination変化の影響を最も受けやすいとされている。[8]

第 2.2 表　振動数誤差　cm^{-1}

	HF	MP2	SVWN	BP	BLYP	ACM	ACM calibrate*
Average	203	51[a]	48	25	48	58	15
Max.	370	-177[a]	156	-113	-130	138	40

a Excluding anomalous frequencies for NO and NO_2

* All ACM frequencies were scaled by 0.95

[3] 生成熱について

検討された中性の窒素酸化物の生成熱について実験値はすべて吸熱である。計算によって得られた生成熱の誤差を第 2.3 表、生成熱の平均及び最大誤差を第 2.4 表に示す。又生成熱誤差を見やすいように棒グラフで第2.1 図に示した。NO を除き HF 法での生成熱の計算値は非常に大きな吸熱を示し、NO を含めた平均誤差は 238 kJ/mol であった。一方 SVWN での計算値は NO を除き、大きな発熱を示し、NO を含めて平均誤差で-155 kJ/mol であった。

第 2.3 表　生成熱誤差　kJ/mol

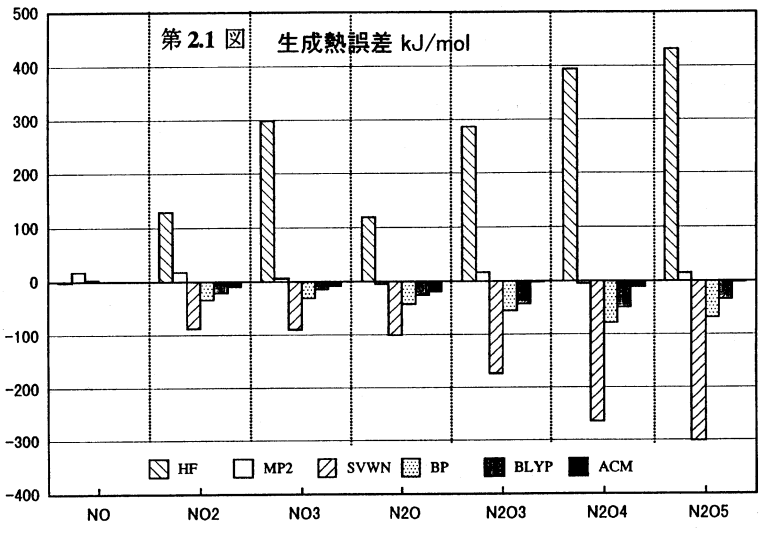
	HF	MP2	SVWN	BP	BLYP	ACM	Expt.
NO	-0.9	17.7	3.1	-0.1	-0.2	0.0	90.2
NO_2	128.7	17.5	-86.3	-33.0	-20.5	-9.5	32.2
NO_3	299.6	6.0	-88.3	-31.3	-14.8	-7.5	71±21
N_2O	120.5	-5.0	-99.3	-42.3	-25.8	-18.5	82.0
N_2O_3	288.1	15.6	-173.4	-55.4	-41.2	-2.2	83.7
N_2O_4	395.2	-5.1	-262.7	-77.9	-48.3	-12.0	9.2

第 2.4 表　生成熱平均及び最大誤差　kJ/mol

	HF	MP2	SVWN	BP	BLYP	ACM
Average	237.5	10.0	-154.8	-47.8	-30.1	-7.9
Max.	431.4	17.7	-301.2	77.9	48.3	18.5

GGA /BP、BLYP 法では、改善され、夫々 **-47.8 kJ/mol**、**-30.1 kJ/mol** の平均誤差となったが、酸化数の高い窒素酸化物について、計算では発熱の傾向が大きくなる事が示された。

NO の生成熱は、検討された全ての計算法で実験値に近い値が得られた。**MP2** ではすべての窒素酸化物で吸熱であり、平均誤差は **10 kJ/mol** であった。最も良い値が得られたのは **ACM** 法であり、N_2O_4で僅かの発熱を示したがその他の窒素酸化物で吸熱であり、その平均誤差は**-7.9 kJ/mol** であった。



以上 窒素酸化物の平衡構造、振動数、生成熱に関する **DFT** 計算と **MP2** 計算比較検討を通じて **HF-DFT** の **hybrid** による **ACM** 法が平衡構造、振動数、生成熱について実測値と総合的に良い一致を示した。

3． チタノシリカライト－1を触媒とする過酸化水素によるエチレンからエチレンオキサイド、アンモニアからヒドロキシルアミン生成の反応機構について

MFI 構造を持ったシリカライトの **Si** の一部を **Ti** で同型置換した **TS-1** 触媒は、過酸化水素によるオレフィン類のエポキシ化触媒、またケトンとアンモニアからオキシム生成触媒として広く研究され、又オレフィン類のエポキシ化の反応機構について **DFT** による理論計算も行われ報告されている。しかし活性化酸素種反応中間体については種々の構造が提案され、現在でも研究途上の問題である。我々は **TS-1** のクラスターモデルを構築し、**TS-1** のクラスターモデル上での過酸化水素の活性化について密度汎関数法を適用して検討を行った。**TS-1** のクラスターモデル上で過酸化水素の活性化により **Ti-O-O-Si** 結合を持つ **TS-1** 過酸化物形成の可能性が示された。又この **TS-1** 過酸化物に水１分子が付加した水和 **TS-1** 過酸化物はエネルギー的にも安定な構造であることが示された。この TS-1 過酸化物を酸化剤としてエチレンからのエポキシ化触媒反応、及びアンモニアからのヒドロキシルアミン生成触媒反応を検討した。反応経路の推定には遷移状態の探索、得られた遷移状態構造が重要である。しかし実際の計算に際しては、遷移状態の探索は反応経路の推測に化学的な洞察力と、遷移状態探索の効率の良いプログラムを必要とし、それでも多くの場合、煩雑で力仕事となる。反応の出発原料系、生成系の相対的なエネルギー差、反応障壁エネルギーの高さ等のエネルギーレベルを求める際にも局所密度近似、非局所密度近似等の手法の適用とその限界の問題があり反応機構の解析を更に複雑にしている。

3－1 計算方法

計算は **MSI** 社の密度汎関数法プログラム DMol[9] を用いた。先ず局所密度近似 **VWN** 法により、**DNP** 基底を用いて構造の最適化を行い **(LDA/VWN)**、得られた最適化構造について非局所密度近似 **GGA/BP** 法による **Single Point** のエネルギー計算 **(Single Point GGA/BP)**を行い、系のエネルギーレベルを検討した。更に非局所密度近似 **GGA/BP** 法による構造最適化の検討も行い、反応系のエネルギーレベルについて評価した。しかしながら分子間の弱い相互作用を含む系の **GGA/BP** 法による構造最適化が収束しないと言う現象が見られ、反応経路の各段階のエネルギーレベル検討については主として **Single Point GGA/BP** に

より評価した。反応系の遷移状態については反応座標経路を化学的に考察し、推定反応座標に沿って原子座標間に距離の拘束を掛け試行錯誤によりポテンシャル表面を求めて遷移状態の近傍を推定した。遷移状態に近い構造を初期構造として **DMol** に導入されている **Eigenvector Following** 法[10]により遷移状態を求めた。この際、反応座標に関連する負の **hessian value** を持った **hessian file** を使用することがキイーポイントとなる。

クラスターモデルは **orthorhomic MFI** 構造を持ったシリカライトの **Si (T1 -サイト)** を **Ti** で同型置換し、その周辺に SiO_4 グループを **4** ケ配置した結晶の部分構造を取り出し、クラスター境界の酸素の解放結合について結晶構造を保持する方向に水素を付加して、$TiSi_4O_{16}H_{12}$ のクラスターモデルを構築した。**Fig. 3.1** に示す。この境界水素 **12** ヶの原子座標を固定して、他の原子座標について最適化を行った。**TS-1** クラスターモデルと水、アンモニア、過酸化水素、エチレン等の分子との相互作用についてそれぞれの構造を最適化し反応系のエネルギー準位を検討した

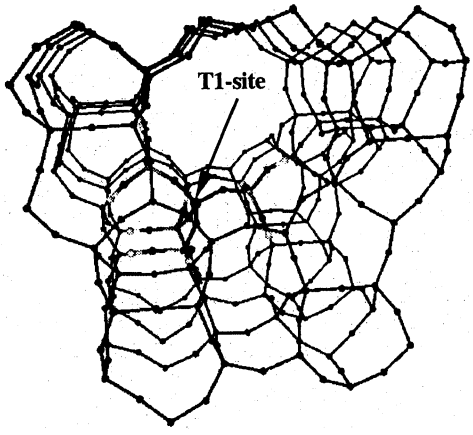
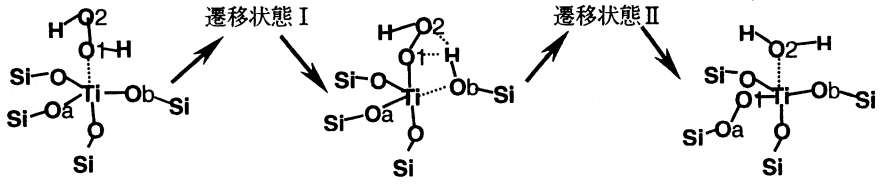


Fig. 3.1 MFI 構造シリカライトの **T1-site Si** の **Ti** による同型置換クラスターモデル

3－2　過酸化水素の活性化

TS-1 のクラスターモデル上で過酸化水素の活性化について検討した結果、過酸化水素 **TS-1** 附加体から出発して、中間に局所安定状態があり、その前後に遷移状態Ⅰ、および遷移状態Ⅱの **2** つの遷移状態を経て水和過酸化 **TS-1** コンプレクスを生成する下記に示す反応経路の可能性が見出された。



水和 **TS-1** から出発して水和 **TS-1** 過酸化物までのエネルギーの推移について出発原料系（**TS-1-Relax 1+HOOH +H_2O**）を基準にとり **LDA/VWN** による最適化エネルギーレベル、及び **Single Point GGA/BP** によるエネルギーレベルを第 **3-1** 表に示した。反応の各中間体について **GGA/BP** による構造最適化を試みたが旨くゆかず、最適化構造を求める事は出来なかった。水、過酸化水素と **TS-1** クラスターモデル間の相互作用が弱く **GGA/BP** による構造最適化が旨く行かなかったものと思われる。

LDA/VWN による最適化エネルギーレベルは、**Single Point GGA/BP** によるエネルギーレベルと比較して平均で **-80 kJ/mol** 程、過度に低い値が得られているが、これは局所密度近似に起因する **over-binding** によるものと考えられる。反応のエネルギー障壁は遷移状態Ⅰで **LDA/VWN** では **+62 kJ/mol**、**Single Point GGA/BP** では **+69 kJ/mol** で、その差は**+7 kJ/mol** であり、遷移状態-**II** では **+64 kJ/mol**、**Single Point GGA/BP** では **+58 kJ/mol** で、その差は **-6 kJ/mol** であった。**LDA/VWN** で最適化された中間体のエネルギーレベルは、**Single Point GGA/BP** で得られたエネルギーレベルに比較して大きな差があるにも拘わらず反応のエネルギー障壁の値は比較的近い値が得られた。**LDA/VWN** 最適化により得られたエネルギーレベルを反応経路探索の際の参考データーとし、**LDA/VWN** により得られた最適化構造について **GGA/BP** 法により **Single**

第 3-1 表　過酸化水素の TS-1 モデル上での活性化

反応段階	相対的エネルギー(kJ/mol)			
	LDA/VWN Optimized		Single Point GGA/BP	
	E	ΔE	E	ΔE
1. TS-1-Relax **1**+HOOH +H_2O	0		0	
2. TS-1-(H_2O) **3**+HOOH	-100		-41	
3. TS-1-(HOOH) **4** +H_2O	-115	+62	-31	+69
4. 遷移状態-**I** + H_2O	-53		+38	
5. 中間体 **5** + H_2O	-77	+64	+11	+58
6. 遷移状態-**II** + H_2O	-13		+69	
7.TS-1-(PerOx)(H_2O) **6** + H_2O	-101		-27	

PerOx = (Ti)-O-O-(Si)

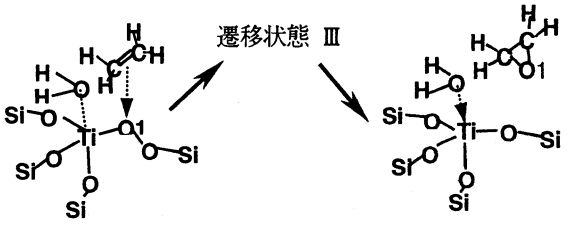
Point のエネルギー計算を行い、そのエネルギーレベル、及び反応のエネルギー障壁を評価するのが良いものと判断された。

過酸化水素 **TS-1** 附加体から水和過酸化 **TS-1** コンプレクスの生成についてその反応のエネルギー障壁は全体では **100 kJ/mol** となるが、中間に局所安定状態を経ることにより **+69 kJ/mol**、**+58 kJ/mol** の **2** 段のエネルギー障壁を超えて水和過酸化 **TS-1** コンプレクスが得られるものと理解される。得られた水和過酸化 **TS-1** コンプレクスのエネルギーレベルは **TS-1-Relax 1** を基準として **-27 kJ/mol** でありエネルギー的には安定であった。

3－3．エチレンからエポキシ化反応

エポキシ化反応においては水和 **TS-1** 過酸化物の **Ti** に隣接する過酸化結合酸素が直接エチレンと反応し、遷移状態 **III** を経てエポキシエタンを生成する。エチレンからクラスターモデル上でのエポキシ化のエネルギー推移について **LDA/VWN** による最適化エネルギーレベル、及び **Single Point GGA/BP** によるエネルギーレベルを第 **3.2** 表に示した。反応の各中間体についての **GGA/BP** による最適化は旨くゆかず、エネルギーレベルを求める事は出来なかった。

Single Point GGA/BP によるエネルギーレベルで反応の推移をみると水和 **TS-1** 過酸化物とエチレンの附加体（**-10 kJ/mol**）から、遷移状態 **III**（**+67 kJ/mol**）の反応のエネルギー障壁 **77 kJ/mol** を超えてエポキシエタンが生成される。**LDA/VWN** による最適化エネルギーレベルでの対応する反応のエネルギー障壁は **41 kJ/mol** でありその差 **–36 kJ/mol** の低い値が得られた。



第 **3.2** 表　エチレンからエポキシ化のエネルギー

反応段階	エネルギーレベル（kJ/mol）			
	LDA/VWN Optimized		Single Point GGA/BP	
	E	ΔE	E	ΔE
1. TS-1-Relax **1**+HOOH+H_2C=CH_2+H_2O	0		0	
7.TS-1-(PerOx)(H_2O) **6**+H_2C=CH_2+H_2O	-101		-27	
8. TS-1-(PerOx)(H_2C=CH_2)(H_2O) **7**+H_2O	-110	+41	-10	+77
9. 遷移状態-**III**+H_2O	-69		+67	
10. TS-1-(H_2O) **3**+Epoxide+H_2O	-330		-245	
11. TS-1-Relax **1**+Epoxide+2H_2O	-230		-204	

PerOx = (Ti)-O-O-(Si),　Epoxide = Epoxyethane

3－4．TS-1 過酸化触媒活性種とアンモニアからヒドロキシルアミンの生成反応

エチレンのエポキシ化においては **Ti** に水が配位した状態でエチレンが直接、過酸化結合酸素**(Ti)-O1-Ob-(Si)** の **O1** と反応するプロセスがエネルギー的に有利であったが、NH_3 の酸化過程では NH_3 が水と置換して直接 **Ti** に配位し、NH_3 が**(Ti)-O1-Ob-(Si)**の過酸化結合酸素 **O1** と反応するプロセスがエネルギー的に有利であることが見出された。

過酸化 **TS-1** クラスターモデル上で NH_3 は **Ti** に配位した過酸化結合酸素 **O1** と反応して遷移状態 **IV** を経て

第 3-1 表　過酸化水素の TS-1 モデル上での活性化

反応段階	相対的エネルギー(kJ/mol)			
	LDA/VWN Optimized		Single Point GGA/BP	
	E	ΔE	E	ΔE
1. TS-1-Relax **1**+HOOH +H_2O	0		0	
2. TS-1-(H_2O) **3**+HOOH	-100		-41	
3. TS-1-(HOOH) **4** +H_2O	-115	+62	-31	+69
4. 遷移状態-**I** + H_2O	-53		+38	
5. 中間体 **5** + H_2O	-77	+64	+11	+58
6. 遷移状態-**II** + H_2O	-13		+69	
7.TS-1-(PerOx)(H_2O) **6** + H_2O	-101		-27	

PerOx = (Ti)-O-O-(Si)

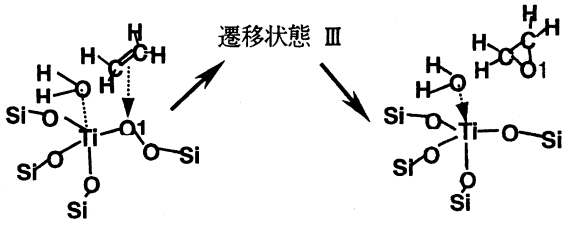
Point のエネルギー計算を行い、そのエネルギーレベル、及び反応のエネルギー障壁を評価するのが良いものと判断された。

過酸化水素 **TS-1** 附加体から水和過酸化 **TS-1** コンプレクスの生成についてその反応のエネルギー障壁は全体では **100 kJ/mol** となるが、中間に局所安定状態を経ることにより **+69 kJ/mol**、**+58 kJ/mol** の 2 段のエネルギー障壁を超えて水和過酸化 **TS-1** コンプレクスが得られるものと理解される。得られた水和過酸化 **TS-1** コンプレクスのエネルギーレベルは **TS-1-Relax 1** を基準として **-27 kJ/mol** でありエネルギー的には安定であった。

3－3．エチレンからエポキシ化反応

エポキシ化反応においては水和 **TS-1** 過酸化物の **Ti** に隣接する過酸化結合酸素が直接エチレンと反応し、遷移状態 **III** を経てエポキシエタンを生成する。エチレンからクラスターモデル上でのエポキシ化のエネルギー推移について **LDA/VWN** による最適化エネルギーレベル、及び **Single Point GGA/BP** によるエネルギーレベルを第 **3.2** 表に示した。反応の各中間体についての **GGA/BP** による最適化は旨くゆかず、エネルギーレベルを求める事は出来なかった。

Single Point GGA/BP によるエネルギーレベルで反応の推移をみると水和 **TS-1** 過酸化物とエチレンの附加体（**-10 kJ/mol**）から、遷移状態 **III**（**+67 kJ/mol**）の反応のエネルギー障壁 **77 kJ/mol** を超えてエポキシエタンが生成される。**LDA/VWN** による最適化エネルギーレベルでの対応する反応のエネルギー障壁は **41 kJ/mol** でありその差 **-36 kJ/mol** の低い値が得られた。



第 **3.2** 表　エチレンからエポキシ化のエネルギー

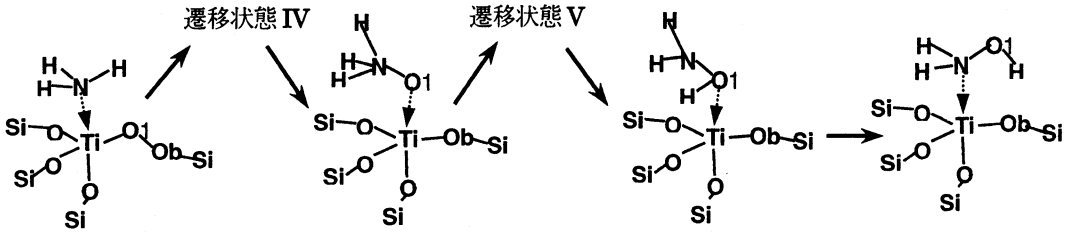
反応段階	エネルギーレベル（kJ/mol）			
	LDA/VWN Optimized		Single Point GGA/BP	
	E	ΔE	E	ΔE
1. TS-1-Relax **1**+HOOH+H_2C=CH_2+H_2O	0		0	
7.TS-1-(PerOx)(H_2O) **6**+H_2C=CH_2+H_2O	-101		-27	
8. TS-1-(PerOx)(H_2C=CH_2)(H_2O) **7**+H_2O	-110	+41	-10	+77
9. 遷移状態-III +H_2O	-69		+67	
10. TS-1-(H_2O) **3**+Epoxide+H_2O	-330		-245	
11. TS-1-Relax **1**+Epoxide+2H_2O	-230		-204	

PerOx = (Ti)-O-O-(Si),　Epoxide = Epoxyethane

3－4．TS-1 過酸化触媒活性種とアンモニアからヒドロキシルアミンの生成反応

エチレンのエポキシ化においては **Ti** に水が配位した状態でエチレンが直接、過酸化結合酸素(**Ti**)-**O1**-**Ob**-(**Si**) の **O1** と反応するプロセスがエネルギー的に有利であったが、NH_3 の酸化過程では NH_3 が水と置換して直接 **Ti** に配位し、NH_3 が(**Ti**)-**O1**-**Ob**-(**Si**)の過酸化結合酸素 **O1** と反応するプロセスがエネルギー的に有利であることが見出された。

過酸化 **TS-1** クラスターモデル上で NH_3 は **Ti** に配位した過酸化結合酸素 **O1** と反応して遷移状態 IV を経て



アンモニア N-オキサイド型で Ti に配位した TS-1 コンプレクスを生成する。次に遷移状態 V を経て水素移動によりヒドロキシルアミン-TS-1 付加体 (A 型) を生成する。ヒドロキシルアミン TS-1 付加体 (A 型) はコンフォメーション変化により、更に安定な B 型となる。ヒドロキシルアミン TS-1 付加体 (B 型)のヒドロキシルアミンはアンモニア又は水と交換して触媒サイクルを一巡する。

触媒反応として NH_3 が過酸化 TS-1 に配位した adduct から出発してヒドロキシルアミン TS-1 付加体 (B 型) 生成に至るまでのエネルギーレベルの推移を出発原料系 (TS-1-Relax 1+HOOH +H_3N+H_2O) を基準にとり LDA/VWN による最適化エネルギーレベル、及び Single Point GGA/BP によるエネルギーレベルを第 3.3 表に示した。アンモニアからヒドロキシルアミンの生成の中間体について GGA/BP による最適化を試みたところ、アンモニア-TS-1 Adduct、アンモニア-過酸化 TS-1 Adduct、遷移状態-IV、アンモニア N-オキサイド型 TS-1 コンプレクス、遷移状態-V 等の主要な中間体について GGA/BP による最適化が成功した。そのエネルギーレベルを併せて第 3.3 表に示した。

第 3.3 表　アンモニアからヒドロキシルアミン生成のエネルギー推移

反応段階	相対的エネルギー (kJ/mol)					
	LDA/VWN Optimized		Single Point GGA/BP		GGA/BP Optimized	
	E	ΔE	E	ΔE	E	ΔE
1. TS-1-Relax 1+HOOH +H_3N+H_2O	0		0		0	
2. TS-1-(H_3N) **10** + HOOH + H_2O	-108		-52		-56	
3. TS-1-(PerOx)(H_2O) **6** + H_3N + H_2O	-101		-21			
4. TS-1-(PerOx)(H_3N) **11** + 2H_2O	-113	+53	-35	+56	-40	+53
5. 遷移状態-**IV** + 2 H_2O	-60		+21		+13	
6. TS-1-(H_3N-O) **12** + 2 H_2O	-224	+69	-122	+61	-129	+74
7. 遷移状態-**V** + 2 H_2O	-155		-61		-55	
8. TS-1-(H_2NOH) A **13** + 2 H_2O	-207		-121			
9. TS-1-(H_2NOH) B **14** + 2 H_2O	-243		-156			
10.TS-1-Relax 1+H_2NOH+2H_2O	-102		-92		-93	

PerOx = (Ti)-O-O-(Si)

LDA/VWN による最適化エネルギーレベルは over-binding による過度の安定化がみられる。 GGA/BP による Single Point エネルギーレベルにより、反応の推移を見るとアンモニア附加過酸化 TS-1 コンプレクス (-35 kJ/mol) から、遷移状態 IV (+21 kJ/mol) の反応のエネルギー障壁 +56 kJ/mol を超えてアンモニア N-オキサイド型 TS-1 コンプレクス (-122 kJ/mol) が生成される。次にアンモニア N-オキサイド型 TS-1 コンプレクスから遷移状態 V (−61 kJ/mol) の反応のエネルギー障壁 +61 kJ/mol を超えてヒドロキシルアミン TS-1 付加体 (A 型) (−121 kJ/mol) を生成し、更に安定なヒドロキシルアミン TS-1 付加体 (B 型) (−156 kJ/mol) へのコンフォメーション変化が可能である。 Single Point エネルギーレベルに比較して GGA/BP による最適化によるエネルギーレベルはアンモニア-TS-1 Aduct で −4 kJ/mol、アンモニア-過酸化 TS-1 Aduct で −5 kJ/mol、遷移状態-IV で −8 kJ/mol、アンモニア N-オキサイド型 TS-1 コンプレクスで −7 kJ/mol、でエネルギーレベルの差異は −4 kJ/mol～ −8 kJ/mol の範囲であったが、遷移状態-V では逆に +6 kJ/mol の差が見られた。GGA/BP による最適化による反応のエネルギー障壁を見ると遷移状態-IV で +53 kJ/mol 、遷移状態-V で +74 kJ/mol で Single Point GGA/BP によるエネルギーレベルと比較して夫々 遷移状態-IV では −3 kJ/mol、遷移状態-V では +13 kJ/mol の差であった。

4．結 語

中性の窒素酸化物に関して、**TURBOMOL** を用いた各種の **DFT** 法、及び **Hatree-Fock** 法、**MP2** 法を適用し、計算手法の相違によって得られた平衡構造、振動数、生成熱 等の比較検討結果について紹介した。**Hatree-Fock** 法はこの系の計算では誤差が最も大きく適用は不適当であった。**LDA/SVWN** 法では平衡構造、振動数では非常に良い結果が得られたが、生成エネルギーの計算では実測値は吸熱であるのに反し、大きな発熱の結果が得られ、生成エネルギーの計算では全く不適当であった。**GGA/BP** 法、**GGA/BLYP** 法では平衡構造についてその結合長は実測値よりも長く評価され、振動数については比較的良い結果が得られたがこれは長い結合長に基づく力の定数の減少と調和振動計算の効果によるものであり、又生成エネルギーの計算では **LDA/SVWN** 法よりも改善されたが充分でなく、**GGA/BP** 法、**GGA/BLYP** 法は総合的には、窒素酸化物系について、平衡構造、生成エネルギー値に良い結果は得られないと判断された。**MP2** 法は平衡構造、生成エネルギー値に良い結果が得られているが、振動数計算では系の多くの場合に良い結果を示したが、ラジカル種の **NO**、**NO_2**、**NO_3** で大きな誤差を示した。**Hatree-Fock-DFT Hybrid** 法で **Becke** によってパラメーター化された **Adiabatic Connection Method**（**ACM** 法）は検討された手法の中で最も良い結果を示した。平衡構造、生成エネルギー値ともに良い結果が得られ、振動数についてはスケーリングにより最も良い振動数が得られた。密度汎関数法の応用に際しては各手法の特徴と適用の限界を考慮して、計算の対象となる系と目的に応じ夫々の方法を選択して、効果的に利用することが重要である。

触媒反応機構に関し、**DMol** (**MSI** 社)を用いた解析例として、チタノシリカライト－1 (**TS-1**)を触媒として用い、過酸化水素を酸化剤とするオレフィンのエポキシ化、アンモニアからヒドロキシルアミン生成について、反応経路エネルギー推移、遷移状態の探索、反応機構の検討結果の概要について紹介した。検討の過程で見出された過酸化 **TS-1** 活性種は酸素原子が格子の **Ti-O** 結合に取り込まれた興味ある構造を持ち、活性化酸素種としての可能性を示唆するものである。この過酸化 **TS-1** 活性種を酸化剤としてエチレンの酸化によるエポキシドの生成、アンモニアの酸化によるヒドロキシルアミン生成の反応機構について検討し興味ある結果が得られた。反応経路の各中間体のエネルギーレベルの検討には **LDA/VWN** 法による構造最適化を行い、最適化構造について **Single Point GGA/BP** によるエネルギーを計算し評価した。反応経路推定には遷移状態の探索が重要であり、**J. Simmons** 等の理論に基づき **J. Baker** 等によって **DMol** に導入されている **Eigenvector Following** 法が、検討に用いられたクラスターモデルのような大きな系での遷移状態の探索に有効であった。しかし遷移状態の探索は力仕事であり、時間もかり、必ずしも成功するとは限らず、より効果的に遷移状態の探索が可能となる手法の改善が望まれる。又 **DFT** 法の計算精度の向上についても更なる改善が望まれる。

謝 辞

TS-1 触媒の研究について 宮本 明教授（東北大院工）及び 窒素酸化物の研究について **Dr. Jon Baker**（現 **Arkansas Univ.**）、（財）地球環境産業技術研究機構、（株）菱化システム に討論、助言、支援について感謝の意を表します。

参考文献

(1) Par, R. G.; Young, W. **1989**, *Density functional theory of atoms and molecules*, Oxford University Press.

(2) Munakata,H.; Kakumoto, T.; Baker, J. *J. Mol. Str. (Theo. Chem.)* **1997**, *391*, 231

(3) Munakata, H.; Oumi, Y.; Miyamoto, A. *Stud. Surf. Sci. Catal.*, **1998**, 227.

(4) Becke, A. D. *J. Chem.Phys.* **1993**, *98*, 5648.

(5) Alrichs, R.; M.Bar; Horn, H.; Kolmer, C. *Chem. Phys. Letts.* **1989**, *162*,165

(6) Weaver, A.; Arnold, D. W.; Bradforth, S. E.; Neumark, D.M. *J. Chem.Phys.* **1991**, *94*, 1740.

(7) Hirota, E.; Kawaguchi, T.; Ishiwata, T. Tanaka, I. *J. Chem.Phys.* **1991**, *95*, 771.

(8) Jensen F. *Chem. Phys. Letts.* **1990**, *169*, 519.

(9) Molecular Simulations Inc. *DMol* version 960

(10) Baker, J. *J. Comput. Chem.* **1986**, *7*, 385

電子ジャーナル "Journal of Computer Aided Chemistry"

刊行のお知らせ

先の米沢での会合でお知らせ致しました通り、本部会では電子ジャーナルを刊行する運びとなりました。本ジャーナルは、情報化学部会に関連する学問分野について、速報性のある論文誌を企図しているだけでなく、本邦の学会では未だ目新しい電子投稿システムを採用するとともに、カラー画像、大型図版、動画、音声、コンピュータ・プログラムなどの添付も可能にしようという意欲的なもので、印刷体に負けない体裁にする予定でおります。本誌の発刊が部会や討論会の活性化にもつながることを祈っております。

現時点では、誌名が表題のように決定し、上述した新しい試みをどのようにして実現するかのプロセスが生まれつつある段階です。担当者といたしましては、このプロセスを、実際に投稿論文を受け付けながら完成させていきたいと考えております。皆様のジャーナルを皆様のお力をお借りして完成させるために、暖かいご協力をいただければ幸いです。つきましては、原稿送付のご予定がございましたら、下記の編集幹事宛、お知らせください。折り返し原稿作成要領をお送りさせていただきます。

２０００年１月３１日

日本化学会情報化学部会　電子ジャーナル刊行ＷＧ主査　時田澄男

連絡先（編集幹事）

豊橋技術科学大学　知識情報工学系　船津　公人

E-mail: jcac@chemistry.or.jp

第11回ケモメトリックス・ワークショップ開催報告

キッコーマン（株）研究本部　相島鐵郎
taishima@ga2.so-net.ne.jp

すべての食品は複雑な多成分系であり、ケモメトリックス手法の適用なしには真の姿を理解することは不可能である。ジョージア大学のPowers教授が1968年、香り成分のガスクロマトグラムと嗅覚による評価データの関係を重回帰分析により解析して以来、ガスクロマトグラムやHPLCデータ及び紫外・可視、近赤外、赤外などの各種スペクトルデータは、ケモメトリックス手法の有用性を示す絶好のターゲットであった。一方、食品の研究や開発には不可欠であるにもかかわらず、機器分析では絶対に得られない情報がある。それは味覚、嗅覚などの五感を利用した官能評価により初めて測定できる、味、香り、テクスチャー(食感)などである。近年、電子鼻や電子舌などと呼ばれる機器も開発、市販されてはいるが、味覚や嗅覚の感知メカニズムが不明な今日、それらの機器がもたらすのは単なる物理的な信号に過ぎず、味や香り自体を示す情報ではない。五感を利用する官能評価から有意義な情報を得るには①高い評価能力のパネル、②適切な評価手法の選択、③正確な評価データの収集、④正しいデータ解析が不可欠となる。つまり、これらの機能を備えたパネルとソフトウェアを利用できるならば、正確で精度高い官能評価データを収集し、その解析から製品の品質特性や消費者行動に関する有用な情報の抽出が可能となる。

そこで、世界の300ヶ所以上で用いられている官能評価データの収集と解析用ソフトウェアを開発販売しているCompusense Inc.(Guelph, Ontario, Canada)から、社の創立者で自身も優れた官能評価の研究者であるDr. Chris Findlayを招き日本化学会会館5階会議室において11月19日10～17時、「コンピュータを利用した官能評価データの収集とケモメトリックス手法による解析」という演題で講演していただいた。Guelphはカナダ最大の都市トロント郊外に位置し、人口10万人レベルではカナダで最も犯罪率の低い安全な町であり、多数のベンチャー企業を育んでいる静かな大学町でもある。テーマがテーマだけに、食品企業や大学の食品関連研究室の関係者が50名を超える参加者の大半を占めた。ふんだんに図を示しながらの下記内容の講演は、英語であることを忘れさせるほど大変分かり易く情報量も豊かであった。

1．官能評価へコンピュータを導入する利点
2．多変量解析手法によるデータ解析
3．時間強度（Time Intensity :T-I）データの収集と解析
4．パネリストの評価
5．消費者嗜好の理解を通じた新製品開発
6．ソフトウェア・デモンストレーション

データ解析手法としては主成分分析、プロクラステス分析（GPA: Generalized Procrustes Analysis)、PLS回帰分析、またパネルの信頼性チェックには卵殻図形を利用する新しい手法も紹介され、ケモメトリックス手法が官能評価データの解析にいかに不可欠な手法として適用されているかが、具体的な例で示された。また評価手法やパネルの信頼性をチェックする手法の標準化を目指す動きも、それぞれヨーロッパとアメリカでは盛んであり、将来的にはパネル評価の信頼性検定や相互比較などに統一基準が導入される可能性も示唆した。それら統一基準の標準ソフトウェアを目指しているのがCompusense *five*と言う訳である。翻って我が国の現状を考え、お寒い限りであると感じたのは私だけであろうか。

講演終了後、ほとんどの参加者が残り、講師とコンピュータを囲みながらの懇親会に移った。期待通り（？）のアルコール効果で、講演時間中とは様変わりの活発なアフタファイブの質疑応答が交わされ19時半、別れを惜しみつつ散会した。

あいしま　てつお　AISHIMA, Tetsuo
連絡先　〒278-0037 千葉県野田市野田 399 キッコーマン（株）研究本部　電話 0471 23 5980

部会役員会報告

平成11年度第7回拡大編集委員会兼常任幹事会議事録

日　時：平成12年1月21日（金）午後3時より
場　所：日本化学会会議室
出席者：吉田元二、時田澄男、三戸邦郎、伊藤眞人、高田　章、船津公人、相田美砂子、
　　相馬　融、坂本直紀、清水弘一
議　題
（1）CICSJ Bulletin 進捗状況（船津）
　18巻1号：特集・続・材料をさぐる
　　佐々木慎一先生追悼号
　18巻2号：特集・21世紀の情報化学に期待する
（2）論文誌電子化刊行の決定。
　誌名：Journal of Computer Aided Chemistry（略称 JCAC）
（3）その他
　・構造活性相関シンポジウム関係者との連絡会について
　・CICSJ ホームページの管理・運用について
　・次期役員について

◆関連行事

2000環太平洋国際化学会議 (PACIFICHEM2000) シンポジウムからの案内

2000環太平洋国際化学会議 (PACIFICHEM2000) シンポジウム(2000年12月14日～19日　於ホノルル)は日本化学会も主催者の一つとして開催されるもので、情報化学関係の幾つかのセッションがあります。以下はそのうちの一つのオーガナイザーからの依頼を受けて掲載するものです。

CALL FOR PAPERS

The 2000 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies will take place in Honolulu, Hawaii, from December 14 - 19, 2000. The congress is cosponsored by the American Chemical Society, the Chemical Society of Japan, the Canadian Society for Chemistry, the New Zealand Institute of Chemistry and the Royal Australian Chemical Institute. Chemical Societies in the countries that border the Pacific Ocean will be Official Participating Organizations. Overall, 6,000 reports on current research and development will be presented in 179 symposia and in oral and poster general sessions in 10 topical areas. If previous congresses are any indication, this year's program should be highly interesting and attendance should be very large.

You are invited to submit an abstract for a paper or poster to be considered for presentation at symposium #175 "Use of Chemical Information in Organic Synthesis", co-organized by Prof. Kimito Funatsu, Toyohashi University of Technology, Japan, Dr. David Winkler, CSRIO Division of Molecular Science, Australia, and Dr. Guenter Grethe, MDL Information Systems, Inc., USA. Abstracts of approximately 150 words must be submitted to the Congress Secretariat at ACS by April 3, 2000, for paper versions, or April 14 electronically. The congress abstract form is available for electronic retrieval and submission from the Pacifichem 2000 web site at

http://www.acs.org/meetings/pacific2000

Paper forms can be obtained by contacting the Congress Secretariat at

Pacifichem Congress Secretariat
American Chemical Society
1155-16th S., N.W.
Washington, DC 20036, USA
e-mail: pacifichem@acs.org

To encourage attendance at the congress by young chemistry professionals from developing countries that border the Pacific Ocean, the sponsoring societies of Pacifichem 2000 are making available up to 40 grants of $1,000 (U.S.) plus complimentary registration to assist with travel and attendance costs. Details about the scholarship are to be found on the congress web site.

Why is participation in this symposium essential for synthetic chemists and information specialists?

During the last two decades various programs and databases, large comprehensive and smaller thematic ones, covering a broad range of synthetic chemistry, have been developed to assist synthetic chemists with their tasks. Additionally, these databases have the potential to serve as a rich source for extracting data into knowledge bases for reaction planning and reaction prediction programs.

Speakers at the symposium will address issues important to the various areas of reaction information management, such as synthesis planning, reaction retrieval and prediction, reagent selection, integrated web-based information, information needs in combinatorial chemistry and other related topics. Emphasis of the symposium will be on the integration of various programs and data from multiple sources to simulate the working habits of synthetic chemists in gathering necessary information, thereby generating an environment in which they will use electronic tools comfortably and efficiently ? the synthetic workbench of the future. Papers describing the use of the various tools and information sources available to synthetic chemists and information specialists alike are solicited. Presentations for contributed papers will be restricted to 25 minutes, including 5 minutes for Q & A.

Following is a description of some of the topics we hope to cover in the symposium:

Reaction retrieval

Retrieval of relevant information from existing databases to plan the synthesis of discrete compounds or libraries and to search for applicable methodologies and efficient functional group transformations is the most frequently used and therefore the most important part of any reaction information system. Presentations on available systems and associated applications to facilitate their use, the contents of available reaction databases, efficient management of large datasets, such as classification, post-search tools to manage large hitlists and other retrieval related topics are invited.

Reaction prediction

Reaction prediction plays an important role in synthesis, particularly in process development and combinatorial chemistry. Presentations addressing the use of available programs and the generation of knowledge bases from reaction databases to assist in the validation of reaction proposals in the planning process will be part of the symposium. Other topics for discussion are applications of methodologies to use physico-chemical parameters in predicting the outcome of reactions and the importance of functional group perception and their dependency on reaction conditions as criteria for reagent selection and automated synthesis.

Synthesis planning

Synthesis planning is experiencing rejuvenation, largely due to developments in combinatorial chemistry. Emphasis of programs has shifted from planning syntheses of complex molecules to generating efficient and economic preparations of libraries of compounds, frequently involving the use of solid-phase methodology. We invite speakers to discuss progress made in this important area as well as talk about validation procedures used in the planning process and methods to select viable starting materials.

Combinatorial chemistry

Combinatorial synthesis continues to have an immense impact on the developments in managing chemical information. Finding the most relevant methodologies, planning a library, and selecting the most viable reagents and solid supports are some of the important tasks to be carried out by the synthetic chemist. Presentations on these topics as well as discussions about the utilization of available information for automated synthesis and effective data

management are desirable.

Electronic workbench

The future and success of using electronic information in synthesis is heavily dependent on the smooth integration of the required tools in an electronic workbench through friendly graphical interfaces and smooth operations. To guarantee good results, the workbench must provide easy access to large amounts of data in diversified databases - online and inhouse - and in electronic versions of the primary and secondary literature. The electronic labjournal must serve both as an archiving and registration tool. We are soliciting papers describing the use of any of these tools, particularly web-based applications.

If you have any questions please contact any of the organizers at the addresses shown below:

Dr. Guenter Grethe
MDL Information Systems, Inc.
14600 Catalina Street
San Leandro, CA 94577
(+1) 510-357-2222, ext. 1430 (voice)
(+1) 510-614-3616 (fax)
guenter@mdli.com

Prof. Kimito Funatsu
Department of Knowledge-Based Information Engineering
Toyohashi University of Technology
Tempaku, Toyohashi 441-8580
Japan
(+81) 532-44-6879 (voice)
(+81) 532-47-9315 (fax)
funatsu@tutkie.tut.ac.jp

Dr. David A. Winkler
CSIRO Molecular Science
Private Bag, Clayton South MDC 3169
Australia
(+61) 3-9545-2477 (voice)
(+61) 3-9545-2446 (fax)
dave.winkler@mo9lsci.csiro.au

◆編集後記

また新しい年がめぐってきました。今年は西暦2000年ということで、ふだんは気付かなくても、いかにコンピューターが私達の生活の奥深くに入り込んでいるかについて認識させられています。私が卒業研究でお世話になったコンピューターの入力は、カードどころか紙テープでした。プログラムはぎりぎりに節約して作ったことを覚えています。それに比べて今のちっぽけなパソコンのなんと贅沢なこと。年末に新装開店した近くの電器店で、その小さな形と、それに似合わないメモリーとディスクの大きさ、そしてさらにその値段に、あらためてびっくりさせられました。私達の研究の主な道具も、大型汎用機からワークステーションへ、そして、今またもっと小さなパソコンに移り変わろうとしています。

こんなに世の中がすすんでも、それでも『２００１年』に自由に宇宙に旅することは、実現しそうもありません。でも情報化学部会でも電子ジャーナルに取り組むように、予想もしなかったことは実現しつつあります。

今年のCICSJ Bulletin の表紙は、『象牙色』です。ちょっと地味かもしれませんが、落ち着いた色合いだと思っています。いかがでしょうか。今号は、1999年度編集委員の担当する最後の号です。次号から新しいメンバーがスタートいたします。

２０世紀最後の年である今年が、部会員のみなさまにとって、２１世紀につながる有意義な年になりますように。

M.A.

（編集委員：船津公人、相田美砂子、相馬融、坂本直紀）

CICSJ Bulletin Vol.18, No.2, April 2000

このページは「日本化学会・情報化学部会」の責任において運営されています。

目次

・　巻頭言
高度情報社会における情報化学部会・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・時田澄男

・　特集：21世紀に期待される情報化学
21世紀の情報化学に期待する・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・旭化成工業　瀬田重敏
21世紀の情報化学に対する大きな期待と要望・・・・・・・・・・・・・旭硝子　真瀬　洋
期待する21世紀の情報化学について・・・・・・・・・・・・・・・・・宇部興産　長澤　俊夫
計算機化学の発展を願って・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・花王　美濃　順亮
21世紀の情報化学への期待・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・JSR　丹沢嘉夫
マイクロファクトリーと情報リテラシー・・・・・・・・・・・・・・・・・・・昭和電工　佐久間　洋
21世紀の情報化学への期待・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・住友化学工業　大庭　成弘
21世紀の情報化学への期待・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・田辺製薬　中島昭英
企業の研究トップが期待する21世紀の情報化学・・・・・・・・日本触媒　佐野禎則
21世紀の情報化学にかける期待・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・日本ゼオン　渡辺　浩志
21世紀の情報化学への期待・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・三井化学　高瀬　勉

・第2特集：続・材料をさぐる（触媒分野）－Part2
化学企業における触媒開発と触媒反応シミュレーション・・・・・・・・・・志賀　昭信
点電荷モデルを用いた酸化スズ触媒上でのメタンの反応
・・・山口洋一・田畑研二・鈴木栄二
燃料電池関連技術への第一原理計算の応用
～金属・合金の水素溶解熱の算出～・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・横井　泰治

・　部会記事
ChIN Web Page: a Navigator for Chemical Information on Internet
・・・Xiaoxia Li
部会役員会・委員会報告

・　編集後記

◆巻頭言

高度情報社会における情報化学部会

日本化学会情報化学部会平成１２年度部会長
埼玉大学工学部　時田澄男

学生の就職状況が一向に好転しないことなどから，大学に身を置く者にとっても不景気が実感される今頃である．しかし，携帯電話や PHS の伸びはすさまじく，関連業界はきわめて好調であるという．4月7日付の朝日新聞によれば，1996 年には 1200 万人弱であった加入者数がこの4年間で 4000 万人以上も増加したということである．通信手段が固定電話から携帯電話に交代した背景には，音声利用だけでなく，インターネットに接続するための端末としての利用の増加がある．2001 年には大容量のデータ通信や動画の伝達なども視野に入れた次世代の携帯電話サービスも予定されていて，世の中はまさに高度情報社会に変わりつつあるといえよう．

高度情報社会においては，化学情報学や計算化学，知識情報学をはじめとして，情報化学が取り組むべき課題はますます増大する．化学計算用の新しいハードウェアも必要であろうし，それを動かすためのコンパイラ，あるいは，新しい理論に基づくソフトウェア開発にも期待がふくらむ．大規模データベースの運用が容易になるのも魅力的である．

日本化学会情報化学部会では，このような情勢を予測して種々の改革を行ってきた．ここ数年間の間にも，吉田元二部会長の下，インターネットの活用，部会ホームページの開設と充実，情報化学討論会の活性化など，さまざまな新しい試みが始まっている．特に，後者については，昨年の討論会において，若手育成のための無料講習会を併催したこと，討論会のプロシーディングスに相当するものを電子ジャーナルの形で出版する手筈を決定したこと等，種々の新しい企画を盛り込んだ．この春には，構造活性相関シンポジウム主催者との話し合いも持たれ，本年秋の大会では両者の共通セッションを設けることも決まるなど，盛り沢山である．

しかし，上述の電子ジャーナルの実現というひとつをとっても問題は山積している．科学技術振興事業団 の J-STAGE というシステムを利用することですでに申し込みも済ませているが，電子投稿に関しては，我が国ではじめての利用となり，パイオニア的な要素が入ってくるためである．昨年度設置された7名から成る WG のメンバーは，本年度より 11 名に増員され，鋭意，これに取り組んでいただいている．

本部会の活性化のために，質の高い論文を御投稿いただくことなどを始めとして，皆様からのあたたかい御支援をお願い出来れば幸いである．

◈特集：21世紀に期待される情報化学

21世紀の情報化学に期待する

旭化成工業（株）　瀬田重敏
e6002579@ut.asahi-kasei.co.jp

昨年12月、通産省が「国家産業技術戦略一次とりまとめ」をプレス発表した。これは吉川弘之日本学術会議議長を座長とする国家産業技術戦略検討会が中心となってまとめたものであり、「フロンティア創造型への技術革新システムへの改革」と「政府の研究開発投資の重点化」を柱として科学技術基本計画に反映して行こうとする意欲的な報告書である。この中に、バイオ、情報通信、環境、エネルギー等と並んで「化学」分野における「産業技術戦略」が含まれている。そこでは、化学産業が物質変換のプロセスを生産の手段とする希有な産業であること、その化学技術の国際競争力がこれを利用する広範な他産業の国際競争力にも影響を及ぼすという立場にあること、そして昨今日本の化学技術が欧米に比して国際競争力を問われていること、一方化学産業において創生される化学物質の利便性と安全性に関する総合的な対応が必要であること、等が論じられている。そして「国際競争力の強化」と「環境への対応即ち持続可能な発展」とが21世紀における日本産業の原点であり、化学産業はその中で重要な役割と責任を負っているとしている。

化学は様々な生活用品や高性能な機能物質を創出し、安価に供給して人類の技術を革新し、また様々な産業の優位性と生活の利便性に貢献してきた。今後もそうした産業や人間生活の面から高度な機能や物性を備えた新素材や化学製品が求められ、化学産業はそれらの要求にことごとく答えてゆくであろう。それは同時に日本産業の国際競争力強化に大きく貢献していくはずである。

こうした動きの中で、今後の世界の最大の課題である地球環境負荷を何らかの形で指標化し、リスク判断できる学問の発展がこれからの大前提となる。総じて研究開発から製造、使用、流通、廃棄、リサイクルの全ライフサイクルを見据えた綜合技術としての要請にも応えなければならない。何十年も前「安全を生産の手段とする」と言われたように、現代は「生体に対する安全性と地球環境保全を生産の手段とする」ことをあらためて再認識すべき時代にある。必ずしも化学産業によって直接作り出された物質によらぬ害も含めて一切の地球環境破壊を浄化し、解決してゆくのも、ある意味では化学にしかできない大きな機能であり役割である。高機能新材料の提供に加えて、環境問題への対応を見事にこなしたときにこそ、尊敬される化学の地位が再認識されるはずである。

そうした変化の激しい現代においては、研究開発のあらゆる面で効率が何よりも重視される。今化学のあらゆる分野で新しい画期的な手法の台頭が世界を変えつつ

21世紀の情報化学に対する大きな期待と要望

旭硝子（株）中央研究所　真瀬 洋
mase@agc.co.jp

20世紀後半における計算機科学の活躍には目を見張るものがあった。当社においても材料探索、製品設計、製造プロセスの最適化等、研究開発におけるあらゆる場面で計算機科学を活用してきた。一方、来る21世紀においても価値創造企業としてグローバルな競争に勝ち残り、より高い価値を提供する素材ソリューションを顧客に提案したいと考えている。そのためのアプローチの1つとして引き続き計算機科学を駆使すると同時に、それと深く関連する情報化学の重要性も強く認識していきべきであろう。

当社においては、情報化学に基づいたアプローチは、たとえば硝子や表面処理薄膜の材料設計、フッ素系材料の分子設計で、研究開発の加速に大いに貢献してきている。ガラスのようなアモルファス材料設計においては構造レベルでの理解に活用され、光・電子機能薄膜材料設計では実験と融合し現象メカニズムの本質の理解や物性の設計手段として重要な役割を演じている。代替フロン探索のような新規分子設計でも候補物質を絞り込む有力な手段となってきた。

世の中の動きも踏まえて今までの情報化学の成果を振り返って見ると、研究開発の方向が決まった場合のスピードアップ（例えば1千件の候補物質から10件に絞り込むような場合）、あるいは開発の方向が定まらない場合のベクトル決定（例えば望む特性を高めるような設計の方針付与）に大きな貢献があったように思う。しかしこの流れの中で、忘れてはならない重要なことは、ヒラメキあるいは洞察力といった人の優れた知恵と結びついて初めて、情報化学に基づいたアプローチが活かされることである。情報化学そのものは価値は生まない。しかし仮説の検証やアイデアの評価を通して、人のよりよい知恵を引き出すキッカケを与えてくれるという意味で、情報化学の役割は益々重くなって来ている。

当社を含め企業は顧客志向の新事業を創出しない限り生き残れない。情報通信・ライフサイエンス・エネルギー・環境分野等の成長産業の中で差別性をもって展開を図るには現行の技術の外挿では限界が見え始めているように思われる。その中で新しい視点での素材ソリューションの提案の一手段として情報化学へ次のように期待したい。人間には捉えられない、捉えにくい視点――たとえば原子・電子のスケールから普段目に触れるスケール（ミクローメゾーマクロ）までを統一的に見渡せる視点や、または、非線型現象で支配されている複雑系（人間は線形化してものを見て本質を失いやすい）としての物質集合体としての視点――からの物の見方を可能にするように情報化学に期待したい。このことにより革新的な材料・プロセスが生み出される可能性も大いに期待されるのではないだろうか。これらの期待に応えらるようになれば計算機科学者が予言した後で実験科学者が検証するような展開がもっと増えてくるであろう。

ところで計算機化学者という専門家ばかりでなく、すべての研究者、技術者が電卓のように日常のツールとして情報化学の必要部分を手軽に使う時代になるべきである。使いやすいツールを流通させることそのものは研究・開発者側からは評価されにくいが、利用者側にはとても価値のあることである。産官学共同でツールの整備を進められる仕組みも検討していただきたいと考えている。

情報化学は化学の中だけに留まることなく他の分野とも連携して産業科学技術全般に大きく貢献できる物の見方・考え方であると思う。産官学の研究者が協力し、また他の分野の研究者との交流も積極的に推進され、情報化学という言葉が広く認知され21世紀の科学技術をリードする役割を担ってもらいたいと考えている。

期待する２１世紀の情報化学について

宇部興産（株） 研究開発本部 本部長　長澤 俊夫
8786u@ube-ind.co.jp

化学企業を取り巻く状況は厳しく、その上世界規模での大型合併がしばしば行われるなど、規模の格差は広がる一方だ。最近では研究開発費用も製品コストに占める割合を厳密に計算して製品毎の競争力を求められている。研究は世界で一個所、製造は世界各地で行い研究成果を各地共通に利用して単位製品量当たりの開発コストを低下させる方式になってきた。この面でも規模の大きさがものを言い、小さい規模の化学企業では研究開発も小さくせざるを得ない。そのため研究開発活動の焦点を鋭くして“選択と集中”を図る方向に向かっているが、その前に活動の効率化が必要である。この効率化のために情報化学の役割に期待している。

企業の化学研究は“新規有効な化学物質を生み出す”か、“既存物質の経済的な新規合成ルートを見つけるか”を実験によって結果をもたらしてきた。化学反応実験の方法は研究者によってそれほど大きな違いはないが、実験計画を立てる段階では百人百様である。膨大な調査を重ね、その中の優秀な結果の追試から始める人。思い付くまま着手する人、その中には安全第一で殆ど目的を達するが 目的レベルが低く結果はあまり面白くない人、いつもホームラン狙いで失敗ばかりしている人、その中間的な人など種々で、ある期間を経ると次々に成果を出す人とそうでない人に分かれてくる。今まではその成果を多く出す人を中心に開発を進め、そうでない人はいつかホームランを打ってくれればよいと考えてきた。必ずしもこの方法に満足してきた訳ではないが、研究者の発想を変えることは至難の技と思いこんでいた。このような研究計画の発想段階で情報化学が活かせて効率の良い実験計画を多くの研究者が立てるようにならないかと期待している。だが、これは成功確率の高い計画を立てる手法で統一しようとするのではなく、あくまで研究者の個性的な発想と手法は大事にしながら、効率の良い実験計画を立てることで、情報化学は支援ツールであることを認識しておくことが必須のことである。

内容的の一つは調査のために物質ならびに反応に関する網羅的な化学情報を含むデータベース（ＤＢ）機能であろう。最近では、大型のＤＢが比較的安価に利用できるようになり、欲しい情報や知りたい合成反応などが瞬時に検索することが可能になり、検索ソフトも大変利用し易くなってきた。外部情報のデータは然るべき市販品を購入することになるが、自社情報は自ら入力せざるを得ない。この場合の問題としては、研究者にインプットさせると研究者によって形式や詳細性がばらばらで、抜けがでてくる。また専任のオペレーターに任せると形式的にはきれいにできても本質が漏れるおそれが多い。このバランスを考え良いデータを入力することが、その利用価値を左右する。

もう一つの期待は合成経路設計支援プログラムであり、優れた有機合成化学者の思考パターンに限りなく近いアルゴリズムを構築することが課題だと思われる。出力されてくる情報の深みや濃さは重要だが、判断に困るほど多くの合成ルートが出力されることは逆効果で、むしろＤＢ内の情報は理論的に検証され、選別されて出力されることが必要と思う。例えば合成ルートのみならず適切な反応条件までもがプログラム内部で計算されて出力されるようになれば極めて有用性の高いツールとなるであると思う。置換基が異なると反応性や選択性が大きく変化することにしばしば直面するが、ＤＢ内の情報をそのままの形ではなく、関連するデーターが先ず抽出され、計算によって解析がなされ、その結果を受けてその後に目的とする反応に対する理論計算、そして反応予測が行われるようなプログラムが出来上がれば合成経路設計の精度は一段と向上すると思える。計算化学との統合により「既知の情報から未知の情報を創り出す」こと、これが私の期待する２１世紀の情報化学である。

計算機化学の発展を願って

花王株式会社　研究開発部門　美濃順亮
050440@kastanet.kao.co.jp

計算機化学は着実に進歩してきたが、その活用状況は大きく変わっていない。即ち、計算機化学は計算機化学者のみを対象とし、大量種合成における効率化や結果の理論的解釈を目的とする場合を除き実験化学者が活用する対象とはなっていない。その原因は、①実験化学者が対象とする実験系とかけ離れている（溶媒効果や計算可能原子数の限界、非平衡系の取り扱いなど）、②過去の Classical と Non-classical Carbonium ion 論争などに照らして実証主義が尊ばれシミュレーション手法が定着していない、などが考えられる。しかし、本質的には計算機化学の工学的なリッミト&スコープが正しく広く認識されず、計算機化学者と実験化学者との交流に欠け両者の認識に乖離があることが最も大きな原因ではなかろうか。

計算機化学は、大きくは理論計算（計算化学）、知識ベース手法と工学的手法とに分かれる。材料は分子の集団として機能するが、計算化学の手法は理想状態において多くとも数十分子を対象とする限界に留まっている。さらに最も大きな課題としてミクロな構造とマクロな機能を統合する新しい理論体系の構築が残されている。特に、計算化学は要素還元主義の立場から構造を演繹的に説明するべく要素のモデル記述に拘る結果、実験化学者の思考体系と大きく異なっている。Woodward-Hoffmann 則や Corey の LAHSA が教えるところは、第一原理から現象を演繹的に解明する立場ではなく、膨大な既知の現象を真摯に受け止め、その体系を第一原理で説明しようとする立場であったはずである。化学のように複雑な物質を扱う学問においては、演繹的に純粋理論の確立を目指すことは計算能力にも依存して遠い道程であり、膨大な化学の経験的実績を前提とすべきである。また、分子シミュレーションや粗視化分子動力学などの理論展開、原子団寄与法、ケモメトリックスなど工学的な手法が開発されているが、残念乍、それぞれの立場から独立に展開されている。また一方で、ネットウェアによる情報の共有化によって知的生産性の革新が予兆されている。ここに種々の化学パラメーターD/B や過去の膨大な書誌 D/B と経験的知識を体系化する知識ベースなどの知的基盤の整備はその手法の検討を含め組織的な取り組みを急ぐ必要がある。

一方、構造を描画するために要素に分割する帰納的立場をとる計算工学の発展は目覚しく、必須の手法となっている。工学は①実験がその規模から費用がかさみ、最適化のために多くの実験をこなすことができない、②時に極限実験を見通す必要がある、などがその発展活用の背景に挙げられる。理論的には数学的モデルが異なり比較することは難しいが、双方に大きなレベルの相違はないと考えられ、寧ろ実践の差が大きい。特にモデルの計算精度を追求する立場はもとより、対象世界を描画する手法として定着していることは参考にすべきである。また、創薬の分野ではリード化学物質が存在し、バイオテクノロジーにおける蛋白工学の分野では対象が相同性の高いことにもよるが、大きな進歩を遂げている。

ここに、望むらくは内挿的最適化手段ではなく外挿的手段として計算機化学が発展することを願うものである。新しい発見、新しい機能物質を提供してきた化学に限界がみられる。化学は原子を情報化（組合わせることで意味化—機能化）する学問であるとも言える。コンビナトリアル　ケミストリーのように、新しい最先端の科学技術を導入して未知の化学物質探索へ挑戦することも必要である。細分化された専門分野の中で論理を展開するだけでは、計算化学者が自ら恐れる Local Optimization に落ち込むのは皮肉な結果と言わざるを得ない。計算機化学発展のためには、物質・エネルギー・情報の相互作用を物理学と化学の基礎に立って追求するという極めて正統的な方法論に加えて、工学的あるいは異分野の発想を交え相互刺激的かつ協調的な取り組みが必要である。その意味で別々の立場で研究されてきた理論が同じプラットフォームで統合され、新しい連成された計算機化学体系の確立を目指すべき好機にあると考えられる。

みの　じゅんりょう　MINO, Junryo
研究テーマ：過去、有機化学を基点としてコロイド・界面化学、情報科学、数理科学と携わってきた経験から、化学を総合科学とする基盤確立に化学技術戦略推進機構の活動を通して微力を捧げている。
連絡先：〒113－5963　東京都墨田区文花 2－1－3　花王株式会社研究開発部門、　Tel:03－5630－9700

２１世紀の情報化学への期待

ＪＳＲ株式会社　研究開発部　丹沢嘉夫

先日、大学生（理系）の息子から、「いよいよ志望学科を決めなければいけないのだが、将来を考えると何が良いか。」と面と向かって聞かれて、はたと考え込んでしまいました。今はやりのコンピュータや情報ソフトの世界は確かに学生にも人気のようですが、一方、ＩＴ技術をはじめとしてこの世界の技術進歩は驚異的で、若い間は良いにしても年をとってから若い人に新しい技術を教えてもらうのは大変だろうなと変な親心が出てしまいます。それに比べて化学という分野はまだまだ知識や経験がものを言う世界ですし、それに、化学を学んで化学系企業で働いている身からしますと、やはり自分の知っている世界に身内を引き込みたいという誘惑にも駆られます。

そこで、やはり化学系を勧めてみようかなと思っていましたら、化学の世界にもいよいよＩＴ技術が到来したことを思い知らされるニュースが目に付きました。医薬品業界では大分前からコンピュータによる構造解析が活用されたり、コンビケミの手法が取り入れられたりしてＩＴ技術の導入では進んでいたのですが、今般世界で初めてコンピュータで設計・開発された薬品が世界各国で承認され、いよいよ日本でも輸入承認されたとのことです。かって新薬開発は化学物質のスクリーニングという経験と体力勝負の世界だったのが、今や病原ウイルスの構造解析を行ってその分子構造を明らかにし、それに対応した新薬を設計するといったＩＴ技術の活用の差が勝敗を分けるようになってきています。

このことは、化学の世界にとっても無縁のことではありません。過去の知識やスクリーニング手法はまだまだ生き残るにせよ、コンピュータを活用した新しい構造解析技術、分子設計技術やコンビケミ手法は次第に化学企業の研究現場にも伝播し、これらの新しい技術をマスターしなければ競争に負けてしまう時代がもうすぐ来るでしょう。コンピュータや情報ソフトの世界よりはスピードは遅いかもしれませんが、化学の世界も遅かれ早かれ大きなＩＴ革命の波に洗われることになると思います。こう考えると、身の安全を願ったとしても結局遅かれ早かれ同じ事になるのならかえって無責任かもしれません。以上のように色々と苦悶した結果、どっちに行っても苦難が待ち受けているのならやはり本人が自分で決めるべきだとの常識的な結論に達しました。

数日たって息子をつかまえて「例のあの件だがなー」と始めたところ、「あー、その件ならもう決めたから。有り難う。」とかわされてしまいました。怒るよりも何よりも唖然としてしまったのですが、結局、親父の時代のスピード感覚ではＩＴ時代の若者との間に大きなコミュニケーションギャップが出来てしまうということでしょうか。

「マイクロファクトリーと情報リテラシー」

昭和電工（株）　佐久間　洋
Hiroshi_Sakuma@sdk.co.jp

21世紀を迎えるにあたり化学産業の研究開発も新たなコンセプトの下で展開すべき時期にあると言える。このような観点から化学産業の研究開発に関して今後の技術革新における情報化学への期待について述べる。

◆ ナノの可能性に挑む

近年生体系の仕組みも分子レベルで明らかにされつつあり、また高分子の分野も原子/分子レベルで高度に構造制御されようとしている。つまり化学の基本である物質を創製/変換する技術は、目的とする機能を積み木のように原子/分子を直接操作して、分子構造のみならず量子制御にも着目した技術へと移行しつつある。すでに97年IBMのチューリッヒ研究所で、フラーレンを使った世界最小の電子増幅器の製作に成功し、さらに原子操作で超微細の構造を持った半導体の開発がなされようとしており、マイクロファクトリーの実現も夢ではない。

したがって目的とする機能を有する化学物質を迅速に予測し設計する技術が、今後はさらに求められるであろう。そのために材料/物質を原子/分子レベルで把握し、機能/性能との関係を理論体系化する上での計算化学、分子と高次構造をつなぐ工学であるナノテクノロジー、STM,AFMなどの機器により原子を自在に操る分析/評価解析とそのシミュレーション技術の進展を期待したい。

◆ 情報リテラシー

化学産業は今後市場を先導する立場をめざしていくので、その研究開発はより市場を先導するスタイルとなることがのぞまれる。したがって、今後化学物質が今まで以上にあらゆる分野で取り扱われること、化学物質の安全性や環境への配慮という点から、化学物質を創製するに当たり研究開発から製造、流通、使用、廃棄、リサイクルの全サイクルを見据えた総合的な対応が必要となる。これらの共通基盤を整備する上で、コンビナトリアルケミストリー、計算化学、化学物質情報などの情報化学技術がきわめて重要となる。

また高度な情報システムの特徴の中で注目すべきことは、時間と空間を超越したバーチャルな世界をも取り扱えることである。企業の中でもプロジェクトごとに人材を組織する柔軟な組織が可能となり、生販一体化の情報システムでは組織の壁がなく、一個の生体のような運営がなされつつある。企業間でも、CALSをさらに発展させていけば、参加企業間で共同開発、共同生産などが可能となり、あたかも1つの企業体として機能する仮想企業の形態が増えていくだろう。

したがって今後企業における研究開発の体系も大きく変化すると考えられ、コンピュータなどの情報技術を使いこなす能力である「コンピュータリテラシー」が重要となる。さらにコンピュータリテラシーを活用して集めた資料や知識に基づいて問題を処理し、正しい判断を下す能力である「情報リテラシー」が不可欠となってきた。つまりこれからの研究開発に携わる人たちは大量の情報から、問題解決や意思決定に必要な情報を選別する能力、取り出した情報に付加価値をつけるための処理、編集加工する能力、さらには情報を必要とする人たちに伝達し説得する能力を磨くことが求められるであろう。

コンピュータができることには限界があり、スケールの問題に対しては多大な貢献をしてきたことは自明であるが、スコープという人間性に根ざした多面的な問題に対しては、まだ貢献し始めたばかりと言える。21世紀を見据えた情報化学は真の知的資本でありたい、すなわち新しい化学の基盤となり今後の化学工業の進展に大いに貢献することを期待する。

21世紀の情報化学への期待

住友化学工業株式会社 常務取締役 大庭成弘

情報の時代と言われつづけて久しいが、この十数年の環境変化をみると誰もが認める事実であろう。小中学生でさえもインターネットで膨大な情報に接することができ、欲しい情報を取り込める時代である。ｅ－ビジネスやインターネットによる技術交換が登場し、ビジネスや仕事の仕方が著しく変化していく。当然のことながら、情報化学もこの十数年かなり注目を浴びるようになった。データベース、情報検索、計算化学、構造活性相関のような今や誰もが活用している分野以外にニューラルネットワーク等の知識情報学、ラボラトリーオートメーション、コンビナトリアルケミストリーがしっかりとその地位を築き、化学会社もこれらの動向に目が離せない。20世紀後半、確かに情報化学は市民権を得た。

このように情報化学は重要との認識は化学や化学工業に携わる者なら誰もが持っているが、それでは情報化学を専門とする科学者達は飛ぶ鳥落とす勢いで研究に没頭できているのであろうか。化学会社では顧客が求める性能を有する製品のスクリーニング研究やその製法研究など商品開発に携わる実践部隊がかなりの数確保されており、彼らの声は大きい。彼らの開発期間は通常情報化学と比較してずいぶん短く、マイルストーンも明確であり、彼らの提案する方針はコンセンサスが得られやすい。他方、情報化学は他社・外部研究機関との共同開発というスタイルをとったとしてもその開発期間は長期にわたり、いつのまにか目標が開発にすりかわっている例もあると聞く。情報化学が実現してくれる究極の効果は誰にとっても非常に魅力的ではあるが、その途中段階で得られる成果は極言すれば大抵は情報化学を利用しなくても到達できるレベル以下ではあるまいか。その結果、「折角努力してこの程度の事しかできないのであれば、このプロジェクト継続に大いに疑問を持たざるをえない。」などと囁かれる。

この時大切な視点は情報化学を武器とする技術が破壊的技術であるか否かの見極めであろう。破壊的技術とは従来の価値基準とは全く異なる価値基準をもたらすものであり、既存の性能指標での製品の性能を高める持続的技術とは異なるものである。破壊的技術は出現当初は主要市場では相手にされないことが多い。しかしながら、破壊的技術には主流からはずれた少数の新しい顧客に評価される特徴があるため、ニッチ市場で受け入れられる。そして、改良がなされていくうちに無用の技術とみなしていた主要市場の顧客の評価基準をも十分満足できるイノベーションになり、最終的には主要市場で幅をきかせてきた持続的技術の代替技術として成長し、リーディングカンパニーを衰退せしめるのである。この破壊的イノベーションのマネジメントの難しさに関しては参考文献を参照されたいが、破壊的技術に遭遇した際、良いマネジメントが企業衰退の一歩であるという著者の警鐘は経営者にとって破壊的技術の真の怖さを思い知らされる。良いマネジメントとは充分な市場調査および技術解析を行なった上で最適の解を見出すわけであるから、主要市場の価値判断から逸脱する破壊的技術に投資しないのは当然の帰結なのだから。

このような観点で情報化学をみてみると破壊的技術としての可能性を秘めているものも少なくないのではなかろうか。今や創薬研究にとってコンビナトリアルケミストリー、ハイスループットスクリーニング、バイオインフォマティクスは必要不可欠の存在になっている。いずれの技術も従来一つずつやっていたものを「大量に迅速に処理する」ことが研究の質的変化をもたらしたものである。創薬研究の最先端にいる研究者の誰がマシーンに合成を任せ、混合物のまま活性を評価したであろうか。また、バイオインフォマティクスは膨大なゲノム情報を創薬研究に活用するための技術であるが、ゲノムプロジェクトが始まった5年ほど前にはインフォマティクス技術の必要性がこれほど急速に高まるとは十分に認識できていなかったと思われる。

企業の研究開発は昨今の経済情勢もあいまってますます重点化の方向にある。このような状況下、長期間の地道な努力を要する情報化学への経営者の理解が必要になってきている。バイオインフォマティクスが夢多きゲノム創薬に不可欠なように21世紀には情報化学の中から次々と破壊的技術が生まれてくることを期待したい。

参考文献　クレイトン・クリステンセン、イノベーションのジレンマ、東京、翔泳社、2000.

おおば しげひろ　OBA, Shigehiro
連絡先　〒104-8260　東京都中央区新川二丁目27番1号

21世紀の情報化学への期待

田辺製薬（株）　常務取締役 研究開発本部長 兼 創薬研究所長
中島昭英

ヒトゲノム解析の進展に伴ってbioinformaticsからもたらされる生物学的情報を、新たな医薬品につなげる化学的情報に変換する方法論は未だ知られていない。これを実現する新たなcheminformaticsの創出を21世紀の情報化学に期待したい。

新しいミレニアムとともに情報化社会が到来したとばかりに、「e-×××」「i-○○○」という言葉で新聞の経済面は大にぎわいである。情報技術（IT; Information Technology）が私たちの生活に浸透することによって新しいビジネスモデルが生み出され、それがまた新しい変化を生み出すという循環が始まっている。

では、製薬企業の競争力の源泉である研究開発において、情報技術は今後どのようなインパクトをもたらすのであろうか？その第一に挙げるべきは、ヒトの全遺伝子を解読するヒトゲノム解析の結果を利用して生命現象や疾病のメカニズムを解明し、それを新たな医薬品の創製につながる「ゲノム創薬」に応用する情報技術、すなわちbioinformaticsであろう。従来、bioinformaticsは遺伝子配列の相同性に基づく分子進化研究や、配列類似遺伝子の機能情報に基づいた機能予測研究に用いられてきた。今後はDNAチップ等の分析技術の発展とあいまって、創薬の標的分子探索や副作用回避等の成功確率を上げることが可能となると期待される。さらに、ヒトのSNPs（Single Nucleotide Polymorphisms）の同定およびその薬剤反応性との相関に関するデータ蓄積が進めば、個人の体質に合わせた「テーラーメード医薬」も現実のものとなるだろう。

一方、製薬企業が社会的責任を果たし、収益をあげるためには、単に疾病のメカニズムを理解するだけではなく、その治療薬を見出さねばならない。蛋白質製剤を主体としたバイオ医薬の占める比重も増加しているが、今後も新しい合成化合物（NCEs; New Chemical Entities）が主たる商品であり続ける可能性が高い。したがって、製薬企業の研究開発においては、bioinformaticsの進展で爆発的に増える生物学的情報を、NCEsにつながる化学的情報に効率よく変換することが要求されるだろう。

NCEsを見出す新しい手法として、combinatorial chemistryとhigh throughput screeningが数年前から一大ブームとなり、それから生み出される膨大な情報を管理するための情報技術をcheminformaticsと呼ぶ例が増えているようだ。しかし、その主たるものはリレーショナルデータベースを用いた構造情報および生物活性情報の管理や、これまで他分野で展開されてきた各種解析手法の構造活性相関への応用である。これらの技術の有用性を否定するつもりは毛頭ないが、いずれも従来技術の延長線上のものである。Bioinformaticsという新しい技術の出現によって創薬に関連する生物学的情報が急激に増加するのに対応して、それをNCEsへ導く新しいcheminformaticsの出現が強く望まれる。

従来のわが国の学界では学問のための学問を希求する傾向が強く、必ずしも産業化につながらないものであった。しかし、現在では状況が一変し、本当に役立つ研究であれば研究者自らがベンチャーを興し、学問的業績と経済的利益の両方を享受できるようになっている。上記のように、真に役立つcheminformaticsに対するニーズは大きく、製薬企業の研究開発トップとしてbioinformaticsとcheminformaticsを創薬研究の両輪とする「e-discovery research」を実現できるような情報技術の創出を、21世紀の情報化学に期待したい。

なかしま しょうえい　NAKASHIMA, Shoei
情報化社会を先取りするため、NTTドコモのi-mode機を発売直後に購入し、休日はSonyのVAIOでデジタルカメラやデジタルビデオの画像を加工して遊んでいます。
連絡先　〒532-8505　大阪市淀川区加島 3-16-89　田辺製薬（株）研究開発本部

企業の研究トップが期待する２１世紀の情報化学

（株）日本触媒　常務取締役　研究開発本部長　佐野禎則

2000年を迎えた我が国の産業界は、全般的には依然厳しい状況にあるが、グローバル化の時代を迎え、日本の企業も世界を相手にしなくてはならない。化学業界においても欧米大手企業は戦略の１つとして、世界のプライスリーダーなるため、豊富な資本とそのスケールの大きさを利用して合併、買収を進めている。日本の企業の進むべき道は、高付加価値化を目指すことであり、そのためには欧米大手企業と競争できる高い技術力、情報力やビジネスチャンスを生かすスピードが必要とされる。18世紀における産業革命において、人間は蒸気機関などの動力を手に入れ、人力に代わり大いに生産性を向上させた。今世紀終盤の、インターネットなどネットワークの活用によるIT革命は、その産業革命と比較される。中でもコンピュータの果した役割は大きく、人の行っていた作業の驚異的なスピード化を実現させた。現在ではその活用を怠れば、他社との競争に負けるほどの必需品となっている。コンピュータに求められるものは、情報などの処理の超高速化である。企業はその処理によって得た結果をもとに判断する。情報化学は、コンピュータを幅広く化学に活用する分野であり、研究開発のスピード化に貢献しているが、21世紀を迎えるにあたり以下の３点を期待したい。

１）計算化学による解析の活用

研究開発において、最も人手のかかるのは実験であるが、その試行錯誤を出来るだけ減らせることが研究のスピード化につながる。そのため、理論的裏付けに基づく、実験の正しい方向付けが求められる。コンピュータケミストリーの分野では、このような研究課題に対する解決方法の提案が最も期待される。研究者が望むレベルでの答えを出すための、計算が速く、精度よいツールの充実が望まれる。

２）コンビナトリアルケミストリーの活用

研究ではあるアイデアに沿って材料を合成し、一定の方法で評価する、という実験のプロセスの省力化が最も望まれている。そこで、製薬関係では既に役立っているコンビナトリアルケミストリーが触媒、高分子など一般の化学の分野でも使用できるようなシステムの開発が期待される。即ち、実験による確認を同時に多数処理出来れば、研究開発のスピード化と省力化の効果は大きい。あまりオープンにされないので実体はつかみにくいが、米国などでは、ベンチャー企業と大手化学会社とが共同開発を行い、大きな成果を出していると聞いている。日本でもこの流れにのった開発が必要であろう。

またこの手法は、自動的に実験をし評価するとういう面をとらえれば、自動合成の一部とも考えられ、ラボレベルにおける実験のスケールアップの省力化にも応用できると期待される。

３）化学情報の戦略的活用

これらにはデータベースや検索システム、AIやニューラルネットなどが重要な関係にある。企業においては、戦略を練るため過去のデータを解析するが、その時の経営的判断のスピード化が求められる。人間だけで過去のデータ解析を行っていると非常に時間がかかる。それをコンピュータ処理することにより体系的に整理でき、それらの機能の充実が経営判断のスピード化や正確さに貢献できると期待される。

今まで述べた１）、２）、３）は、何れもそれぞれの専門分野で開発されているが、将来的にはこれら３つのシステムが統合され、一つの流れとなり研究開発の必須ツールとなることを期待している。

さの　よしのり　　SANO,Yoshinori
連絡先　　大阪市中央区高麗橋4丁目1番1号（興銀ビル）　株式会社　日本触媒

２１世紀の情報化学にかける期待

日本ゼオン総合開発センター　渡辺浩志
hiroyuki@zeon.co.jp

1　はじめに

21 世紀には「地球環境問題」、「エネルギー資源の枯渇」、「人口増加と食糧問題」、日本の場合は「少子高齢化問題」といった問題がいよいよ深刻化すると予想される。一方、産業界では 21 世紀における生き残りを掛け、事業の再構築を目指した提携、合併、買収がより一層活発化すると考えられ、各企業ともコンピューターを活用した企業活動の変革、例えば意思決定の効率化、ネット経済への移行などといった IT 革命を推進するものと思われる。

研究部門においても、企業活動全体のスピードアップに遅れをとるわけにはいかず、一層の効率化が要求されてくる。本稿では、当社において研究活動の効率化にむけて取り組んでいる活動を紹介したい。

2　実験の自動化

研究所の活動において、物性評価をはじめとしてデータ採取から解析・記録・報告までの全過程において、未だに手作業の操作が多くある。当社では、各過程の精度向上及び効率向上を目指して、自動化を進めることにより手作業をゼロにするプロジェクトを開始した。また、医薬業界において実験方法を全く変えたと言われる HTS (High Throughput Screening)、コンビナトリアルケミストリー的手法も積極的に取り込むことにより、開発期間の短縮を図ると同時に、従来期間という制約のもと限られたデータの中での最適解であったものを、その制約を外すことによって、解の質の向上にもつなげたいと考えている。

3　情報の共有化

紙で書かれた研究報告書、技術情報等は、知りたいときにその情報が探せないため言わば情報が私蔵（死蔵）された状態である。また、定形フォームにデータを入力するといった従来型のデータベースでは、データの背景や失敗データ等は蓄積されない。情報を生きた“使えるもの”とするために、二次作業無しで自然に情報が蓄積でき、かつあるがままのデータにタイムリーにアクセスできるような柔軟なシステムを当社研究情報システムとして再構築中である。

4　シミュレーション

研究開発の効率化の１つの方向性として自動化により速く数多くの実験を行うということもあるが、もう一つに経験や勘、偶然に頼るのではなくサイエンスに立脚した設計、開発を行うという方向がある。現象を理解するうえでは、分析技術の進歩も欠かせないが、同時にミクロからマクロまで目にみえない現象をシミュレーションにより“観測”することも有効な手段となろう。今後ますますの計算能力の向上、理論、ソフトウエアの発展により計算化学、CAE あるいはメソスケールのシミュレーションが実践的に活用される場が増えると考えられる。

5　おわりに

研究活動の効率化という面から情報化学への期待について述べた。21 世紀には今からでは想像も付かないような研究所となっていくかもしれない。しかし、実験や計算はロボットやコンピューターがやってくれるようになるかもしれないが、考えるのはヒトであることに変りはないであろう。ただ、たくさんの実験データ、過去のデータ、シミュレーション結果等の情報を相補的に活用し、さらに円滑なコミュニケーションにより知を結集することによって、答えに行き付くまでの時間は大幅に短縮されることになろう。21 世紀に予想される様々な問題を克服し、人類が繁栄するための技術を開発するには、情報化学はなくてはならないものである。

わたなべ　ひろゆき　WATANABE, Hiroyuki
1968年九州大学工学部修士課程修了。同年日本ゼオン（株）入社。以来一貫してタイヤ用ゴムの開発に従事。1987年「高ビニルポリブタジエンの開発と工業化」で高分子学会賞。1989年「分子末端変性ゴムの開発」で日本化学会賞。1996年より総合開発センター所長現在に至る。
連絡先　〒210-8507 神奈川県川崎市川崎区夜光 1-2-1 日本ゼオン総合開発センター　044-276-3725

２１世紀の情報化学への期待

三井化学（株） 専務取締役 研究開発本部長　　高瀬 勉

我々を取り巻く「情報」を、大きく二つに分けて考えてみたい。一つは、インフォメーションの意味での「情報」であり、もう一方は、諸々の自然現象の観測から得られるものであり、それを「状報」と定義してみる。

「情報」は、分散化しているものを帰納的に体系化し、情報技術（ＩＴ）の利用によりソフト化することで、共有化出来るものである。

一方、「状報」は、電子・原子のようなミクロな視点から演繹的に解析し、理論化し、体系化することが必要である。

この情報の体系化には、「知織」、即ち、知を織りなすことが必要であり、共有化するためには、「組識化する」、即ち、Knowledge を組込んで行くことが重要である。こうして共有化出来た「情報」が始めて「創造」へ循環出来るのである。

ＩＴ革新が社会生活における時間、空間に大きな変化をもたらしている現在、企業活動においてもＩＴを如何に活用して行くかが重要な課題となっている。企業の次代を担う新製品の研究開発においても、複雑化する社会の要求を受け、高機能高性能な材料・製品を如何に速く効率的に開発するかが問われており、急激に進展してきたコンピュータ技術の活用なくしては、対応できないと言っても過言ではあるまい。

２１世紀は正に循環型社会である。あらゆる情報・知識が one-way で指数関数的に増加拡大し分散化している現在、これらを如何に集約し体系化し、如何に循環型の情報へ変換させることが求められている。これを実現できる技術が正にＩＴである。これを実現できなければ、人類の将来は危いものとなろう。

さて、化学におけるこれらの「情報」を扱う情報化学の技術革新には近年目覚しいものがあるが、未だ発展が十分とは言えず、実用には困難なアイテムもあり、新たな理論の構築やシステムの開発を積極的に進める必要がある。その際、産官学の協力が不可欠となる。科学技術振興事業団で平成７年度から進められている「高機能基盤データベース開発事業」や、一昨年、名古屋大学の土井正男教授をプロジェクトリーダーとしてスタートした「高機能材料設計プラットフォームの研究開発」などがその好例であり、現在、着実に成果が挙がりつつあることは喜ばしい限りである。この土井プロジェクトを担っている「化学戦略推進機構」は、産において複合体系化された技術を如何に学へ循環し、産学の目標、目的を一元化するかが大きな役割の一つである。今後、このような産官学の連携により様々な化学技術の基盤が構築されていくことを期待している。

２１世紀に於ける化学技術者には、高度の専門性と幅広い判断力を持つ総合性の両者を兼ね備えることが求められている。化学を取り巻く理論・計算技術の発展、更に、ハードウェアやネットワーク環境の急激な進歩が、今後、多くの化学技術者に、これらのシステムを容易に利用できる環境を提供してくれ、専門性と総合性を発揮する上でコンピュータ技術を最大限に活用することは不可欠になろう。

化学技術・化学産業は、これまで以上に地球環境と人類に対する安全性、信頼性を確保することが必要不可欠であり、今後存続できる化学産業はこれを使命として行動できる企業のみである。限られた地球資源を無駄に費やすことなく、諸問題を解決しながら、有用な物質を創生できる唯一の手段である化学技術を効果的に駆使し、人類と社会の発展に貢献することが肝要である。今後、当該分野技術の革新が、これを加速することを期待する。

化学企業における触媒開発と触媒反応シミュレーション

住友化学工業(株) 筑波研究所　志賀昭信　shiga@tuc.sumitomo-chem.co.jp

1 緒言

人類の活動は化学反応によって営まれており、化学反応は触媒によって司られている。触媒は人類社会の持続的発展、エネルギー、地球・生活環境問題解決のキーテクノロジーである。それゆえ触媒開発は多くの産業にとって重要な関心事であるが、ここでは化学企業の立場から触媒開発のための触媒反応シミュレーションについて述べる。

2 触媒の分類

化学企業とは化学式で表現された設計図に基づいて化学反応を用いて有用化学品の製造を行う企業である、が故に殆ど全ての化学企業は何らかの意味で触媒と関わりを有する。 しかし製造する化学品の種類によって製造の際に触媒のはたす役割、重要度は異なる。 其処でまず化学品を (i) バルクケミカルズ、(ii) ポリマー、(iii) ファイン&スペシャリティケミカルズに分類し、それぞれの触媒に対する要求を整理しておく。

i) バルクケミカルズ

大量生産のため反応系は気相または液相、プロセスは連続、コンパクトな設備で高い STY(空時収率)を達成するべく触媒には高温高活性が、また分離、回収工程の簡素化、省略のために高選択性が、さらにプロセスの運転は年の単位で続けられるので触媒の寿命はそれに見合ったもので且つ再生の容易なことが求められる。触媒費は固定費用である。

ii) ポリマー

汎用ポリマーは大量生産のため触媒に対してはバルクケミカルズの場合と同様の要求がなされる。重合系は気相、バルク液相、溶媒スラリー、バルク溶融、溶液と多彩ゆえ触媒使用温度に注意が必要である。最も重要なことはポリマーの品質、物性を満たすことであるから、触媒には高活性は当然として、位置・立体選択性、分子量とその分布、共重合性などの制御が求められる。 触媒費は変動費用である。

iii) ファイン・スペシャルティケミカルズ

製造プロセスは少量多品種生産、多段階反応、バッチ操作となり一般に環境負荷も大きい。触媒には高収率(位置・立体・不斉選択性)はもちろん、合成経路短縮のためにいわゆるワンポット反応の達成が求められる。溶媒、副生物、触媒の分離、回収、廃棄工程の簡素化という視点はやはり重要である。 触媒費は変動費用である。

一方触媒そのものは便宜上形態で分類されている。即ち固体触媒(不均一系触媒)、分子触媒(均一系触媒)、酵素である。生産する化学品と使用する触媒の形態にはおのずと対応が有る。その意味を吟味しておくことは重要である。

3 触媒設計

触媒設計という言葉が使われて 20 年になる。[1] その間の計算化学の進歩は瞠目するばかりである。触媒シミュレータを駆使して触媒設計を行い化学式で描かれた触媒の設計図に基づいて化学品を生産する、そんな時代になっている…いやなっている筈である…現実はどうか…。 触媒設計は一連の長い手順を踏んだシステム設計である。全要素個々のレベルとシステムの出力(設計図)の精度のバランスが肝要である。シミュレータはアラジンの魔法のランプではない。徒にシミュレータの性能だけを俎上に載せて“合う”“合わない”“使える”“使えない”の不毛の議論に陥ってはなら無い。 シミュレータのユーザーは実験化学者である。使い易いシミュレータに改訂して行くのにユーザーの視点は欠かせない。もとより筆者は多様、多彩な触媒全般について論じる力量は持ちあわせていない。ここでは比較的周囲の様子を知っている触媒（キーワードは重合/不均一/均一/錯体/酵素模倣）を題材としてユーザーの立場から触媒反応シミュレーションの抱える課題について述べる。

4 触媒反応過程：触媒反応機構

4.1 物理的過程と化学的過程

触媒反応は原料物質の輸送・拡散、触媒への吸着、反応、生成物の触媒からの脱離、拡散・輸送の過程から成っており、各過程に熱の出入りが伴っている。輸送・拡散・伝熱・移動といった物理的過程の重要性を看過すること無く意識した上で吸着、反応といった化学的過程へと進む。

4.2 全触媒反応サイクル

反応は主反応だけが起こるのではない、必ず副反応を伴う。それぞれの反応毎に触媒反応サイクルが成立している。この素反応を可能な限り漏れなく枚挙して全触媒反応サイクルに纏め上げる。速度論的研究による反応次数、律速段階の知見が基礎になる。

4.3 素反応経路

各素反応について分子レベルで素反応経路を決定する。この段階から計算化学的手法が前面に出てくる。活性サイト、反応物、のモデリングであり、始原系、反応中間体、遷移状態、生成系の決定であり、極限反応経路の決定である。各種 MO、特に ab initio MO が活躍する。最近は第一原理 MD も登場するようになった。

4.4 MO 計算結果を反応の理解と活性予測へ：軌道相互作用理論

系の最適三次元構造が決まり、分子軌道と軌道エネルギーが求まった…此処からが肝心である。計算化学の言葉を実験化学の言葉に翻訳しユーザーに理解し、役立てて貰わねばならない。最も直裁的なのは遷移状態を決めて活性化エネルギーを求め反応速度を比較して活性、選択性を予測する方法である。解釈に議論の余地が無い点が長所と同時に短所である。構造とエネルギーから活性化エネルギーが与えられてもなぜ反応が進行するのかという本質的な問題の答えが殆ど得られないからである。更に現実的な問題をあげれば遷移状態を決めるにはやはり大きな費用と時間が掛かることである。

反応の理解には軌道概念が有用である。藤本らは反応に際して分子は電子の授受を行う反応のための軌道を相互に生み出すことを軌道理論に基づいて明らかにし、"Paired Interacting Orbitals" (PIO)を用いる反応の解析法 [2] として、また一連の分子が特定の相手分子との間でこの反応軌道を通じて電子の授受を行う際の定量的な難易度を比較する方法 "Localized Frontier Orbital Calculation" (LFO 計算) 提唱した。[3] 我々はこの手法を Ziegler-Natta 触媒によるオレフィン重合反応機構の解析に適用し、有用な知見を得た。MO 計算には拡張ヒュッケル法を用いるので結果が非常に短時間に得られ、ハードはパソコンなので実験室の傍らでも容易に使えるのが最大の特徴である、以下に紹介する。

5 PIO を用いる Ziegler-Natta オレフィン重合の解析 [4]

5.1 実験による重合作用機構研究の要約

速度論的、分光学的、結晶学的、形態学的、ポリマーのミクロ構造論的といった多面的な研究の結果、重合作用機構は次のように要約することができる。固体表面上の Ti - Cl 結合がアルキルアルミによってアルキル化されたアルキルチタンが活性サイトであり、成長反応は Cossee 機構で進行し、分子量はβ-水素引き抜き、モノマー、アルキルアルミ、水素等の連鎖移動剤への連鎖移動によって決まる、三塩化チタン触媒では活性サイトは三塩化チタン結晶(001)面のエッジ上に存在する。Fig. 1 に全重合サイクルを Fig. 2 に三塩化チタン結晶表面上の活性サイトを模式的に示した。

(Fig. 1)　　(Fig. 2)

5.2 Cossee 機構の分子レベルでの記述

栗林らは$[CH_3TiCl_2]^+$錯体におけるオレフィンの挿入反応が Cossee 機構で進行することを初めて分子レベルで明らかにした。[5] メチル錯体、オレフィン配位状態、遷移状態、γ-、β-水素アゴスチックプロピル錯体の三次元構造とエネルギーが決定され、遷移状態の Cs 対称からのずれ、電子相関の影響、プロピレン挿入における位置、立体選択性の問題がエネルギー面から解明された。

次は活性サイトの設計、即ち、金属種、原子価、配位子の種類と数をどのように選べば副反応を抑えて収率向上が図れるかを予測することである。活性サイトの設計には反応の本質の理解とその定量的表現が必要である。

5.3 活性サイトモデル

Fig. 3 は三塩化チタン結晶(001)面のエッジから切り出した $CH_3Ti_{16}Cl_{47}$ クラスターである。 ここから O_h-$d^1[CH_3Ti_nCl_{3n-1}]$: (n = 4,6,8)クラスターを不均一系 Natta 触媒の活性サイトモデルとして、T_d-d^0,-$d^1[CH_3TiCp_2]^m$: (m = 1,0)を均一系メタロセン触媒のそれとして選び、そのエチレン配位状態を PIO 解析した。モデルの構造の Ti - CH3、…エチレン 部分には ab initio 計算結果を用い[5]、リガンド部分は結晶データを利用した。それらモデルを Fig. 4 に示した。

(Fig. 3) (Fig. 4)

5.4 PIO、LFO の計算方法

PIO、LFO は藤本らの方法に基づいて計算は LUMMOX™ で行った。[6] 分子軌道計算は拡張ヒュッケル法を用いた。 PIO の計算手順を略記する。

i) モデル(合体系 C)を Fig. 5 に示すように Fragment A と Fragment B に分割し、C、A 及び B の分子軌道を求める。

(Fig. 5)

ii) (1)式によって C の分子軌道を A 及び B の分子軌道（被占軌道群と空軌道群）を用いて展開する。

$$\Phi_f = \sum_{i=1}^{m} c_{i,f}\phi_i + \sum_{j=1}^{M-m} c_{m+j,f}\phi_{m+j} + \sum_{k=1}^{n} d_{k,f}\psi_k + \sum_{l=1}^{N-n} d_{n+l,f}\psi_{n+l}, \qquad (1)$$

$$f = 1,2,\ldots,m+n,$$

iii) (2)式で定義される相互作用表現行列 : P をつくる。

$$P = \begin{pmatrix} p_{i,k} & p_{i,n+l} \\ p_{m+j,k} & p_{m+j,n+l} \end{pmatrix} \qquad (2)$$

ここで

$$p_{i,k} = n_{t,u}\sum_{f=1}^{m+n} c_{i,f}d_{k,f} \qquad i=1\sim m, k=1\sim n$$

$$p_{i,n+l} = n_{t,u}\sum_{f=1}^{m+n} c_{i,f}d_{n+l,f} \qquad i=1\sim m, l=1\sim N-n$$

$$p_{m+j,k} = n_{t,u}\sum_{f=1}^{m+n} c_{m+j,f}d_{k,f} \qquad j=1\sim M-m, k=1\sim n$$

$$p_{m+j,n+l} = n_{t,u}\sum_{f=1}^{m+n} c_{m+j,f}d_{n+l,f} \qquad j=1\sim M-m, l=1\sim N-n$$

iv) (3)、(4)式で変換行列 U^A(for A)と U^B(for B) を求める。

$$\tilde{P}PU^A = U^A\Gamma \qquad (3)$$

$$U^B{}_{s,v} = (\gamma_v)^{-1/2}\sum_{r}^{N} p_{r,s}U^A{}_{r,v} \qquad v = 1,2,\ldots,N \qquad (4),$$

v) (5)、(6)式で PIO を求める。

$$\phi'_v = \sum_{r}^{N} U^A{}_{r,v}\phi_r \qquad (\text{for A}) \qquad (5)$$

$$\psi'_v = \sum_s^N U^B_{s,v}\psi_s \qquad (\text{for B}) \qquad (6).$$

これで 合体系Cに存在するN×M (N≦M) 個の軌道相互作用がN組の相互作用軌道対 で表現される。

5.5 LFO の計算手順

i) PIO 解析結果に基づいて Fragment A、Fragment B それぞれの空軌道空間対応反応軌道 ;(δ_r)$_{Aunocc}$、(δ_r)$_{Bunocc}$ 及び充填軌道空間対応反応軌道(δ_r)$_{Aocc}$、(δ_r)$_{Bocc}$ を(7)式で決定する。

$$\delta_r = \sum_i^{occ} d_{i,r}\phi_i + \sum_j^{unocc} d_{j,r}\phi_j \qquad (7).$$

ii) (8)、(9)、(10)、(11)式で LFO エネルギーλ_{Aocc}、λ_{Aunocc}、λ_{Bocc}、λ_{Bunocc} を計算する。λ_{Aocc} 及びλ_{Aunocc}はそれぞれ活性サイトの電子供与能及び電子受容能をλ_{Bocc}及びλ_{Bunocc}はそれぞれオレフィンの電子供与能及び電子受容能を示す。

$$\phi_{occ}(\delta_r) = \left(\sum_i^{occ} d_{i,r}\phi_i\right) \Big/ \left(\sum_i^{occ} d^2_{i,r}\right)^{1/2} \qquad (8),$$

$$\phi_{unocc}(\delta_r) = \left(\sum_j^{unocc} d_{j,r}\phi_j\right) \Big/ \left(\sum_j^{unocc} d^2_{j,r}\right)^{1/2} \qquad (9).$$

$$\lambda_{occ}(\delta_r) = \left(\sum_i^{occ} d^2_{i,r}\varepsilon_i\right) \Big/ \left(\sum_i^{occ} d^2_{j,r}\right) \qquad (10),$$

$$\lambda_{unocc}(\delta_r) = \left(\sum_j^{unocc} d^2_{j,r}\varepsilon_j\right) \Big/ \left(\sum_j^{unocc} d^2_{j,r}\right) \qquad (11)$$

iii)(12)式で (RI) を求める。

$$RI = 1/(\lambda_{Aunocc} - \lambda_{Bocc}) + 1/(\lambda_{Bunocc} - \lambda_{Aocc}) \qquad (12)$$

5.5 PIO 解析結果

Table 1 に各モデルの PIO の固有値を示す。固有値は PIO-3 以降急激に小さくなっている。したがって触媒錯体とエチレン間の主たる相互作用は PIO-1 と PIO-2 で表現されていることが判る。Table 2 は各モデルの PIO-1 及び PIO-2 の LCAO 表示である。 Fig. 6 の等高線図によって PIO-1 と PIO-2 を視覚的に捉えることができる。

(Table 1) (Table 2) (Fig. 6)

i) O_h-d^1[$CH_3Ti_nCl_{3n-1}$] / C_2H_4 系

Table 2 をみると PIO-1 は触媒錯体の充填 Ti d(t_{2g})からエチレンのπ*軌道への電子の非局在化(back donation)を現わしており、PIO-2 はエチレンのπ軌道から錯体の空の Ti d(e_g)軌道への電子の非局在化(donation)とエチレン充填軌道とリガンドの充填 Cl p 軌道との重なり反発を現わしていることが判る。モデル(1)の PIO-1 と PIO-2 の等高線図を Fig. 6(a)に示した。軌道相互作用の様子が容易に見て取れる。PIO-1 でメチル C*とエチレン C $_\beta$間にも引力的相互作用のある事が判る。

ii) T_d-d^0[CH_3TiCp_2]$^+$ / C_2H_4 系

PIO-1 はエチレンπ軌道から錯体の空の Ti d(e_g)軌道への電子の非局在化(donation)であり、PIO-2 は錯体の充填 Ti d(e_g)とメチル C* p 軌道からエチレンπ*軌道への電子の非局在化(back donation)である。Fig. 6(b)を参照。

iii) T_d-d^1[CH_3TiCp_2] / C_2H_4 系

α spin 部分

PIO-1 は錯体からの back donation、PIO-2 はエチレンからの donation である。 Fig. 6(c)を参照。

β spin 部分

ii)項の d^0 錯体とほぼ同じである。即ち PIO-1 はエチレンからの donation、PIO-2 は錯体からの back donation である。

以上 PIO 解析によりエチレンの成長反応においては錯体とエチレン間の電子の donation 及び back donation が重要なことが解った。前者は錯体の電子受容能にまた後者は錯体の電子供与能に依存する。次に LFO 計算によって電子受容能と電子供与能を定量的に算出し反応性指数(RI)によって活性予測を行う。

5.6 LFO 計算と反応性指数(RI)

各モデル系の PIO-1、PIO-2 を反応軌道としてそれぞれの錯体充填軌道空間対応、空軌道空間対応、エチレン充填軌道空間対応、空軌道空間対応反応軌道エネルギー λ を算出し反応性指数(RI)を求める。結果を Table 3 に纏めて示した。

(Table 3)

モデル(1)、(2)、(3)、(4)ではいずれの場合も電子供与能(nucleophilicity)が電子受容能(electrophilicity)に比べてはるかに大きい。RI は主として電子供与能で決まっている。RI はモデル(1)、(2)、(3)、(4)ともにほぼ等しい。 従って三塩化チタン結晶表面上の活性サイトモデルとしてはチタン原子四個のクラスターを考えれば充分と云えよう。 さて T_d-d^0(5)では電子供与能と電子受容能がほぼ見合っている、RI は O_h-d^1 錯体の場合よりやや小さい。一方 T_d-d^1(5)では α spin 部分で電子供与能が受容能より大きくなっておりその結果 RI は d^0 体より大きい。 RI で活性を比較すると O_h-d^1(1)~(4) $\fallingdotseq$ T_d-d^1(5) $>$ T_d-d^0(5)となる。 O_h 体より T_d 体の方が電子供与能と電子受容能のバランスがとれている。

5.7 触媒錯体の形状と活性

錯体のオレフィンに対する電子供与能とオレフィンからの電子受容能によって成長反応活性が支配されることが解った。錯体の形状によって活性はどうなるだろうか？ Fig. 7 に各種 $d^0[CH_3TiL_n]^{3-n}$ モデル錯体を示した。(9)、(11)はメタロセン錯体、(8)、(10)はそれぞれ T_d-体、O_h-体の、その他は配位子の位置の影響を調べるモデルである。Table 4 にモデル錯体の λ_{unocc} λ_{occ} とエチレン成長反応性指数(RI)を示す。エチレン反応性は (1) > (5) > (3) > (8) > (11) > (7) > (9) > (4) > (2) > (6) > (10) となり反応面外にある配位子は反応を妨げないこと、エチレンに対してトランス位にある配位子はトランス効果により錯体の電子受容能を低下させること、Cl- より CO の方が反応に好結果を与えること、チタノセンより架橋ジルコノセンの方が活性が大きいこと等 の判定を定量的に下すことができる。

(Fig. 7) (Table 4)

7 触媒反応シミュレータに望むもの

触媒開発に王道はない。道無き未踏の地をそろそろと探りながら進めるものである。開発の指針を決め、開発の段取りをする手段として触媒反応シミュレータに期待するもの大である。しかし無責任な期待は禁物である。シミュレーションのコスト／精度／扱える系の原子数は相互にトレードオフの関係にある。コスト／パフォーマンスを秤に掛けるのはユーザーである。無い物ねだりをしても始まらない、工夫が要る。シミュレータはユーザーが目的に応じて自分で組み立てるものであろう。シミュレータは入力、計算、解析、データ管理、出力、及びシステム全体管理の各部分で構成されるのが一般である。しからば各部の部品（モジュール）は揃っているか、マーケットで入手できるか、寄せ集めをつなぎあわせることは可能か、そのための手直しはできるか、… 浅学ゆえの偏見もユーザーの立場という免罪符でお許し頂いて現状についての感想を思いつくままに述べる。

i) 計算モジュール：低レベルから高レベルまで各種 MO が揃っているし、さらに高度なものの開発も進められている。交換可能な部品としての仕上げと同時にネット環境下動作への対応を望む。さて反応は有限温度で進行する。第一原理 MD は本来反応シミュレーションにふさわしい、部品としての開発が待たれる。

ii) 解析モジュール：反応がなぜ進むのかを理解してこそシミュレーションにも血が通い、開発指針としての信用も得られる。反応論自体がもっと盛んになる必要があるのではないか？軌道論に基づいた反応論のモジュール化を期待する。

iii) 入、出力モジュール：ユーザーにとっては最も重要なモジュールである。ことはここに始まってここに

終わる。反応は分子同志が接近し、双方特定の部位の複数の原子が反応平面を形成し、その平面内で原子間の旧い結合が切れて新しい結合が生成する過程である。この反応平面と自分の視点の相対位置を知らなければ反応を視覚的に追跡する事はできない。モデリングのみならず、反応平面を指定しての分子のマニピュレーションの操作性が重要な所以である。

iv) データ管理、システムの全体管理プラットフォーム：シミュレータの部品の交換がどれだけ平易にできるかがポイント。同時にネット環境下にある外部シミュレータとの共同作業性はどうかもあるがあまり広げすぎると収集がつかなくなる恐れもある。

v) 市販ソフト： 汎用を謳うあまり無駄な部分が多すぎる、他社の部品との交換困難である、そもそもユーザーが手直しして使う事は考えられていないのではないか？

最後にソフトウェアの著作権について、考え出すときりがないが少なくともオリジナリティのある部分、他者の開発によるが使用許可を得ている部分、公知の事実とみなして良い部分等の出所進退を明確にして説明できるようにしておく必要がある。今日のユーザーは明日のメーカーとなる事もあるのだから。

8 おわりに

ab initio 計算による触媒サイクルの反応経路決定は今後ますます普及するだろう。精密な計算結果からできるだけ多くの情報を引き出して反応の理解と反応性の予測をすること、そのために軌道相互作用理論が非常に有用な事の一端を紹介した。軌道論がもっともっと触媒開発の現場で使われることを願って止まない。

文献

1) a)化学工学の進歩 15「触媒設計」化学工学協会編；槙書店 (1981)
b)化学総説 NO.34「触媒設計」；日本化学会 (1982)

2) a) H. Fujimoto, N. Koga and K. Fukui, J. Am. Chem. Soc., **103**, 7452 (1981)
b) H. Fujimoto, N. Koga and I. Hataue, J. Phys. Chem., **88**, 3539 (1984)
c) H. Fujimoto, T. Yamasaki, H. Mizutani and N. Koga, J. Am. Chem. Soc., **107**, 6157 (1985)
d) H. Fujimoto, Acc. Chem. Res., **20**, 448 (1987)

3) a) H. Fujimoto, K. Hatakeyama, S. Kawasaki and T.Sasaki, J. Chem. Soc.,*PerkinTrans.* **2**, 989 (1991)
b) K. Omoto, Y. Sawada and H. Fujimoto, J. Am. Chem. Soc., 118, 1750 (1996)

4) a) A. Shiga, J. Macromol. Sci. *PURE APPL. CHEM.*, **A34**(10), 1867 (1997)
b) A. Shiga and M. Kubota, Catalysis Letters, **48**, 89 (1997)
c) A. Shiga, J. Molecular Cat. A: Chemical 146, 325 (1999)

5) H. Kawamura-Kuribayashi, N. Koga and K. Morokuma, J. Am. Chem. Soc., **114**, 2359 (1992)

6) LUMMOX™, SUMITOMO CHEMICAL Co., Ltd.

Table 1 Eigenvalues of PIOs of the ethylene coordinated state of the model systems

model system	PIO-1	PIO-2	PIO-3	PIO-4	PIO-5	PIO-6	...	PIO-12
O_h-d^1(1)/C_2H_4	0.469	0.159	0.067	0.050	0.037	0.017	...	0.000
O_h-d^1(2)/C_2H_4	0.523	0.155	0.066	0.049	0.039	0.017	...	0.000
O_h-d^1(3)/C_2H_4	0.599	0.155	0.066	0.051	0.039	0.017	...	0.000
O_h-d^1(4)/C_2H_4	0.635	0.157	0.066	0.051	0.041	0.017	...	0.000
T_d-d^0(5)/C_2H_4	0.194	0.130	0.051	0.031	0.018	0.013	...	0.000
T_d-d^1(5)/C_2H_4 ; α spin	0.172	0.046	0.013	0.011	0.006	0.004	...	0.000
β spin	0.049	0.033	0.013	0.008	0.005	0.003	...	0.000

Table 2 LCAO representation of PIO-1 and PIO-2 of the ethylene coordinated state of the model systems [a)]

PIO-1

O_h-d^1(1)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_1 = -0.21^5Tid_{xy} + 0.58^5Tid_{xz} + 0.24^{10}Tid_{xy} - 0.40^{10}Tid_{xz} - 0.41^{14}Tid_{yz} - 0.28^{17}Tid_{xz} + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_1 = 0.81C_{\alpha}p_x - 0.80C_{\beta}p_x + \ldots,$

O_h-d^1(2)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_1 = 0.61^5Tid_{xz} + 0.24^{10}Tid_{xy} - 0.48^{10}Tid_{xz} + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_1 = 0.81C_{\alpha}p_x - 0.80C_{\beta}p_x + \ldots,$

O_h-d^1(3)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_1 = -0.21^5Tid_{xy} + 0.66^5Tid_{xz} + 0.24^{10}Tid_{xy} - 0.41^{10}Tidxz - 0.24^{21}Tid_{xz} - 0.20^{28}Tid_{xy} + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_1 = 0.81C_{\alpha}p_x - 0.81C_{\beta}p_x + \ldots,$

O_h-d^1(4)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_1 = 0.71^5Tid_{xz} + 0.28^{10}Tid_{xy} - 0.35^{10}Tid_{xz} - 0.24^{14}Tid_{yz} + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_1 = 0.82C_{\alpha}p_x - 0.81C_{\beta}p_x + \ldots,$

T_d-d^0(5)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_1 = -0.74^5Tid_{x2-y2} + 0.38^5Tid_{z2} + 0.22^5Tid_{xz} + 0.21^7Cp_x + 0.21^{16}Cp_y - 0.29^{18}Cp_y + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_1 = 0.78C_{\alpha}p_x + 0.44C_{\beta}p_x + \ldots,$

T_d-d^1(5)/C_2H_4 ; α spin , catalyst part $\phi'_1 = -0.22^1Cp_x - 0.21^5Tid_{z2} + 0.88^5Tid_{xz} + 0.23^6Cp_y + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_1 = 0.80C_{\alpha}p_x - 0.82C_{\beta}p_x + \ldots,$

β spin , almost the same values as those of the T_d-d^0(5) model system

PIO-2

O_h-d^1(1)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_2 = -0.47^5Tid_{x2-y2} + 0.35^5Tid_{z2} + 0.29^6Cls + 0.54^6Clp_x + 0.23^8Clp_x + 0.34^9Clp_x + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_2 = -0.20C_{\alpha}s + 0.50C_{\alpha}p_x + 0.52C_{\beta}p_x - 0.20^{10}Hs + \ldots,$

O_h-d^1(2)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_2 = -0.45^5Tid_{x2-y2} + 0.34^5Tid_{z2} + 0.31^6Cls + 0.53^6Clpx + 0.22^8Clp_x + 0.36^9Clp_x + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_2 = -0.21C_{\alpha}s + 0.48C_{\alpha}p_x + 0.51C_{\beta}p_x - 0.21^{10}Hs + \ldots,$

O_h-d^1(3)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_2 = -0.45^5Tid_{x2-y2} + 0.34^5Tid_{z2} + 0.31^6Cls + 0.54^6Clp_x + 0.23^8Clp_x + 0.35^9Clp_x + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_2 = -0.21C_{\alpha}s + 0.49C_{\alpha}p_x + 0.50C_{\beta}p_x - 0.20^{10}Hs + \ldots,$

O_h-d^1(4)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_2 = -0.44^5Tid_{x2-y2} + 0.34^5Tid_{z2} + 0.31^6Cls + 0.53^6Clp_x + 0.23^8Clp_x + 0.35^9Clp_x + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_2 = -0.21C_{\alpha}s + 0.49C_{\alpha}p_x + 0.50C_{\beta}p_x + 0.20^{10}Hs + \ldots,$

T_d-d^0(5)/C_2H_4 ; catalyst part $\phi'_2 = 0.56^1Cp_x - 0.48^1Cp_z - 0.22^2Hs + 0.27^5Tid_{x2-y2} + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_2 = 0.49C_{\alpha}p_x - 0.78C_{\beta}p_x - 0.27^{11}Hs - 0.27^{12}Hs + \ldots,$

T_d-d^1(5)/C_2H_4 ; α spin, catalyst $\phi'_2 = -0.74^5Tid_{x2-y2} + 0.44^5Tid_{z2} + 0.25^7Cp_y + 0.20^9Cp_y + 0.24^{11}Cp_y - 0.26^{18}Cp_y + \ldots,$

C_2H_4 part $\psi'_2 = 0.63C_{\alpha}p_x + 0.62C_{\beta}p_x + \ldots,$

β spin, almost the same values as those of T_d-d^0(5) model system

a) A suffix number at the left shoulder of the atomic formula indicates the number of the atomic formula in the models shown in Fig. 4.

Table 3 LFO energies, nucleo- and electro-philicity of the methyltitaniums and the reactivity index (RI) of ethylene insertion of methyltitaniums/C_2H_4 systems

	λA_{occ}	λA_{unocc}	λB_{occ}	λB_{unocc}	Nucleophilicity	Electrophilicity	RI
	(eV)	(eV)	(eV)	(eV)	$[1/(\lambda B_{unocc} - \lambda A_{occ})]$	$[1/(\lambda A_{unocc} - \lambda B_{occ})]$	
O_h-d^1(1)/C_2H_4	-10.43	-1.07	-17.54	-8.29	0.472	0.061	1.07
O_h-d^1(2)/C_2H_4	-10.41	0.07	-18.03	-8.30	0.474	0.055	1.06
O_h-d^1(3)/C_2H_4	-10.69	0.46	-18.02	-8.30	0.418	0.054	0.94
O_h-d^1(4)/C_2H_4	-10.34	0.36	-18.02	-8.30	0.490	0.054	1.09
T_d-d^0(5)/C_2H_4	-13.32	-8.47	-13.20	-6.65	0.150	0.211	0.72
T_d-d^1(5)/C_2H_4 ;							
α spin	-10.44	-8.23	-13.20	-8.25	0.457	0.201	0.66
β spin	-13.32	-8.47	-13.20	-6.65	0.150	0.211	0.36
							Σ 1.02

Table 4 Nucleophilicity(λ_{occ}) and Electrophilicity(λ_{unocc}) of Methyltitanium Complexes and Reactivity Index(RI) for Ethylene Insertion

complex	λA_{unocc}(eV)	λA_{occ}(eV)	RI
(1)	-10.40	-13.32	0.577
(2)	-5.90	-13.40	0.353
(3)	-9.94	-13.59	0.515
(4)	-6.65	-13.44	0.367
(5)	-10.09	-13.55	0.532
(6)	-4.90	-13.73	0.322
(7)	-8.58	-13.38	0.433
(8)	-9.00	-13.38	0.455
(9)	-6.94	-13.47	0.372
(10)	-0.23	-13.84	0.274
(11)	-9.11	-13.59	0.452
ethylene	-8.30	-13.19	

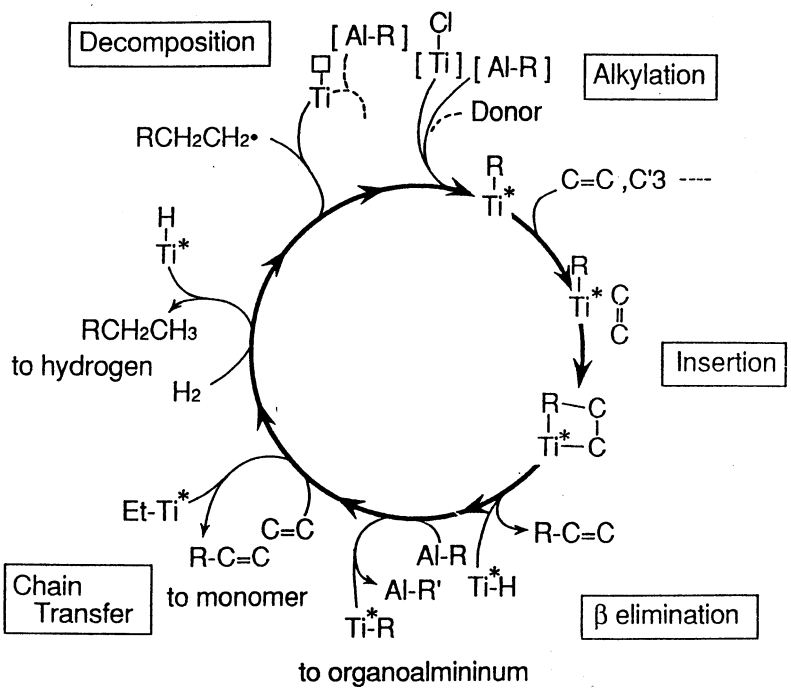


Fig. 1 Polymerization scheme

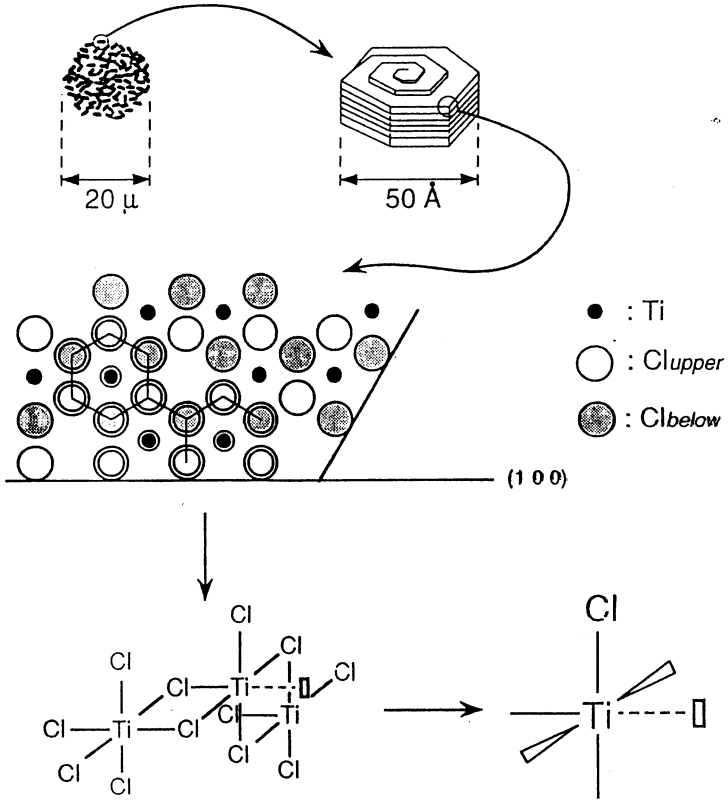


Fig. 2 An illustration of the active center on the crystallite surface

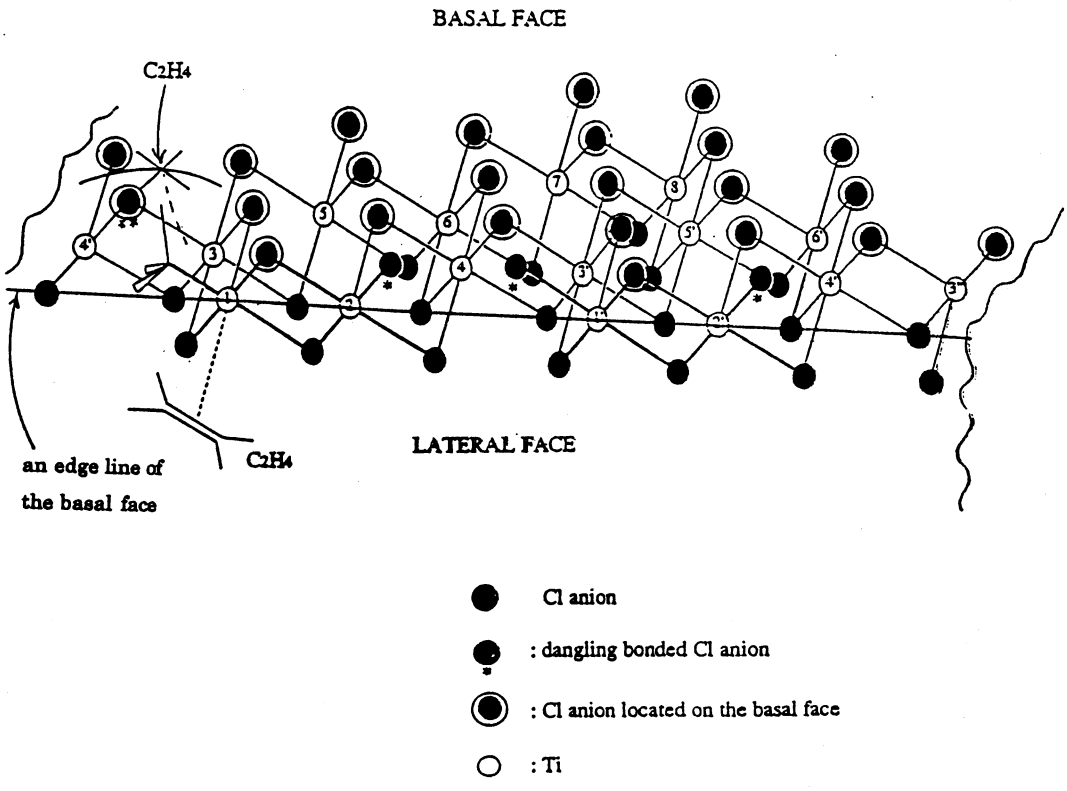


Fig. 3 A schematic illustration of a $CH_3Ti_{16}Cl_{47}$ cluster cut off from the edge of the basal face of $TiCl_3$ crystalline

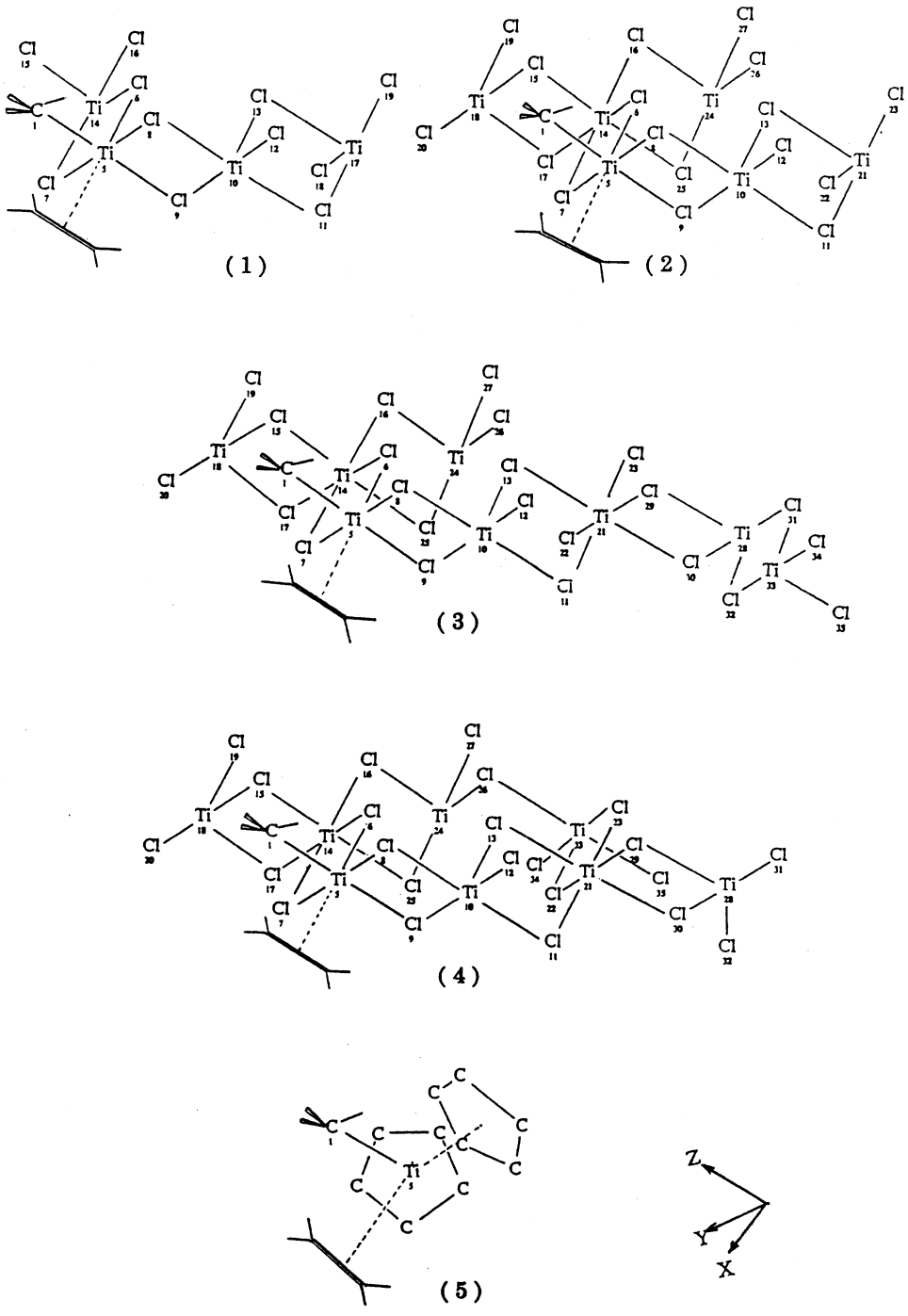


Fig. 4 A schematic illustration of models

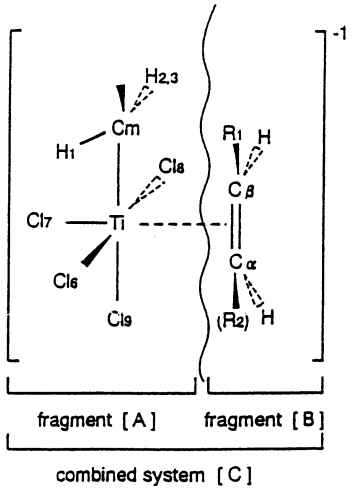


Fig. 5 A combined system [C] devided into the fragment [A] and the fragment [B]

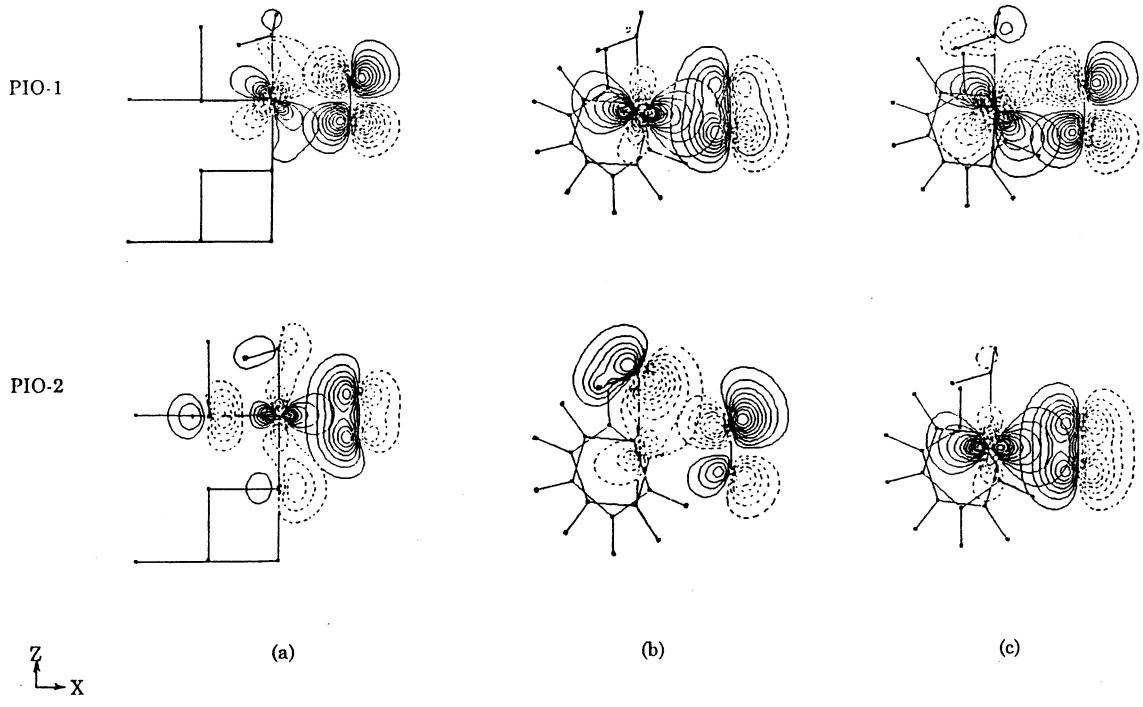


Fig. 6 Contour maps of PIO-1 and PIO-2 of model systems; (a) O_h-d^1(1)/C_2H_4, (b) T_d-d^0(5)/C_2H_4, (c) T_d-d^1(5)/C_2H_4 α spin

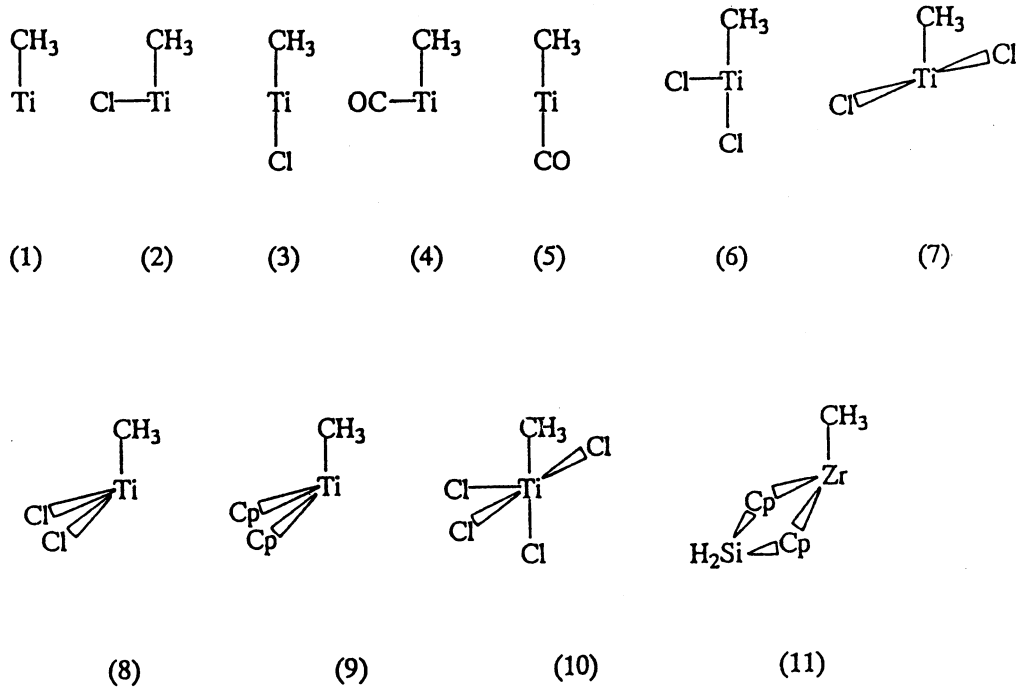


Fig. 7 A schematic illustration of model d^0-methyltitanium complexes

点電荷モデルを用いた酸化スズ触媒上でのメタンの反応

（株）関西新技術研究所　山口洋一
（財）地球環境産業技術研究機構　田畑研二・鈴木栄二

最近の計算機の急速な発達とともに、高精度 *ab initio* MO 法や密度汎関数法を用いた触媒上での化学反応の計算が、盛んに行われるようになってきているが、ここで扱うスズ原子のように周期律表で大きな族に属する重元素は、価電子近似では十分ではなく、また相対論的効果が無視できないとされている。また MM 法と組み合わせた最新の ONIOM(our own *n*-layered integrated molecular orbital and molecular mechanics)法の適用も、重元素については分子力場のパラメータがなかったり、その信頼性に問題がある場合が多く、我々が検討している金属酸化物触媒ではその精度高い取り扱いは依然として困難である。ここでは、酸化スズ触媒の格子原子すべてを点電荷モデルで近似して、触媒の電子状態を間接的に取り込む方法で、メタンの反応を検討した結果を紹介する。[1]

1．はじめに

近年、天然ガスの有効利用を目的として、その主成分であるメタンを、メタノールやホルムアルデヒド等の有用化学物質へマイルドな条件下で変換する試みが行われている。メタンは地球温暖化の原因の一つといわれており、地球環境の保護のためにもメタンの部分酸化は、重要なテーマと位置付けられている。メタンの部分酸化は、その強固なC－H結合のために、工業的には高温・高圧という条件が必要であることから、新規触媒の探索を含め、触媒上でのメタンの反応解析等の基礎研究に基いたブレークスルーが不可欠であると考えられる。その一つの試みとして、我々はこれまで低温(300K-400K)・常圧条件下での１ステップ反応を目標にして、金属酸化物触媒上でのメタンの部分酸化を検討してきた。[1-5]　ここでは酸化スズ触媒上での吸着酸素種の安定性と、活性酸素種によるメタンからの水素引き抜き反応について紹介する。[1]

2．酸化スズ触媒の性質

はじめに酸化スズ(SnO_2)についてなじみの薄い読者もあると思われるので、説明をしておこう。ここで検討した酸化スズ触媒は、図１に示したような、ルチル型の結晶構造を持ち、熱力学的に最安定な(110)面である。酸化スズは、電子をキャリヤ(*n*型)とするバンドギャップ3.6 eV の半導体的性質を持ち、すでにガスセンサーとして実用化されている材料である。酸素欠陥のない酸化スズ結晶は、図１(a)に示したように、５配位あるいは６配位の Sn^{4+}カチオンと O^{2-}アニオンから構成されている。図１(a)で、最上層の橋かけ酸素(bridging oxygen)は、真空中で700K以上の温度やエッチング処理により容易に脱離することが知られている。この橋かけ酸素が完全脱離した状態(還元状態)が、図１(b)である。橋かけ酸素は、この酸化スズ触媒上に酸素１原子当たり２つの電子を残して、酸素分子となって脱離する。この残された電子が、酸化スズのキャリヤとなり触媒表面上を動き回るわけである。ここで、図１(a)の橋かけ酸素と結合していた６配位 Sn^{4+}は、酸素分子が脱離後、価数が変化して図１(b)中に示した４配位 Sn^{2+}になる。実験では、還元処理により表面電気伝導度が２桁以上上昇し、バンドギャップ中の占有準位が、フェルミ準位へ昇位することが

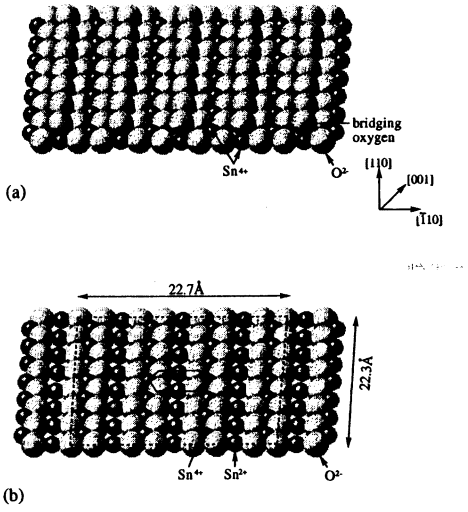


Figure 1. Schematic structures for (a) the stoichiometric and (b) the reduced SnO_2 (110) surfaces. The dashed square is the surface area of the point-charge model. The bold hexagon is the adsorbed center of the model.

確かめられている。この還元処理した酸化スズ(図1(b))は、電子供与的性質があるので、酸素ガスを導入すると、吸着した酸素分子は触媒のフェルミ準位から電子を受け取り、解離した後、もとの橋かけ酸素位置に格子酸素(O^{2-}アニオン)として収まるまでの間、有機分子に対して活性を持つことが知られている。実際、メタノールや酢酸が、酸化スズ触媒で酸化されることが報告されている。この活性酸素の生成が、ガスセンサーとしての働きと関係しているものと考えられる。ここで述べた酸化スズ触媒以外の金属酸化物触媒においても、活性酸素種がメタンからの水素引き抜き反応で、極めて重要な働きをしていることが、理論計算や実験で報告されている。

3．酸化スズの点電荷モデル

還元処理した酸化スズに、酸素ガスを導入すると、(1)式に示すような種々の吸着酸素種が存在することが、ESR等から推定されている。

$$O_2(g) \rightleftharpoons O_2(ad) \underset{-e}{\overset{+e}{\rightleftharpoons}} O_2^-(ad) \underset{-e}{\overset{+e}{\rightleftharpoons}} O_2^{2-}(ad) \rightleftharpoons O^-(ad) \underset{-e}{\overset{+e}{\rightleftharpoons}} O^{2-}(ad) \rightleftharpoons O^{2-}(lat) \quad (1)$$

ここで *g*, *ad*, *lat* はそれぞれガス状態、吸着状態および格子状態を、eは伝導電子を表わす。酸化スズと酸素の反応は、可逆反応なので還元処理した酸化スズと酸素は、(1)式右側に向かって反応が進み、酸化スズ結晶は、前述したように真空加熱等により、(1)式左側に向かって反応が進む。さてクラスターモデルでは、(1)式中の多重度が異なる各酸素種の違いを、メタンとの反応性も含めて区別することはかなり困難であるが、点電荷モデルでは、酸素種の違いを区別して計算可能である。気相中のメタンガスが、(1)式中の吸着酸素種と直接反応すると仮定すれば、酸素分子に電子を与えた後の酸化スズ(110)表面を、反応の静電的なバックグラウンドとみなすことができる。そこで、表面を約22Å×23Å、深さ方向に約8Å(3層)の448原子を含む、反応活性点に対して十分広い領域(図1(b)の点線で囲んだ部分)を、すべて点電荷モデルで近似した。点電荷モデルの中心の反応活性点に、クラスターモデルを埋め込む方法もよく用いられるが、クラスターのサイズや末端の結合の閉じ方で、結果が左右される場合が多々ある。各格子原子の点電荷の大きさは、小さなクラスターを用いた電子状態の計算から求めることができるが、計算方法によってその絶対値が大きく異なり、Sn^{4+}とSn^{2+}で絶対値が逆転する場合もあるので、ここでは、Sn^{4+}、Sn^{2+}、およびO^{2-}の電荷をそれぞれ、+4、+2.083、および-2と設定した。点電荷モデルを中性にするために、Sn^{2+}は調節パラメータとなっているおり、その値は半端なものになっている。モデルサイズが大きくなるほど、Sn^{2+}は+2に近づく。点電荷モデル自体が電荷を帯びていると、吸着分子との間で電荷密度の移動が行われ、異常な結果が得られる場合がある。

酸素分子の吸着点とメタンの反応活性点は、不明であるが、酸素欠陥がほとんどない酸化スズ結晶では、酸素分子が吸着しないことから、図1(b)の還元処理した酸化スズ表面上の電子リッチな欠陥酸素サイト、つまりSn^{2+}のライン上にあるものと考えて間違いないだろう。そこで、図1(b)中の六角形の中心を酸素分子の吸着点とメタンの反応活性点と仮定して、図2に模式的に示したような反応モデルを設定した(図2にはメタンも描いてある)。実験からは、同じルチル型結晶構造を持つ還元処理した酸化チタンにおいて、酸素分子は図2(b)の位置に吸着していることが報告されている。我々の点電荷モデルは、当然ではあるが、触媒表面の格子原子がすべて点電荷になっているので、吸着分子との距離の最適化ができない欠点がある。このため、図2のSn^{2+}-O(吸着酸素原子種)間距離(吸着酸素分子種は分子の重心)は、結晶のSn^{2+}-O^{2-}の結合距離に設定した。

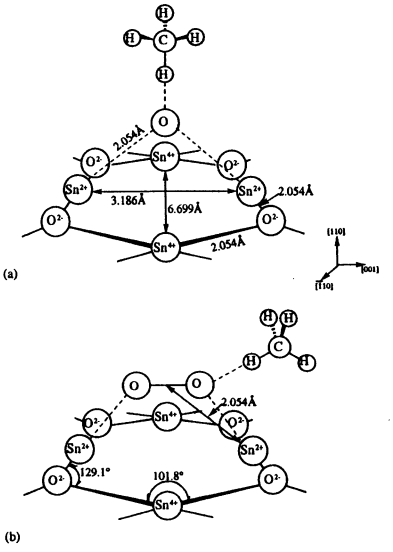


Figure 2. Schematic structures for the adsorption of (a) oxygen atom species (O^-, O^{2-}) and (b) oxygen molecule species (O_2, O_2^-, O_2^{2-}) including methane on the reduced SnO_2 (110) surface.

4．計算方法

量子化学計算は、密度汎関数法(Becke3LYP/6-311+G(3df,3pd))を用いて、はじめに気体状態における(1)式の酸素種やメタンの反応に関わる分子の構造最適化を行った。次いで、この最適化構造をもとにして、各酸素種を図2中の各位置にセット(メタンと酸素種の反応の場合も同様)し、点電荷モデル上における各分子のエネルギーの1点計算を行った。本計算により、酸化スズ触媒の表面格子原子の並びに対応する静電相互作用が、吸着酸素種やメタン-活性酸素種の反応系に反映される。ここで計算プログラムはGAUSSIAN94を用いた。結果の詳細については原報[1]を参照して頂くことにして、ここでは要点だけを述べる。

5．計算結果

5－1．酸素種の安定性

(1)式中の各酸素種についての計算結果を図3に示す。ここでは気体状態における酸素分子の全エネルギーを基準にした相対エネルギーで整理している。まず気体状態では、O_2は電子親和力 0.49eV(exp.:0.43eV)が大きいので、O_2^-となり易い。さらにO_2^-は、電子を取り込んでO_2^{2-}に変化するよりも、エネルギー4.26 eVで$O(^3P)+O^-$に分解するほうが容易である。この反応はエネルギー3.85 eVでO_2^-からO^-を作り出す方法として炭化水素の燃焼の分野で用いられている。メタンとの反応で後述するように、この酸素種O^-はメタンからの水素引き抜き反応において、極めて活性が高い。気体状態における酸素種O_2^{2-}とO^{2-}以外の安定性に関しては、本計算結果は妥当なものと考えられる。これら2つの酸素種の気体状態での安定性は不明であるが、図3の計算結果からは極めて不安定であると思われる。なお図3では、O_2^{2-}がO_2^-からO^-への解離の遷移状態のような記述になっているが、O_2^{2-}は実モードの振動数を持つので、分子として存在可能である。以上のことから、気体状態における(1)式の酸素種の安定性の順は、O_2^->O_2>O^->O_2^{2-}>>O^{2-}であると推定される。

次に、点電荷モデル上において、各酸素種は図3に示したように著しく安定化する。点電荷の絶対値が大きいので、各酸素種と触媒間の静電相互作用による安定化エネルギーが、過大評価されているが、気体ではエネルギー的に不安定なO_2^{2-}とO^{2-}においても、酸化スズ表面では著しく安定化されている。また分子状吸着酸素(O_2,O_2^-,O_2^{2-})では*end-on*型よりも*side-on*型吸着のほうが安定であることが推定される。さらに酸素アニオン種間のエネルギー差が、気体状態と比べて酸化スズ表面ではかなり低下していることから、(1)式の平衡がこの触媒表面で起こりうるものと考えられる。さて、図3から酸素分子は、気体状態では安定なO_2^-よりも、酸化スズ触媒上では、むしろO_2^{2-}の状態で吸着することが予想される。実際、気体状態では不安定と考えられるO_2^{2-}の存在が、酸化スズ触媒で、XPS(X-ray photoelectron spectroscopy)により観測されている。[2]他の金属酸化物触媒においても、O_2^{2-}の報告がある。(1)式に従えば、O_2^{2-}は、解離してメタンに対して活性がある酸素種の一つであるO^-を生成する重要な分子である。点電荷モデル上では、O_2^{2-}が最安定であり、O_2^{2-}はO_2^-に戻るよりも解離して、O^-を生成するほうが、エネルギー的に有利であることがわかる。従って酸化スズは、メタンに対して活性を示すO^-の生成には、好都合な触媒と考えられる。我々は、XPSにより酸化スズ触媒表面で、O_2^{2-}以外にO^-とO^{2-}を観測しているが、O_2^-の存在は微妙であり、[2]これは図3から明らかなように、はじめの3つの酸素アニオン種に比べて、O_2^-が不安定であるためである。メタンからメタノールやホルムアルデヒドの生成には、触媒表面上でのO^-の濃度が左右することが報告されている。たとえば、濃度が高いMoO_3触媒では、メタノールやホルムアルデヒドが生成し、濃度が低いLiをドープしたMgO触媒では、生成したメチルラジカル同士の

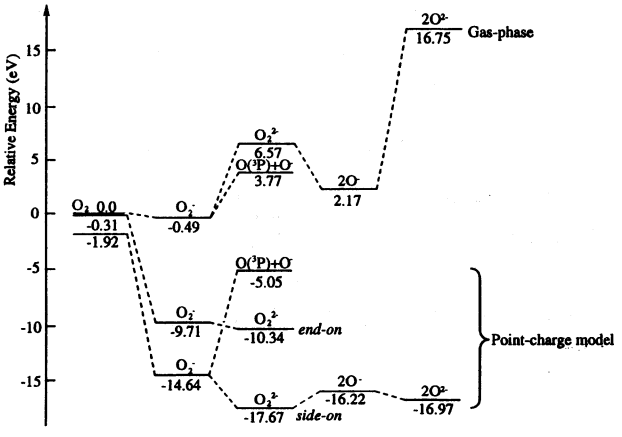


Figure 3. Energy diagram for various oxygen species in the gas phase and on the point-charge model. The total energy of O_2 in the gas-phase is taken as a standard. The positive value stands for the instabilization. Relative energies are given in eV.

カップリングによりエタンが生成する。酸化スズ触媒の場合には、実験条件により異なるが、触媒表面でのメタノール生成が確認されているので、[3] 比較的 O^-の濃度が高いものと推定される。以上のように、単純な点電荷モデルを用いても、酸化スズ触媒表面における酸素種の安定性に関して、実験結果を説明することができることがわかった。

5－2．メタンと酸素種の反応

酸化スズ触媒では、(1)式の酸素種うちのどれがメタンから水素を引き抜くのか、実験的な証拠はない。しかし O_2^{2-}と O^{2-}はメタンと同様、1重項の電子閉殻構造を持つので、これらの分子間の相互作用は困難である。実際、理論計算からMgO触媒は、メタンから水素を引き抜く反応の活性化エネルギーが、70 kcal/mol 以上であることが報告されている。一方、O_2^-と O^-は、2重項ラジカルの電子開殻構造を持つので、メタンと反応する可能性がある。図3に示したように、酸化スズ触媒上では O_2^-が存在する可能性は小さいが、金属酸化物触媒における O_2^-とメタンとの反応の理論計算は、ほとんどないのでここで検討した。

メタンと O^-や O_2^-との反応計算で得られた反応錯体(RC)と遷移状態(TS)の分子構造を図4に示した。メタンと O_2^-との遷移状態は、本計算レベルでは見いだせなかったが、これらの反応錯体の構造は、我々が初めて報告した。計算方法で述べたように、点電荷モデル上では、触媒表面と反応物との距離の最適化ができないので、気体状態で最適化したRCとTCを、図2のような幾何構造にセットし、エネルギーの1点計算を行った。図5および図6は、反応物のエネルギーを基準として整理した結果である。ここで反応物のメタンは気体状態とし、O^-や O_2^-は点電荷モデルでは、それぞれ図2(a)および(b)の位置に存在すると仮定している。一方、生成物のメチルラジカルは気体状態とし、OH^-と HO_2^-は点電荷モデルでは、それぞれ図2(a)および(b)の各酸素種に水素原子が結合した分子構造を持ち、それぞれO-H軸、O-O軸を触媒表面に垂直、平行にした。図5と図6に示した計算結果から、メタンから O^-や O_2^-による水素引き抜き反応の活性化エネルギーは、それぞれ約12 kcal/mol、約48 kcal/mol 以上であることがわかった。従って、還元処理した酸化スズ触媒に酸素ガスを導入した際、メタンから水素を引き抜く反応は、主に O^-によるものと結論される。この反応の活性化エネルギーは、他の理論計算においても、MoO_3触媒では16 kcal/mol、MgO触媒では15 kcal/molであることが報告されており、これらの値は本検討で得られた値に近く、触媒の違いよる活性化エネルギーの差は小さいことがわかった。また図6から、メタンと O_2^-の反応は、気相と酸化スズ触媒上では、エネルギー値の違いは小さいが、図5のメタンと O^-の反応では、気相よりも酸化スズ触媒上で、TSのエネルギーが高い位置にあることがわかる。これは引き抜かれるメタンの水素原子が、TSでは大きな正の電荷密度を持つために、触媒の Sn^{2+}との静電的反発が大きいためであることがわかった。

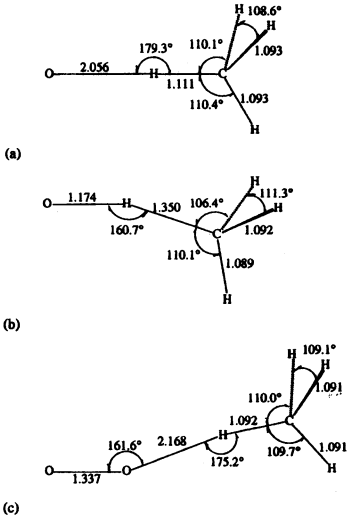


Figure 4. Optimized geometries (a) RC, (b) TS for the O^-+CH_4 reaction, and (c) RC for the $O_2^-+CH_4$ reaction in the gas-phase. All bond lengths are given in Å.

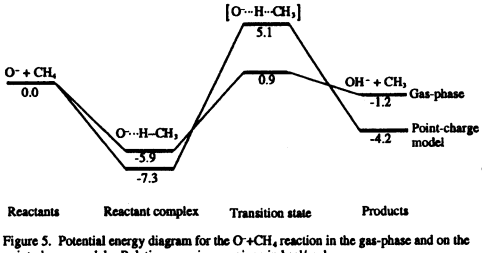


Figure 5. Potential energy diagram for the O^-+CH_4 reaction in the gas-phase and on the point-charge model. Relative energies are given in kcal/mol.

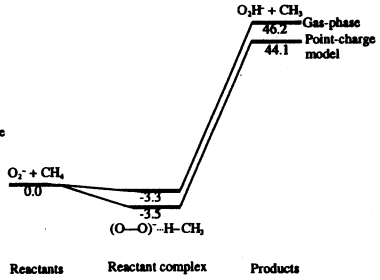


Figure 6. Potential energy diagram for the $O_2^-+CH_4$ reaction in the gas-phase and on the point-charge model. Relative energies are given in kcal/mol.

6．終わりに

ここで紹介したような触媒全体を点電荷モデルで近似した検討例はほとんどなく、周期境界条件を用いたクラスターモデルが主流である。しかし、酸化スズ触媒のように、静電的なバックグラウンドで触媒表面が近似可能な場合には、点電荷モデルを使えば、クラスターモデルよりも非常に短時間で計算できるので有用な方法と考えている。ここでは述べなかったが、我々は、メタンとO^-の反応で生成したメチルラジカルからメタノールやホルムアルデヒドの生成反応についても、点電荷の絶対値を改良して同様の検討を行っている。[4] 本文の内容は、以下の参考文献とその中の引用文献に依る。なお本研究は、NEDOの環境触媒プロジェクトの委託を受けて実施したものである。

参考文献

1. Y. Yamaguchi, Y.Nagasawa, A. Murakami, and K. Tabata *Int. J. Quantum Chem.* **69**, 669(1998).
2. Y.Nagasawa, T. Choso, T. Karasuda, S. Shimomura, F. Ouyang, K. Tabata, and Y. Yamaguchi, *Surf. Sci.* **433-435**, 226(1999).
3. T. Kawabe, S. Shimomura, E. Suzuki, K. Tabata, Y. Nagasawa, and Y. Yamaguchi *Surf. Sci.*, in press.
4. Y. Yamaguchi, Y.Nagasawa, S. Shimomura, and K. Tabata *Int. J. Quantum Chem.* **74**, 423(1999).
5. Y. Yamaguchi, Y.Nagasawa, S. Shimomura, K. Tabata, and E. Suzuki *Chem. Phys. Lett,* in press.

燃料電池関連技術への第一原理計算の応用
～金属・合金の水素溶解熱の算出～

東京ガス株式会社　横井　泰治
yyokoi@tokyo-gas.co.jp

1．はじめに

近年、地球の温暖化や大気汚染などの地球環境問題が大きくクローズアップされ、低 NOx で環境適合性の高い燃料電池、特に固体高分子型燃料電池（PEFC）が盛んに研究されている。PEFC は低温作動が可能なため起動性に優れ、その特徴を活かして自動車などを中心に実用化への動きが非常に活発である。このような背景から燃料電池の燃料である水素が注目されている。

メタンの水蒸気改質はメタンと水蒸気を反応させて水素と一酸化炭素（CO）を得る反応であり、都市ガスの主成分であるメタンから水素を製造する最もポピュラーな方法である。しかし改質ガスを直接 PEFC に供給すると、わずかに含まれる CO により燃料極の Pt 触媒が被毒され、著しい性能低下を引き起こす。このため改質器以外に CO 変成器や水素精製器あるいは CO 選択酸化装置が必要となり、水素製造装置が大型化してしまう。また、PEFC 自身は低温作動が可能であるにもかかわらず、メタンの水蒸気改質反応は非常に大きな吸熱反応であり、商業的に要求される転化率を得るためには800℃程度の高温で運転しなければならない。よって燃料電池システム全体として高い熱効率を得るには、より低い反応温度で高いメタン転化率を得る工夫が必要である。

水素製造装置のコンパクト化や反応温度の低温化は膜型改質器を用いることで解決できる。メタンの水蒸気改質で生成した水素をパラジウム膜などの水素透過膜を用いて選択的に反応系外に抜き出すことにより、反応温度を低下させ、さらにその反応温度での平衡を越えるメタン転化率を達成することが可能である[1]。しかもパラジウム水素透過膜は水素の選択的透過率が原理的には 100%であるため、前出の CO 変成器や水素精製器を用いずに PEFC 向けの高純度水素が得られる。よって膜型改質器を用いることでシンプルかつコンパクトな水素製造装置の構築が可能となる。

膜型改質器の性能には水素透過膜の水素透過性能が直接的に影響する。よって高い水素透過性能を有する膜の研究開発は実用的に非常に重要な意味を持つ。膜を透過する水素量は膜厚に反比例するので、膜の水素透過性能を向上させる第一の方法は膜厚を薄くすることである。しかし膜厚を薄くすると機械的強度が低下してしまう。これを回避する目的で様々な種類の支持体（基板）を用い、それらの上に透過膜を形成させたコンポジット型の分離膜が数多く報告されている。菊池らは無電解メッキ法によりピンホールの無いパラジウム薄膜を多孔質ガラスや多孔質アルミナ上に形成させた。しかしそのような薄膜を用いた場合においてさえパラジウム膜中の水素の透過がプロセスの律速になることが明らかになった[2]。

パラジウム水素透過膜の水素透過性能を向上させるもう１つの効果的な方法は銀の合金化である。パラジウム／銀合金膜は銀の量が 23%で最大となるが、これは合金中への水素の溶解量が銀 23%付近で最大になるためである[3]。単金属の銀はほとんど水素を溶解しないにもかかわらず、銀を合金化することによってパラジウムの水素溶解が促進されることは非常に興味深い。しかしながら銀の合金化が水素溶解を促進するメカニズムを明らかにした研究は見あたらない。

本稿では、各種金属・合金への水素の溶解に直接関連する水素溶解熱を第一原理計算によって算出することを試み、さらにパラジウムの銀合金化が水素の溶解を促進するメカニズムについて検討した研究[4]を紹介する。

2．方法

（1）第一原理計算ソフト「CASTEP」[5]について

計算には CASTEP（モレキュラーシミュレーションズ社製）を用いた。CASTEP は金属、絶縁体あるいは半導体などの電子状態をシミュレートできる。基本的に周期的境界条件が適用しやすいバルクの計算に向いているが、分子についてもスーパセル中に置くことにより計算できる。また、原子やセルに働く力も計算でき、それによって平衡構造を見つけることが可能である。

CASTEP の理論的基礎は、局所密度近似（LDA）あるいは勾配補正を加味した LDA（GGA）の密度汎関数理論にある[6, 7]。密度汎関数理論の電子ガスモデルは多くの適用例について十分に正確で、周期系の解析では数少ない実用的なモデルである。LDA は結合距離や格子定数を過小評価することが知られており、一方 GGA はこれを補償する。本研究では CASTEP のデフォルトとして設定されている GGA を用いた。

CASTEP では、価電子軌道を平面波で展開し、一方、内殻電子を擬ポテンシャルの概念を用いて記述する方法を採用している。殻の領域を定義するカットオフ半径を越える範囲において、擬波動関数は全電子波動関数と合っている。殻の領域内においては、擬波動関数は節をもたずに全電子波動関数とノルム保存の条件によって関連付けられている。すなわち両方の関数は同じ電荷を有している。この従来のタイプの擬ポテンシャルでは高いカットオフエネルギーを用いて平面波の数を増やさなければ高い精度の波動関数が得られなかった。特に遷移金属元素等の局在化した軌道の記述には極めて高いカットオフエネルギーを必要とする。Vanderbilit によって提案されたウルトラソフト擬ポテンシャルのアイディアは、ノルム保存の条件を緩和することによって非常にやわらかいポテンシャルを生成することが可能となるというものである[8]。この方法によれば擬波動関数は殻の領域内において可能な限りやわらかくなることが許され、その結果、必要な平面波数を相当減少させる、すなわちカットオフエネルギーを劇的に低減させることが可能である。本研究では最近 CASTEP で用いることが可能になったこのウルトラソフト擬ポテンシャルを使用して、カットオフエネルギーの値を CASTEP での金属－水素系のデフォルトの値である 380eV に設定した。

（2）計算モデル

金属・合金の格子間に固溶した水素がどのような格子間位置を占めるか、それによって格子がどのように変化するか、さらにその際の生成熱はどの程度かを調査した。

金属中で水素は 8 面体位置（O サイト）あるいは 4 面体位置（T サイト）を占めると一般的に考えられている。そこで fcc 金属および bcc 金属のそれぞれの場合について、O サイトおよび T サイトに水素が占有する初期構造モデルを仮定した（図 1）。計算モデルの単位格子内の金属原子数は 4 つで、それに対して水素原子数は 1 つである（H/M=0.25）。fcc 金属では Ni、 Pd、 Pt、Cu、Ag および Au、bcc 金属では V、Nb、Ta、Cr、Mo および W を対象とした。

図 1 を初期構造として構造最適化を実施した。格子間水素による格子の膨張と生成熱を評価するために、水素を含まないモデルについても構造最適化を実施した。生成熱は下記の安定化エネルギーの評価式（1）により算出した。

$$E_{diss} = E\ (4M + H)\ - E\ (4M)\ - 1/2 * E\ (H2) \qquad (1)$$

ここで、E（4M + H）は図 1 の水素を含むモデルの最適化構造における全エネルギー、 E（4M）は

水素を含まないモデルの最適化構造における全エネルギー、そして E (H2) は水素分子の全エネルギーである。

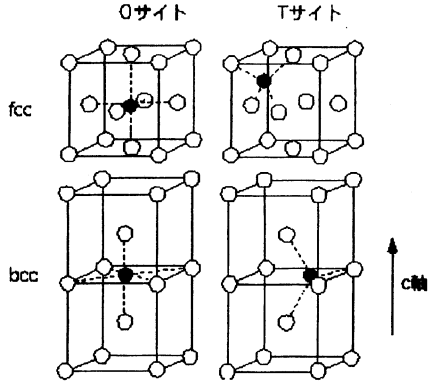


図1　金属中の水素溶解を表したスーパーセルモデル（○金属原子、●水素原子）

3．結果

（1）金属中への水素の溶解

水素を含まないモデルの最適化構造は、fcc あるいは bcc 格子がいずれの金属種においてもほぼ立方体になった。格子定数の計算値を実験値と比較して図 2 に示す。計算値と実験値のよい相関が見られる。水素を含むモデルについても構造最適化（エネルギー極小構造の決定）を実施した。bcc 金属においては V と Mo において O サイト占有の最適化構造が得られたが、その他の bcc 金属については O サイト占有の最適化構造は得られなかった。また、T サイト占有の最適化構造はすべての bcc 金属について得られた。一方 fcc 金属については、O サイト占有および T サイト占有の最適化構造がすべての fcc 金属について得られた。

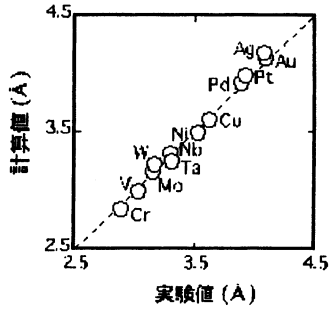


図2　各種金属の格子定数における計算値と実験値の相関

最適化構造が得られた各金属の水素を含むモデルでは、水素を含まないモデルと比べて体積膨張が

見られた。fcc 金属の場合は O サイト占有の場合も T サイト占有の場合も、ともに fcc 単位格子としては立方体をほぼ維持しつつ膨張した。O サイト占有および T サイト占有の格子の体積膨張率は平均してそれぞれ 1.5%および 2.5%であった。一方 bcc 金属については bcc 単位格子が立方体からずれて歪んだ構造になった。O サイト占有および T サイト占有の格子の体積膨張率は平均してそれぞれ 1.5%および 1.7%であった。図 3 には bcc 金属の例として V の格子定数の変化を示す。O サイト占有の場合に、4.7%ほど c 軸が膨張するが、a 軸および b 軸は若干収縮した。fcc 金属の例として Pd の格子定数の変化を図 4 に示す。

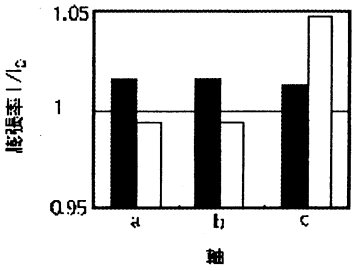


図 3　格子間水素による V の格子定数の相対膨張率（黒：T サイト占有、白：O サイト占有）

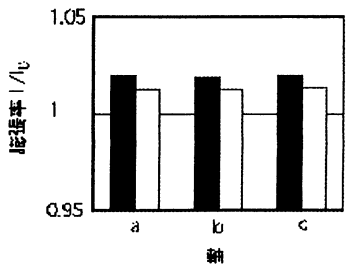


図 4　格子間水素による Pd の格子定数の相対膨張率（黒：T サイト占有、白：O サイト占有）

Pd の O サイト占有の場合については水素濃度と体積膨張の関連も調査した。H/Pd 比が 0, 0.25, 0.5, 0.75 および 1 の場合について最適化された fcc 格子の体積（単位は $Å^3$）はそれぞれ 59.82, 62.17, 64.29, 66.04 および 67.82 となった。

図 5 に fcc 金属の E_{diss} を示す。Ni と Pd の場合には O サイト占有の方が T サイト占有と比べて安定であったが、Pt、Cu、Ag および Au の場合には T サイト占有の方が安定であった。図 6 に bcc 金属の E_{diss} を示す。O サイト占有で最適化構造が得られたものは V と Mo だけであったが、どちらの場合も O サイト占有よりも T サイト占有の方が安定であった。

（2）パラジウム／銀合金中への水素の溶解

Pd の Ag 合金化が水素溶解熱におよぼす影響を研究するために、金属で実施した方法と同様の方法を用いて Pd/Ag 合金の E_{diss} を評価した。図 7 に周期モデルを示す。

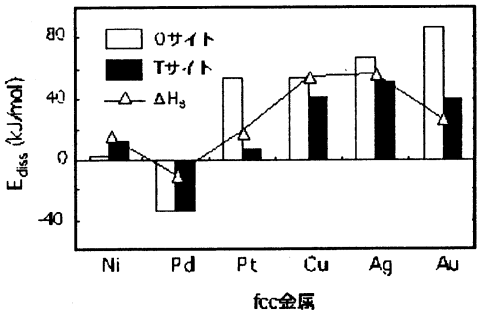


図5　fcc 金属に関する E_{diss} の計算値（白：O サイト占有、黒：T サイト占有）

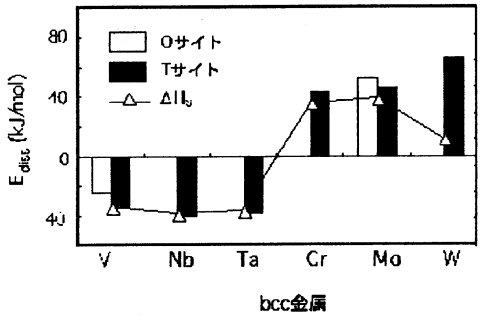


図6　bcc 金属に関する E_{diss} の計算値（白：O サイト占有、黒：T サイト占有）

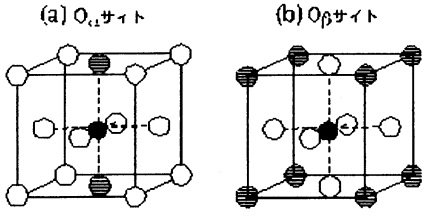


図7　Pd/Ag 合金の水素溶解を表したモデル（白：Pd、線塗り：Ag、黒：H）

これらのモデルは 3 つの Pd 原子と 1 つの Ag 原子からなるホストと O サイトに溶解している 1 つの H からなる。これらはそれぞれ違う 2 種類の O サイトを示したものである。ひとつは 4 つの Pd と 2 つの Ag で構成される 8 面体の中心（O_αサイト）、もうひとつは 6 つの Pd で構成される 8 面体の中心（O_βサイト）である。

図 8 に E_{diss} の計算結果を単金属の Pd の O サイト占有の場合と比較して示す。O_βサイト占有の溶解熱の大きさは単金属 Pd の O サイト占有と比較して大きいが、O_αサイト占有の場合は逆に小さかった。

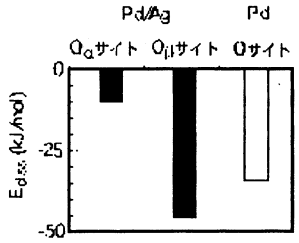


図8　Pd/Ag 合金に関する E_{diss} の計算値

4．考察

（1）単金属の水素溶解による格子膨張

水素を含まない単金属の最適化構造の格子定数と水素分子の結合距離に関して、計算値は実験値と比較して十分な一致をみた。このことから水素-金属系についても最適化構造の信頼性が期待された。実際に H/Pd 比が 0.5 の Pd の場合に水素を含まない単金属と比べて計算では 7.5%の体積膨張が示された。この計算値に対応する実験値は文献値で約 10%である[4]。また、V の格子膨張についても、図3から計算では O サイト占有の場合には c 軸方向に 4.7%の膨張を引き起こした。これに対応する実験の報告として c 軸方向に約 10%膨張するという報告があり、定性的ではあるが計算と実験との関連が示された[9]。

（2）単金属中での水素位置

図5から fcc 金属については O サイトおよび T サイトの両方が安定な水素位置として得られた。Ni と Pd の場合には O サイトの方が T サイトよりもエネルギー的に安定であり、Ni と Pd については実験的にも O サイト占有が観測されている[9, 10]。その他の fcc 金属：Pt、Cu、Ag および Au については、T サイト占有の方が O サイト占有よりもエネルギー的に安定であるという計算結果であったが、十分に信頼できる比較データは報告されていない。

一方、図6から bcc 金属については T サイト占有が安定であると示された。これらの bcc 金属は T サイトに占有しやすいという報告があり[9, 10]、計算による知見と一致する。V については、O サイト占有（これによって c 軸方向に約 10%格子膨張する）という報告[11]があるが、計算でも T サイト占有と同様に O サイト占有も最適化構造が得られたこととの関連が示唆された。

（3）単金属中の水素溶解熱

図5および図6には計算値（E_{diss}）とともに水素溶解熱の実験値（ΔH_s）[12]もプロットしてある。これらの値は Sieverts の法則を適用することにより得たものであるので、水素濃度が高い領域では誤差が大きい可能性がある。それにもかかわらず E_{diss} と ΔH_s の間には非常によい関係が得られた。

Pd に対する Ag の合金化に対する詳細な議論に入る前に、単金属の Pd における E_{diss} と ΔH_s の差異について議論する。Pd における計算値と実験値との差異は Pd と同様に発熱的である V、Nb および Ta と比較するといくぶん大きい。Pd 中への水素溶解熱について水素濃度の影響を研究した文献[9]がある。それによると、計算モデルの水素濃度に対応する H/Pd が 0.25 での溶解発熱の実験値は 20kJ/mol

よりも大きい。このように水素濃度の補正をすることで実験と計算との差異が小さくなる。これらのことから E_{diss} は単金属 Pd と Pd/Ag 合金の水素溶解熱の違いを定性的に議論するには十分信頼できると考えられた。

（4）パラジウム／銀合金中の水素溶解熱

金属の水素透過係数は水素の溶解度係数と拡散係数の積である。水素の溶解度は$-\Delta H_s$とともに増加するので、$-\Delta H_s$を増大させることは水素透過性能を向上させるのに有効である。Pd/Ag 合金において Ag の量が 20～25%程度の場合に水素溶解度が高く、それによって高い水素透過性能が得られるとの報告がある[4]。この文献によれば1気圧、183℃の条件で 100g の Pd/Ag 合金中に約 150mg の水素が溶けることが可能であるが、この H/M 比は 0.25 よりも小さい。Pd/Ag 合金への水素の溶解は発熱的であるので、H/M 比は温度の上昇とともに減少する。膜型改質器の運転温度は通常 500℃より高い[13]ので、Pd/Ag 合金でできた水素透過膜中では H/M 比は 0.25 よりも小さくなる。図 7 に示した 25%Ag/Pd 合金の単純な計算モデルは、3つの O_αサイトと1つの O_βサイトを有している。O_βサイト占有は O_αサイト占有よりもエネルギー的に安定であるので、H/M 比が 0.25 より小さい場合には水素は O_βサイトのみを選択的に占有すると示唆された。図8から、O_βサイト占有の E_{diss} の大きさは単金属Pdの O サイト占有の E_{diss} の大きさよりも大きい。このように水素濃度の低い領域においては、Pd/Ag 合金の水素溶解熱は単金属 Pd よりも大きいことが示唆された。このことが高温の Pd/Ag 合金中での高い水素溶解度の原因であり、これが高い水素透過性能に寄与する理由であると考えられた。

（5）現状の問題点と今後の展望

我々の目的は、既存の Pd/Ag 合金膜よりも高い水素透過性能と実使用条件下における力学的信頼性を兼備する膜を開発することである。

すでに述べたように、金属や合金の水素透過係数は水素の溶解度係数だけでなく水素の拡散係数にも依存する。しかしながら本研究では、計算資源や方法の制限により前者のみ議論した。Pd/Ag 合金に関しては、Ag の量とともに水素の拡散係数は減少するとの報告がある[14]。本研究で議論した Ag の合金化による溶解度係数の増大が非常に大きいため、拡散係数は減少するにもかかわらず全体としては水素透過性能が向上するのである。今後、新規な金属膜あるいは合金膜の設計を目的として、より精密に水素透過性能を見積もるためには、拡散係数の算出も含めた評価が必要になってくるであろう。

単金属 Pd では、各 300℃、20 気圧以下においてα相とβ相の相変化を起こす領域が存在することが知られている[15]が、本研究の計算モデルは周期的境界条件の制限を受けるために単相のモデルにならざるを得なかった。β相はα相と比較してかなり格子膨張することが知られている。例えば H/Pd 比が 0.5 の場合では体積は約 10%増加する[4]。このことから、膜型改質器の運転中に起こる水素の溶解／放出サイクルをくり返すことによりパラジウム膜は力学的損傷を引き起こす可能性があることが示唆される。Pd に対する銀の合金化は、水素透過性能の向上効果だけでなく、α相とβ相の共存温度を室温付近まで低下させるという効果がある。本研究では単相金属中に溶解した水素による格子膨張を理論的に明らかにしたが、このことが水素透過膜の力学的信頼性を理論的に評価するための基礎になると確信する。

5．おわりに

本稿では、水素分離膜型改質器の性能を左右する水素透過膜に着目し、その水素透過性能と直接関連する水素溶解熱を、第一原理計算を用いてよい精度で算出できることを紹介した。このことは水素

－金属系の全エネルギー計算が可能になったということを示すものであり、今回議論した水素透過膜の材料設計についてはもちろんであるが、同等かそれ以上に水素吸蔵合金の材料設計に与えるインパクトは大きいと考えられる。水素吸蔵合金において（水素化物の）生成熱が重要であることは言うまでもないからである。また水素吸収／放出による微粉化の問題も実用上重要な問題であるが、これについても水素透過膜の力学的信頼性と同様に水素が引き起こす構造変化に起因する問題であり、今回定性的に実験結果を再現することに成功した水素による金属の構造変化の評価が基礎になると考えられる。今後、第一原理計算による水素吸蔵合金に関する研究が盛んになり、メカニズムの解明から新規な合金組成の設計までの多岐にわたって、第一原理計算が活躍することは間違いないであろう。

ここで、足立らあるいは森永らによる金属中水素の電子状態に関する先駆的な研究[16]について言及しておきたい。彼等はクラスターモデルを用いて金属中の水素に関する詳細な研究を継続し、水素が絡む金属・合金材料について量子化学的な設計指針を確立した。その手法的な特徴は、原子軌道の線形結合を基本とした波動関数を用いることであり、これによって特定の結合、例えば金属と水素の間の結合や溶解した水素によって変化する金属原子間の結合についてその化学的な由来を明らかにしつつメカニズムを研究することが可能になる。特に部分状態密度（PDOS）と重なり電子密度の状態密度（OPDOS）の解析は電子状態と化学結合の関連について深い理解を与える。後者についてはホフマンらが COOP（Crystal Orbital Overlap Population）と名付けたものである[17]。今回紹介した研究のような全エネルギー計算によるアプローチは、PDOS や COOP 等の波動関数の解析と組み合わせて評価することにより、より一層の威力が発揮されると筆者は考えている。そのような意味で CASTEP の解析機能として PDOS や COOP が開発プランに挙がっていることは喜ばしい限りである[18]。

PEFC は最近特に注目を集めているということもあり、本稿ではその関連技術に対して第一原理計算を適用した例を紹介した。しかし燃料電池の中には PEFC よりも遥かに高い発電効率が期待できる固体酸化物燃料電池（SOFC）があり、こちらも大いに期待されている。SOFC の作動温度は高温であるため、都市ガスの主成分であるメタンを電極上で直接内部改質することができる。よって水素製造装置すら必要としない都市ガスによる燃料電池システムが構築でき、さらなるコンパクト化や高効率化を図ることが可能である。

SOFC においても PEFC と同様に水の電気分解とは逆の「水素と酸素から水が生成する反応」が起こるが、電解質中を PEFC では水素イオンが移動するのに対して SOFC では酸素イオンが移動することになる。よって酸素イオンが拡散しやすいジルコニア（ZrO_2）系の材料が電解質として用いられているが、より酸素イオンが拡散しやすい材料を用いることによって性能の向上が可能である。そのようなことから固体電解質材料について古典力場を用いた分子動力学（MD）シミュレーションが盛んに行われてきたが、経験的なパラメータを用いることから材料設計手法としてはあまり大きな成果は期待できなかった。しかしながら第一原理計算を用いて非経験的に酸素拡散経路のポテンシャルを算出することができれば、材料設計についても期待できるであろう。

また SOFC では、作動温度が高温であるがゆえに材料に要求される性能は厳しい。例えば電池をスタックするためのセパレータ材料には導電性を付与したランタンクロマイト（$LaCrO_3$）系の材料が用いられるが、高温動作時に還元雰囲気の燃料極側では酸素空孔が生成することによって還元膨張が起こり、最悪の場合にはセパレータが破損する危険もある。これについても少ないながら古典 MD によって検討されてきたが[19]、酸素空孔生成による金属元素の電子状態変化をあらわに考慮することが重要であると考えられるにもかかわらず、筆者が知る限りにおいてはそのような事例は報告されていない。ここでも酸素空孔生成によって誘起される還元膨張を第一原理計算を用いて非経験的に評価できれば、新規な材料の選定に威力を発揮することになるであろう。

最近 CASTEP で用いることが可能になったウルトラソフト擬ポテンシャル[8]は、従来の擬ポテン

シャルが不得意とした局在化した価電子軌道にも適用できるという点で、CASTEP による第一原理計算の実用的な適用範囲を大きく拡げたと言えるであろう。本稿で紹介した遷移金属を含む系に威力を発揮できたのも、これに負うところが大きいのかも知れない。遷移金属系への適用と同じ理由から、酸素（O）、窒素（N）、炭素（C）などを含む系についても高い精度の計算が期待でき、実際に金属酸化物系に適用した研究の報文数が急速に増加してきている[20]。今後、SOFC を構成する電解質やセパレータ等に用いられる金属酸化物材料の第一原理計算が盛んになり、これによって新規な材料が設計され、実用化に向けた性能向上や力学的な信頼性向上に貢献することを期待する。

6．謝辞

本稿で紹介した研究は、筆者が東京ガス（株）基礎技術研究所在籍時に同所属の安田 勇氏および関 務氏と共同で実施したものである。また、同所属の白崎 義則氏には本研究をまとめるにあたり有益な情報を提供していただいた。ここに改めて感謝の意を表します。

文献

1. M. Oertel, J. Schmitz, W. Weirich, D. Jendryssek-Neumann and R. Schulten, Chem. Eng. Technol., 10 (1987) 248.
2. E. Kikuchi, CATTECH, (1997) 67.
3. A. G. Knapton, Platinum Metals Review, 21 (1977) 44.
4. Y. Yokoi, T. Seki and I. Yasuda, 218th ACS National Meeting (New Orleans), FUEL-108, 1999.
5. The CASTEP code, originally written by M. C. Payne, is marketed by Molecular Simulations, Inc.
6. J.P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B45 (1992) 13244.
7. J.A. White and D.M. Bird, Phys. Rev. B50 (1994) 4954.
8. D. Vanderbilt, Rhys. Rev. B41 (1990) 7892.
9. Y. Fukai, "The Metal Hydrogen System", Springer, Series in Materials Science Vol. 21 (1993) Chap. 4.
10. D. Richter, R. Hempelmann and R.C. Bowman, "Hydrogen in Intermetallic Compounds II : Surface and Dynamic Properties,Applications", Springer, Topics in Applied Physics, Vol. 67 (1992) Chap. 3.
11. I. Okuda, H. Asano and M. Hirabayashi, Trans. JIM, 21 (1980) 89.
12. H.M. Lee, Metall. Trans., 7A (1976) 431.
13. Y. Ohta, M. Gondaira, K. Kobayashi, Y. Fujimoto and K. Kuroda, in Extended Abstracts of AIChE Annual Meeting, 1994, San Francisco.
14. E. Wicke and H. Brodowsky, "Hydrogen in Metals II: Application-oriented Properties", Springer-Verlag, Topics in Applied Physics, Vol. 29 (1978) Chap. 3.
15. F.A. Lewis, "The Palladium Hydrogen System", Academic Press, 1967.
16 足立，森永，那須，「金属材料の量子化学と量子合金設計」，三共出版, 1997.
17 ホフマン，「固体と表面の理論化学」，丸善, 1993
18 1999 Wish-List: 99WL14, Molecular Simulations Inc.
19 石原，森，泉，岡，三菱重工技報, 34 (1997) 374.
20 http://www.msi.com/materials/refs/castep

ChIN Web Page : a Navigator for Chemical Information on Internet

Xiaoxia Li
(Laboratory of Computer Chemistry, Institute of Chemical Metallurgy,
Chinese Academy of Sciences, P.O. Box 353, Beijing 100080)

1 Chemistry and Internet

Internet has experienced rapid growth since it was born in 1969. After 20 years, the number of Internet hosts is 56,218,000 up to July 1999, and the number Web sites approaches to 9,560,866 at the end of 1999 from 56,218,000 in January 1999[1]. As the Web is now the basic way for providing information on Internet, the growth of Web sites shows the growth speed of information content on Internet.

For chemistry, Internet is not only becoming a new major media for chemical information, but also a convenient way for communication among chemists in the global scale. Taking the ChemProt [2] as an example, introduced in 1997 as a cooperative effort of CAS, ACS Publications, and other prestigious scientific publishers, ChemPort has made the full-text of more than 1800 chemistry-related journals available on Internet within 3 years. ChemWeb[3], a virtual chemistry community Web site has attracted more than 100,000 members at the end of 1999, it's approaching the scale of the largest chemical society of the real world, the American Chemical Society.

However, it is not easy for a chemist to find a specific chemical information in need on Internet, for the information is scattered on Internet in the inconceivably large space, the size is estimated to be 800 million pages as of February 1999, encompassing about 6 terabytes of text [4]. The basic way to solve the problem is to have the Internet resources indexed. There are 2 major approaches up to now that can help chemists making use of the chemical information on Internet. One is the search engine like Altavista, another is the Internet chemistry resources navigator (also called as links, directories, no definite terms have been widely accepted yet), the human compiled Internet chemistry resources guide. Both approaches have the history of about 5 years.

Search engine is not a solution dedicated to chemistry and has goal of indexing all Web, but none of search engine indexed more than 16% of the total publicly indexable Web since December 1997[4]. With their technical limits, the available search engines only partially meet the desperate need for an effective means of finding chemical information on Internet [5].

Among the numerous efforts to compile and structure the Internet chemistry resources,

some Internet chemistry resources navigators with comprehensive resources indexed are recognized. Gary Wiggins should be a pioneer [6], his article "Chemistry on the Internet: The Library on Your Computer" [7] has been considered as a must read in the CHMINF-L mailing list. Sheffield's ChemDex [8] now has more than 4000 links and short descriptions for some of the resources are available. Links for Chemists [9] of the University of Liverpool now lists over 7500 Chemistry resources on the WWW, but only providing links. It is easier to just provide links for this kind of navigator site, but more difficult to link the resources on a review or selected basis. ChIN page [10] has a similar goal as these navigators to help chemists making use of the Internet chemistry resources, but the resources linked on ChIN page has been carefully selected [11]. ChIN page will be introduced in a little bit detail in the following.

2 The ChIN and ChIN Web Page

2.1 About ChIN

ChIN (the international Chemical Information Network) was initiated in 1990 by UNESCO, the interim secretariat of ChIN was located in the former Yugoslavia. Owing to the well known reason, the first steering Committee and the 1st Regional Seminar on "Chemical Information" were held on Aug. 30, 1991 in Beijing. The goal of ChIN is **to launch and carry out activities to promote chemical information as an efficient means for national and international cooperation and development in the chemical sciences** .

ChIN became one of the projects, Federation of Asian Chemical Societies (FACS) after the 4th Asian Chemical Congress. The major ChIN's activity has been a series of ChIN symposia in combination with the Asian Chemical Congress every two years since 1995.

2.2 ChIN Web Page: a Navigator for Chemical Information on Internet

With the well recognition of the new trend of Internet as an important media for chemical information and the progress of chemical resource discovery on Internet, the construction of ChIN Web page started in November 1996 under support of Beijing Office and Jakarta Office of UNESCO. There are two goals for ChIN's Web page, one is to archive ChIN's activities, another one, is to help chemists be aware of the fast development of chemical resources on Internet and make use of them. The second goal was intensified by a research project on Internet chemistry resources discovery supported by the National Natural Science Foundation of China. Now the page becomes the best chemical site with comprehensive directories of chemical resources on Internet in China.

ChIN page was on Internet 24 hours a day, 7 days a week from May 1998. It has

received steady increased access, the total requests is over 450,000 since then. Half of the visitors are from China.

More than 1500 selected chemical resources on Internet are indexed on ChIN Web page under 20 categories up to now. The subject of the indexed categories are carefully selected to cover the basic tools such as chemical databases and software, and the basic chemical information about meetings, organizations, mailing lists, books and patents.

Some special features of ChIN page are listed as the following:

(1) Aims at selected resources: Both the category subjects and the indexed items in each category are carefully chosen on ChIN page. As chemical databases and chemical software are the basic tools for chemists, they are chosen as the primary lists. New applications such as e-journals and e-conferences on Internet are emphasized on ChIN page. Lists on chemical meetings, organizations, mailing lists, important news, selected publications and books as well as patent information are available. A special category about chemical information service in China can be found on ChIN page. Categories with gateway to other famous comprehensive lists and search engines are also provided.

(2) Information base approach: Instead of providing only a hyperlink or a link with short description about the resource indexed, a summary page is created for most of the chemical resources included on ChIN page, which describes the indexed resources in more detail. The whole set of the summary pages form the information base, where the full-text searching can be performed by Internet users for more precise and fast locating of information on ChIN page.

(3) Knowledge Accumulate: Some categories are created on ChIN page to accumulate expertise postings in mailing lists and newsgroups, which often provides useful clue for chemical information. e.g., the category of "How to Find Property Data" is an effort to accumulate the knowledge on physical and chemical property data. The combination of it with the category of "Chemical Databases" on ChIN page might provide more hints for physical property data on Internet or about other sources.

3. The Future of ChIN Page

A completely new version of ChIN page is under construction and expected to release within year 2000. The new ChIN page will has English and Chinese version separated. Multi-entry for a specific resource and more internal links to connect related resources within ChIN page will be available for easy location of the indexed resources. The daily maintenance will be based on database and new updating information can be delivered to chemists automatically.

We hope that ChIN page can be a basic tool for chemists to find chemical information

on Internet. It might be evolved into a chemical virtual community site in future.

References

1. Hobbes' Internet Timeline v5.0, http://info.isoc.org/guest/zakon/Internet/History/HIT.html
2. ChemPort, http://www.chemport.org/
3. ChemWeb.com, http://ChemWeb.com/
4. Steve Lawrence, Lee Giles, Accessibility and Distribution of Information on the Web Nature, 400, 107-109, 1999. http://wwwmetrics.com/
5. Lucas Introna, Helen Nissenbanm, Defining the Web: The Politics of Search Engines , Computer, 33(1), 54-62, 2000
6. CHEMINFO, http://www.indiana.edu/~cheminfo/
7. Gary Wiggins, "Chemistry on the Internet: The Library on Your Computer", J. Chem. Inf. & Comput. Sci., 38(6), 956-, 1998
8. ChemDex, http://www.shef.ac.uk/~chem/chemdex/
9. Links for Chemists, http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html
10. ChIN page, http://chin.icm.ac.cn/
11. Xiaoxia Li, et al, ChIN's Web Page : Selected Chemical Resources on Internet", presented at the 1st Chemistry and the Internet Conference, Irvine, CA, US, Sep. 12-15, 1998, http://www.chemint.org/chemint98/

部会役員会・委員会報告

平成１２年度第１回　電子ジャーナル編集委員会　議事録

日　時：４月３日（月）13:00～15:00
場　所：日本化学会会議室
出席者：時田澄男、高田 章、船津公人、北尾 修、相馬 融、中田吉郎、中野英彦、中山伸一、清水弘一
議　題：

（１）　新委員自己紹介

（２）　電子ジャーナル準備状況討議

執筆者の e-mail アドレスの記入例をスタイルファイルに入れる。

英語要旨の部分はそれだけで内容がわかるように、図・表等の番号は記入しないようにする。

英文の論文の場合、和文要旨を付けるようにする。

要旨の字数目安（英文１５０字、和文４００字）を入れる。

投稿料の代りに、保存用媒体（CD-ROM）を有償で頒布する、１投稿あたり１枚とする、現在のところ、委員会が CD-W で書き込んで作成する予定、今後早急に投稿料を決定する必要がある。

デフォルトの書体は必要に応じて一部変更可（例えばイタリック体使用）とする。

論文受付日は (received ***, accepted ***) の形式に統一する、編集委員会で記入する旨明記する。

キーワード部分について英文と和文を併記するか要検討。

原稿 NO.（通し番号で論文のヘッダー部分に付く）は編集委員会で記入する。

スタイルファイルにページ数（個別の論文単位で付く）を入れる。

英語要旨は、本文（和文）の後に改ページして付ける。

（３）　今後の予定

大筋の目標：次の情報化学討論会の前に電子ジャーナルが運用している状態にする。

船津編集委員長がテストシステムを利用した電子ジャーナルの一連の流れをトレースする、スタイルファイルあるいはホームページに関する問題点等はメールでやりとりする。

５月中には e-mail 等で部会員に連絡する。

電子ジャーナル委員は自分の論文をもとにスタイルファイルを用いた論文作成、PDF 化を早急に実施する。

部会役員は早急に論文投稿に協力する。

次回委員会の開催日は未定。

以上

平成１２年度第１回　役員会　議事録

日　時：平成１２年４月３日（月）１５時～１８時
場　所：日本化学会会議室
出席者：時田澄男，高田 章，船津公人，相田美砂子，有國 尚，北尾 修，工藤喜弘，相馬融，高畠哲彦，中田吉郎，中野英彦，中山伸一，藤田眞作，藤原 巌，吉田元二，清水弘一
議事内容
（１）平成１１年度事業報告および会計報告
工藤委員より第２２回情報化学討論会の決算報告と第１２回情報化学講習会についての報告があり，了承された。
清水部会担当より平成１１年度情報化学部会事業報告と会計報告があった。平成１１年度の赤字原因について議論が行われた後，了承された。
（２）平成１２年度事業計画案および予算案
清水部会担当より平成１２年度事業計画案と予算案が示された。併せて高田委員から化学会の他の部会予算との比較資料が提示され，収入増と支出減の方策が提案された。個人会員の会費の値上げは行わず，会員数の増加と広告収入の増大を図り，会員に対する現状のサービスを維持することで，平成１２年度事業計画案と予算案は了承された。
（３）第２３回情報化学討論会
藤田委員より第２３回情報化学討論会について報告があった。会場費用が高いため期間を２日としたこと，会期が早まったため全体の日程が繰り上がっていること，構造活性相関シンポジウムとの合同のセッションを設けたこと，佐々木先生の追悼行事を行うことなどが説明され了承された。
（４）ＪＣＡＣ
船津委員より部会が発行する電子ジャーナルＪＣＡＣの進捗状況について報告があった。さらに第２３回情報化学討論会までにある程度の数の論文が集るよう努力して欲しい旨，要請があった。
（５）ＱＳＡＲとの打ち合わせ会
時田委員長より平成１２年２月２１日（月）に行われたＱＳＡＲとの打ち合わせ会についての報告があった。情報化学討論会と構造活性相関シンポジウムの併催についての議論の結果，第２３回情報化学討論会で構造活性相関シンポジウムとの合同セッションを行うことが決まったことなどが説明された。
（６）ＣＩＣＳＪ
有國委員よりＣＩＣＳＪ編集の進捗状況について報告があった。第２３回情報化学討論会の会期が早まったことを受けて，５号に予定していた討論会特集を４号に繰り上げることとなった。
（７）その他
高田委員より春季年会のポスター賞の推薦者について提案があり了承された。
拡大編集委員会を５月１８日（木）３時から行うこととした。

以上

◈編集後記

ＣＩＣＳＪ１８巻２号　特集：２１世紀に期待される情報化学をお届けします。本号は、２１世紀に向けて情報化学に関して、化学工業界で指導的な立場におられる方々から様々な提言を頂きました。
こうした提言に答えるべく、本誌もその一翼を担えるようなテーマや特集を編集し、皆様にお届けできるよう編集委員一同努力する次第です。
本年は、新しく時田部会長の下、電子ジャーナルの出版を始め、様々なテーマに取り組んでいきます。これまでも部会活動の進捗について本誌を通じてお伝えしてきましたが今後一層、充実していきたいと考えています。

本誌が皆様のお手元に届く頃は、春爛漫、桜も散りかけていると思いますが、当地パロアルトの桜は、今が満開で、日本の桜はどうだろうと思いつつ、時差ぼけの頭をだましながら後記を書いています。

CICSJ Bulletin Vol.18, No.4, August 2000

このページは「日本化学会・情報化学部会」の責任において運営されています。

目次

・特集：第23回情報化学討論会
第23回情報化学討論会　プログラム
第28回構造活性相関シンポジウム　プログラム
第23回情報化学討論会　発表の概容

・部会行事
情報化学部会総会のお知らせ

・部会記事
電子ジャーナル（Journal of Computer Aided Chemistry）の創刊と投稿の御願い
部会役員会・委員会報告

・編集後記

第 23 回 情 報 化 学 討 論 会

主催 日本化学会情報化学部会

共催 日本薬学会，日本農芸化学会，日本分析化学会，日本化学プログラム交換機構

会期 2000 年 10 月 26 日 (木)-27 日 (金) (構造活性相関シンポジウムと併催)

会場 京都リサーチパーク (京都市下京区中堂寺南町 17 番地 Tel: 075-256-6600)

- 一般講演，キーノート講演，情報化学部会総会: 東 1 号館 4 階サイエンスホール
- 特別講演: 西 4 号館地階バズルーム
- ポスターセッション: 東 1 号館 4 階ホワイエ
- 展示会: 東 1 号館 4 階 AV 会議室
- 懇親会: 東 1 号館 1 階アトリウム

交通 JR 山陰線で京都駅から一駅，丹波口下車，徒歩 5 分．京都駅からタクシーで 10 分．

講演時間 一般講演は，口頭 25 分 (講演 20 分，討論 5 分)，または口頭 15 分 *(講演 12 分，討論 3 分)．

ホームページ http://www.chem.kit.ac.jp/cicsj23/

プログラム

第 1 日・午前　10 月 26 日 (木)

キーノート講演 9:30–10:10

J01 The Use of Crystallographic Data to solve Real Problems in Drug Design and Other Applications.　(Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK) Stephen J. Maginn

一 般 講 演 10:15–11:10 — 化学情報学 1—

J02 情報化学システム CGS の開発 (10) 巨大 CVReF グラフ符号データベースのためのグラフ Viewer.　(日本情報化学システムズ) 内野 正弘

J03* 情報化学システム CGS の開発 (11) 計算機言語 Language 兀の開発状況　(日本情報化学システムズ) 内野 正弘

J04* Multi-Layered Cyclic Fence Graph(MLCFG) 群の同相関係の解析　(お茶大大・人間文化研究科) ○夏 菁彦 (お茶大・理) 細矢 治夫

一 般 講 演 11:15–12:00 — 化学情報学 2—

J05* SDBSWeb アクセスログのマイニング　(物質研) 早水 紀久子，○齋藤 剛，矢部 篤子，衣笠 晋一，(先端情報計算セ) 塚本 啓一，小島 功

J06* JST 高分子データベース PoLyInfo—高分子のデータモデル—　(科技団) ○塩野 圭介，前田 知子，飯室 茂，間下 健太郎，(三菱総研) 長阪 匡介，高枝 佳男，吉成 泰彦，関田 大吾，松田 和宏

J07* JST 高分子データベース PoLyInfo —化学構造検索システムの開発—　(科技団) ○川島 潤，前田 知子，飯室 茂 (三菱総研) 関田 大吾，吉成 泰彦，長阪 匡介

情報化学部会総会 12:00–12:20

第1日・午後　10月26日(木)

ポスターセッション 13:30 15:30

[構造活性相関シンポジウムと同じ会場で開催] 13:30 ～ 14:30（奇数番号），14:30 ～ 15:30（偶数番号）

―化学情報学―

JP01 双方向性薬物催奇形性データベース・システム構築の試み　(徳島大大・薬) ○石井 真吾，山内 あい子，木原 勝 (徳島大・薬) 中馬 寛，寺田 弘

JP02 毒性情報を中心とした化学物質情報データベースの構築について　(名古屋市環境研) ○山神 尚人，山守 英朋

JP03 内分泌かく乱候補物質および関連物質データベースの開発 2　(インターネットアトラス) ○高野 英雄，友利 和秀 (国立医薬品食品衛生研) 中野 達也，小谷野 和郎，神沼 二眞

JP04 医薬品一般名称のデータベース化（その 2）　(データインデックス) ○鈴木 聡子，横山 美和，川出 達 (国立医薬品食品衛生研) 瀧 明子，長谷川 式子，山本 美智子，小峰 啓，中野 達也，宮田 直樹，神沼 二眞

JP05 生体影響化学物質データベースのＸＭＬ化　(科技団) ○志村 和樹

JP06 立体化学教育支援システムの開発　(豊橋技科大) ○加藤 淳，酒井 和行，加藤 博明，阿部 英次

JP07 タンパク質三次元構造モチーフデータベースの作成　(豊橋技科大) ○田所 哲男，加藤 博明，高橋 由雅，阿部 英次

JP08 匂いと三次元構造式の相関の解析　(豊橋技科大) ○村上 剛，長屋 崇，加藤 博明，阿部 英次

JP09 インターネット・ジャーナル構築支援システムの開発　(豊橋技科大) 飯田 晋一，後藤 仁志

JP10 XyM Java —XyM Notation の Java による実装　(京都工繊大大・工芸) ○田中 伸也 (京都工繊大・工芸) 藤田 眞作

JP11 反応知識 DB を用いた副反応評価システムの開発　(三井化学) ○塚本 幸治 (科技団・さきがけ研究 21) 佐藤 寛子 (豊橋技科大) 船津 公人

JP12 多変量化学データ視覚化ツール MolSpace の開発　(豊橋技科大) ○紺地 充，高橋 由雅

―理論化学・計算化学―

JP13 フラグメント分子軌道法による解析的微分を用いた構造最適化計算　(国立医薬品食品衛生研) ○中野 達也，神沼 二眞 (生命工学工研) 上林 正巳 (富士総合研) 佐藤 智之 (筑波大・化) 稲富 雄一 (電総研) 秋山 泰，古明地 勇人 (産技融合研) 長嶋 雲兵 (大阪府大・総合科学) 北浦 和夫

JP14 水クラスター（H3O+(H2O)n, n=1-5）におけるプロトン移動についての理論的研究　(広島大・理) ○三宅 敏子，山根 庸平 (広島大大・理) 相田 美砂子 (大阪大・産研) 山高 博 (太平洋北西国立研)Michel Dupuis

JP15 水イオンクラスターの衝突断面積に関する理論的研究　(早大理工) ○國見 貴之，市川 尚志，中井 浩巳

JP16 CH... π相互作用を考慮した結晶力場の構築 (豊橋技科大) 福井 正和, 後藤 仁志, 小貫 慶昭, 大澤 映二

JP17 2,2'-架橋ビスジメドン類における大環状水素結合 (京都大大・理) ○今城 文雄 (島根大・総合理工) 藤原 隆二

JP18 ベンゾジキサンテンエンドペルオキシド及びその類縁化合物のプロトン付加体に関する分子軌道計算 (埼玉大・工) ○太刀川 達也, 時田 澄男

JP19 mannose-bindnig lectin の糖鎖選択性に関する理論的研究 (東海大・電子計算セ) ○合田-日向寺 祥子, 井上 靖 (東海大・工) 水落 次男 (日本電気) 高田 俊和 (お茶大・理) 細矢 治夫

JP20 アミノ酸側鎖-核酸塩基対間の相互作用自由エネルギーマップ計算 (広島大・理) ○吉田 智喜, 西村 友宏 (広島大大・理) 相田 美砂子 (理研) M. Gromiha, F. Pichierri, 皿井 明倫

JP21 タンパク質内電子移動反応系におけるレドックス中心の密度汎関数法による分子軌道計算 (九工大・情報工) ○恵良 信, 吉廣 保, 佐藤 文俊, 柏木 浩

JP22 タンパク質全電子計算のための自動計算プログラムの開発 (九工大・情報工) ○時枝 浩司, 吉廣 保, 佐藤 文俊, 柏木 浩

JP23 量子化学計算による常温溶融塩の融体構造に関する基礎的研究 (早大・理工) ○廣田 光仁, 齋藤 永宏, 不破 章雄

JP24 リチウムイオン2次電池の材料設計 (物質研) 松本 高利, ○田辺 和俊 (融合研) 長嶋 雲兵

JP25 炭素材料の振動構造に関する理論的研究 (京都大大・工) ○加来 賢一, 張 軫鉉, 佐藤 徹

JP26 大環状ムスコンの多配座解析 (豊橋技科大) ○山口 貫司, 後藤 仁志 (新潟大大・自然科学) 萩原 久大

JP27 密度汎関数法による Et-St 共重合触媒の反応解析 (電気化学工業・中研) ○引馬 尚子, 戸木田 裕一

JP28 有機赤色蛍光材料の分子設計 (埼玉大・工) 時田 澄男, ○杉山 孝雄

JP29 単環状共役化合物の最安定構造と電子数: 平面型構造はシグマ電子のみで形成できるか (明治薬大) 溝口 則幸

JP30 4次元原子軌道の表現方法に関する研究 (埼玉大・工) 時田 澄男, ○木戸 冬子 (お茶大・理) 細矢 治夫

JP31 分子のまわりの静電ポテンシャル, クーロン力体感システム—電気力線の立体表示と力覚提示— (名古屋大大・人間情報) ○吉田 俊介 (中京大・情報科学) 安田 浩司, 鬼頭 良彦, 鈴木 孝彰, 秦野 やす世, 宮崎 慎也

JP32 大規模系のための汎用分子動力学統合システム TACPACK2000 の開発. その2 システム化技術 (富士通) ○南 多善 (富士通九州) 吉嶋秀明 (富士通) 紙谷 希, 三井崇志, 立川 勉 (物質研) 三上 益弘, 篠田 渉 (産技融合研) 川田 正晃, 森川 良忠, 古明地 勇人, 長嶋 雲兵 (東北工研) 池庄司 民夫, 劉 子敬 (名古屋工研) 小川 浩 (大阪工研) 田中 真悟, 香山 正憲 (産技融合研) 寺倉 清之

—ケモメトリックスおよび関連ソフトウェア—

JP33 医薬学データのための回帰, 判別手法に対する計算機統計学的手法の導入 (大阪

大大・薬) ○宮田 幸治 (大阪大・薬) 西村 枝里子 (大阪大大・薬) 岡本 晃典, 黒川 絵美子, 田中 優子 (大阪大・遺伝情報実験施設) 黒川 顕, 安永 照雄 (大阪大・医) 藤原 英明 (大阪大大・薬) 高木 達也

JP34 有機化合物の蒸気圧推算 (旭硝子・中研) ○山本 博志

JP35 反応試薬機能予測ニューラルネットワークモデルの化学実験による検証とフィードバック (科技団さきがけ研究 21, 理研) ○佐藤 寛子 (理研) 長澤 和夫 (豊橋技科大) 船津 公人 (お茶大) 鷹野 景子 (理研) 中田 忠

JP36 Kohonen ネットワークと MultiwayPLS 法を用いた新しい 3D-QSAR 手法の開発—静電的相互作用と疎水的相互作用の利用について— (豊橋技科大) ○松岡 成郎, 荒川 正幹, 船津 公人

JP37 ケモメトリックス手法を用いた材料開発支援プログラムの開発 (4) —ニューラルネットワークの予測性についての検討— (豊橋技科大) ○棚田 東作, 荒川 正幹 (三井化学) 西村 竜一 (アイセロ化学) 神村 基和 (豊橋技科大) 船津 公人

JP38 ニューラルネットワークを用いたフロン代替化合物の溶解度推算 (地球環境産業研) ○浦田 新吾 (旭硝子・中研) 入澤 潤 (地球環境産業研) 玉井 良一, 黒河 勇治 (物質研) 関屋 章

JP39 遺伝的アルゴリズムを用いた材料作製プロセスにおける反応機構解析法に関する研究 (静岡大・工) ○高橋 崇宏 (豊橋技科大) 船津 公人 (静岡大・工) 江間 義則

JP40 遺伝アルゴリズムを用いた剛球モデルに基づくタンパク質立体構造比較 (2) 二次構造を考慮した比較法の検討 (図書館情報大) ○中山 伸一, 光貞 英一郎, 斉藤 梓, 滝澤 強志, 吉田 政幸

—ゲノム情報と創薬— (構造活性相関シンポジウムとの共通セッション)

JKP1 SNPs 解析のデータマイニングからの考察 (富士通) ○湯田浩太郎

JKP2 タンパク質三次元共通構造特徴の自動認識システム AIM の開発 (豊橋技科大) ○加藤 博明, 高橋 由雅, 阿部 英次

JKP3 SELDI プロテインチップ技術を用いたバイオマーカー探索 (サイファージェン) 有國 尚, 斉藤 賢治

(ポスターセッション末尾)

キーノート講演 15:50–16:30

J08 化学構造からのデータマイニング (関西学院大 情報メディア教育セ) ○岡田 孝

一 般 講 演 16:35–17:20 —ケモメトリックスおよび関連ソフトウェア—

J09* 化学物質の毒性の予測 (物質研) ○田辺 和俊, 松本 高利

J10* 分子の構造活性相関のためのニューラルネットワークシミュレータ: Neco (NEural network simulator for structure-activity COrrelation of molecules) の開発—ペリラルチンの疎水性パラメータ LogP の予測— (お茶大大・人間文化研究科) ○高橋 梨紗, 細矢 治夫, 長嶋 雲兵

J11* 石炭の化学情報解析 (一関高専・物質化工) ○貝原 巳樹雄, 佐藤 寿克, 高橋 正幸, 高橋 信行

特 別 講 演 17:40–18:40

KJ Chemo-Bioinformatics and Comparative QSAR (Pomona College, USA) Corwin Hansch

懇 親 会 19:00–

第2日・午前 10月27日(金)

一 般 講 演 9:00–10:40 —故佐々木慎一教授追悼セッション —

J12* 情報化学と佐々木慎一先生 (豊橋技科大) 阿部 英次

J13* ヒトのm DNA のイントロンの構造 (山形大・工) 木ノ内 誠, 坂井 孝光, 金谷 重彦, ○工藤 喜弘

J14* バクテリア tDNA の検出 (山形大・工) ○木ノ内 誠, 金谷 重彦, 工藤 喜弘

J15* 構造類似性解析ツール TOPSIM の開発 (豊橋技科大) ○高橋 由雅, 金畑 竜彦, 平井 貴朗, 丸岡 芳子

J16 立体化学の規範的コード化法 CAST による分子の相対および絶対立体配置の識別 (科技団さきがけ研究21, 理研) ○佐藤 寛子 (理研) 越野 広雪 (豊橋技科大) 船津 公人 (理研) 中田 忠

J17 CAST を用いた NMR データベースと立体化学を考慮した NMR 化学シフト精密予測システム (理研) ○越野 広雪 (科技団さきがけ21, 理研) 佐藤 寛子 (豊橋技科大) 船津 公人 (理研) 中田 忠, (理研) 鵜澤 洵

特 別 講 演 11:00–12:00

JK 化学情報システムの現状と将来 — インターネット時代を迎えて (化学情報協会) ○千原 秀昭

第2日・午後 10月27日(金)

キーノート講演 13:20–14:00

J18 計算機化学による有機反応経路の追跡 (奈良教育大学) ○山辺 信一, 山崎 祥子

一 般 講 演 14:05–15:10 —理論化学・計算化学 1—

J19* 無電解析出における還元剤酸化反応の Ab initio 分子軌道法による解析 (早大理・工) ○玉木 亜弥子, 中井 浩巳, 本間 敬之, 逢坂 哲彌

J20 色素増感太陽電池に関する理論的研究 (物質研・東京大大・工) ○北尾 修 (物質研) 小川 哲司, 青木 孝造, 荒川 裕則

J21 水溶液における有機化学反応への ab initio MD 法の適用 (広島大大・理) ○相田 美砂子 (大阪大・産研) 山高 博 (太平洋北西国立研)Michel Dupuis

一 般 講 演 15:15–16:10 —理論化学・計算化学 2—

J22 シリカガラスの圧密化と無定形多形 (polyamorph) (旭硝子・中研) 高田 章

J23* periodicDFT による硫酸化ジルコニア表面の超強酸性の研究 (宇部興産) ○叶木 朝則, 角田 剛久, 後口 隆, 八尾 滋

J24* ジルコノセン／メチルアルモキサン系オレフィン重合触媒の活性点構造に関する理論的検討 (三菱化学) ○遠藤 潤, 岡崎 慶二 (東京大大・工) 中野 晴之, 平尾 公彦

一 般 講 演 16:20–17:00 —理論化学・計算化学 3—

J25* 大規模系のための汎用分子動力学統合システム TACPACK2000 の開発．その 1 概念設計 (物質研) ○三上 益弘，篠田 渉 (産技融合研) 川田 正晃，森川 良忠，古明地 勇人，長嶋 雲兵 (東北工技研) 池庄司 民夫，劉 子敬 (名古屋工技研) 小川 浩 (大阪工技研) 田中 真悟，香山 正憲 (産技融合研) 寺倉 清之 (富士通) 南 多善 (富士通九州) 吉嶋 秀明 (富士通) 紙谷 希，三井 崇志，立川 勉

J26 新しい量子分子動力学ソフトウェアの開発と応用 (東北大院工) ○久保 百司，黒川 仁，鈴木 研，高見 誠一，宮本 明 (広島国際学院大工) 今村 詮

一 般 講 演 17:05–18:00 —理論化学・計算化学 4—

J27* 密度汎関数法プログラム ProteinDF を用いたヘムタンパク質の全電子計算 (九工大・情報工) 佐藤 文俊，吉廣 保，恵良 信，○柏木 浩

J28* TS1 活性中心構造最適化に及ぼすクラスターモデルサイズ効果 (宇部興産) ○後口 隆，八尾 滋

J29 計算振動分光学—密度汎関数法に基づいた約 500 種の化合物の振動解析 (広島大大・理) ○吉田 弘，武田 久美，岡村 潤子，江原 明人，松浦 博厚

参加登録予約

参加登録予約締切 9 月 22 日 (金)[必着]

参加登録予約申込方法 記入項目: 申込 1 名ごとに，氏名 (ふりがな)，所属，電話，ファックス，懇親会出欠，要旨集前送 (郵送料 1,000 円) 希望の有無，昼食予約の有無 (1 日 (26, 27 のいずれか指定) または 2 日)，振込金額，振込日．入金確認をもって予約完了とします．

なお，会場の周辺にはレストランがあまりありませんので，会場内レストランにバイキング形式 (またはお弁当) の昼食を準備いたします (1 人 1 日 1,200 円，予約のみ)．予約される方は，参加登録予約の際にお申込み下さい (1 日 (26, 27 のいずれか) あるいは 2 日と明記のこと)．昼食代も同時にお振込下さい．

送金方法 郵便振替，第 23 回情報化学討論会 00950-6-155544．領収書は発行しません．

参加登録費 (要旨集合本 1 冊を含む) (構造活性相関シンポジウムも聴講可能)

(一般) 予約 8,000 円，当日 10,000 円．(学生) 予約 4,000 円，当日 6,000 円．要旨集前送郵送料 1,000 円．

合同懇親会 10 月 26 日 (木)．会費: 予約 7,000 円．当日 9,000 円．

申込先 〒 606-8585 京都市左京区松ヶ崎御所海道町，京都工芸繊維大学工芸学部物質工学科 藤田眞作気付 情報化学討論会．

Tel: 075-724-7537 E-mail: cicsj23@chem.kit.ac.jp

Fax: 075-724-7580 ホームページ: http://www.chem.kit.ac.jp/cicsj23/

第28回構造活性相関シンポジウム

(第23回情報化学討論会と併催)

日時　平成12年10月26日（木）～27日（金）

会場　京都リサーチパーク

[京都市下京区中堂寺南町17番地 (Tel: 075-256-6600) http://www.krp.co.jp/]

主催 日本薬学会医薬化学部会

共催 日本化学会，日本農芸化学会，日本分析化学会，日本農薬学会，構造活性相関研究会

講演時間 招待講演は40分，一般講演は口頭25分（講演20分，討論5分）または口頭15分＊（講演12分，討論3分）

プログラム

第1日　10月26日(木)

招待講演，一般講演　9:00～12:30

—ゲノム情報と創薬—

K01 招待講演 ファーマコゲノミクスと研究開発戦略（田辺製薬医療情報部） 宮城島 利一

—吸収・分布・代謝・毒性・環境毒性—

K02 招待講演 QSAR手法による化学物質の哺乳動物・生態毒性予測（住友化学工業生科研・阪大先端センター）松尾 昌季

K03 Rapid, Automated Prediction of Abraham LFER Descriptors, and Their Use for Predicting Drug Transport Properties (Sirius Analytical Instruments Ltd.) ○John Comer, Karl Box

K04* 内分泌撹乱物質のバーチャルスクリーニング（医薬分子設計研究所）○久保亜抄子，井上 典子，水谷 実穂，富岡 伸夫，板井 昭子

—QSAR基本パラメータと解析手法—

K05 招待講演 疎水性パラメータの測定と予測 — ヘテロ芳香族化合物を中心として —（神戸薬大）山上 知佐子

K06 超高速分子計算を用いる生体関連分子の活性・機能予測システム(1)　— 分子の3次元構造記述子とQSAR —（徳島大薬）○中馬 寛,（富士総合研）馮 誠,（日本たばこ産業）岡島 伸之,（富士総合研）稲垣 祐一郎，大谷 泰昭,（産業技術融合領域研）長嶋 雲兵,（九大院システム情報科学）村上 和彰

K07 表面プラスモン共鳴センサーを用いたConcanavalin Aの単糖誘導体分子認識の解析（徳島大薬）○後藤　了，増井 美由紀，白水 真貴，桝田 恭子，中馬 寛，寺田 弘

ポスターセッション [情報化学討論会と同じ会場で開催]

13:30～14:30（奇数番号），14:30～15:30（偶数番号）

—吸収・分布・代謝・毒性・環境毒性—

KP01 グルタミン酸トランスポーターサブタイプに対する輸送阻害剤の結合配座モデルの探索（北里大薬）○中込 泉，広野 修一

KP02 植物由来トリテルペンによるカドミウム毒性軽減のメカニズムの解明（東北大院薬）廣谷 功，○高橋 泰輔，三浦 伸彦，永沼 章，坂本 尚夫

KP03 CoMFA を用いたダイオキシン類の構造活性相関解析（国立医薬品食品衛生研究所）○小谷野 和郎，中野 達也，神沼 二眞

KP04 エストロゲン受容体リガンド結合エネルギーの計算による予測（富士総合研究所計算科学技術研究センター）○福澤 薫，（国立医薬品食品衛生研究所）小谷野 和郎，中野 達也，中田 琴子，神沼 二眞

—QSAR 基本パラメータと解析手法—

KP05 液体クロマトグラフィーにより log P を予測する際の固定相および移動相の選択基準（神戸薬大）山上 知佐子

KP06 フロー分析法（流量比法）に基づく分配係数の測定（徳島大薬）○田中 秀治，中馬 寛

KP07 遺伝的アルゴリズムによる関数近似と QSAR への応用（豊橋技科大）○田村 広志，高橋 由雅

KP08 静電相互作用の評価のための電荷計算法の比較（田辺製薬創薬研）福島 千晶，中尾 和也，○清水 良

—医薬—

KP09 PPAR γ アゴニスト活性を有するチアゾリジン誘導体のドッキングと構造活性相関（三共創薬化学研）○粕谷 敦，岩田 依子，宮本 秀一（三共化学研）高村 実，柳澤 宏明

KP10 3D-QSAR of Antitumor 3-Arylisoquinoline Derivatives（全南大薬）趙 元済

KP11 ACAT 阻害活性を有する Pyripyropene 誘導体の 3 次元定量的構造活性相関：立体配座集団からの結合配座推定と CoMFA 解析（北里大薬）○伊東 朱美，合田 浩明，砂塚 俊明，（北里研究所）大村 智，（北里大薬）広野 修一

KP12 細胞毒性環状デプシペプチド arenastatin A の活性コンフォメーションの探索（阪大院薬）村上 啓寿，○田村 理，高木 達也，青木 俊二，小林 資正

KP13 サリチル酸およびその異性体の抗酸化作用の比較（東北薬大）○遠藤 勝也，須藤 英典，木皿 里子，松崎 久夫

—農薬—

KP14 非ステロイド型昆虫脱皮ホルモン類縁体の QSAR — 鱗翅目昆虫と鞘翅目昆虫に対する殺虫活性の比較 —（京大院農）○中川 好秋，（Department of Crop Protection, Gent University）Guy Smagghe，Luc Tirry，（京大院農）上野 民夫

—コンビナトリアルケミストリーと創薬—

KP15 薬物候補構造設計のための仮想化合物ライブラリ自動生成システムの開発（豊橋技科大）○田畑 拓，高橋 由雅

—構造生物学と創薬—

KP16 基準振動解析による MHC class I 分子の alpha ヘリックスの動的挙動（北里大薬）○栗原 庸次，竹田-志鷹 真由子，津田 幸司，野島 浩幸，（北里大理）米田 茂

隆，神谷 健秀，(北里大薬) 梅山 秀明

KP17 gp120(HIV-1) による CD4 のくわえ込み運動 ：基準振動解析（北里大薬）○大内千都子，栗原 庸次，竹田-志鷹 真由子，(北里大理) 神谷 健秀，(北里大薬) 梅山 秀明

KP18 ヒト血清アルブミン（HSA）とそのサイト II に結合する薬物 (Tolmetin、(R)-Ibuprofen、(S)-Ibuprofen) との複合体の分子動力学シミュレーション（富山化学工業）○ 原 英二，(北里大薬) 松下 泰雄，山乙 教之，広野 修一

KP19 分子動力学法による薬物の立体配座サンプリングと 3D 検索法を用いたヒト血清アルブミンに対する薬物結合サイトの同定法（北里大薬）○山乙 教之，松下 泰雄，広野 修一

KP20 Rational Procedure for 3D-QSAR Analysis using TRNOE Experiments and Computational Methods: Application to Thermolysin Inhibitors (School of Pharmaceutical Sciences, Kitasato University) ○ Awwad A.R. Salama, Hiroaki Gouda, Noriyuki Yamaotsu, Shuichi Hirono

KP21 ヒト特異的細胞溶解毒素インターメディリシンからの創薬に向けて：膜結合ドメインの構造と機能（徳島大工・名大院・生命農学）○大倉 一人，(徳島大工) 服部 加奈子，大西 大樹，大和 美紀，(徳島文理大健康研) 津下 英明，勝沼 信彦，(徳島大工) 高麗 寛紀，長宗 秀明

KP22 蛋白—リガンドの結合自由エネルギー予測の現状（医薬分子設計研究所）○高松 善宏，武藤 進，富岡 伸夫，板井 昭子KP23　A QSAR Study on Binding of Indanone Moiety in the Complexes of Acetylcholinesterase and Indanone-Benzylpiperidine Inhibitors（分子研）藤田 忠男

—ゲノム情報と創薬—　（情報化学討論会との共通セッション）

JKP1 SNPs 解析のデータマイニングからの考察（富士通）湯田 浩太郎

JKP2 タンパク質三次元共通構造特徴の自動認識システム AIM の開発（豊橋技科大）○加藤 博明，高橋 由雅，阿部 英次

JKP3 SELDI プロテインチップ技術を用いたバイオマーカー探索（サイファージェン鎌倉研）有國 尚，斉藤 賢治

招待講演，一般講演　15:30 ～ 17:25

—農薬—

K08 招待講演 農薬の構造活性相関（日本曹達 小田原研）中山 章

K09 アゾール系殺菌剤メトコナゾール，イプコナゾール誘導体の構造活性相関 —水酸基の役割 —（呉羽化学生物医学研）○唐沢 真美，(呉羽化学錦総合研) 伊藤篤史，熊沢 智，　新関 孝高，(呉羽化学化学品開発部) 最勝寺 俊英，(徳島大薬) 中馬 寛

K10 クロロニコチニル系殺虫剤の殺虫活性-受容体結合親和性相関および構造-活性相関解析（京大院農）○西脇 寿，(大阪府大先端科学研) 桐山 和久，(京大院農) 佐藤 一行，赤松 美紀，中川 好秋，(大阪府大先端科学研) 西村 勁一郎，(岐阜大教育) 利部 伸三，(京大院農) 上野 民夫

K11 ネオニコチノイドの構造活性相関：リガンドの 3 次元構造情報とアセチルコリンレセプター情報のドッキング（近大農化）○松田 一彦，下村 勝，近藤 諭美，吉

田直史，駒井 功一郎（University of Oxford）Valerie Raymond，Nigel Mongan，David B. Sattelle，（京大院農）赤松 美紀，上野 民夫

特別講演 17:40 ～ 18:40

KJ Chemo-Bioinformatics and Comparative QSAR（Pomona College, USA）Prof. Corwin Hansch

第2日 10月26日(木)

招待講演，一般講演 9:00 ～ 11:00

—医薬—

K12 招待講演 創薬研究における定量的構造活性相関の役割—その現状と課題（大日本製薬創薬研）藤原 巌

K13* 新しいHMG-CoA還元酵素阻害剤、NK-104：構造活性相関解析（日産化学工業特許情報部）○ 陸門 元生，（日産化学工業医薬研究部）鈴木 幹夫

K14* ニューラルネットワークによるDrug-likenessの解析（日本新薬創薬研）丹羽 朋子

K15* 創薬のための平面構造式3次元化手法の開発（医薬分子設計研究所）○中村建介，富岡 伸夫，板井 昭子

K16* グルコーストランスポーターの分子認識：種々の糖を用いた結合強度解析（徳島大薬）○清 邦明，佐藤 洋一郎，後藤 了，中馬 寛

特別講演 11:00 ～ 12:00

JK 化学情報システムの現状と将来—インターネット時代を迎えて（化学情報協会）千原 秀昭

招待講演，一般講演 13:00 ～ 14:55

—医薬—

K17 強力なIP3受容体アゴニスト活性を有するアデノホスチンAとシクロホスチンの立体配座解析（三共創薬化学研）○岩田 依子，（Leiden University），Martin de Kort，（University of Leicester）R.A.John Challiss，（Leiden University）Gijs A.van der Marel，Jacques H.van Boom，（三共創薬化学研）宮本 秀一

K18 糖鎖付加カルシトニンの立体構造と生理活性（旭化成基盤セ）田頭 瑞加，飯嶋秀樹，（野口研）○戸澗 一孔

—コンビナトリアルケミストリーと創薬—

K19 招待講演 固相合成とコンビナトリアルケミストリーを活用したフィブリノーゲン受容体拮抗剤の開発（京都薬大）林 良雄

K20 構造多様性評価のためのデータサンプリング手法に関する研究（豊橋技科大）竹澤博士，○高橋 由雅

招待講演，一般講演 15:10 ～ 17:20

—構造生物学と創薬—

K21 招待講演 In silicoスクリーニングの課題とアプローチ（阪大 蛋白研）中村春木

K22 非天然アミノ酸を導入した機能性ペプチド：人工イオンチャネルの機能構造相関（科技団井上プロジェクト）○石田 斉，堂ノ脇 靖已，井上 佳久，（名大医）智戚，曽我部 正博

K23* ヒト血清アルブミンのサイト・結合薬物の結合配座決定およびアルブミン-薬物複合体モデルの構築（北里大薬）○松下 泰雄，道券 孝子，（杏林製薬中研）岩瀬一彦，（北里大薬）広野 修一

K24 糖脂質をNKT細胞に提示するために重要なマウスCD1d内のアミノ酸の同定（キリンビール医薬探索研）○飯島 洋，（千葉大・院医・免疫発生学・科技団CREST）鎌田憲明，（キリンビール医薬探索研）木村 要，（千葉大・院医・免疫発生学・科技団C REST）原田 通成，清水 英子，本橋 新一郎，吉田 泰司，田中 裕二郎，河野 鉄，（キリンビール医薬探索研）酒井 輝行，（千葉大・院医・免疫発生学・科技団CREST）中山 俊憲，谷口 克

K25 FAMSBASE：大腸菌および枯草菌の全ORFに対するホモロジー解析と自動モデリング法による蛋白質モデルデータベースの構築（北里大薬）○海老沢 計慶，岩舘 満雄，竹田-志鷹 真由子，栗原 庸次，石井 崇洋，(国立遺伝研) 太田 元規，川端 猛，西川 建，（三井情報開発）三橋 信孝，大山 彰，（日本電気）麻生川 稔，（NEC情報システムズ）柳田 伸二，（三菱化学）奥村 千英子，杉尾 成俊，松崎 尹雄，（味の素医薬研）高橋 三雄，（味の素中研）鈴木 榮一郎，（東レ医薬研）谷村 隆次，青木 拓実，（東レリサーチセンター）斎藤 晋，（北里大薬）梅山 秀明

第23回情報化学討論会　発表の概要

第1日・午前　10月26日(木)

キーノート講演 9:30–10:10

J01 The Use of Crystallographic Data to solve Real Problems in Drug Design and Other Applications.

(Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), UK) Stephen J. Maginn

■ The Cambridge Structural Database (CSD) contains more than 200,000 crystal structures of small molecule organic and metal-organic compounds. Buried within this unique resource is information on the conformations which molecules like to adopt, and the ways in which different organic chemical functional groups like to interact with each other.

Extracting this information from the CSD is straightforward if searches are well-defined; much of the most commonly useful knowledge has now been extracted and is, or soon will be, available in two "knowledge-based libraries", known as IsoStar and Mogul. These libraries and the information they contain will be described in the talk.

This knowledge is itself of academic interest, but is also useful because it can be applied to solve real problems of academic and commercial interest. Examples of this will be described, including ways to tackle the modelling of docking of small molecules into protein binding sites (the programs SuperStar and GOLD).

一　般　講　演 10:15–11:10 — 化学情報学 1 —

J02 情報化学システム CGS の開発 (10) 巨大 CVReF グラフ符号データベースのためのグラフ Viewer.

(日本情報化学システムズ) 内野 正弘

■群論的方法で作り上げた一億個以上の CVReF グラフ符号による関係データベースのための graph viewwer について，報告する．Graph viewer は検索したグラフの最終的な直感的イメージを得るために必要であるが，ここでは，各種の環構造の認識，木状座標の生成などにもとづいて，image を作り出すアルゴリズムとその implementation についてのべる．

J03* 情報化学システム CGS の開発 (11) 計算機言語 Language 兀の開発状況

(日本情報化学システムズ) 内野 正弘

■普及している大多数の Computer 言語例えば Fortran,Basic, Pascal, C, C++,Java などは，基本的にアセンブリー言語を組織化し，あるパラダイムのもとに再組織化して，使いやすくする方向で開発されてきた．我々は伝統的な数学表現により，問題の側面を記述し，それを含めた全体をこれらの汎用の計算機言語で記述することで，計算機の化学や化学工学への応用を実現して来た．このような方法には，いくつかの欠点がある．例えば，ソースコードも数年たてば自然言語による解説なしには，書いた本人さえ戸惑うこともまれではない．言語自身が数学的な発想を刺激し，直接的に数学的表現を受け入れたりするものではない．伝統的数学表現が必ずしも Computer にマッチしていないので，数学表現とプログラムの関係が簡潔でない．我々は，Computer 時代にふさわしい直接的表現で，数学的な内容を簡潔に表現したいという考えで，行列作業空間 (MAWS) を提案し，それを Windows 向けに改善した Language　P の考えを発表してきたが，更に言語仕様を充実させ，Language 兀として，開発を押し進めている．その開発状況について報告する．

J04* Multi-Layered Cyclic Fence Graph(MLCFG) 群の同相関係の解析

(お茶大大・人間文化研究科) ○夏 菁彦 (お茶大・理) 細矢 治夫

■ MLCFG は Hosoya-Harary の定義した Cyclic Fence Graph を多層重ねて作られた cyclic graph の一群 (E,F,D,G,X) である．これらはグラフ理論的にも新しいグラフで，無限に広がるグラファイト格子と，数学的にも化学的にも密接な関係をもつことが知られている．われわれはその数学的性質を調べている．また，多種の MLCFG 同士，及び Hamilton wheel graph や Petersen graph のような他の関連するグラフ群との同相関係はまだ系統的に調べられていない．これらの問題や 6 角形敷き詰めグラフとの同相関係等を調べている．同相関係を求めるために MLCFG の変形だけでなく，Kirby による 6 角形敷き詰めグラフへの変換やグラフの特性量の比較など，さまざまな方法を用いた．

一 般 講 演 11:15–12:00 —化学情報学 2 —

J05* SDBSWeb アクセスログのマイニング

(物質研) 早水 紀久子, ○齋藤 剛, 矢部 篤子, 衣笠 晋一, (先端情報計算セ) 塚本 啓一, 小島 功

■ SDBS (有機化合物のスペクトルデータベースシステム) はインターネット上で公開している統括的スペクトルデータベースである (http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/). 我々はこれまで SDBS の利用価値を一層高めるため, スペクトルの追加・更新や検索機能追加などの作業を続けている. 今回, SDBS の継続的な発展のヒントを得るため, アクセスログに注目しその解析を開始した. 検索項目の利用頻度, アクセスされる化合物やスペクトルの種類などに, 興味深い傾向が現れているので, 最近のデータベース活動をあわせてここに発表する.

J06* JST 高分子データベース PoLyInfo—高分子のデータモデル—

(科技団) ○塩野 圭介, 前田 知子, 飯室 茂, 間下 健太郎, (三菱総研) 長阪 匡介, 高枝 佳男, 吉成 泰彦, 関田 大吾, 松田 和宏

■本発表では, JST で開発中の高分子データベース PoLyInfo に適用したデータモデルについて報告する. 種々の物性や構造, 重合方法, 原料モノマーなど, 多様な情報が複雑に関連し合う高分子の情報を適切に取り扱うことが出来るようにするため, 実在高分子に関する情報を対象にオブジェクト指向分析法によるデータモデリングを行ない, 高分子に対する新たなデータモデルを構築した. 得られたデータモデルでは, 多様な高分子情報を, 関連性を保ちながら整理することが可能になる. PoLyInfo は, 本データモデルを適用することにより高分子情報を適切に取り扱うことが出来, 新規材料設計の効果的な支援が可能なデータベースとなることが期待される. なお, 現在, PoLyInfo のプロトタイプシステムを http://kronos.tokyo.jst.go.jp/ にて無料公開中である.

J07* JST 高分子データベース PoLyInfo —化学構造検索システムの開発—

(科技団) ○川島 潤, 前田 知子, 飯室 茂 (三菱総研) 関田 大吾, 吉成 泰彦, 長阪 匡介

■材料設計支援型データベース PoLyInfo では, ポリマーを「高分子辞書」と名付けた専用の化合物レジストリシステムにより, 構成単位 (CU) の化学構造に基づいて識別・同定している. CU は「基本要素」という原子団を組み合わせた書式で表現されており, この構造情報を利用して以下に示す検索システムを開発した. 1つは簡易構造検索システムで,「どの基本要素を幾つ含むか」を指定することにより検索を行う. 指定方法には GUI 形式, テキスト形式がある. GUI 形式では, テンプレートから必要な要素を選び, それが検索したいポリマーに幾つ含まれるかを入力する. テキスト形式ではテキストボックスに規定の書式で検索式を入力する. もう1つは詳細構造検索で, 検索したい構造を条件構造としてモデリングする事により, 基本要素の数や種類だけでなく, 並んでいる順序や結合関係まで詳しく指定でき, 完全一致と部分一致の2方法で検索できる.

第1日・午後 10月26日 (木)

ポスターセッション 13:30–15:30

[構造活性相関シンポジウムと同じ会場で開催] 13:30 ～ 14:30 (奇数番号), 14:30 ～ 15:30 (偶数番号)

— 化学情報学 —

JP01 双方向性薬物催奇形性データベース・システム構築の試み

(徳島大大・薬) ○石井 真吾, 山内 あい子, 木原 勝 (徳島大・薬) 中馬 寛, 寺田 弘

■薬物による催奇形性は, 頻度は低いが薬物治療において決して起こしてはならない副作用である. 薬物による胎児の奇形発現は, 薬物の種類, 服用の時期や量によって支配されるため, 正確で迅速な情報提供が特に重要である. しかし, 現在, 我が国には薬物の催奇形性に関する適切な情報提供システムが存在しない. そこで, 我々は, ネット上で薬物の催奇形性情報と構造式を検索でき, かつ症例登録等も可能な, 妊婦, 医療関係者および医薬品研究開発者からなる双方向性成長型情報コミュニティの構築を目指している. 今回, その第一段階として, 現在構築中の薬物催奇形性に関する試用データベース・システムについて発表する予定である.

JP02 毒性情報を中心とした化学物質情報データベースの構築について

(名古屋市環境研) ○山神 尚人, 山守 英朋

■我々は，バイオアッセイを用いて環境中に存在する化学物質の毒性を評価する方法を検討している．そして，それらバイオアッセイの結果の妥当性を確認するためには，毒性情報を整理して，参照できるようにする必要がある．しかし，化学物質の多くは，十分な毒性情報が得られることが少なく，不足している毒性情報は，既存の毒性予測プログラムにより，補完しなければならない．すなわち，実用的な化学物質毒性データベースを構築するには，単に既存の毒性情報だけを収録しただけでは不十分であり，各種物理化学性状も併せて収録していることが望ましい．そこで，我々は，毒性情報を中心とした化学物質情報を一元的に取り扱うことができて，既存の毒性予測プログラムを利用して容易に毒性情報を補完することのできる化学物質情報データベースの構築について検討した．

JP03 内分泌かく乱候補物質および関連物質データベースの開発 2

(インターネットアトラス) ○高野 英雄，友利 和秀 (国立医薬品食品衛生研) 中野 達也，小谷野 和郎，神沼 二眞

■コルボーンらが提起した内分泌かく乱物質問題は，化学物質の安全な管理に大きな論議を呼び起こした．この問題は科学としては，環境中あるいは身近なところにある多様な化学物質が生体内の正常なホルモン作用をかく乱するのではないかという作業仮説に帰着する．そこで関心を集めているのが，如何なる化学物質がそうしたかく乱作用をするかである．この問題自身，内分泌かく乱作用メカニズムが解明され判定基準が確立されなければ，確認することは不可能である．かくして問題は循環論に陥ってしまう．そこでわれわれは，こうした研究のひとつの出発点として，どのような化合物で作業仮説を検証していくべきかという考えの下に，重要と思われる化合物のリストを作成し，付帯情報をつけてデータベースとして整備することを試みている．これについて現状を報告する．

JP04 医薬品一般名称のデータベース化（その 2）

(データインデックス) ○鈴木 聡子，横山 美和，川出 達 (国立医薬品食品衛生研) 瀧 明子，長谷川 式子，山本 美智子，小峰 啓，中野 達也，宮田 直樹，神沼 二眞

■これまで，われわれの研究グループでは，相互作用まで含めた構造活性相関解析を行う目的で，医薬品の構造情報を有するデータベースの開発を行ってきた．今回これまで開発してきた医薬品のデータベースをもとに，日本で承認されたすべての医薬品について，医薬行政および基礎研究のための基盤となる情報を提供することを目的として，医薬品一般名称・構造等の基本情報のデータベース化を行った．

JP05 生体影響化学物質データベースのＸＭＬ化

(科技団) ○志村 和樹

■生体影響化学物質データベースは，科学技術振興事業団（ＪＳＴ）がこれまで蓄積してきた化合物辞書，熱物性，質量スペクトル，結晶構造といった化学物質に関する基礎的データをWWW上に整備し実験的に公開を行っているものである．このシステムでは，国立医薬品食品衛生研究所，国立環境研究所等の研究機関で開発されている化学物質の生体影響に関する研究のためのデータベースとの間でＪＳＴの化合物辞書番号をキーとしてリンク付けたことにより統合的な利用が可能になっている．今回，化学情報流通においての利便性を向上させるために，インターネット上での情報交換フォーマットとして標準化されつつあるＸＭＬを利用して各データベースの再整備を試み，全てのデータを試験的にＸＭＬ化した．その上でWWW上での利用法について検討し，システム改良を行って，スタイルシート（ＸＳＬ）を用いてブラウザ上で構造図等の情報まで含めて表示できるようにした．

JP06 立体化学教育支援システムの開発

(豊橋技科大) ○加藤 淳，酒井 和行，加藤 博明，阿部 英次

■本研究は，立体視システムを用いた分子構造の三次元グラフィックス表示を通じて立体化学の直感的な理解を支援するソフトウェアシステムを開発し，教育に利用することを目的とする．構造式は付属のエディタから入力され，その疑似三次元モデルが自動生成される．この構造式は，一般に広く用いられている Wireframe や Ball&Sticks，Spacefill などのモデルで三次元表示される．表示されたモデルはマウス操作によりユーザが自由な角度で観察できる．また，立体中心を自動検出するルーチンを組み込み，立体化学教育利用に向けて機能の充実を図っている．

JP07 タンパク質三次元構造モチーフデータベースの作成

(豊橋技科大) ○田所 哲男，加藤 博明，高橋 由雅，阿部 英次

■本研究では，タンパク質配列モチーフデータベース PROSITE に登録されているモチーフパターンに注目し，これに対応する三次元モチーフ構造データベースの作成を試みた．

PROSITE ではモチーフを一種の正規表現で定義しており，入力されたタンパク質配列中にこのパターンが含まれているかどうかを検索するプログラムを最初に作成した．入力するタンパク質データは三次元構造が既知のものとし，ヒットした部位の三次元構造情報を自動抽出する．それらの三次元部分構造に対する構造類似性評価の方法についても併せて報告する．

JP08 匂いと三次元構造式の相関の解析

(豊橋技科大) ○村上 剛，長屋 崇，加藤 博明，阿部 英次

■有機化合物の匂いがその立体構造に深く係わっていることは良く知られている．そこで我々は，立体化学を含んだ匂い物質のデータベースを構築するとともに，それを活用して匂いと三次元構造式の相関の解析を試みた．

JP09 インターネット・ジャーナル構築支援システムの開発

(豊橋技科大) 飯田 晋一，後藤 仁志

■現在，多くの学術雑誌がネットワーク上で閲覧できるオンライン化が進んでいる．しかし，実際の論文掲載までの作業の多くは，論文投稿がインターネット上でできるようになってきたこと除けば，以前とそれほど変わっていない．実際に，査読，校正，編集者と出版社のやり取りに関しては郵送などに頼っている．また，レイアウトやデータベース構築などの多くは人手に頼って行われているのが現状である．そこで本研究では，これらの作業を可能な限り自動化して時間や手間を省くことによって，速やかにインターネットから雑誌を配信するための支援システムを開発する．現在本システムはフラーレン総合シンポジウムの学会運営の支援を行っている．学会発表申込，プログラムの作成支援，予稿原稿収集，そして予稿集の発行に至るまでの運営を支援している．本討論会では，研究発表会の運営に対して本システムを導入した際の利点や問題点，化学特有の問題点，学術雑誌をネット配信するため総合支援システムとして必要な要件など，幅広く議論したい．

JP10 XyM Java —XyM Notation の Java による実装

(京都工繊大大・工芸) ○田中 伸也 (京都工繊大・工芸) 藤田 眞作

■インターネット上での化学情報の流通形式として，われわれは化学構造式表現言語 XyM Notation とそれをマークアップ言語とした XyMML(XyM Markup Language) を提案した．すでに，これらを TeX/LaTeX 処理系により実装し，XyMTeX と名づけて公開している．今回は，XyM Notation の Java による実装をおこなった．開発した XyMJava はデザインパターンを利用し入出力に依存しないよう設計されている．このため将来 XyMML からの入力や各種の化学フォーマットへの出力などの拡張プログラムが簡単に作成できるようになっている．併せて XyM Notation 形式の入力を構文解析する XyMTeXParser と WWW 上で化学構造式を表示するアプレットを作成したので報告する．

JP11 反応知識 DB を用いた副反応評価システムの開発

(三井化学) ○塚本 幸治 (科技団・さきがけ研究 21) 佐藤 寛子 (豊橋技科大) 船津 公人

■合成経路設計システム AIPHOS（Artificial Intelligence for Planning and Handling Organic Synthesis）から提案される逆合成ルートは，網羅性を持ちながら実際性が高い．しかし反応設計システムを考えた場合，条件によっては提案された前駆体構造から必ずしも target 化合物のみが生成するとは限らず，前駆体構造から得られる副反応物が有害な生理活性物質で有れば提案された合成ルートを変更する必要もある．今回，AIPHOS から提案された合成ルートの前駆体構造に対し，反応予測システム：SOPHIA（System for Organic Reaction prediction by Heuristic Approach）の機能を利用して認識した反応部位を手掛かりに，既存のデータベースから具体的な反応スキーム（反応物→生成物）の部分構造変化情報を獲得し，それらを前駆体構造に適用することで副反応を予測するシステムを開発した．

JP12 多変量化学データ視覚化ツール MolSpace の開発

(豊橋技科大) ○紺地 充，高橋 由雅

■現在筆者らは，次元縮約技法を用いた構造類似性空間の視覚化のための効果的な手法を検討するとともに 3 次元分子構造表示機能を含めた多変量化学データ解析支援のためのソフトウェアツール MolSpace の開発を進めている．ここでは解析の対象とする化合物群の種々の特性データ行列と 3 次元結合表データベースをもとに，これらデータ散布図の描画ここでは，線形写像法を用いた高次元データ空間におけるデータ構造の視覚化，特定のサンプルパターンをプローブとした類似パターンの検索や部分空間の切出し機能とともに，分子構造の種々のモデル表示機能を実装した．これにより，従来の単なるデータ散布図とは異なり，各表示点に対応する化合物分子の 3 次元構造をリアルタイムに参照することが可能となり，

データ空間における対象化合物相互の比較が視覚的にも容易となった．講演に際しては，作成したシステムを具体的な実行例とともに示す．

—理論化学・計算化学 —

JP13 フラグメント分子軌道法による解析的微分を用いた構造最適化計算

(国立医薬品食品衛生研) ○中野 達也，神沼 二眞 (生命工学工研) 上林 正巳 (富士総合研) 佐藤 智之 (筑波大・化) 稲富 雄一 (電総研) 秋山 泰，古明地 勇人 (産技融合研) 長嶋 雲兵 (大阪府大・総合科学) 北浦 和夫

■ 北浦らによって開発されたフラグメント分子軌道法における解析的微分の定式化にもとづき，フラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP に解析的微分の組み込みを行った．

JP14 水クラスター（H3O+(H2O)n, n=1-5）におけるプロトン移動についての理論的研究

(広島大・理) ○三宅 敏子，山根 庸平 (広島大大・理) 相田 美砂子 (大阪大・産研) 山高 博 (太平洋北西国立研) Michel Dupuis

■ H3O+(H2O)n クラスター (n=1-5) において，水分子間の水素結合の形態やクラスターの構造の種類によってプロトン移動のおこりやすさに違いがあることを，ab initio MO 法によって明らかにした．また，それにもとづいてバルクの水におけるプロトン移動のメカニズムについて考察する．さらに，プロトン移動の過程について QM/MM-vib 法に基づいた ab initio MD 法によって詳細に解析する．水は身の回りに遍在する物質であり，水溶液中でのプロトン移動は最も基本的な反応でありながら，その移動速度が非常に早いことについては分子レベルで完全に理解されてはいない．バルクの水において水分子は部分的にクラスターを形成し，水素結合網を形成している．そこで，プロトンを含む水クラスター中でのプロトン移動のメカニズムについて詳細に検討することによって，バルクの水における現象を理解することをめざす．

JP15 水イオンクラスターの衝突断面積に関する理論的研究

(早大理工) ○國見 貴之，市川 尚志，中井 浩巳

■ 我々の研究室では，核生成過程におけるイオンの役割を明らかにするために，これまでアンモニアクラスターイオンに対して理論的研究を行ってきた．本研究では，水クラスターイオン (H3O+(H2O)n-1) (n=1，2 ･･･) の構造，安定性，反応性を理論計算により調べ，イオン核生成のメカニズムの解明を目指した．特に，核生成の初期過程で重要であると考えられる小さな水クラスターイオンと水モノマーの衝突について，その衝突断面積を理論的に求めた．その手段は ab initio 分子軌道計算により衝突に対するポテンシャルカーブを求め，それを解析関数 (M orse 関数) にフィッティングし，衝突エネルギーを考慮にいれた有効ポテンシャルから衝突パラメータを解析的に求めるというものである．アンモニアクラスターイオンの場合，n=5 で衝突断面積の極小値が現れたが，今回の水クラスターでは n=4 で magic number となることが理論的に予想された．

JP16 CH... π相互作用を考慮した結晶力場の構築

(豊橋技科大) 福井 正和，後藤 仁志，小貫 慶昭，大澤 映二

■現在我々は炭化水素化合物の結晶構造を再現できる力場を構築するため，力場ポテンシャル最適化システムを開発中である．本システムでは，まず適切な参照データをケンブリッジ結晶構造データベース (CSD) から抽出し，適当な分子間力場ポテンシャルを選択し，そして分子間力場ポテンシャルのパラメータを遺伝的アルゴリズムを応用して最適化する．本討論会では，共役系炭化水素における CH... π相互作用に着目し，CSD 内での CH... π相互作用の分布について検討すると同時に，この系に適切な水素合様ポテンシャル関数として負の Gauss 関数を適用し，ポテンシャルパラメータの最適化を試みた結果について報告する．

JP17 2,2'-架橋ビスジメドン類における大環状水素結合

(京都大大・理) ○今城 文雄 (島根大・総合理工) 藤原 隆二

■標記化合物は分子中に二つのβ－ジケトンを含むが，固体状態ではジケトンはエノール構造をとり，互いに水素結合でつながった 12 員環の大環状水素結合系を形成している．これは，分子間と分子内水素結合系の中間状態のモデル化合物となっている．β－ジケトンのエノールにおいては分子内水素結合系と分子間水素結合系で大きく挙動が異なっている．標記化合物の固体状態での C-13 NMR 化学シフトは特にエノール炭素とカルボニル炭素が著しい温度変化を示した．低温および常温で測定されたメチレン架橋体のX線結晶解析による分子構造と ab initio MO 計算 (MP2/6-31G**) による分子構造，および，C-13 NMR 化学シフトの計算値と実験値との対応から，本大環状水素結合系における水素移動の存在を明らかにする．

JP18 ベンゾジキサンテンエンドペルオキシド及びその類縁化合物のプロトン付加体に関する分子軌道計算

(埼玉大・工) ○太刀川 達也, 時田 澄男

■ベンゾジキサンテンはフォトクロミックな特性をもつ赤色の色素化合物で, 酸素存在下, 可視光照射で, 無色体であるエンドペルオキシドに変化する. 我々はこのエンドペルオキシドが酸の添加によっても, 発色体に変化することを発見した. そこで, 我々は, エンドペルオキシド体と酸との相互作用について, 計算化学的な知見を得るため, エンド酸素, エーテル酸素のそれぞれに対するプロトン付加体について, MOPAC, AM1 法, PM3 法の半経験的分子軌道法計算を施し, 構造の最適化を行った. 我々は反応の実測データから, エーテルプロトンに対する付加体の優位性を指摘したが, 計算結果を比較すると, エンド付加体の安定構造の方が安定である. しかしながら, エンド付加体の安定構造では, プロトンが付加した方の酸素が骨格から遊離する. 講演では, ベンゾビスアクリジンなどの類縁体についても考察を加える.

JP19 mannose-bindnig lectin の糖鎖選択性に関する理論的研究

(東海大・電子計算セ) ○合田-日向寺 祥子, 井上 靖 (東海大・工) 水落 次男 (日本電気) 高田 俊和 (お茶大・理) 細矢 治夫

■マンノース結合蛋白質は生体防御作用に関与するレクチンとして注目されているが, マンノース以外の糖とも結合するため, その結合特異性を解明することは重要である. 我々は非経験的分子軌道法により rat マンノース結合蛋白質 (rMBP-A) と 6 種類の糖の間に起こる結合エネルギーを計算した. 計算には AM OSS を用い, 基底関数は MIDI-4 +分極関数を採用した. 6 種類の糖と rMBP-A の間に起こる結合エネルギーの大きさの傾向は, すでに行われている直接結合実験の結果を大変良く再現していた. さらに, 静電ポテンシャルの分布および分子軌道の形状から糖と rMBP-A の間に働く親和性や結合性までも説明することが可能となった.

JP20 アミノ酸側鎖-核酸塩基対間の相互作用自由エネルギーマップ計算

(広島大・理) ○吉田 智喜, 西村 友宏 (広島大大・理) 相田 美砂子 (理研) M. Gromiha, F. Pichierri, 皿井 明倫

■ DNA 結合タンパク質による DNA 塩基配列の特異的認識においては, アミノ酸のトリプレットコードのような 1 対 1 の対応性はないが, アミノ酸と塩基配列の間の特異性が確かに存在する. その特異性の源をミクロな視点から解明することを目的とし, そのための第一歩として, アミノ酸側鎖と核酸塩基対 (アデニン-チミン, グアニン-シトシン) 間の相互作用自由エネギー面を, 2 種の力場 (ab initio potential と Amber force field) を用い計算した. それをもとに, アミノ酸と塩基対の相互作用の本質を理解し, エンタルピー項やエントロピー項がその相互作用にどのように寄与しているかを考察する. 計算には 2 種の力場 (ab initio potential と Amber force field) を用いその比較も行った. ab initio force field は水素結合の方向性が表現することができるものであるが, Amber とくらべて, 安定な相互作用が形成される領域が限定される, という結果が得られた.

JP21 タンパク質内電子移動反応系におけるレドックス中心の密度汎関数法による分子軌道計算

(九工大・情報工) ○恵良 信, 吉廣 保, 佐藤 文俊, 柏木 浩

■発表者らは, タンパク質内電子移動反応に着目した. タンパク質内電子移動反応の代表的なモデルに, 電子のドナーまたはアクセプタとして, タンパク質表面のヒスチジンに Ru 錯体を付加し, ヘムを他の金属に置換したモデルがある. このような電子移動反応系の始状態および終状態について理論的計算を行い, 電子移動反応におけるドナー, アクセプタの電子状態を発表する. 理論的計算には, 発表者ら独自の分子軌道法プログラム (ProteinDF) を用いる. これは密度汎関数法に基づいたプログラムで, 遷移金属を含む系に威力を発揮するものである.

JP22 タンパク質全電子計算のための自動計算プログラムの開発

(九工大・情報工) ○時枝 浩司, 吉廣 保, 佐藤 文俊, 柏木 浩

■当研究グループではタンパク質の性質や反応性を電子レベルで理解することを目的にガウス型基底関数を用いた密度汎関数法による分子軌道計算プログラム ProteinDF を開発・発展させてきた. しかし実際に計算を行うには専門的な知識と経験的な勘が必要となり計算を困難にしている. この対策として分子全体に広がっている軌道を特定の部位に局在する軌道に変換し, この軌道が特定部位のカノニカル軌道に近い軌道へと変換する手法を用いてタンパク質を自動的に計算するプログラムをオブジェクト指向言語 C++を使用して開発している. ポスターではこのシステムの構成と計算の結果を報告する予定である.

JP23 量子化学計算による常温溶融塩の融体構造に関する基礎的研究

(早大・理工) ○ 廣田 光仁，齋藤 永宏，不破 章雄

■めっきや電解製錬などあらゆる分野において，合金の電析は一般に水溶液中の金属イオンから行われている．水溶液系の場合には常に溶媒の水が存在するため，金属の種類によっては電析の困難なものがあり，このようなときには溶融塩を用いた電析が利用される．特に，室温でも液体で安定に存在可能である BP C(1-ブチルピリジニウムクロリド) 及び EMIC(1-エチル-3-メチルイミダゾリウムクロリド) などを用いた常温溶融塩は取り扱いが容易で，加熱装置も小型で済むことから非常に有用であり，現在注目されている．しかしながら，常温における浴諸性質は電解浴として十分な諸性質を有していないと報告されており，いまだに検討の余地があるといえる．そこで，本研究では，量子化学計算により常温溶融塩の融体構造を明らかにし，軌道論の観点から浴の諸特性 (特に導電率) の支配因子を解析する．

JP24 リチウムイオン２次電池の材料設計

(物質研) 松本 高利，○田辺 和俊 (融合研) 長嶋 雲兵

■リチウムイオン２次電池の負極の炭素材料の最適構造を設計するために，数十原子以上の炭素クラスターの電子状態を非経験的分子軌道法で計算した．その結果，リチウムイオン２次電池の負極材料に最適な炭素構造を見いだすことができた．

JP25 炭素材料の振動構造に関する理論的研究

(京都大大・工) ○加来 賢一，張 軫鉉，佐藤 徹

■熱処理炭素材料のラマン散乱スペクトルにおいて，1360 cm^{-1} 付近の D lin e は小サイズのグラファイトフラグメント (GF) の C-C 伸縮振動に，1580 cm^{-1} 付近の G line は大サイズの GF の C-C 伸縮振動にそれぞれ帰属されている．またその強度比により，GF のサイズが予測される．本研究では，GF のモデルとしてアセンエッジを持つ細長型縮合芳香族環化合物を考え，そのサイズを変えたものについて，半経験的分子軌道法を用いて構造最適化および振動解析を行い，ラマン活性な振動モードの振動状態とそのサイズ依存性について検討を行った．その結果，G line に帰属される振動モードにおいて，変位の大きな C-C 伸縮振動が，サイズの拡大とともに長軸方向の端に局在化する傾向が見られた．また D line に帰属される振動モードは，明確なサイズ依存性は見られなかったが，分子全体にわたった C-C 伸縮振動と端の C-H 変角振動が共存する振動であることが分かった．

JP26 大環状ムスコンの多配座解析

(豊橋技科大) ○山口 貫司，後藤 仁志 (新潟大大・自然科学) 萩原 久大

■一般的に似たような構造を持つ分子には似たような物性を期待するが，匂いに関わる分子では似たような構造を持っていても異なる匂いを示すことがある，その一方で全く違う構造であっても良く似た匂いを持つこともある．その理由は未だ明らかになっていない．本研究では自然界に存在する Muscon や Civeton をターゲットに，15-17 員環ケトンとラクトン，それらの誘導体，および各基本骨格となるシクロアルカンの配座異性体について詳細に調べた．そして，それぞれの化合物において優勢な数種類の配座骨格を系統的に考察し，実験的に得られた匂い強度と比較することから，配座と匂いとの（相関）関係について検討した．

JP27 密度汎関数法による Et-St 共重合触媒の反応解析

(電気化学工業・中研) ○引馬 尚子，戸木田 裕一

■メタロセン触媒は，オレフィンの重合触媒として広く知られている．当社では，この触媒の配位子であるシクロペンタジエニル (Cp) 環を，インデニル (Ind) 環やベンゾインデニル (BzInd) 環，シクロペンタフェナンスレニル (Phe) 環で置換すると，St 共重合性の高い Et − St 共重合体合成触媒となることを見いだした．実験から，St 共重合性が高いものは，配位子が Phe と BzInd の場合で，次に活性が高いのは Ind の場合であることが分かっている．また，配位子が Cp の場合には，St 共重合性がないことが分かっている．しかし，なぜこれらの触媒が高い St 共重合性を持つのかは分かっていない．そこで，本研究では，これらの触媒が高い St 共重合性を持つ理由を検討するため，量子化学計算による反応解析を行った．

JP28 有機赤色蛍光材料の分子設計

(埼玉大・工) 時田 澄男，○杉山 孝雄

■有機赤色蛍光材料の開発を目的として， PPP 分子軌道法計算を利用した分子設計を行なった．黄色蛍光材料である N,N'-disalicylidene -o- phenylenediamine 亜鉛錯体を基本骨格として，蛍光極大を黄色から赤色に変化させるにはどうしたら良いか種々検討し，基本骨格に縮環した化合物 9 種類を分子設計した．基本骨格化合物と縮環化合物の電子スペクト

ルの吸収極大を PPP 分子軌道法により計算した．縮環する位置により短波長シフトする場合と長波長シフトする場合があることがわかった．長波長シフトする位置に複数の環を縮環すると 90nm 長波長シフトするすることがわかった．

JP29 単環状共役化合物の最安定構造と電子数: 平面型構造はシグマ電子のみで形成できるか

(明治薬大) 溝口 則幸

■ベンゼンの幾何構造は6個のパイ電子の寄与によるものであると長い間信じられてきたが，最近，多くの研究者により，このパイ電子の役割について疑問が持たれ，再検討されている．Shaik らはベンゼンを D6h から D3h に変形させたとき，パイ電子のエネルギーは低下するが，シグマ電子のエネルギーは増加することを示し，ベンゼンが最安定構造として D6h 構造をとるのはパイ電子の寄与によるものではなく，シグマ電子の寄与によるものであると主張した．しかし，ベンゼンの幾何構造に対するシグマ電子の役割はパイ電子の有無によっても異なるかもしれない．最近，市川らは C6H66+の最安定構造は D6h 対称性を持つ平面型構造ではなく，D 3 d対称性を持ついす型構造であることを報告している．ここではいくつかの単環状共役化合物（C n H n，n=4,6,8）に対して，パイ電子を取り除き，シグマ電子のみが存在するときに，それらの分子はどのような最安定構造をとるのかを ab initio 分子軌道法により検討する．得られた構造は分子の大きさ n によらず，共通の構造を持つことがわかった．

JP30 4次元原子軌道の表現方法に関する研究

(埼玉大・工) 時田 澄男，○木戸 冬子 (お茶大・理) 細矢 治夫

■水素原子の原子軌道について，3次元を超える次元の数式で表す試みがいくつか行われている．しかしながら，これらの数式を画像で表現する研究はあまり行われていない．我々は，4次元の原子軌道を角部分で表示するために，水素原子の等値曲面の3次元による描画法をどのように4次元に応用するかについて研究してきた．今回は，4次元空間軸を時間軸に置き換えて表現する方法について研究した．本方法は，4次元空間軸の値を定数とする3次元の画像を定数を一定間隔で変化させて作成し，この4次元空間軸のみが異なる3次元画像を時間軸に並べることで動画として表現するものである．

JP31 分子のまわりの静電ポテンシャル，クーロン力体感システム—電気力線の立体表示と力覚提示—

(名古屋大大・人間情報) ○吉田 俊介 (中京大・情報科学) 安田 浩司，鬼頭 良彦，鈴木 孝彰，秦野 やす世，宮崎 慎也

■分子のまわりの静電ポテンシャル，電場，電気力線を CG の技術を用いて，立体的に表示することにより，分子の電気的な特徴や化学反応の直観的理解を支援するシステムを構築した．このシステムでは VR 技術の力覚提示装置を用いて，分子のまわりのクーロン力を仮想的に体感できる機能を付加した点が特長である．立体視と力の体感により，複雑な分子内部の電場の状態を「触る」感覚で体験できるシステムである．システムは対話操作による，任意断面上のポテンシャルの等高線表示と触覚提示，分子のまわりのイオン粒子のアニメーションの機能も備えている．開発は，visualc++と openGL を使用した．

JP32 大規模系のための汎用分子動力学統合システム TACPACK2000 の開発．その 2 システム化技術

(富士通) ○南 多善 (富士通九州) 吉嶋秀明 (富士通) 紙谷 希，三井崇志，立川 勉 (物質研) 三上 益弘，篠田 渉 (産技融合研) 川田 正晃，森川 良忠，古明地 勇人，長嶋 雲兵 (東北工研) 池庄司 民夫，劉 子敬 (名古屋工研) 小川 浩 (大阪工研) 田中 真悟，香山 正憲 (産技融合研) 寺倉 清之

■ TACPACK2000 システムは，生体高分子，有機結晶，液晶，高分子，半導体，金属・合金，セラミックスなど複雑物質の大規模系を対象とした大規模汎用分子動力学シミュレータとそのための統合化システムからなる．本講演では，統合化システムのシステム化技術について述べる．データベース管理技術では，分子構造データ，結晶構造データ，ポテンシャル関数データ，擬ポテンシャル関数データなどから構成される各種データを統一的に管理するために XML(eXtensible Markup Language) を採用した新しい管理技術を開発した．また，プラグイン機能では，本システムへのプログラム登録／削除機能，プログラムの適時コンパイル・リンク機能，パラメータ入力画面自動生成機能を開発した．

—ケモメトリックスおよび関連ソフトウェア —

JP33 医薬学データのための回帰，判別手法に対する計算機統計学的手法の導入

(大阪大大・薬) ○宮田 幸治 (大阪大・薬) 西村 枝里子 (大阪大大・薬) 岡本 晃典，黒川

絵美子，田中 優子 (大阪大・遺伝情報実験施設) 黒川 顕，安永 照雄 (大阪大・医) 藤原 英明 (大阪大大・薬) 高木 達也

■医薬学分野，特に薬剤／臨床疫学分野では，リスクファクターの解明にロジスティック回帰法がしばしば用いられるようになってきたが，本手法では重回帰分析等と同様，用いられる説明変数が有意であるかどうかを検定する必要がある．この目的のためには従来より幾つかの手法が用いられてきているが，今回，我々はエフロンらのブートストラップ法とオズワルトらによって考案され，当研究室で改良された拡張シフト検定法という２つのコンピュータ集約型検定法の適用を試みた．その結果，これらの検定法が有用であることを示すことができたので，いくつかの医薬学データへの応用とともに報告する．また Freedman らによるノンパラメトリック回帰法である MARS，データマイニング的な手法である MART などの回帰／判別手法の，医薬学データへの適用性についても検討したのであわせて報告する．

JP34 有機化合物の蒸気圧推算

(旭硝子・中研) ○山本 博志

■有機化合物の蒸気圧を推算することは化学工学における蒸留塔の設計などで非常に重要な技術である．その推算式には，Lee-Kesler 法，Riedel 法，Riedel-Plank-Miller 法などが知られていが，これらの式は低圧での精度が低いとされている．これらの式は化合物の沸点，臨界定数，偏心因子などから蒸気圧を推算している．我々はこれまでに化合物の沸点，臨界定数などの物性をニューラルネットワークを用いて推算してきた．今回は沸点，臨界定数などを入力にし蒸気圧を推算するニューラルネットワークを構築したので発表する．また，遺伝的アルゴリズムを用いた多項式係数の決定法を作成し，新たな蒸気圧式を構築したので発表する．

JP35 反応試薬機能予測ニューラルネットワークモデルの化学実験による検証とフィードバック

(科技団さきがけ研究 21，理研) ○佐藤 寛子 (理研) 長澤 和夫 (豊橋技科大) 船津 公人 (お茶大) 鷹野 景子 (理研) 中田 忠

■反応試薬とその機能とを数値的に関連付けた試薬－機能予測モデルの予測結果を化学実験により検証した．ここでモデル化のための反応試薬は，基質との静電的・立体的相互作用に基づいて３次元的に分子を特性値化する FRAU(Field characterization for Reaction Analysis and Understanding) により数値化した．反応を取扱うために改良した Counter-propagation タイプの Kohonen neural network をモデル化手法とした．実際の反応実験により，予測を支持する良好な結果が得られた．実験結果をフィードバックすることでモデルの予測精度が向上することを確認した．

JP36 Kohonen ネットワークと MultiwayPLS 法を用いた新しい 3D-QSAR 手法の開発—静電的相互作用と疎水的相互作用の利用について—

(豊橋技科大) ○松岡 成郎，荒川 正幹，船津 公人

■薬物設計の分野において，三次元構造活性相関（3D-QSAR）に関する研究が幅広く行われている．筆者は，すでに分子の特性をより効率的にモデリングするために，van der Waals 表面上における静電的相互作用を用いて，活性値との相関を MultiwayPLS 法により解析を行うという手法を開発している．今回は，さらに，生物活性の場合において重要な特性である疎水的相互作用を加え，それらと活性値との相関を MultiwayPLS 法を使用して解析を行うことを試みた．そして，実際に本手法を用いて，2-Phenylindole 類似体 36 種に関して，活性に寄与している領域を特定することを試みた．その結果，静電的相互作用や疎水的相互作用と活性の関係を反映したモデルが得られた．さらに，係数値を van der Waals 表面上へ逆射影することにより，活性に寄与している領域を特定することができた．そこで，本手法および解析結果を報告する．

JP37 ケモメトリックス手法を用いた材料開発支援プログラムの開発（４）—ニューラルネットワークの予測性についての検討—

(豊橋技科大) ○棚田 東作，荒川 正幹 (三井化学) 西村 竜一 (アイセロ化学) 神村 基和 (豊橋技科大) 船津 公人

■計量化学の分野では，PLS(Partial Least Squares) 法や主成分分析法などの手法を用いて，化学データをモデル化する研究が行われている．そして，そのモデル式による物性予測は，材料開発などさまざまな分野で応用されている．しかし，このような通常の物性予測法では複数の目的物性値を同時に満たす説明変数の組を見つけることは困難である．そこで，これを実現する逆解析プログラムを開発した．逆解析を行う場合，精度の高い材料候補を提案するためには，予測性の高いモデルが必要である．線型データの場合，PLS 法を用いることによって，予測性のあるモデルを得ることができる．一方，非線型データのモデリング

の場合，一般にニューラルネットワークが用いられるが，パラメータ設定やオーバーフィッティングなどの問題のため，予測性のあるモデルを構築することは難しい．そこで，オーバーフィッティングを防ぎ，予測性のあるニューラルネットワークモデルを作成する最適なパラメータ (中間層の数，学習回数など) を自動的に設定するプログラムを開発した．ポリエチレンの実験データに適用し，解析した結果などを示す．

JP38 ニューラルネットワークを用いたフロン代替化合物の溶解度推算

(地球環境産業研) ○浦田 新吾 (旭硝子・中研) 入澤 潤 (地球環境産業研) 玉井 良一，黒河 勇治 (物質研) 関屋 章

■フロン代替化合物を洗浄剤や発泡剤として用いる場合，油脂やポリオールとの相溶性が性能を評価する１つの要素としてあげられる．特に，ポリオールとの相溶性は発泡体の性能そのものに大きく寄与することが分かっており，代替化合物をスクリーニングする上で重要な要素となっている．そこで我々は，ニューラルネットワークを用いて，フロン代替化合物と油脂（n-エイコサン）やポリオール（PE315）との相溶性の推算を試みた．ネットワークの入力パラメータとして，分子シミュレーションから得られる２分子間エネルギーの情報や分子軌道計算から得られる電荷，及び密度などの物性値を用いることにより溶解度の予測が可能であった．

JP39 遺伝的アルゴリズムを用いた材料作製プロセスにおける反応機構解析法に関する研究

(静岡大・工) ○高橋 崇宏 (豊橋技科大) 船津 公人 (静岡大・工) 江間 義則

■材料作製プロセスである化学気相堆積法の研究開発において，原料から生成物に至る反応機構 (反応モデル) を明らかにすることは極めて重要な作業である．本研究では研究開発速度の向上や省力化が求められている現状を踏まえ，反応機構解析を自動化する手法を提案し，解析能力の評価を行った．一般的な反応モデル解析では実験データをもとに反応過程の逆問題を解くこと妥当なモデルを得る手法が多いが，提案する手法では，まず反応モデル群を a priori に定め，順問題を解くことで実験結果の予測値を得る．次に予測値を実験値と比較し，予測値と実験値との"ずれ"を見積もる．このずれの大きさを駆動力として，遺伝的アルゴリズムによってモデルへと進化させるという手順をとる．実際にこの手法を実験値のデータセットに適用し，反応モデルの探索を行ったが，十分な探索能力を有することが示すことができた．

JP40 遺伝アルゴリズムを用いた剛球モデルに基づくタンパク質立体構造比較（２）二次構造を考慮した比較法の検討

(図書館情報大) ○中山 伸一，光貞 英一郎，斉藤 梓，滝澤 強志，吉田 政幸

■我々はすでにタンパク質の立体的な類似度として，アミノ酸残基を剛球と仮定したときの重なり容積を提案し、それを求めるのに最適な遺伝アルゴリズムとその係数を明らかにした。しかし、計算量が大きいための速度的な問題や、全てのアミノ酸を等価なものと扱うためのアミノ酸残基の対応付けの問題があった。そこで、同じ二次構造のアミノ酸残基間の重なり容積をもとにした類似度を提案し、同様の検討を行ったので報告する。

—ゲノム情報と創薬 — (構造活性相関シンポジウムとの共通セッション)

JKP1 ＳＮＰｓ解析のデータマイニングからの考察

(富士通) ○湯田浩太郎

■ヒトゲノムの配列決定が完了しつつあり，今後はこのヒトゲノム上に存在する遺伝子の探索と機能解析が当面の研究ターゲットとなる．ゲノム上に存在する遺伝子の探索手法として遺伝学にもとづくアプローチがある．これは，細胞分裂時に起こる染色体間の交叉原理に基づき，遺伝子多型情報を用いて種々疾患，薬剤応答性，薬剤副作用等と相関のある遺伝子や座位を特定するものである．ゲノム上の多型情報源として，VNTR，マイクロサテライトマーカー，そしてＳＮＰｓ（Single Nucleotide Polymorphisms）等が存在する．これらのマーカのうち，ＳＮＰｓはマーカーであると同時に直接的な疾患原因となる可能性もあり，この点でも注目されている．遺伝子多型情報を用いた解析には統計や多変量解析の適用が必要となる．近年，多量のデータを用いた解析を行う手法の総称としてデータマイニングという言葉が使われており様々な解析手法が展開されている．ポスターではＳＮＰｓ解析をデータマイニング手法を基本として展開する場合の特徴，利点，あるいは留意点等に関する考察を行う．

JKP2 タンパク質三次元共通構造特徴の自動認識システム AIM の開発

(豊橋技科大) ○加藤 博明，高橋 由雅，阿部 英次

■タンパク質の三次元共通構造特徴（モチーフ）の探索は，その構造-機能相関や遺伝情報解析の問題とも密接に関連し，今日の重要な課題の一つになっている．本研究では，あらかじめ質問構造の設定を必要としない，複数タンパク質間の三次元共通構造特徴（モチーフ候補部位）の自動認識のためのプログラムの開発を試みたので報告する．探索対象となる二つのタンパク質の三次元構造は，その構成二次構造セグメントを要素としてそれぞれグラフ表現し，グラフ論的な最大共通部分グラフ探索アルゴリズムを基礎として，その三次元共通構造特徴を同定する．また，三つ以上の複数タンパク質間の共通構造探索への応用についても併せて報告する．

JKP3 SELDI プロテインチップ技術を用いたバイオマーカー探索

(サイファージェン) 有國 尚，斉藤 賢治

■このシステムは SELDI 技術に基づいている．このシステムにより血清，尿，髄液，組織といったクルードなサンプルから直接プロテイン・マーカーを探索する事が可能になった．マーカーを確認するためのアッセイをチップ上で行う事が可能なため必要な実験をプロテインチップシステムだけで行う事が出来るように工夫することができる．このシステムの核になるプロテインチップ R には2 mm 径のスポットがある．各々のスポットは陽イオン・陰イオン・疎水性・親水性といった化学修飾や抗体・レセプター・DNA 等の生化学的修飾がされており，目的とするタンパク質をチップ上に捕捉する事が出来る．プロテインチップ上にクルードなサンプルをスポッティングした後，スポット表面に対して親和性を示さないタンパク質やその他の夾雑物を取り除くため洗浄を行い，溶出させる．その後，質量分析計（TOF-MS）装置により，スポット表面に結合していたタンパク質の分子量スペクトルを僅かな時間（数秒）で得ることができる．このシステムには質量スペクトルを解析し，スペクトルデータをハンドリングするためのソフトも含まれており，複数のサンプルから得られた分子量スペクトルの比較からタンパク質の発現の有無をビジュアルに判断するように工夫されており，迅速にマーカー・プロテインを探す一助になっている．

(ポスターセッション末尾)

キーノート講演 15:50–16:30

J08 化学構造からのデータマイニング

(関西学院大 情報メディア教育セ) ○岡田 孝

■マーケットバスケット分析の実用化以来，データマイニングの研究が幅広い分野から注目を集めている．最近は表形式のデータばかりでなく，テキストや時系列，地図，マルチメディアなど多様な構造を持つオブジェクトへと対象が拡がっており，知識発見のための方法論としても，帰納論理プログラミングや相関ルール解析の拡張など，多くの試みがなされている．このような研究の一環として，分子のグラフ構造，3次元構造と生理活性が格納されたデータベースから，構造活性相関に関する知識を発見する試みが行われている．ハイスループットスクリーニングにより大量のデータが生成される現状では，これらデータからの知識発見方法論を，各種のマイニング技法中に見出せるか否かが関心事となろう．本報告では，(1) 化学構造を対象とすることができる機械学習系統の各種マイニング法の概観，(2) 筆者らが開発したカスケードモデルによる知識発見結果，の2点を中心に解説する．

一 般 講 演 16:35–17:20 —ケモメトリックスおよび関連ソフトウェア —

J09* 化学物質の毒性の予測

(物質研) ○田辺 和俊，松本 高利

■化学物質の毒性をその化学構造から予測するシステムを開発するために，化学構造から発生させた構造的・立体的・電子的・疎水的記述子と毒性データとの相関をニューラルネットワークで解析した．その結果，化学構造から化学物質の毒性を高い的中率で予測する手法を見いだした．

J10* 分子の構造活性相関のためのニューラルネットワークシミュレータ: Neco (NEural network simulator for structure-activity COrrelation of molecules) の開発—ペリラルチンの疎水性パラメータ LogP の予測—

(お茶大大・人間文化研究科) ○高橋 梨紗，細矢 治夫，長嶋 雲兵

■学習方法として中間層において自己組織化を行い，全体に教師付学習の両方を行う，自己組織化とパーセプトロンを融合したニューラルネットワークシミュレータの開発を行っている．本プログラムは，自己組織化と教師付学習の双方の特徴を併せもつため，従来のニューラルネットワークよりも高精度な認識処理を実現し，かつ高速学習が可能となる．本研究

では今回開発した3層からなる階層型ニューラルネットワークを用いて，22種類のペリラルチン類の疎水性パラメータ LogP の予測を行う．出力層のノード数を1つにすることで，LogP の値を連続した数値データとして予測することが可能である．なお入力パラメータとして，分子構造 STERIMOL パラメータ5種のパラメータと甘味／苦味の分類値を用いた．

J11* 石炭の化学情報解析

(一関高専・物質化工) ○貝原 巳樹雄，佐藤 寿克，高橋 正幸，高橋 信行

■石炭の起源，性質，用途に関係する，主に化学的なパラメーター (化学情報) として，生成の地質年代，組織成分，石炭化過程や，元素組成，また，発熱量，粘結性，膨張性，コークス化性などの加熱時の性質や揮発分，燃料比などが広く利用されている．しかしながら，これらのパラメーター相互の関係は，単純ではない．そこで，今回，多数のパラメーターの階層関係が一目で理解でき，さらに定量的な目安が得られるよう，統計的な解析方法の適用可能性について検討した．

特 別 講 演 17:40–18:40

KJ Chemo-Bioinformatics and Comparative QSAR

(Pomona College, USA) Corwin Hansch

第2日・午前 10月27日 (金)

一 般 講 演 9:00–10:40 —故佐々木慎一教授追悼セッション —

J12* 情報化学と佐々木慎一先生

(豊橋技科大) 阿部 英次

J13* ヒトのm DNA のイントロンの構造

(山形大・工) 木ノ内 誠，坂井 孝光，金谷 重彦，○工藤 喜弘

■ヒトm RNA のイントロンの新しいデータから GT/AG 則（上流端の GX の X が T, 下流端の GY が A であるという規則）から逸脱する事例が出てきたので，GT/AG 則を補完する規則を探した．GenBank/EMDL/DDBJ(Release 34) のヒトのデータ Locus 数 78425 から抽出した完全な実在イントロンの記述 5791 部位の内，逸脱事例は 161 件であり，「イントロンを否定」，「GT・AG への読み替え」などの解釈可能なものを除いても GC/AG , GT/GG , GT/CG で合計 34 件が残った．これは GX-，－ YG の最末端の G, G は不可欠であること，揺らぎは二番目（X および Y）から現れていること，などを示唆していると考え，X，Y の塩基部位の環数，原子団の種類，位置，数に関する共通性からスプライシングで投げ縄構造形成に関与するという U1 － および U2 － RNA 複合体の作用機構の考察を試みた．

J14* バクテリア tDNA の検出

(山形大・工) ○木ノ内 誠，金谷 重彦，工藤 喜弘

■遺伝情報全体の全体的な解明のために細菌のゲノム DNA の中から tDNA を拾い出す手順を開発した．「クローバ葉構造を組めること」が最初の必要条件である．大腸菌に適用して見つけた 256 個は Komine ら (1990) による 78 個全部を含んでいた (すなわち再現率 100 まのところない．不変部位を重視するなどの機能を付加してあるため，候補を大幅に絞り込むことができる．たとえば，T ループの gttc に注目すると大腸菌では 86 個になり，GenBank のファイルに記述されている tDNA と完全に一致した．真核生物の tDNA でも上述条件が成立すれば適用でき，事実，線虫で検出した tDNA 17918 件は，データベース記載の 186 件のうちイントロン介在などが原因でクローバ構造を組めない 25 件を除いた 161 件を全部含んでいた．特別処置を施さないで真核生物にも適用できるように，イントロン問題の実用的な解決策を検討中である．機能を最優先する他の諸方法に比して，本方法は適合率をそれほど落とさずに高い再現率を維持する点が優れている．

J15* 構造類似性解析ツール TOPSIM の開発

(豊橋技科大) ○高橋 由雅，金畑 竜彦，平井 貴朗，丸岡 芳子

■ 先に，筆者らは，化学構造情報の定量的な記述表現の一つとしてトポロジカルフラグメントスペクトル（TFS）法を提案した．TFS 法は与えられた化学構造からの部分構造の列挙とその数値的な特徴づけを基礎としており，この特徴づけの方法によって様々な特性スペクトル表現を得ることができる．現在，これまでに提案した隣接原子の数，構成原子の質量数，さらには疎水性パラメータによる特徴づけのによる TFS の自動生成と，これらの構

造特徴表現を基礎とした構造類似性解析のためのソフトウェアツール TOPSIM の開発を進めている．これまでに，構造エディタによって描画された構造式に対する前述の特徴づけを利用した TFS の生成機能のほか，TFS データベースの作成機能とこれらデータベースを利用した構造類似性解析，類似性検索の機能及び関連入出力のための GUI を実装した．TOPSIM の基本概念とこれら機能の詳細について報告する．

J16 立体化学の規範的コード化法 CAST による分子の相対および絶対立体配置の識別

(科技団さきがけ研究 21，理研) ○佐藤 寛子 (理研) 越野 広雪 (豊橋技科大) 船津 公人 (理研) 中田 忠

■ CAST は入力された三次元分子構造を規範的にコード化できる立体化学構造表記法である．CAST 表現によるコンホメーションの類似と相違の識別について前回の情報化学討論会において報告した．CAST コードには，相対および絶対立体配置の情報も表現されているが，分子のとり得る多様なコンホメーションの情報に取り込まれて表現されている．従って同じコンホメーション間の類似性の識別と同定はコードを比較することで容易に行えるが，異なるコンホメーション間ではコードを比較するだけでは行えない．そこで，入力分子構造を比較基準構造へ規範的に変換した後に CAST コード化することで，多様なコンホメーションの情報を取り除き立体配置を明確にコード化することを可能とした．エナンチオマーを表現し相対配置を同定するための鏡像的変換についても報告する．

J17 CAST を用いた NMR データベースと立体化学を考慮した NMR 化学シフト精密予測システム

(理研) ○越野 広雪 (科技団さきがけ 21，理研) 佐藤 寛子 (豊橋技科大) 船津 公人 (理研) 中田 忠，(理研) 鵜澤 洵

■複雑な天然物などの有機化合物をコンピュータで取り扱う場合，その多様性の為に分子の比較が困難である．そのためこれまでに幾つか報告されている，データベースを用いる NMR 化学シフト予測システムで用いられている構造情報は平面構造で，立体化学の考慮は開発途上にある．我々は平面構造を表記する CANOST 法と並列表記でき，二面角情報によって立体化学を表記できる CAST (CAnonical representation of STereochemistry) 法を最近報告した．今回，CAST による各原子とその周りの立体化学的な環境の類似性の識別方法，CAST コードを用いたデータベースの構築とそれを用いた立体化学を考慮できる NMR 化学シフト予測システムへの開発について報告する．

特 別 講 演 11:00–12:00

JK 化学情報システムの現状と将来 — インターネット時代を迎えて

(化学情報協会) ○千原 秀昭

■紙媒体の時代から現在に至る，化学情報の整理・利用・流通の変遷を簡単にふりかえり，これまで3回にわたる革命的な転換期を経験した化学情報システムがたどった道をふりかえり，化学とその周辺分野の研究者・開発者の要求に応じて，またはそれを先取りして，情報システムのあるものは発展し，他のものは消滅したのはなぜか，いまはどういう性格の状態にあるのかを概観する．化学・薬学・農学・材料学・医学などの研究・開発にあたって，必要とされる，または望まれる形の情報システムはどんなものか．現状はそれと比べて，どう評価されるか，何が足りないのか，望ましい形へもっていくのにはどうすればいいかなどについてお話しし，皆さんのご意見も伺いたい．文献情報，ファクト情報，特許，など種類によっても望ましい形は違う．特にこれからは，ソフトウエアと通信技術との融合がいっそう進むことは必至であろう．

第2日・午後 10月27日 (金)

キーノート講演 13:20–14:00

J18 計算機化学による有機反応経路の追跡

(奈良教育大学) ○山辺 信一，山崎 祥子

■計算機化学のうち，分子軌道法を使う量子化学は，有機化合物を対象として発展してきた．有機化学反応に対し，計算機化学がどのようにアプローチするかの例を，小員環有機化合物形成の反応機構をテーマとして，二つ述べたい．

1．セレノシリルエテンを用いるルイス酸によるシクロプロパン化反応小員環有機化合物であるシクロプロパン環形成反応の新規な例としてセレノシリルエテンを用いる塩化スズにより促進されるシクロプロパン化の理論計算を行なった．その結果，Se とルイス酸金属の

スズが相互作用をする環状中間体双性イオンから，ケイ素1,2-転位とシクロプロパン閉環が協奏的に起こる反応機構が判明した．また，シクロブタン化の経路は，シクロプロパン化に比べ，エネルギー障壁が高かった．

2．ケテンとオレフィンのオキセタン生成反応ケテンとオレフィンとの [2+2] 環化付加反応の反応機構を理論計算で検討した．Bis(trifluoromethyl)ketene の場合，シクロブタノンよりオキセタン形成を有利であることが判明した．一旦，生成したオキセタンのシクロブタノンへの異性化し，この途中で双性イオン中間体が介在しているト予想される．この結果は実験的に 1HNMR で実証された．

一 般 講 演 14:05–15:10 —理論化学・計算化学 1 —

J19* 無電解析出における還元剤酸化反応の Ab initio 分子軌道法による解析

(早大理・工) ○玉木 亜弥子，中井 浩巳，本間 敬之，逢坂 哲彌

■無電解析出法は外部電源を使用しないめっき成膜プロセスであり，電子デバイス・回路実装を始めとした様々な分野で用いられ，工業的に重要な技術になっている．この方法では溶液中の還元剤分子の酸化反応により供給される電子が金属イオンを還元することにより析出が進行する．このため固液界面における種々の電子移動を伴う複雑な反応系であると同時に，連続成膜のためには析出した金属表面の還元剤酸化反応に対する触媒活性が重要な因子となっている．我々は無電解析出に伴う反応の中でも還元剤の酸化反応に着目し，非経験的分子軌道法を用いた分子レベルからの解析を行っている．今回は，特に金薄膜の成膜に用いられる，中心原子に窒素を持つヒドラジン（N2H4）とヒドロキシルアミン（NH2OH）還元剤に着目し，両者の酸化反応の素過程を分子レベルで定量的に検討すると共に，還元剤の酸化能などの比較検討を行った．

J20 色素増感太陽電池に関する理論的研究

(物質研・東京大大・工) ○北尾 修 (物質研) 小川 哲司，青木 孝造，荒川 裕則

■ 色素増感型太陽電池では半導体表面に化学的に吸着された色素分子の励起状態から半導体の伝導帯への電子移動が高効率で生じ，その機構には色素分子と半導体を繋げている共有結合が重要であるとされている．我々はその反応機構を理論化学の手法でしらべ，この人工光合成材料の設計指針を得ることを目指している．具体的に上記系のモデルについて，Rappe-Goddard の電荷平衡法（QEq）と，それを我々が電荷分離系へ一般化した手法 (QEq-CS) を用いて計算し，その結果から，注入された電子は色素分子と結合している金属原子周囲ではなく，色素分子のドナー領域に面したところに局在していることを確かめた．この内容は，上述の共有結合がドナーとアクセプターとの間を密接な位置に保ち，超高速電子移動過程を実現していることを示唆する．

J21 水溶液における有機化学反応への ab initio MD 法の適用

(広島大大・理) ○相田 美砂子 (大阪大・産研) 山高 博 (太平洋北西国立研) Michel Dupuis

■溶液内反応においては溶媒分子が重要な役割を果たしている場合が多い．しかし量子化学的取り扱いをすべての溶媒分子に対して行うことはできない．そこで反応に直接関与している溶質および溶媒分子を QM 的に取り扱い，その周辺の多数の溶媒分子を MM 的に考慮に入れた分子動力学法計算を行う手法を発展させている．ここでは，この手法を t-BuCl の加水分解反応に適用する．これは，有機化学の分野では典型的な SN1 反応として分類されている反応である．すなわち，水溶液中において反応の中間体が存在する．この反応が多数の溶媒分子の存在下でどのような経路で進行するのか，QM/MM-vib 法に基づいた ab initio MD 法によって詳細に解析する．

一 般 講 演 15:15–16:10 —理論化学・計算化学 2 —

J22 シリカガラスの圧密化と無定形多形（polyamorph）

(旭硝子・中研) 高田 章

■ シリカガラスは種々の anomalous な性質を持つが，加圧による変形は複雑な振る舞いを示す．ある圧力値を超えると除荷してももとに戻らず圧密化したままの状態を保持する・さらに圧力を大きくすると４配位から６配位に変化することも知られている．特に前者については原子構造がどのように変形していくのかまだよくわかっていない．本研究では分子動力学法を用いることにより原子レベルの構造の特徴を解析する．ガラスの圧密化を無定形多形（無定形の構造にも多形が存在する）の観点から解釈した結果についても発表する．

J23* periodicDFT による硫酸化ジルコニア表面の超強酸性の研究

(宇部興産) ○叶木 朝則，角田 剛久，後口 隆，八尾 滋

■硫酸化ジルコニアはアルカンの異性化反応等に活性を示す超強酸性固体触媒として知られているが，触媒表面や活性点の構造などの詳細は未知のところが多く，いまだ議論の対象となっている．本研究では密度汎関数法を用い，ジルコニア表面に，水，SO 3，硫酸を吸着させ，硫酸化ジルコニアのモデリングおよび酸強度の評価を試みた．まず水およびSO3を，cubic(111)，tetragonal(101)，monoclinic(-111) と異なる３つのジルコニア表面に吸着させたところ，tetragonal(101) 表面は他の 2 つの表面に比べて，１）水を解離しやすい，２）SO3 を特異な吸着構造で強吸着する，という特徴がある事が分かった．また，硫酸をtetragonal(101) 表面に吸着させた硫酸化ジルコニアに塩基性ガスであるアンモニアを吸着させることにより，硫酸化ジルコニアの酸強度の評価を試みた．

J24* ジルコノセン／メチルアルモキサン系オレフィン重合触媒の活性点構造に関する理論的検討

(三菱化学) ○遠藤 潤，岡崎 慶二 (東京大大・工) 中野 晴之，平尾 公彦

■現在工業的に広く用いられているチーグラー系のオレフィン重合用触媒に続き，近年メタロセン系触媒が注目されている．メタロセン系重合触媒の中でも，ジルコノセンに対する助触媒としてメチルアルモキサンを用いる系は，最初に重合が確認された触媒系としてよく知られている．しかしアルモキサンの構造とジルコノセンへの作用，そして活性点構造に関しては，種々の仮説が提出されているが，まだ明確なモデルが定まっていない．本検討では，実重合系の活性点構造を考える基盤を得るため，ジルコノセンとメチルアルモキサンの相互作用系実験値に適合するモデルを量子化学計算により探索した．その結果，ＸＰＳによるイオン化エネルギーと固体ＮＭＲのケミカルシフトの実験値に適合する相互作用モデルを見出した．当日はその結果について詳細に報告する．

一 般 講 演 16:20–17:00 —理論化学・計算化学 3 —

J25* 大規模系のための汎用分子動力学統合システム TACPACK2000 の開発．その 1 概念設計

(物質研) ○三上 益弘，篠田 渉 (産技融合研) 川田 正晃，森川 良忠，古明地 勇人，長嶋 雲兵 (東北工技研) 池庄司 民夫，劉 子敬 (名古屋工技研) 小川 浩 (大阪工技研) 田中 真悟，香山 正憲 (産技融合研) 寺倉 清之 (富士通) 南 多善 (富士通九州) 吉嶋 秀明 (富士通) 紙谷 希，三井 崇志，立川 勉

■本研究では，生体高分子，有機結晶，液晶，高分子，半導体，金属・合金，セラミックスなど複雑物質の大規模系を対象とした大規模汎用分子動力学シミュレータとそのための統合化システムの開発を進めている．本システムは，拡張性の向上を目的に，新しい理論に基づいた分子動力学シミュレータや解析プログラムを容易にプラグインするソフトウェア技術と，実験研究者にも本システムが容易に利用できるようにするためのデータベース管理技術，マルチスケール高速グラフィクス技術，大規模複雑物質モデリング技術，グラフィカル・ユーザ・インターフェースを持つ．本講演では，大規模汎用分子動力学シミュレータとそのための統合化システムの概念設計について述べる．

J26 新しい量子分子動力学ソフトウェアの開発と応用

(東北大院工) ○久保 百司，黒川 仁，鈴木 研，高見 誠一，宮本 明 (広島国際学院大工) 今村 詮

■ 近年，量子分子動力学法を用いた反応ダイナミックス解明への期待が急速に高まっている．しかし，現実問題として，密度汎関数法に基づく第一原理分子動力学計算では十数原子系の計算が限界であり，単純系以外のほとんどの系に対して全く無力である．そこで，著者らは Tight-Binding 近似に基づくオリジナルな高速化量子分子動力学計算プログラムを開発し，第一原理分子動力学法より 4000 ～ 5000 倍の高速化に成功した．さらに，本プログラムを活用し，触媒を含む大規模系における反応ダイナミックスの解明に成功した．

一 般 講 演 17:05–18:00 —理論化学・計算化学 4 —

J27* 密度汎関数法プログラム ProteinDF を用いたヘムタンパク質の全電子計算

(九工大・情報工) 佐藤 文俊，吉廣 保，恵良 信，○柏木 浩

■発表者らはタンパク質の性質や反応性を電子レベルで理解することを目的に，ガウス型基底関数を用いた密度汎関数法に基づく分子軌道法プログラム ProteinDF を開発・発展させてきた．このたび，ワークステーションクラスタ並列システムで本格的なタンパク質の全電子計算を実行したので，その結果を報告する．

J28* TS1 活性中心構造最適化に及ぼすクラスターモデルサイズ効果

(宇部興産) ○後口 隆，八尾 滋

■我々は，密度汎関数法計算を行ない，酸化反応に対し特異な活性を示す TS1 上での反応

分子活性化機構に関する検討を続けてきた．これまでは比較的小さなクラスターモデルを用い，吸着分子の反応性を調べてきた．今後，さらに大規模な計算が可能となると考えられるため，その準備として比較的大きなクラスターモデルを用い，活性中心構造が再現できるかどうかを検討した．まず，TS1 の細孔モデルから T12(Ti が存在すると考えられている位置) 周辺を切り出し，H で末端をキャップし [TiSi16O16 H36] サイズのクラスターとした．このクラスターに対し，密度汎関数法，および B3LY P 法，さらには ONIOM 法等で構造の検討を行なった．その結果に関して報告する．

J29 計算振動分光学—密度汎関数法に基づいた約 500 種の化合物の振動解析

(広島大大・理) ○吉田 弘，武田 久美，岡村 潤子，江原 明人，松浦 博厚

■密度汎関数法 (DFT) は比較的短い計算時間で分子の構造的・分光学的性質を高い精度で与えることが知られており，我々はこれまでに，個別の化合物についてその精度の高さを示してきた．本討論会では，DFT を用いた振動解析が，さまざまな種類の元素を含む多様な化合物について一般的に適用可能であるかどうかを検討するために，振動スペクトルの帰属が信頼できるデータ集として出版されている，約 30 種類の元素を含む約 500 種の化合物について，比較的大きな基底関数系を用いた DFT による基準振動計算を行った．さらに，計算結果が実測スペクトルを極めて高い精度で再現するための方法として，計算された調和振動数を計算波数値に対してスケールし非調和振動補正を行う Wavenumber-linear Scaling (WLS) 法を提案する．また，比較的小さな基底関数系を用いたより実用的な振動解析法の試みも同時に報告する．そして，これらの新たな計算化学的手法に基づいた振動解析法をインプリメントした分子モデリングプログラムについても紹介したい．

◇部会行事

情報化学部会　総会

期　日：平成 12 年 10 月 26 日（木）12 時より

場　所：京都リサーチパーク（京都市下京区中堂寺南町 17）

　　第 23 回情報化学討論会　初日　午前のセッション終了後　同会場にて

議　題：３月よりこれまでの活動報告

　　これから年度末までの活動予定紹介　　等

◆部会記事

電子ジャーナル(Journal of Computer Aided Chemistry)の創刊と投稿のお願い

日本化学会情報化学部会では、かねてより On-line only journal, "Journal of Computer Aided Chemistry"(JCAC)の発行の準備を進めてまいりましたが、8月8日に公開の運びとなりましたので会員の皆様にお知らせいたします。この電子ジャーナルは、日本化学会ホームページ(http://www.chemistry.or.jp)の定期刊行物のページからアクセスできます。

JCAC は、査読システムの整った学術雑誌としての位置付けを持っていると同時に、投稿および公開を電子化し（将来的には査読も）、投稿から公開までの期間を短縮することを目指している点に第一の特色があります。また、電子体の特色を活かし、動画や高解像度の図、音響を伴った資料などのマルチメディア付録を論文と共に提供でき、これまでの論文誌とは一味違った情報豊かな内容にできる点に第二の特色があります。なお、JCAC の公開プラットフォームは、科学技術振興事業団が開発を進めている J-STAGE を利用しています。J-STAGE の詳細は、http://www.jstage.jst.go.jp をご覧下さい。

新しいジャーナルを軌道に乗せるには何と言っても皆様からの論文の投稿が不可欠です。研究の成果をぜひ投稿頂きたいと考えています。また、情報化学部会では年に一度情報化学討論会を開催していますが、ここで発表される内容やさらに完成度を高めたものを論文としてぜひ JCAC に投稿頂きたいと考えております。編集委員会メンバー一同、この JCAC を日本のコンピュータ化学を代表する学術誌として育て上げて行きたいと考えていますので、会員の皆様のご理解とご協力を宜しくお願い申し上げます。

なお、JCAC の投稿規程は上記の日本化学会ホームページの JCAC アクセスポイントおよび http://www.quebec.tutkie.tut.ac.jp/jcac/ に掲示しています。投稿の便を図るためにスタイルファイルもダウンロードして利用できるようになっていますので、投稿の際にはこれをご利用ください。投稿に際しては、下記の編集事務局宛てにフロッピーなどの電子媒体でお送りいただくか、メールの添付ファイルでお願い致します。

皆様からの投稿をお待ちしております。

Journal of Computer Aided Chemistry 編集委員長
船津　公人

編集事務局所在地
441-8580　豊橋市天伯町雲雀ヶ丘 1-1
豊橋技術科学大学知識情報工学系
船津研究室気付
TEL：0532-44-6879（直通）
FAX：0532-47-9315（直通）
編集局 e-mail：jcac@chemistry.or.jp

平成１２年度第２回電子ジャーナルWG議事録

日　時：平成１２年５月１８日（木）１３時～１５時

場　所：化学会５０１Ａ会議室

出席者：船津公人，相馬融，時田澄男，中田吉郎，中野英彦，中山伸一

議事内容

（１）船津委員より、Ｊ－ＳＴＡＧＥは投稿システムがとりあえず機能しそうであること、最終テストを５月31日NTT-LSで行うことが報告された。

（２）７月中に１０報程度を掲載したものができそうであること、それに向けた準備がなされていることが報告された。

（３）文献としての所在を確かなものにするために、化学会のホームページにJCACへの入り口を置く折衝をすること、データのバックアップ体制をつくることなどが検討された。

（４）電子ジャーナルへの投稿料は２ページまで１万円、以降１ページごとに千円とし、添付ファイルについては百メガバイト当り千円とし、上限を五百メガバイトとする案がまとめられ、拡大編集員会にかけることとなった。

以上

平成１２年度第２回拡大ＣＩＣＳＪ編集委員会議事録

日　時：平成１２年５月１８日（木）１５時～１８時

場　所：化学会５０１Ａ会議室

出席者：時田澄男，高田章，船津公人，有國尚，相馬融，高畠哲彦，中田吉郎，中野英彦，中山伸一，清水弘一

議事内容

（１）第２３回情報化学討論会について

清水部会担当より、藤田委員からの電子メールに基づき進捗状況の説明があった。展示企業の募集、展示の際のインターネットの利用の可否については藤田委員に確認することとした。発表申込締め切り前にメーリングリストで申し込みを促すこととし、合同セッションについては申し込み件数によっては調整することとした。またプログラム編成は関西の高木委員、高畠委員、藤原委員にお願いすることとした。

（２）ＪＣＡＣについて

船津委員より、Ｊ－ＳＴＡＧＥは投稿システムがとりあえず機能しそうであること、７月中に１０報程度を掲載したものを立ち上げられそうであることが報告された。また化学会のホームページに雑誌のトップを置く折衝をすること、データのバックアップ体制をつくることなどが検討された。投稿料は２ページまで１万円、以降１ページごとに千円とし、

添付ファイルについては百メガバイト当り千円とし、上限を五百メガバイトとすることが決められた。投稿料などは今後見直しを行っていくこととした。
最後に、ＪＳＴから原稿のＸＭＬ化についてのテストケースになって欲しい旨要望があったことが報告された。

（３）CICSJ Bulletin Vol.18 No.3 について

清水部会担当より、No.2 の発送が遅れたため名簿原稿の返送が遅れていることが報告された。有國委員より名簿校正の作業を 6 月初旬に東京近郊の委員だけで行うことが提案され了承された。

有國委員より、CBI 学会からシンポジウムの掲載と共催、近畿化学部会からセミナーの掲載の申し出があったことが報告され、費用節減のため、部会ホームページに掲載することとなった。

（４）同 No.4 以降の企画について

有國委員より、８月下旬発行予定の No.4 は第２３回情報化学討論会特集号、９月下旬発行予定の No.5 は、材料を探るのパート３かバイオインフォマティクス関係、１１月下旬発行予定の No.6 は２０世紀を振り返るというテーマで、これまでの JICSJ の索引や歴代部会長のレビューを掲載、来年１月下旬発行予定の Vol.9 No.1 は２１世紀に望む情報化学というテーマで、アカデミックな人の短い原稿を掲載という提案があった。No.4 にはＪＣＡＣへの投稿の呼びかけを掲載することとした。No.5 については幾つかの案が出たが、有國委員が調整することとした。それ以降については次回の委員会で検討することとした。

（５）九州支部・中国四国支部合同大会への「依頼講演者」推薦の件

時田委員長より標記の件について説明があった。日程が情報化学討論会の翌日からであることを踏まえて近郊の人を選んでもらうよう松岡委員に一任することとした。

（６）支部長・部会長会報告

時田委員長より、５月１５日に行われた支部長・部会長会について以下のような報告があった。本部会からは、電子ジャーナルを発刊することと収支状況について報告した。収入が多い部会は講習会が活発である。学会のホームページで収入源となる情報の提供を目指している。

（７）講習会について

高田委員より講習会テーマとして、材料、溶液反応、触媒、ケモメトリクスなどが提案された。多くの人を集めるには、現在注目されている対象とその情報化学的な側面を組み合わせることが必要であるという提言があり、いくつかの注目されている技術が紹介され、さらに情報収集を行うこととした。

次回委員会は藤田委員の都合を聞いて事務局で調整することとした。

以上

平成１２年度第３回拡大ＣＩＣＳＪ編集委員会議事録

日　時：平成１２年８月８日（火）１５時～１８時

場　所：化学会６０３号室

出席者：時田澄男，高田章，船津公人，坂本直紀，相馬融，高畠哲彦，中山伸一，藤田眞作，清水弘一

議事内容

（１）第２３回情報化学討論会について

藤田委員より，情報化学討論会のＨＰ及びプログラムの資料に基づき進捗状況の説明があった。発表申込件数は口頭２９件・ポスター４０件となったこと，現在まで広告４社・展示７社の申し込みがあるがもう少し増やしたいこと，１２名の座長依頼を行っていること，４００名の参加者を目標としていること，今回は発表者索引を作成したことなどが報告された。プログラムについては，佐々木先生の追悼セッションと構造活性相関シンポジウムとの共通セッションが新規のものであり詳しい説明がなされた。広告企業を増やすことに関しては，高田委員が検討することとなった。また予算について時田委員長から質問があり，藤田委員が次回までに予算案を作成することとなった。さらに，船津委員から，討論会のＨＰに電子ジャーナルへのリンクを張ってほしい旨の要望があり了承された。最後に，清水部会担当よりポスター賞の景品のアイデアを募集する旨の発言があった。

（２）ＪＣＡＣについて

船津委員よりＪＣＡＣのデモを行いながら，現在８報が掲載されており３報が査読中である旨の報告があった。さらに，電子ジャーナル発行に至る手順書が資料に基づき説明された。ＪＣＡＣについては投稿機能は当分の間使わず，閲覧機能のみで８月８日から公開することが了承された。また化学会の雑誌として化学会のＨＰからリンクを張る事も確認された。年間３０報を目標に，多方面に渡る広告を行うこととし，ＣＩＣＳＪ，情報化学部会のＨＰ，化学と工業誌，情報化学部会メーリングリストなどで「電子ジャーナルの創刊と投稿のお願いを」を掲載・配付することとした。また，ＪＣＡＣの公開に伴い，投稿規定のＨＰも一般公開するが，名誉編集委員名については部会長による確認の手紙を出すまで明らかにしないこととした。また，時田委員長から論文賞の設置についての提案があった。今後は索引の作成，ＸＭＬの導入を視野に入れて検討を行っていくことが確認された。

（３）CICSJ Bulletin Vol.18 No.5 以降の企画について

No.5 の特集については有國委員に確認し，メーリングリストにより検討することが了承された。

No.6 はこれまでのＣＩＣＳＪの総索引の作成を行うこととした。歴代部会長のレビューについては，工藤委員よりメールで提案のあった情報化学部会の前史，黎明期の歴史についての特集案と重なるので，提案の趣旨をもう一度確認することとした。Vol.19 No.1 は２

◆編集後記

今号は１０月２５、２６日に京都リサーチパークで開催される第２３回情報化学討論会の要旨特集号となっています。

昨年度は部会へのご意見をいただく場としてミキサーを企画しましたが、本年度は構造活性相関シンポジウムとの共通セッションとして「ゲノム情報と創薬」セッション、及び故佐々木慎一教授(元豊橋技術科学大学学長)の追悼セッションを予定しています。

討論会の場はいろいろな機会でもあります。教育の場、情報発信・収集の場、交流の場等々。いずれの場合にもまず情報をきちんと受け止め、さらに自ら情報発信しながら議論を交わすことができれば一層有意義な場となります。

そのためには何か基本があるでしょうか？会社に入社した時に先輩から教えてもらい役に立っていると思うことがあります。

まず発表会に出席した時には必ず一回は質問するように言われました。質問しなければならないとなると相手の言いたいことを理解しようと集中して聞きます。内容が自分の専門と違う場合でも、初歩的な質問を投げかけながら相手の壷にうまく嵌まることあるいは逆に痛い所を突くことが出来るようになります。どんどん質問してみましょう。

もう一つは会議等に出た時に必ず議事録を書かされたことです。議事録を書くためには会議の内容を理解し、わかりやすく再構成する必要があります。自分がわからない言葉は質問することにより新しい知識が増えます。討論会から戻って報告を書くあるいは口頭で伝えるつもりでぜひ聞いてみましょう。

討論会が特に若い参加者の皆さんにとって有意義な場になって欲しいと願っています。討論会も含めて部会活動へのご意見・ご要望を常時お待ちしております。

(A.T.)

CICSJ Bulletin Vol.18, No.5, November 2000

このページは「日本化学会・情報化学部会」の責任において運営されています。

目次

・特集：ポストシークエンス時代に臨む情報化学
巻頭言・・・

◈特集：ポストシークエンス時代に臨む情報化学

巻頭言

サイファージェン・バイオシステムズ㈱　鎌倉研究所　有國　尚

ポストシークエンシング時代を迎え、生命情報をいかに応用して活用していくかを研究する生命情報科学の時代が到来した。

ヒトゲノム塩基配列解読の進展は、この分野における研究を次の構造と機能解析へと加速している。こうした分野は、機能ゲノミクス，プロテオミクス、構造ゲノミクス、薬理ゲノミクス、バイオインフォマテイクス，といった新しい研究・技術分野として成長しつつある。

本誌ではこれまでも、バイオインフォマテイクス特集を刊行してきたが、今回、これらの特集を継続する形で「ポストシークエンス時代に臨む情報化学」と題して、これらの分野で活躍中の諸氏に今後の発展方向および情報化学との関わりについて論じて頂いた。

東京工業大学の石川先生には創薬に応用する立場で薬理ゲノミクスを解説いただいた。京都府立医科大学の一石先生にはゲノム塩基配列解読における情報科学について解説頂いた。京都大学の植田先生にはコンビナトリアル・バイオエンジニアリングについての試みについて書いていただいた。癌研究会癌化学療法センターの矢守先生には分子標的薬剤のバイオインフォマティクスについて書いていただいた。

ポストシークエンシング時代の新しい息吹と情報化学の発展方向の一端を感じていただければ幸いである。

２１世紀ゲノム創薬に向けた１つの提案
輸送機構に基づいた創薬分子デザイン

東京工業大学大学院生命理工学研究科　石川智久

１．はじめに

前臨床段階はもちろん，臨床開発の段階で，数多くの開発候補化合物がドロップアウトすることは，創薬において憂慮すべき重大な問題である。この開発中止となるケースのうち，約 30%が低い吸収率，低血中濃度レベル，速いクリアランスなど，薬物動態の不具合に起因することはよく知られている（図１）。これまで製薬企業は，新薬開発の段階で，候補化合物が開発中止に追い込まれることを，ビジネス上やむを得ないことだと見なしてきた。しかし，新薬開発のコストが鰻上りに上昇するに従い，製薬企業も新薬探索と開発戦略を再検討しはじめた。こうした中で，薬物輸送機構に基づく分子デザインは，薬物動態的に有利な薬を創出するとともに，薬剤設計のうえでも重要な要素となるであろう。

近い将来，薬物輸送機構に基づいた分子設計は，バイオインフオマテイクス，機能ゲノム，薬理ゲノムといった新しい研究技術を取り入れることにより，新薬探索と臨床開発を劇的に変化させるだろう。そして，酵素，膜結合レセプター，イオンチャネルといった古典的薬剤ターゲットのほかに，シグナル伝達の細胞内構成因子，オーファン核内レセプター，そして mRNA や DNA といった新しい薬剤ターゲットも同定されるであろう。したがって，今後はゲノム創薬の進展とともに，組織に特異的な薬剤ターゲティング，デリバリーの開発は，新規薬剤の部位選択性や薬理効果を向上させ，副作用を減少させるうえで重要になってくるであろう。

２．なぜ薬剤輸送は重要か

薬物トランスポーターや薬剤代謝酵素は，吸収，分布，代謝，排泄（ADME），ターゲット部位での薬剤実効濃度など，薬剤の体内動態プロファイルを規定し，薬剤の全体的な薬理効果を左右する。図２で示したように，もしターゲット部位での薬剤実効濃度が低過ぎた場合（タイムコース a），薬理効果は期待できない。逆に、ターゲット部位での薬剤実効濃度が高過ぎた場合には，副作用の起きることが予測される（タイムコース c）。したがって，良好な薬理効果を得るには，薬物トランスポーターと薬物代謝酵素の共同作用によって，ターゲット部位での薬剤実効濃度は十分な時間，うまく制御されなければならないのである（タイムコース b）。

薬物トランスポーターは，薬物の体内動態において，極めて重要な役割を果している。たとえば，小腸上皮細胞，脳血管内皮細胞に発現したトランスポーター蛋白は，経口投与された薬剤のバイオアベイラビリティや，中枢神経系（CNS）への薬剤移行に大きな影響を

与えている。一方，癌の化学療法の分野では，P 糖蛋白（MDR1）や多剤耐性関連蛋白（MRP1）が過剰発現すると，制癌剤に対して癌細胞が耐性になることはよく知られている。P 糖蛋白と MRP1 は，いずれも ATP（アデノシン 3 リン酸）一結合カセット（ABC）トランスポーターファミリーに属している。

現在では，40 以上ものメンバーからなるとトの ABC トランスポーターファミリーの遺伝子は，ほとんどが同定され，シークエンスが解明されている。また，ヒトの ABC トランスポーター蛋白が、イオンや内因物質のほか，薬剤も輸送するという研究報告も蓄積してきている 1)

（詳細については，URL ホームページ http：//www.gene.ucl.ac.uk/users/hester/abc.html を参照)。

P 糖蛋白は，薬剤の小腸による吸収や脳への移行に関与していることから、近年、特に注目されている。P 糖蛋白は，癌細胞ばかりではなく，正常な細胞や組織にも発現している。小腸における P 糖蛋白のモジュレートは，経口投与された薬剤の吸収に影響を与える。また，血液脳開門では P 糖蛋白が多く発現すると・薬剤の中枢への移行が抑えられで，中枢での薬効が得られない。逆に少ないと，中枢に薬剤が異常に蓄積して，副作用が起きる。

3．薬物トランスポーターの遺伝子多型

薬物トランスポーターの薬物体内動態への影響は，その発現レベルと分子自体の機能に依存している。薬物トランスポーターの発現は・内因物質ばかりではなく，薬剤を含む外界物質（異物）によって影響される。遺伝的な差異が，薬剤の効果や副作用発現の個人差となって現れることはよく知られている。この遺伝的な差異は，薬剤のターゲット分子のほか，薬物代謝酵素や薬物トランスポーターにもみられる。この遺伝的な差異と薬剤の効果との関係を取り扱うことを研究分野としている薬理遺伝学は，これまでチトクローム P450 による代謝など，薬物代謝による差異を遺伝的原因と関連づけて理解するうえで大きく貢献してきた。大量ゲノムシークエンスを可能にした最近の技術発展は，個々人の薬剤応答性の差に関係している因子である一塩基多型（SNP）を解析する共同研究組織の構築を促進させた。そして，設立された SNP 共同研究組織は，30 万から 60 万個の SNP 高密度マップを 2001 年中期にまで完成させ，その結果を公開する予定である（http：〃snp／cshl／org)。このような目ざましい技術発展に伴い，薬物トランスポーターの遺伝子多型解析とその臨床的意義を詳細に検討することも可能になってきた。

これまでの基礎研究でも，P 糖蛋白の自然発生的な遺伝子多型が見つかっており，薬剤の吸収，分布，排泄への影響が考えられてきた。しかし，P 糖蛋白をはじめとする薬物トランスポーターの遺伝子多型の臨床的意義については，現在までのところまだ十分には検討されていない。最近，Hoffmeyer らは，ヒト P 糖蛋白には複数の遺伝子多型があるという興味深い研究結果を報告している 2〉。P 糖蛋白をコードする MDR1 遺伝子の 26 番目のエクソンにある C−T 変異は，P 糖蛋白の発現レベルと機能とに有意に相関している。C−T 変

異をホモ型で持つ人では，十二指腸での P 糖蛋白の発現レベルが低く，経口投与したジゴキシンの血中濃度が高くなる。Hoffmeyer らは，この遺伝子多型が他の多くの P 糖蛋白の基質の吸収や，組織濃度に影響を与えている可能性を示唆している。薬物トランスポーターの遺伝子多型の発見と解析は，MDRl 遺伝子にみられるような対立遺伝子を区別する診断法を確立し，それに応じた薬剤の分子設計へとつなげられるであろう。

4．輸送機構に基づいた創薬分子設計の例

製薬企業にとっては、薬物トランスポーターの基質にならず且つ遺伝子多型に左右されない創薬分子デザインをすることが重要である。ドキソルビシンとダウノルビシンは最初に臨床応用が認可されたアントラサイクリンであり、エビルビシンは最近市場に出た制癌剤である。これらは 3 つの薬は現在広くヒトの癌の化学療法に使用されているが、P-糖蛋白によってと卜癌細胞からすぐに除去されるので P 糖蛋白が過剰発現した耐性癌でははとんど効き目がない。この治療上の問題を解決するために、P 糖蛋白の基質とならない分子構造を考慮する必要があった。かくして、より効果的なアントラサイクリンを試行した結果、Priebe 等によってアナマイシン（図 3）という新規の制癌剤が合成された。

P-糖蛋白は広い基質特異性を呈するが、疎水性カチオンをより好んで輸送する性質を持つ。アントラサイクリンの 3'－位のアミノ基は生理的条件下ではプロトンと結合してカチオンとなることから、P-糖蛋白の輸送機構に重要な分子構造上の要素であると示唆された。したがって、その 3'－位のアミノ基を水酸基に置換して P 糖蛋白による基質認識を回避した。さらに、脂溶性を増加させてリボゾームにとりこませるためと、トポイソメラーゼの阻害能力を強化するために、構造上の変換を試みた。即ち、C－2'位にヨードを導入して親油性を高め、C－4 位のメトキシ基を除去することであった。薬をリボソームに取り込ませるのは、癌へのターゲティングを上昇させることと、心臓毒性などの副作用を軽減するためである。図 3 に示す様に、P 糖蛋白を高発現する多剤耐性の癌を移植したヌードマウスにおいて、リボソームに抱埋したアナマイシンは強い制癌作用を示した。現在、アナマイシンは米国において第 2 相臨床試験の段階にある。

5．結論と将来への展望

今世紀末の 10 年間において，ハイスループットスクリーニング（m）やハイスピードアナロギング（HSA，またはコンビナトリアルケミストリー）の開発は，新薬探索のスピードを急激に加速させた。そして 21 世紀には，バイオインフオマテイクス，機能ゲノム，薬理ゲノムの研究から生まれるゲノム技術が、新薬探索段階でのターゲット評価，開発段階での臨床研究にバラダイムシフトを与えるであろう。しかし，新薬探索と開発は，時間とコストを要する高いリスクを有するだけに，ギャンブルの要素をはらむビジネスであることに変わりはない。この創薬における経済的リスクを減少させる優れた薬剤を創出する輸

送機構に基づいた創薬分子デザイン戦略が考えられる。創薬へのこうしたアプローチは，将来，「適切な薬を適切な患者に適切な投与量で」という医療の究極のゴールと完全に一致するであろう。受動的な拡散は，多くの脂溶性化合物の膜輸送にとって基本的な機構であるが，これだけでは細胞の薬剤輸送を完全に説明できない。

個々の患者における薬剤応答の差異の根幹である未知の分子機構について評価することが必要である。このことを成し遂げる第一歩は，薬剤の吸収，分布，代謝，排泄（ADME）に関与するトランスポーターと，薬物代謝酵素の遺伝学的研究であろう。その研究のターゲットは，まずP糖蛋白やMRPといったABCドランスポーターであろう。加えて，溶質トランスポーターであるオリゴペプチドトランスポーター（PepTl），モノカルポン酸トランスポーター（MCTl），有機アニオントランスポーター（Nptl），カチオントランスポーター（OCTNl，OCTN2）もターゲットとしてあげられる。これら溶質トランスポーは，小腸や腎臓の上皮細胞，肝細胞，脳血管内皮細胞にも発現している。そして，ある種の薬剤輸送にも関与している。薬剤トランスポーターの分子機構の解明とその薬物動態上の意義を定量的に解析することは，ポストゲノム時代における合理的な創薬分子デザイン戦略，ターゲット部位への特異的な薬剤デリバリーの開発に大きく貢献するものと我々は確信している。

References

1) Ishikawa T, et al. New nomenclature of human ABC transporter genes. Xenobiotics, Metabolism and Disposition l5: 8-19, 2000.

2) Hoffmeyer S. et. Al. Functional polymorphisms of the human multidrug-resistance gene: Multiple sequence variations and correlation of one allele with P-glycoprotein expression and activity in vivo. Proceedings of National Academy of Science USA 97: 3473-4378, 2000.

3) Priebe, W and Perm-Soler, R. Design and tumor targeting of anthracyclines able to overcome multidrug resistance: A double-advantage approach. Pharmac Ther 60: 215-234, 1993.

4) Consoli, U, et al. The novel anthracycline annamycin is not affected by P-glycoprotein-related multidrug resistance: Comparison with idarubicin and doxorubicin in HL-60 leukemiacell lines. Blood 88: 633-644, l996.

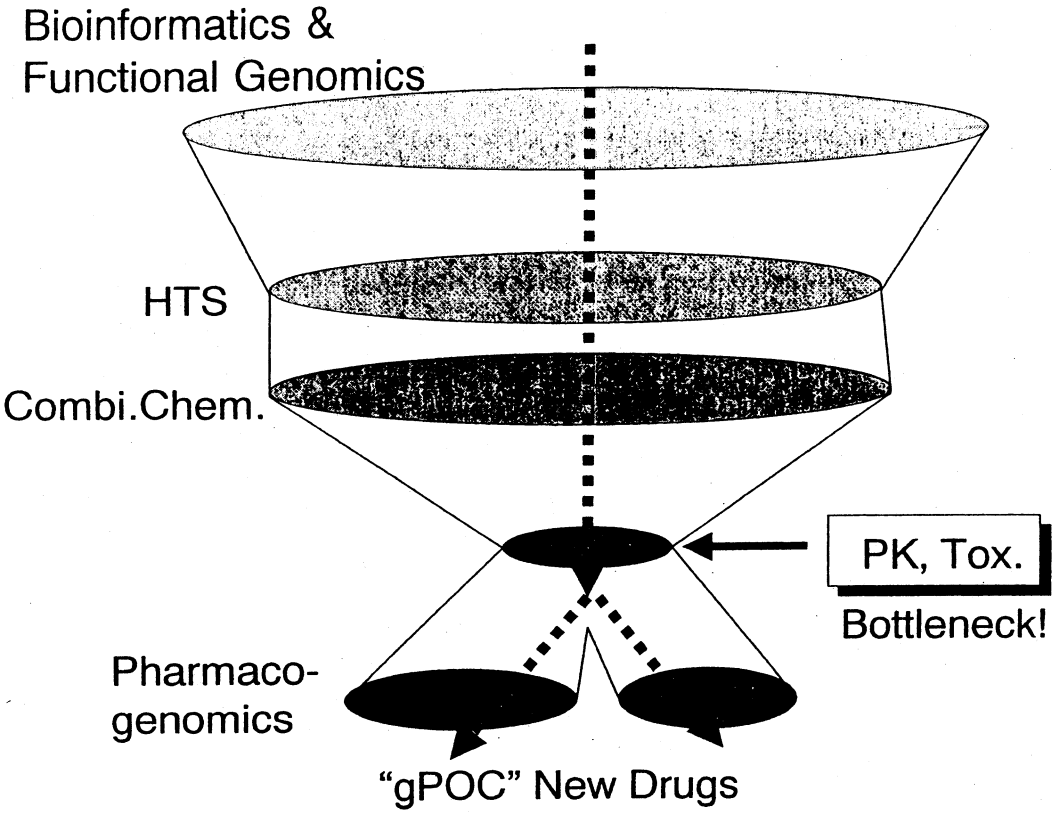


図1 gPOC（genetic point of care）新薬を生み出すゲノム創薬過程とそのボトルネックである薬物動態(PK: pharmacokinetics)と毒性(Tox.: toxicity)。

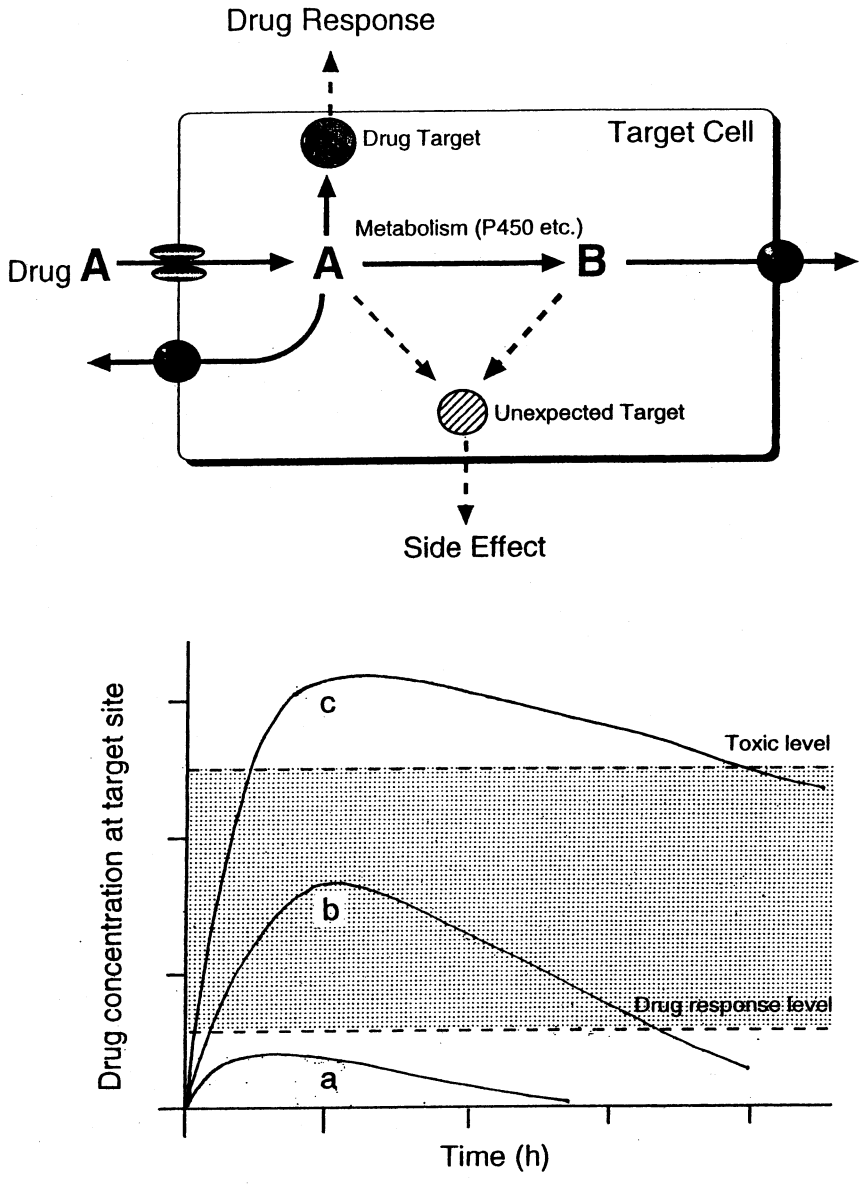
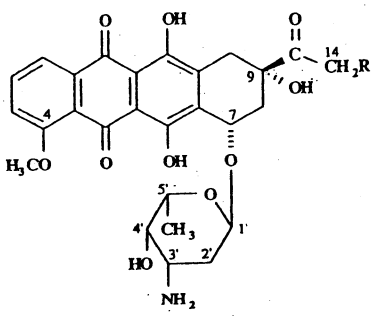
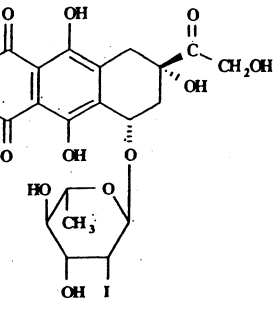


図２　薬物の薬理効果と副作用に対する薬物トランスポーターと代謝酵素の役割（上部パネル）。ターゲット部位での薬剤濃度の経時変化と薬剤応答性との関係（下部パネル）。ターゲット部位で薬剤は、薬理効果を示す最低濃度と副作用を起こす最低濃度との間、即ち”therapeutic window”内のレベルで充分な時間存在しなければならない（タイムコース b）。



1 - R=OH: Doxorubicin (DOX)
2 - R=H: Daunorubicin (DNR)



Annamycin

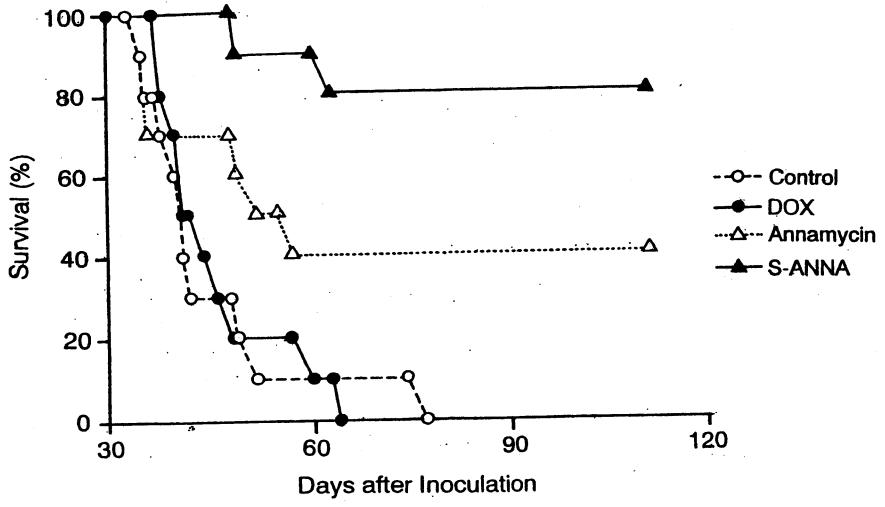


図3 ドキソルビシン(DOX)、ダウノルビシン(DNR)、アナマイシンの化学構造（上部パネル）。Lewis lung carcinomaを移植したマウスで、フリーのアナマイシン(4mg/kg)と小リポゾーム抱埋アナマイシン(S-ANNA 4mg/kg)ならびにドキソルビシン(10mg/kg)を投与したものの生存率の経過。

マイクロアレイデータの解析技法

河合隆利（エーザイ㈱）　一石英一郎（京都府立医科大）

現在非常に脚光を浴びているＤＮＡアレイにおける遺伝子発現解析で得られる膨大な量のデータを「いかにして解析し、医療や創薬に利用していくか」という観点からデータ解析にかかわる最新情報とＤＮＡアレイの技術革新についてレビューする。なお、cDNA をスポットしたStanford 大タイプのものをマイクロアレイ、オリゴＤＮＡを合成した Affymetrix 社タイプのものをＤＮＡチップ、両者をまとめてＤＮＡアレイと呼ぶことにする。

ＣＢＩ学会では今年度に入り、ＤＮＡアレイに関する３つの講演会を企画し最新情報の共有化と討論を重ねてきた（表１）。その内容を、「医療・創薬への応用」、「モデル生物との比較ゲノミクス」、「データ管理とデータマイニング」、これらをささえるべき「次世代ＤＮＡアレイの革新技術」という４つの切り口からまとめてみた。

１．医療・創薬への応用

現在利用されている高密度のＤＮＡアレイが実用に供されるようになったのは 1998 年ごろからであり、出芽酵母に様々な刺激を加えた場合や細胞周期、発生段階に応じて変化する遺伝子発現プロファイルが解析されてきた。医療への応用も 1999 年より報告が相次いでいる。

DLBCL サブタイプ分類への応用 (1, 13)：遺伝子発現プロファイルが実際に診断に役立つことを示した最初の報告とされるものは米 Stanford 大学 P. Brown らのグループによる Alizadeh らのびまん性大細胞性Ｂ細胞リンパ腫 (diffuse large B-cell lymphoma: DLBCL) に関するものである (18)。DLBCL は成熟Ｂ細胞の進行性の悪性腫瘍で、米国では年間 25,000 人以上が発症し、うち 60%の患者には化学療法の効果がない。Alizadeh らはリンパ球に特異的に発現する遺伝子 17,593 個をマイクロアレイ化した Lymphochip を作製し、患者の遺伝子発現プロファイルをクラスタリングしたところ、癌化する前のＢ細胞の分化の状態と化学療法の感受性とに関連性があることを明らかにした。

NCI60 の分類への応用 (1)：米 NCI で行われている 60 種のヒト由来ガン細胞（NCI60）を用いた抗ガン剤スクリーニングで得られた遺伝子発現パターンを解析した報告が NCI の J.N. Weinstein らと Stanford 大学 P. Brown らの共同グループによってなされた。Ross らは、ヒト cDNA を 9,703 種類スポットしたマイクロアレイを用い、NCI60 を細胞株の由来組織ごとにグルーピングできることを示した (19)。Scherf らは NCI で実施されている DTP (Developmental Therapeutic Program) で解析された 70,000 以上の化合物の NCI60 に対する GI_{50} 値と NCI60 の遺伝子発現プロファイルの間の相関係数をクラスタリングし、薬剤と遺伝子の相関関係を解析した (20)。

表1. DNAアレイに関する本年度のCBI研究講演会

第194回 CBI研究講演会 2000.07.03
「DNAチップの診療への応用」
「マイクロアレイの医療・創薬応用:ファンタジーからリアリティへ」辻本豪三(国立小児病院・小児医療研究センター 小児薬理研究部)
「マイクロチップ・ナノチップテクノロジーによる次世代DNA解析技術開発の最前線」馬場嘉信(徳島大学薬学部薬品物理化学教室)
「医療応用を目指したcSNPデータベースの構築」斉藤俊行(放射線医学総合研究所 第2研究グループ)
「アレイデータと遺伝子情報の活用ーバイオインフォマティクス・ソルーションの実際」田辺雄介(CTCラボラトリーシステムズ株式会社)
「DNAチップと数理情報処理の動向」張慶偉、田中博(東京医科歯科大学難治疾患研究所生命情報)

第193回 CBI研究講演会 2000.05.19
「マイクロアレーからの大量データの解析手法ー2」
「セミナー報告: DNAチップの最近の動向」三木敬三郎(バイオス研究所)
「線虫cDNAアレイを用いた遺伝子発現解析からシグナル伝達系構築へ」上野直人(基礎生物学研究所)
「ヘリックス研究所におけるヒトおよびマウス完全長cDNAのチップ化について」関直彦(ヘリックス研究所)
「チップからのデータ解析」(GeneSpringデモ含む)近藤孝(シリコンジェネティクス社)
「事例調査: ヒト遺伝子チップの医学応用」高井貴子(国立医薬品食品衛生研究所)

第192回 CBI研究講演会 2000.05.10
「マイクロアレーからの大量データの解析手法」
「遺伝子発現プロファイルの医療診断と創薬への応用に関する論文の紹介」高井貴子(国立医薬品食品衛生研究所 化学物質情報部)
「遺伝子チップの現状と技術開発」内田和彦(筑波大学 基礎医学系)
「CBIマイクロAI計画について」神沼二眞(国立医薬品食品衛生研究所 化学物質情報部)
「Affymetrix GeneChip 実験データ解析における解決すべき問題点」河合隆利(エーザイ(株))
「Analyzing Gene Expression Data」Dr. Conway (Silicon Genetics社)
「チップデータ解析ソフト GeneSpring の使い勝手」百瀬祐子(生命工学工業技術研究所)
「PAGEと組み合わせたDNAチップ技術」Dr. Paul Diehl (Display Systems Biotech社)
「Biomedical Data Integration - Microarray Data Analysis as a Typical Example -」Dr. Jan Michel (LION bioscience社)

2つの白血病 AML と ALL の分類 (1)：米 MIT の Whitehead 研究所 E. Lander らのグループによる Golub らの報告は、AML (acute myeloid leukemia)と ALL (acute lymphoblastic leukemia)で特徴的な 50 遺伝子の発現プロファイルを調べれば両者を 100%正確に区別できることを示した。さらに SOM 解析により ALL の細胞を T-linease ALL と B-linease ALL とに細分化することができた (21)。

以上の論文はガン細胞が示す遺伝子プロファイルからそのガンの種類を特定、診断することが可能であることを示したものであり、他の疾病へ応用していけば広くテーラーメイド医療につなげられることを予見させるものである。

また、ＤＮＡアレイによる遺伝子発現解析を創薬へ応用した例としては、FK506 を出芽酵母に作用させたもの（Marton et al. (22)）や、血清でヒト繊維芽組織を活性化したときのもの（Iyer et al. (23)）、ob/ob マウスにレプチンを投与したときのもの（Soukas et al. (24)）など多くの新規薬物ターゲットを探す試みがなされている。しかし、ターゲット遺伝子の絞り込みには発現量変化のあった遺伝子の間の関係を調べるパスウェイ解析やモデル生物を用いた機能解析などを追究していかなければならず、道のりはまだまだ遠いように感じる。

2．モデル生物との比較ゲノミクス

生命現象の解明や創薬ターゲットの探索にはモデル生物の遺伝学的研究が必要不可欠である。1996 年にゲノムが解明された出芽酵母はもとより、1998 年にゲノムが解読された線虫、ヒトゲノムの次に取り組まれる予定のマウスなどＤＮＡアレイによる遺伝子発現解析はモデル生物の遺伝学的研究のファーストスクリーニングとして利用されている。

線虫の DNA アレイ (10)：TGF-βファミリーに属する BMP は初期発生段階では中胚葉の腹足化や神経形成の阻害を、後期発生段階では器官形成、アポトーシスの誘導などを引き起こす。基

礎生物学研究所の上野らは、線虫cDNAのマイクロアレイを作製し、TGF-βの線虫ホモローグであるcet-1のヌルミュータントとwtとの遺伝子発現パターンを比較したところ、24個の遺伝子に発現量の差を認めた。そのうちの1つはSma-6で、Cet-1のリガンドそのものであった。線虫はヒトの遺伝子との類似性が40%あり、RNAi法により容易にノックアウト様実験ができるためモデル生物としての利用度が高い。

マウス完全長cDNAアレイ (11)：ヘリックス研究所の関らは、マウスの完全長cDNAをスポットしたマイクロアレイを作製し、臓器特異的に発現している遺伝子を探索した。マウスの脳と腎での遺伝子発現量の違いを比べたところ、腎で特異的に高発現な遺伝子の中にヒトホモローグを見出し、RT-PCRによりヒト腎臓でも実際にその遺伝子が高発現していることをつきとめた。

モデル生物でターゲット遺伝子の機能を解析する場合には、異なる研究集団の間の共通語を作り出すオントロジーが重要となる (3, 17)。オントロジーのなすべきことは、語彙の整理やデータ記述言語の整備である。未知遺伝子の機能推定にはインターネット空間にある種々のデータベースに対して情報収集する必要があり、LION社のSRS (8, 16)に代表される検索エージェントが使われている。

3．データ管理とデータマイニング

DNAアレイを用いた遺伝子発現解析実験は膨大な量のデータを生成する。Affymetrix社のGeneChip HuGeneFLを例に取ると、1枚のチップから約7,000の遺伝子に対し29種類のデータが得られる。ひとつの実験で数枚のチップを使用するのでデータ量は膨大なものになり、その管理には通常Oracle, Sybaseなどの RDBMSを用いる。データベースの構造（スキーマ）はGeneChip用のGATCフォーマット(25)やNIHのArrayDBが採用しているもの(26)などがある。遺伝子発現データの国際的な共有化プロジェクトはまだ稼働していないようだが、EBIのArray Expressのサイトでは入手可能なＤＮＡアレイデータへのリンクが紹介されている (27)。

ＤＮＡアレイのデータを解析する手法として表２に示したようなものが使われている。最もよく使われる階層的クラスタリングは、個々のデータのペアについて相関係数を計算し、最も相関係数の高いペアから順に系統樹に加えていき最終的に1本の系統樹にする、というアルゴリズムである。ここで使われる相関係数にはユークリッド距離もしくはピアソン相関係数が用いられるが、データセットの間で値のバイアスやスケーリングが異なっていてもその影響を受けないピアソン相関係数がよく用いられる。Alizadeh (18), Ross (19), およびScherf (20)の論文ではこの方法が使われている。

非階層的クラスタリングとしては、*k*-means, SOMなどがある。*k*-meansは、まず母集団からk個の代表点を決め、各データを最も近い代表点に帰属させる。こうしてできた各クラスターについて代表点を重心に取り直して操作を繰り返し、代表点が動かなくなったらクラスタリングを終了する。この方法はSoukas (24)らの論文で使われている。類似の方法にSOM (Self-organizing map)がある (28)。この方法は、k次元のデータ空間のグリッド上にn個の参照ベクトルを配置し、ラ

ンダムに選んだデータポイントとの距離に依存した量で各参照ベクトルをそのデータポイントへ向かって動かすという操作を繰り返す。この方法は *k*-means と異なり、よく似たクラスター同士が隣り合うという特徴を持っており、Golub (21)らの論文で使われている。

クラスター解析で新しく提唱されている方法として、クラスター数をあらかじめ指定する必要のない Heyer らの Quality Clustering Algorithm (29)、発現パターンの類似性から機能未知の遺伝子の機能推定に応用できる Brown らの SVM (Support Vector Machine) (30)がある。Golub らによる ALL と AML を明確に規定する 50 個の参照遺伝子セットを決める際に用いられた Neighborhood Analysis も、あらかじめグループ分けできている臨床データや遺伝子のセットがある場合に適用できる新しい方法である (21)。

ＤＮＡアレイからの大量データの解析手法に関するレビューを２つ上げておく (31, 32)。このようなデータマイニングに使えるツールとして、Silicon Genetics 社の GeneSpring (5, 12)、LION 社の ArraySCOUT (16)などがある。

４．次世代ＤＮＡアレイの技術革新

マイクロアレイは遺伝子発現や遺伝子の変異或いは多型などを効率良くより短時間で調べる、いわゆるＨＴＳ(highthroughput-screening)を可能にする技術である。これは解析システムのマイクロ化技術 (14) と遺伝子資源と情報データベースの整備 (2, 15) が必須である。ＨＴＳには２つの意味がある。一万以上の調べる遺伝子の数を対象にする場合と数千のサンプルを解析する場合である。ＳＮＰ解析はＨＴＳの代表的な例であるが、表３にＨＴＳの技術プラットフォームを示す。果たして次世代のスタンダードは何になるのであろうか。マイクロアレイは有力候補の一つではあるが、これから開発される新技術プラットフォームも含めてブレークスルーが期待されている。ＤＮＡアレイの流れは遺伝子をもれなく調べる解析と、一連の有用とわかった遺伝子 (1000 程度) を用いて莫大なサンプルを調べる、もしくは簡単な検査装置で「実用化」を図るという２つの方向に向かうと思われる。前者では最近 Sydney Brenner (Lynx Therapeutics) らはマイクロビーズアレイを開発し、ＨＴＳシーケンシングによる遺伝子発現頻度解析を報告している。後者ではナノゲン社のナノチップは、電気的ハイブリダイゼーションによってストリンジェンシーを厳密にコントロールして高い精度を得ていると報告されている (2, 13)。

表2. 遺伝子発現データの解析手法

- クラスター解析
  - 階層的クラスタリング
    - average linkage
    - single linkage
    - complete linkage
  - 非階層的クラスタリング
    - k-means
    - SOM (self-organizing map)
    - Quality Clustering
    - SVM (support vector machines)
- その他
  - 主成分分析
  - Neighborhood Analysis

表3. High Throughput, Cost Performance

Accuracyを満たす技術プラットフォームは？

- ・Sequencing
- ・DNA chip
- ・One base extension
- ・TaqMan assay
- ・Invader assay
- ・TOF-MASS
- ・Microbeads

参考文献

1) 高井貴子　第１９２回ＣＢＩ研究講演会
2) 内田和彦　第１９２回ＣＢＩ研究講演会
3) 神沼二眞　第１９２回ＣＢＩ研究講演会
4) 河合隆利　第１９２回ＣＢＩ研究講演会
5) Andrew Conway 第１９２回ＣＢＩ研究講演会
6) 百瀬祐子　第１９２回ＣＢＩ研究講演会
7) Paul Diehl 第１９２回ＣＢＩ研究講演会
8) Jan Michel 第１９２回ＣＢＩ研究講演会
9) 三木敬三郎　第１９３回ＣＢＩ研究講演会
10) 上野直人　第１９３回ＣＢＩ研究講演会
11) 関直彦　第１９３回ＣＢＩ研究講演会
12) 近藤孝　第１９３回ＣＢＩ研究講演会
13) 辻本豪三　第１９４回ＣＢＩ研究講演会
14) 馬場嘉信　第１９４回ＣＢＩ研究講演会
15) 斉藤俊行　第１９４回ＣＢＩ研究講演会
16) 田辺雄介　第１９４回ＣＢＩ研究講演会
17) 張慶偉、田中博　第１９４回ＣＢＩ研究講演会
18) Alizadeh, A.A. et al.: Nature, 403: 503-511, 2000
19) Ross, D.T. et al.: Nature Genetics, 24: 227-235, 2000
20) Scherf, U. et al.: Nature Genetics, 24: 236-244, 2000
21) Golub, T.R. et al.: Science, 286: 531-537, 1999
22) Marton, M.J. et al: Nature Medicine, 4: 1293-1301, 1998
23) Iyer, V.R. et al: Science, 283: 83-87, 1999
24) Soukas, A. et al.: Genes and Development, 14: 963-980, 2000
25) GATC format; http://www.gatconsortium.org/
26) Ermolaeva, O. et al.: Nature Genetics, 20: 19-23, 1998
27) Array Express; http://www.ebi.ac.uk/arrayexpress/
28) Tamayo, P. et al.: PNAS, 96: 2907-2912, 1999
29) Heyer, L. et al.: Genome Res., 9: 1106-1115, 1999
30) Brown, M.P.S. et al.: PNAS, 97: 262-267, 2000
31) Sherlock, G.: Current Opinion in Immunol., 12: 201-205, 2000
32) Gaasterland, T. et al.: Nature Genetics, 24: 204-206, 2000

細胞表層工学とコンビナトリアル・バイオエンジニアリング
—ポストゲノムシークエンシング研究へのニューウエーブ—

植田充美、田中渥夫
（京都大学大学院工学研究科）

1．バイオインフォマテイクスの所産としての細胞表層工学

ポストシークエンシング時代を迎え、生命の情報をどのように応用して活用していくかを研究する生命情報分子工学の時代が到来した。生命情報のなかでも、細胞内外のタンパク質が本来の活性機能を保持する部位の外に持つ、機能発揮の場にたどり着くための、いわゆる「場」を指定する情報は、応用価値の高い生命情報である。ミトコンドリア、ペルオキシソーム、クロロプラスト、小胞体や核などのオルガネラ固有のタンパク質は、１９９９年ノーベル医学生理学賞を受賞されたアメリカ・ロックフェラー大学のブローベル教授の「タンパク質におけるシグナル説」で周知のごとく、個々に固有の「場」を指定する情報を持ち、その情報に基づいて輸送され局在化している。我々は、細胞表層、即ち、細胞膜や細胞壁に着目して、これらの領域に輸送され局在化するタンパク質の「場」を指定する情報の利用を考え、【細胞表層工学（Cell Surface Engineering)】という新しい概念を打ち出した。
これは、外来タンパク質を、細胞表層へ輸送局在化されるタンパク質の分子情報を活用して、細胞膜の外側や細胞壁に分子ターゲテイングさせて細胞表層に新機能を賦与したり、ＤＮＡ情報に対応するタンパク質分子を提示してその機能を解析したりすることにその本質がある。これまでに、各種の酵素などの分子サイズの大きいタンパク質やペプチド、さらに、抗原などを単独で、あるいは、協奏的に細胞表層に発現提示させることに成功してきた。また、さらに、発光オワンクラゲ Aequorea victoria 由来の緑色蛍光タンパク質 (Green Fluorescent Protein; GFP）やその変異体を用いて、新たに開発した種々の発現プロモーターを挿入できるように構築したプロモーター・発光タンパク遺伝子組み合わせベクターを形質転換して作られた酵母は、酵母が自らの置かれている環境に応答して、細胞と外界とのインターフェイスである細胞の表層に細胞内外の分子情報を非破壊的かつリアルタイムに細胞表層からの光としてモニターできる細胞として、また、ＤＮＡ情報のタンパク機能分子への変換を発信できる機能素子としても、非常に有用となった。このように、酵母がこれまで持たなかった機能を持った「アーミング酵母」が創製されてきている（１－５)。

2．コンビナトリアル・バイオエンジニアリング

日本経済産業新聞（平成１２年４月２１日号や６月８日号）に初めて取り上げられた「コンビナトリアル・バイオエンジニアリング」という言葉は、その後の６月２６日のヒトゲノム解読の発表とともに、その技術のもたらす意味合いがじわじわと浸透してきている。
バイオの分野では、「コンビナトリアル」という言葉はこれまで使われていなかったが、その

手法は、生命の誕生以来すべての生き物がDNAという情報をまさに「組み合わせ」て進化してきた生きるための手段であった。一方、実験手法の一つとしても、なんら特殊なものではなく、普段何気なく使用している遺伝子工学実験の中にも含まれている常套手段ともなっているものである。すなわち、「コンビナトリアル」手法は生物研究にとってこそ専売特許的なものなのである。にもかかわらず、あえて「コンビナトリアル・バイオエンジニアリング」という言葉をつくり出したのは、既知のDNA情報を機能タンパク質に変換したり、ランダムなDNA情報からこれまでに存在しなかったタンパク質を創製したりする潜在的な能力のある魅力あふれる技術として、DNA情報から発現したタンパク質を細胞などの表層にデイスプレイ（提示）する手法が登場してきたからである。しかも、それにより研究者による創製の意図をもったバイオ高分子が創出されたり探索されたりするというこれまでにない新しいサイエンスの世界が開かれる可能性が出てきたからでもある。

これまで遺伝子からそのコードするタンパク質を発現させる方法として、主に、細胞内発現と細胞外分泌発現の二つの系が使われてきている。しかし、細胞内発現の場合、発現産物であるタンパク質を細胞内に蓄積させると、時には、細胞毒性を示したり、不活性なインクルージョンボデイとなったりすることが多々あり、たとえうまく発現できたとしても純粋にとりだすためには、細胞を破砕し、種々のカラムクロマトグラフィー操作が必要となる。インクルージョンボデイになってしまった場合には、リフォールデイングの操作がさらに加わる。一方、細胞外に分泌生産させた場合には濃縮操作が必要であり、同じように分泌されて濃縮されるタンパク分解酵素の攻撃を阻害しなければならないといった煩雑な操作を必要とする。一方、細胞の表層にデイスプレイされた場合には、デイスプレイされた細胞を一つの支持体として、提示されたタンパク質の機能解析ができ、タンパク質のアミノ酸配列分析を待たずに、PCR法などの併用により、導入されたDNAの配列から提示されたタンパク質のアミノ酸配列が決定できる。このように、細胞表層デイスプレイの手法は、DNA情報と機能タンパク質との解析のいわゆる距離を一気に短縮させると予測されている。

既知のＤＮＡ配列やアミノ酸配列にないバイオ高分子の世界には、これまでまだ遭遇したことのない興味深い新機能や活性をもつ分子の存在が予想されている。これまで、バイオテクノロジーの世界では、試験管内分子進化法などにより、新しい分子認識機能をもった核酸ポリマーなどの物質も生まれてきている。さらに、コンピューターサイエンスを取り入れた遺伝子工学的ならびに細胞工学的手法による種々の新しいデイスプレイ手法ーファージデイスプレイ・酵母表層デイスプレイなどの生細胞を用いた手法やリボソームデイスプレイなどの無細胞タンパク合成系を用いた手法ーによって、既知のアミノ酸配列にないペプチドやタンパク質などの新しいバイオ分子の創出や探索が展開されつつある。こういった新手法による研究を総称した「コンビナトリアル・バイオエンジニアリング」は、２１世紀のバイオテクノロジーを支えるモレキュラーツールとして、あるいは、ブレイクスルーとして期待されている。

ＤＮＡ情報をタンパク機能分子に変換する新技術である細胞表層デイスプレイによる「コンビナトリアル・バイオエンジニアリング」は、無尽蔵・無制限・ランダムなＤＮＡ情報から我々の誰もが遭遇したことのない全く新しい未知の新機能バイオ高分子を生み出す「打出の小鎚」となる可能性を秘めており、新しいサイエンスやバイオマテリアルの世界の創造が期待できる。一方、ゲノム配列決定の進む多くの生物の分子情報とDNAアレイによる転写レベルでの解析（いわゆるゲノミックス）の先にある未知cDNAのコードする未知機能タンパク質を創出して

解析するというポストゲノムプロジェクト（プロテオーム解析）にも取り込まれて展開して行くことが予測されており、まさに、ポストゲノムシークエンシング研究へのニューウエーブと言えよう。

引用文献

(1) 植田充美：細胞表層工学による新機能細胞の創製，バイオサイエンスとインダストリー, 55, 253 & 275 (1997).
(2) M. Ueda, A. Tanaka : Genetic immobilization of proteins on the yeast cell surface, Biotechnol. Adv., 18, 121 (2000).
(3) M. Ueda, A. Tanaka : Cell surface engineering of yeast - Construction of arming yeast with biocatalyst, J. Biosci. Bioeng., 90, 125 (2000).
(4) K. Ye, S. Shibasaki, M. Ueda, T. Murai, N. Kamasawa, M. Osumi, K. Shimizu, A. Tanaka: Construction of engineered yeast with glucose-inducible emission of green fluorescence from cell surface, Appl. Microbiol. Biotechnol., 54, 90 (2000).
(5)Anonymous: Arming yeast with cell-surface catalysts, Chem. Eng. News, 75, 32 (1997).

分子標的薬剤のバイオインフォマテイクス

癌研究会癌化学療法センター　分子薬理部　　矢　守　隆　夫

1．はじめに

ヒト癌細胞の数十の系を一括し，多数の抗癌剤に対する感受性を調べデータベース化すると，そのデータベース自体がユニークかつ有用な機能を発揮しうることが、近年、米国国立癌研究所（NCI）および我々の研究で分かってきた。

本稿では、このデータベースの有用性について述べる。すなわち，本データベースは，①癌分子標的薬剤の選別，②データベース発掘による drug　discovery，③抗癌剤感受性を決定する遺伝子群の解明などへ応用しうることが分かってきた。

①については，本データベースにより新規抗癌物質を選別した例，②については，新規テロメラーゼ阻害物質を発見した例，③については，本データベースが抗痛剤感受性と相関する遺伝子発現プロフィルの解析に役立つ可能性について述べる。

2．ヒト癌細胞パネルの薬剤感受性

この方法論の原型は、60 種の癌細胞株を用いて NCI で開発された 1)。我々は、それに基づき、肺癌 7 系，胃癌 6 系，大腸癌 5 系，卵巣癌 5 系，脳腫瘍 6 系，乳癌 5 系，腎癌 2 系，前立腺癌 2 系およびメラノーマ 1 系の計 39 系よりなる独自のヒト癌細胞パネルを樹立した（表 1)。

表 1．ヒト癌細胞パネルのメンバー

肺癌(7)	胃癌(6)	卵巣癌(5)
NCI-H23	MKN1	OVCAR-3
NCI-H226	MKN7	OVCAR-4
NCI-H522	MKN28	OVCAR-5
NCI-H460	MKN45	OVCAR-8
A549	MKN74	SK-OV-3
DMS273	St-4	
DMS114		腎癌(2)
		RXF-631L
大腸癌(5)	乳癌(5)	ACHN
HCC-2998	HBC-4	
KM-12	BSY-1	脳腫瘍(6)
HT-29	HBC-5	U251
HCT-15	MDA-MB-231	SF-295
HCT-116	MCF7	SF-539
		SF-268
メラノーマ(1)	前立腺癌(2)	SNB-75
LOX-IMVI	PC-3	SNB-78
	DU-145	

この一括された癌細胞株を以下「癌細胞パネル」と呼ぶ。我々は、このパネルにおける薬剤感受性のデータベース化を進めてきた。その過程で、一つの薬剤によって細胞が 50％増殖阻害を受ける濃度（GI50）は癌細胞株ごとに異なるが、GI50 をパネル全体でみるとその薬剤に固有のパターン（finger print）を示すことが明らかとなった。興味深いことに、抗癌剤など約 200 種の標準物質の finger print を調べた結果、薬剤の finger print による分類は作用機作による分類とよく一致することが判明した。

また、我々は Paull らの方法 2〉をもとに COMPARE プログラムを開発した 3，4)。COMPARE は、このデータベースにおいて

非常に重要な役割を持つ、その機能は、二つの薬剤の finger print の類似性を検定することである。すなわち、新規物質の finger print とデータベース内の標準薬剤の finger print との類似性を検定することにより、その新規物質が作用機作において既存の抗癌剤のいずれかと似ている、あるいはどれとも似ていないことを推定できる。COMPARE を利用すれば新規化合物の作用機作がたとえ知られていない場合でも、それを標準物質との finger print の比較からある程度推定し、選別化することが可能である。COMPARE プログラムにより，分子標的薬剤の選別が可能である。

3．分子標的薬剤の選別

ここでは，トポイソメラーゼⅠおよびⅠⅠの両者を阻害する新規抗癌物質 MS－247 を見いだしたことを紹介する 3)。

MS－247 の finger print は，COMPARE で解析した結果、トポイソメラーゼⅠ阻害作用あるいはトポイソメラーゼⅠⅠ阻害作用をもつ抗癌剤と有意な相関性を持つことが示された。すなわち、COMPARE は、MS－247 がトポイソメラーゼⅠおよびⅠⅠを阻害することを予測したのである。そこで、MS－247 が実際にこれらを阻害するかどうか実験で検定したところ、MS－247 は両酵素を阻害することが確かめられ、COMPARE の作用機作予測が正しかったことが証明された 3)。

次に、MS－247 が in vivo で抗腫瘍効果を持つかどうかを調べた。我々の癌細胞パネルのうち肺癌，胃癌，大腸癌など 17 株をヌードマウスの皮下に移植し，MS－247 を 1 回，静脈内投与したところ驚くべきことに、すべての皮下腫瘍で増殖阻害が認められた。

その効果は、固形癌に対する有効性が最も期待されているパクリタキセルやイリノテカンと比べても遜色がないか、腫瘍によってはより高いことが証明された。よって、本法によりトポイソメラーゼⅠおよびⅠⅠを阻害する有望な抗癌物質を選別することができた。

4．データベースによる drug discovey

我々のデータベースにはさまざまな新規化合物の finger print が登録されているが、その中には実験的な作用機作データは何もないものも多数眠っている。これらの中におもしろい作用を持つ物質はないだろうか。前述したとおり，COMPARE は，ある化合物の finger print をもとに、データベースに登録された物質の中からそれと類似性の高い finger print をもつ物質を抽出することができる。換言すると、その化合物と同じ作用機作をもつ化合物を抽出しうる。

ここでは、データベース中から COMPARE によりテロメラーゼ阻害物質を発掘した例を示す 5)。 我々は,弱いながらもベルベリンにテロメラーゼ阻害活性のあることに気づいた。

そこで、ベルベリンと似た finger print を持つ物質をデータベース中から検索した。その多くはベルベリンの構造類似物質であったが、まったく化学構造の異なる MKTO77(JCI#:-110)が抽出されてきた。これに注目し、そのテロメラーゼ阻害活性をしら

べたところベルベリンよりも強い活性のあることが判明した。そこで、さらにMKTO77と似た finger print を持つ物質を再検索した結果、もっと強いテロメラーゼ阻害活性を持つFJ5002(JCI#: 10231)が見いだされた。

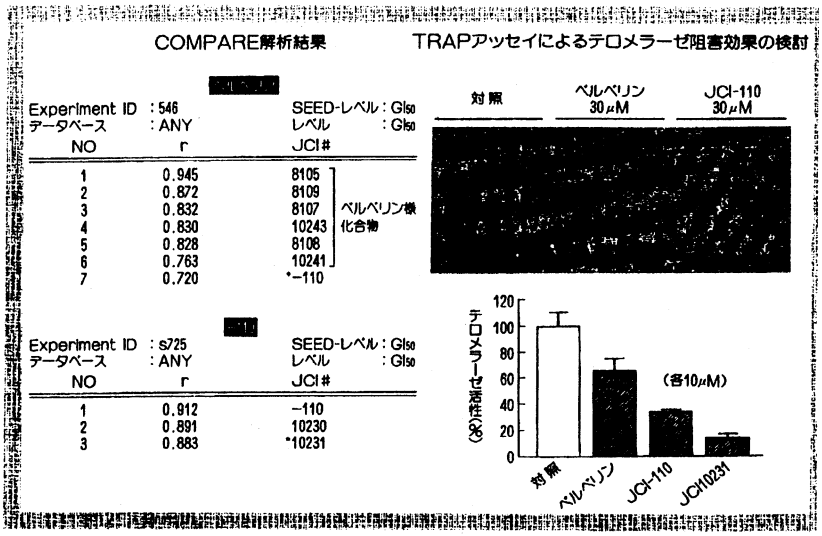


図 6. テロメラーゼ阻害薬の選別

このように、COMPARE は、ある薬理活性を持つリード化合物の finger print さえあれば、それをもとにより強い活性を持つ候補物質のグループを（実験する手間なしに）データベースに登録された物質の中から finger print の類似性のみを指標に抽出することもできる。

4．抗癌剤感受性と相関する遺伝子発現プロフィルの解析

癌化学療法に最も望まれるのは、個々の患者に有効な抗癌剤を予知した上で処方するオーダーメイド化学療法の実現である。そのために、ヒト癌細胞パネル薬剤感受性データベースを活用し、抗癌剤感受性と相関する遺伝子発現プロフィルを明らかにすることは有力なアプローチと考えられる。近年，DNA マイクロアレーやプロテオームなど、遺伝子発現を個々にみるのではなく全体的プロフィルとしてみる方法が実用化されてきた。NCI の Weinstein らは、彼らの癌細胞パネルにおいて薬剤感受性データベース、ならびに DNA マイクロアレー法で調べた遺伝子発現データベースを用意した上で、薬剤感受性と相関する遺伝子発現を解析するためのプログラムを早くも開発し、発表している 6)。

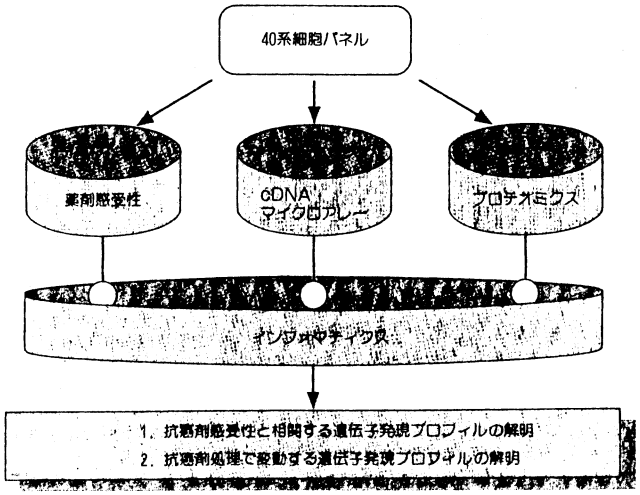


図 8. ヒト癌細胞パネルデータベースによるバイオインフォマティクス

今後，癌化学療法におけるポス

トゲノムプロジェクトとして非常に重要な研究分野に発展すると思われ，我々も癌細胞パネルの遺伝子発現プロフィルのデータベース化を検討している（図）。

5．おわりに

ヒト癌細胞パネルは，種々のフェノタイプについてある程度のバリエーションを備えた癌細胞株の集合である。このパネルにおいて薬剤感受性をきちっとデータベース化すると種々の分子をターゲットとする分子標的薬剤の drug discovery に非常に有用な系になることを述べた。

さらに、それのみならず、今後の癌治療において、個別化すなわちオーダーメイドの治療を考える上で、ヒト癌細胞パネルの遺伝子発現プロフィルをデータベース化し、薬剤感受性データベースとあわせてインフォマティクスを行うことで特定の薬剤に感受性(あるいは抵抗性)の細胞群に共通した遺伝子発現プロフィルを抽出できる可能性がある。このような遺伝子発現プロフィルが明らかになれば癌の薬剤感受性診断への新たな道が開けると期待される。

文　献

1) Monks A et al : Feasibility of a high-flux anticancer drug screen using a diverse panel of cultured human tumor cell lines. J Natl Cancer lnst 83 : 757, 1991.

2) Paull KD et al :Display and analysis of patterns of differential activity of drugs against human tumor cell lines : develop-ment of mean graph and COMPARE algorithm. J Natl Cancer lnst 81 : 1088, 1989.

3) Yamori T et al: Potent antitumor activity of MS-247, a novel DNA minor groove binder, evaluated by an in vitro and in vivo human cancer cell line panel. Cancer Res59 : 4042, 1999.

4)矢守隆夫ほか:制がん剤の分子標的スタリーニング成績 1 わが国における制がん剤候補物質のスタリーニング成績·第 8 報-.癌と化学療法 27 : 1, 2000.

5) Naasani I et al : FJ5002 : a potent telomerase inhibitor identified by exploiting the disease-oriented screening Program With COMPARE analysis. Cancer Res 59 : 4004,1999.

6) Scherf U et al : A gene expression database for the molecular pharmacology] of cancer [see comments]. Nat Genet 24 : 236, 2000.

◆部会行事

第１２回ケモメトリックスワークショップ

プロクラステス分析法を利用した官能評価と
機器分析における多変量データの比較、統合及び情報抽出

(OP&P,オランダ) Dr. Pieter Punter

主　催　日本化学会情報化学部会

会　期　2000年12月1日（金）10～17時、懇親会 17～19時

会　場　日本化学会会議室 （定員80名）（東京都千代田区神田駿河台1-5）

http://www.chemistry.or.jp/compendium/index.html

プログラム

1．プロクラステス分析法とは
- ・プロクラステス回転法
- ・主成分分析や因子分析との比較

2．各種官能評価パネルとデータ特性
- ・分析型パネルと消費者パネルデータの特徴
- ・各パネリストの変動性と全体的な調和度の評価

3．プロクラステス分析法による官能評価データの解析
- ・分析型パネルデータと消費者パネルデータの統合

4．フリーチョイス・プロファイル法
- ・考え方と実施における留意点
- ・プロクラステス分析法による解析

5.官能評価データと機器分析データの関連づけ

6.質疑応答

※本講演は英語で行われます。

参加費：3000円、当日徴収いたします。懇親会は無料です。

参加申込方法：参加ご希望の方は日本語と英語で、氏名、所属、住所、電話・ファックス番号、電子メールアドレスを明記の上、懇親会参加の有無と共にハガキ、ファックスまたは電子メールにて下記宛、11月20日までにお申し込み下さい。

申込先：〒278-0037 野田市野田399 キッコーマン（株）研究本部　相島鐵郎
Tel: 0471-23-5980、Fax: 0471-23-5550、電子メール:LDH00052@nifty.ne.jp

電子ジャーナル(Journal of Computer Aided Chemistry)の創刊と投稿のお願い

日本化学会情報化学部会では、かねてよりOn-line only journal, "Journal of Computer Aided Chemistry"(JCAC)の発行の準備を進めてまいりましたが、8月8日に公開の運びとなりましたので会員の皆様にお知らせいたします。この電子ジャーナルは、日本化学会ホームページ(http://www.chemistry.or.jp)の定期刊行物のページからアクセスできます。

JCACは、査読システムの整った学術雑誌としての位置付けを持っていると同時に、投稿および公開を電子化し（将来的には査読も)、投稿から公開までの期間を短縮することを目指している点に第一の特色があります。また、電子体の特色を活かし、動画や高解像度の図、音響を伴った資料などのマルチメディア付録を論文と共に提供でき、これまでの論文誌とは一味違った情報豊かな内容にできる点に第二の特色があります。なお、JCACの公開プラットフォームは、科学技術振興事業団が開発を進めているJ-STAGEを利用しています。J-STAGEの詳細は、http://www.jstage.jst.go.jp をご覧下さい。

新しいジャーナルを軌道に乗せるには何と言っても皆様からの論文の投稿が不可欠です。研究の成果をぜひ投稿頂きたいと考えています。また、情報化学部会では年に一度情報化学討論会を開催していますが、ここで発表される内容やさらに完成度を高めたものを論文としてぜひJCACに投稿頂きたいと考えております。編集委員会メンバー一同、このJCACを日本のコンピュータ化学を代表する学術誌として育て上げて行きたいと考えていますので、会員の皆様のご理解とご協力を宜しくお願い申し上げます。

なお、JCACの投稿規程は上記の日本化学会ホームページのJCACアクセスポイントおよび http://www.quebec.tutkie.tut.ac.jp/jcac/ に掲示しています。投稿の便を図るためにスタイルファイルもダウンロードして利用できるようになっていますので、投稿の際にはこれをご利用ください。投稿に際しては、下記の編集事務局宛てにフロッピーなどの電子媒体でお送りいただくか、メールの添付ファイルでお願い致します。

皆様からの投稿をお待ちしております。

Journal of Computer Aided Chemistry 編集委員長
船津　公人

編集事務局所在地
441-8580　豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1
豊橋技術科学大学知識情報工学系
船津研究室気付
TEL：　0532-44-6879（直通）
FAX：　0532-47-9315（直通）
編集局 e-mail：jcac@chemistry.or.jp

平成１２年度第３回電子ジャーナルWG議事録

日　時：平成１２年９月１日（金）１５時～１７時３０分
場　所：化学会２０２号室
出席者：船津公人，時田澄男，相馬融，北尾修，清水弘一，三田友紀子

議事内容

（１）ＪＣＡＣの発行の現状について

船津委員長より、８月２６日現在における公開論文リストの資料に基づき、掲載論文が８報あり、公開待機が１報、２報が査読中、投稿の意思表示が４名ある旨が報告された。

（２）投稿受付から発行までの流れ

・船津委員長よりＪ－ＳＴＡＧＥ査読系は年末を目処にシステムが完成予定であるが、情況をみて使用の検討をすることとしたとの報告があった。
・投稿系・査読系の英語版も年末完成予定である事が報告された。これに伴い投稿規程の英語版を編集事務局で作成することとなった。
・電子ジャーナル発行に至る事務局手順書がＪＣＡＣのデモと資料に基づき説明された。
・Ｊ－ＳＴＡＧＥに掲載されている他ジャーナルの投稿票使用状況を相馬委員が確認することとなった。

（３）査読者リストの充実

船津委員長より査読者リストの充実を図るため各委員へのリスト追加者の提案の依頼があった。提案にあたっては、査読者と専門領域をメール等で事務局へ連絡すること、また投稿者からの査読者指名が提案され、査読者は２名かつ匿名、投稿者からの指名可、最終判断は編集事務局が下すという内容が投稿規定の追加事項として了承された。

（４）情報化学討論会での宣伝と投稿の呼びかけについて

・投稿の呼びかけについて、第２３回情報化学討論会において、PC によるＪＣＡＣデモ、パネル展示等のプレゼンが可能か藤田委員へ確認検討することとした。
・北尾委員より、メールで申込のあった方に情報化学討論会発表後に投稿依頼のメールを送るという提案がされた。また同時に併催の構造活性相関シンポジウムや、出展企業への呼びかけも行うことにした。
・北尾委員の資料情報に基づきＪＣＡＣに関連ある研究会学会が発表され、北尾委員、船津委員長による呼びかけをお願いした。時田部会長より論文タイトル・抄録の一年分をＣ

ＩＣＳＪ年末号に、北尾委員よりＣＩＣＳＪBulletin背表紙に「電子ジャーナルの創刊と投稿のお願いを」を掲載する案が出され、次回の拡大ＣＩＣＳＪ編集委員会へ提案することとなった。

・時田部会長より公開された各論文へのアクセス数のデータ情報がＪ－ＳＴＡＧＥ上に存在するかとの質問があり、相馬委員が確認することとなった。

（５）特別企画などの設定

投稿呼びかけの今後の特別企画として、あるテーマで特集を組み、論文・総説を掲載することが検討された。

（６）名誉編集委員の委嘱について

資料に基づき時田部会長より名誉編集委員の委嘱状の送付説明があり了承された。

以上

平成１２年度第４回拡大ＣＩＣＳＪ編集委員会議事録

日　時：平成１２年９月２６日（火）１５時～１８時３０分

場　所：化学会２０２号室

出席者：時田澄男，高田章，船津公人，坂本直紀，相馬融，高畠哲彦，中山伸一，
藤田眞作，清水弘一

議事内容

（１）第２３回情報化学討論会について

藤田委員より参加予約数は約８０人であること，展示申し込み数が１２社となり１部屋では収まらなかったので２部屋用意したこと，ＪＣＡＣの展示場所も用意したこと，要旨集はすでに仕上がり１０月５日に発送予定であることなどが報告された。予算案について，今回は寄付を募っていないが繰越金を若干食い込む程度であることが示された。要旨集の大きさについて，Ａ４からＢ５に戻ったのは構造活性相関からの要望であることが説明された。討論会の直前に電子メールによる参加呼びかけを行うこととなった。情報化学部会総会については，ＯＨＰを使って時田委員長が全般的な部会報告，船津委員がＪＣＡＣの報告，有國委員がＣＩＣＳＪの報告をすることとなった。清水部会担当からポスター賞の景品の提案があり，図書カードとすることとなった。

（２）来年度（以降）の討論会について

来年度の討論会は，徳島で構造活性相関と合同で行う方向で，情報化学の担当を打診するという形で進めることとなった。次々回以降の討論会を構造活性相関と合同で行うかど

うかについては時間をかけて考えることとし，必要なら合同役員会を開いて検討することを次回の合同役員会で提案することとなった。

（3）ＪＣＡＣについて

船津委員より８月８日から公開しており，現在８報が掲載されており３報が査読を終了し掲載準備中であること，今後もＨＰやシンポジウム等で投稿の呼びかけをしていくことなどが報告された。さらにアクセスログについては要望があれば処理できること，投稿票を使っているのはＪＣＡＣを含めて３学会であることが報告された。清水部会担当から名誉編集委員の依頼結果（６名が承諾）について報告があった。さらに，論文賞はアクセス状況なども勘案して決めることとし，時田委員長が規定の原案を作ることとなった。最後に，ＪＳＴからあったＸＭＬエディター開発のために掲載論文を使わせてほしいという要望について，著者の承諾を得たうえで利用することを認めることとした。

（4）平成１３年度予算案について

清水部会担当から平成１３年度の予算案についての提案があり，ＪＣＡＣ査読謝金を無くしてその分をＪＣＡＣ編集謝金に繰り込むことで承認された。

（5）CICSJ Bulletin について

No.5 の特集については清水部会担当から有國委員からの電子メールに基づき説明があり，特集のタイトルをもう一度確認することで了承された。編集後記は坂本委員が担当することとなった。No.6 はＪＣＡＣの目次（船津委員担当）とこれまでのＣＩＣＳＪの目次と特集タイトルの一覧，及び著者索引の作成を行うこととした。可能なら，情報化学討論会要旨集の目次と著者索引の作成も検討することとした（中山委員担当）。巻頭言を高田委員，討論会の報告を藤田委員，編集後記を高畠委員が担当することとし，原稿は１１月末を締め切りとすることとした。Vol.9 No.1 は「２１世紀に臨む情報化学」というテーマで、情報化学に関連する周辺の学会・研究会の人に依頼するということで，時田・高田委員が取りまとめることとなった。それ以降は，北尾委員のグリーンケミストリー，工藤委員の情報化学黎明史を検討していくこととした。

（6）計算力学連絡会議の報告

時田委員長より，９月２２日に開催された連絡会議について説明があった。

次回委員会は１１月３０日（木）１５時から行うこととした。

以上

◇編集後記

シドニーオリンピックが終わりました。結局、期間中は日本人選手の活躍に一喜一憂しながらテレビにくぎ付けになってしまいましたが、女子柔道の田村選手の金メダルは特に印象的でした。

試合後、彼女は「８年間思いつづけた初恋の人にめぐり合えたような感じ」と感想を述べていました。

“８年間”という時間を、この間に大きな変貌を遂げた“IT”の世界で考えてみると…８年前、インターネットは研究者がe-mail等に使っている程度で、一般にはほとんど利用されておりませんでした。Windowsもありません。携帯電話もほとんど存在していませんでした。それが、現在では皆さんご存知の通りです。田村選手はこの間ずっとトップに君臨しつづけたことになります。

８年間、多方面で量、質共に劇的な変化をつづけたITと変わらず初恋の人を思いつづけた田村選手。ドッグイヤーといわれる変化に対し臨機応変に対応しなければならない現実と変わらず持ちつづける（持ちつづけていたい）目標、志。感動の中でこうしたことをちょっと考えさせられました。

（N.S.）

CICSJ Bulletin Vol.18, No.6, December 2000

このページは「日本化学会・情報化学部会」の責任において運営されています。

目次

・追悼：吉田元二氏
吉田元二さんを偲ぶ・・・



平成十二年十月十八日逝去

享年五十九歳

故　吉田元二　前部会長

故　吉田元二　氏　略歴

１９４１．８．１９　生
１９６８　東京大学大学院　計数工学科修士課程修了
１９６８.４　住友化学工業株式会社　入社　計数部計算課配属
１９８１.１０　計算センター技術計数部課長
１９８７.１０　大阪研究所主任研究員
１９８９.４　大阪研究所主席研究員
１９８９.７　高槻研究所主席研究員
１９９０.７　筑波研究所主席研究員
１９９７.１　筑波研究所物性科学グループマネージャー
１９９８.３　財団法人化学技術戦略推進機構
　　技術部長、土井プロ　サブリーダー、統括主席研究員

その他役職経験
日本化学会　情報化学部会　部会長
新化学発展協会　計算機材料設計　先導研究　運営委員
ＣＡＭＭフォーラム　幹事　(創設者の一人)
ＣＡＣフォーラム　代表　など

１９８９.９　情報化学討論会　招待講演
　　「企業における情報化学の現状と展望」
その他、企業とコンピューター・ケミストリー、情報化学などについて、日本化学会、日本学術会議、有機合成化学協会、近畿化学協会、および海外など、講演多数

著書
コンピューターはいい化学者　―コンピューター化学入門―、東京化学同人(1989)
コンピューター・ケミストリー　新しい化学研究法入門　科学のとびら 16、東京化学同人(1993)

共訳書
原子・分子の密度汎関数法、シュピリンガー・フェアラーク(1996)

以上

◆追悼：吉田　元二氏

吉田元二さんを偲ぶ

土井正男

吉田さんが名古屋にこられたのは 1998 年の春でした．その年から名古屋大学を拠点にして始まる国家プロジェクトの準備をされるためです．このプロジェクトは吉田さんらが中心となって，新化学発展協会のコンピュータケミストリ分科会の中で，長い間準備を進められてきたものでした．吉田さんは住友化学の中で，コンピュータを使った分子設計システムの開発をされ，その農薬への応用に成功されました．化学企業にはコンピュータがもっと使えるはずだということに気づいた吉田さんは，住友化学の中だけでなく，企業や大学など広い範囲から同志を募り，活動を進めてこられました．部会長を務められた日本化学会情報化学部会だけでなく，新化学発展協会，企業研究会，近畿化学協会，高分子学会計算機科学研究会など吉田さんはたくさんの場所にネットワークを持っておられました．コンピュータケミストリという言葉を作ったのは吉田さんであるということはだいぶ後になって知ったことです．

名古屋大学では吉田さんは，統括主席研究員として，プロジェクトのまとめをしていただきました．いろいろな企業からきた人を一つにまとめ，ある目的に向かって結集させることはたいへんなことですが，吉田さんはメンバー全員から信望をあつめ，プロジェクトの心棒の役割を果たしてくださいました．

吉田さんは，いつもにこにこして，軽やかな冗談を言いながら仕事をしておられました．吉田さんの冗談は，高級で知的なものでしたから，私達は，時にその意味が分からず，ぽかんとし，後になって納得して妙に感心したり，からかわれていたと分かって憤慨したりしたものでした．そういう冗談をいっても吉田さんは皆から敬愛されていました．それは吉田さんが，優しさと高い理想を持っていたためだと思います．

吉田さんはいつも人のことを思いやっていました．プロジェクトの人が，病気で仕事が続けられなくなったとき，吉田さんは親身になって相談にのり，出向もとと話しをつけてくださいました．”彼が職場に復帰できたんだよ”と本当に嬉しそうに私に話してくれた時の吉田さんの顔がいまでも思い浮かびます．

吉田さんは，高い理想を持っておられました．コンピュータケミストリという言葉を作られた吉田さんは，この技術を育て，もっともっと広く使えるものにしたいという強い気持ちがありました．私達のプロジェクトだけでなく，もっと広い視野にたって，何をなすべきかを考えておられました．プロジェクトを進める上でいくつかの分岐点に立った時，吉田さんはいつもそのような立場で助言を下さいました．昨年，手術で入院された時も，私は病院まで押しかけて相談をいたしました．吉田さんと話していると，何が問題なのか，何が一番大切なのかがすっと分かってくる感じがするので，私は，思い悩むことがあると，いつも，吉田さんに相談に行きました．吉田さんはどんな時も親切に相談に乗ってくださいました．

吉田さんにはスーパーマンの優しさがありました．しかし，今考えると，吉田さんはそのために，たいへんな苦労をされていたのではないかと思います．こういうことに気づいたのは，住友化学の社内報に載せられた吉田さんのインタビュー記事を読んでからです．「人生観をお聞かせください」と聞かれて吉田さんは次の様に答えています．

”私は，今が一番いいと思うようにしているんですよ.選択肢が無限大にある中，自分でいろんな選択をしながら生きてきて，その結果今があるんだから．あの時こうしていたらと後悔しないようにしています．もう一つは，気は使うけど気にしないようにしています．自分が一生懸命生きているなら，意見の違う人も皆それぞれ一生懸命生きています．だからなるべく他人の立場などに気を使うようにしているんです．でも結果はあまり気にしない．完全に楽天的です．”

この文章を読むと今でも涙が出ます．

吉田さん，天国でどうか安らかにお休みください．

吉田さんとの別れを惜しむ

住友化学工業㈱　高山 千代蔵

吉田元二さん！お会いしてから25年有余、いつも変わらず親しくして頂いた吉田さんとの突然のお別れはあまりにも哀しく、残念でなりません。昨年暮れの佐々木慎一先生とのお別れの日にお会いしたのが最後で、その後は遂に、電話やメールで連絡し合うだけになってしまいました。「大阪の方へ行くときは連絡します。一緒に食事をしましょう」と言って頂き、その日の来るのを楽しみにしていましたのに、もうお会いすることが出来なくなったのが未だに信じられません。

全く以って、彼岸に渡られるのがあまりにも早すぎました。吉田さんご自身にとって、また、残された奥様はじめご家族、ご親族の皆様にとって、無念極まりないこととお察し致します。私にとっても、教えて頂きたい事、お会いしてお話ししたい事などまだまだたくさん有りました。昨年の夏、入院される旨のメールを頂き手術前に病院にお見舞いに寄せて頂いたとき、たまたまご自宅に外泊されており、そちらの方へお邪魔させて頂きました。その時の吉田さんは実に穏やかで、とても病魔に冒され手術を控えた人とは思えませんでした。奥さんを交え3人でいろいろとお話しをさせて頂いたこと、本当に印象的であり、折に触れてご一緒させてもらったこととともに、私にとって大事な一生の思い出です。

吉田さんに初めてお会いしたのは、私が住友化学に入社した年の昭和49年、構造活性相関解析プログラムのことで、当時おられた千里の住友化学計数センターに相談に寄せて頂いたときでした。その後も、数理統計学・コンピューターケミストリーの専門家として、また、人生の先輩としていろいろと相談に乗って頂き、また話しを聴かせて頂きました。

ある時、「ある化合物系列でいくつか化合物を合成し生物活性データが出た後、Hansch－藤田法で次に合成すべき高活性な化合物を予測するためのプログラムを作ってもらいたいのですが」とお願いしたところ、吉田さんは快く引き受けて下さり、現場の農医薬のスクリーニング合成研究者が実に使い易いプログラムを短期間で作り上げて下さいました。このプログラムは、その後更に増強され、当社と日本電気さんとの間で共同開発されたコンピューターケミストリー統合システムACACSの中に組み込まれました。このACACSシステムの開発をはじめ、吉田さんは、住友化学のコンピューターケミストリー発展のために常に卓抜したリーダーシップで社内をまとめられ、引っ張っていって下さいました。また社外的にも、情報化学部会の部会長や土井国家プロジェクトの副リーダーを務められるなど、多方面でいろいろと貢献されました。産・官・学の橋渡し役としても、吉田さんならではのご活躍をされました。

吉田さんが贈って下さった著書の「コンピューター・ケミストリー　新しい化学研究法入門」（東京化学同人、1993年）を今また開いています。コンピューターを用いた分子・材料設計、合成反応設計、構造決定について実に平易に解説されているのに、あらためて感銘を受けています。この本に限らず、吉田さんの書き物やお話しの中には、読む側、聴く側が理解し易いように、じつに当を得た譬えがよく出てきました。お陰さまでそれまでよく分からなかったいくつものことが理解できるようになりました。きっと、そのようなご経験をされた方も多いことと思います。

吉田さん！今どうされていますか。「コンピューター・ケミストリー」という術語を作られた吉田さんと「計算機化学」の概念を提唱された佐々木先生、お二人は再会され、美味しい酒を酌み交わしながら、21世紀のコンピューター支援化学研究、情報化学についていろいろとお話しをされているのでしょうか。ご冥福をお祈りいたします。

吉田元二氏とのお付き合いを振り返って

呉羽化学工業（株）　朝永　惇

数年前、新化学発展協会の幹事会・講演会の折りに以下のようなことがあった。吉田氏と一緒に受付で、懇親会の領収書をもらったところ、私の領収書の宛先も住友化学となっていた。受付のお嬢さんから見ると、お互いの会話の様子が同社内の人間の様に見えたのであろう。彼と私は大学の同級生であり、つい話し方が、他社の人への場合のような配慮がなくなっていたのであろう。教養課程、専門課程と４年間に渡り、勉学や遊びの仲間であった。教養課程時代はそれ程親しい仲ではなかったが、専門課程（東大工学部計数工学科計測コース）は人数が三十人程と小さなグループなので、自然とより親しい存在となった。卒業後、彼は修士課程を経て住友化学へ、私は呉羽化学へ入社し、活動場所も東京と大阪と離れ、時々ある同期会でも会うことも、殆どなかった。お互いの仕事の内容も全く異なっていた。

入社後、十年ほど経った時、彼から化合物管理システム（オスレッド）を開発、社内利用に加え外部への販売も始めたので化学企業として導入を検討してほしい旨の説明資料が、突然送られてきた。その頃、私の仕事も変わり、コンピュータによる医・農薬の研究開発支援に取り組み始めた時であったので、驚きを感じた。海外の情報も調べ、その中に今では当たり前になっているＩＳＩＳ（当時はＭＡＣＣＳ／ＲＥＡＣＣＳ）の様な化合物管理システムが、販売され始めていることも知っていた。想像するに、彼のシステム開発の方が先行していたであろう。ただ、残念なことに海外製品の入出力がグラフィックスであるのに対し、彼の方はカードシステムであり、多くの企業が海外のシステムを導入することになってしまった。彼が開発を始めた時期は、コンピュータ・グラフィック技術が一般的でなく、「始めるのが早すぎた」と残念がっていたのを記憶している。

彼の元々の専門は統計学と理解しているが、全く異なる分野へも平気で取り組み、彼の造語であるコンピュータ・ケミストリーの先駆的役目をはたしていたのであった。このようなお互いの状況で、学会、研究会などで会う機会が飛躍的にふえていった。我々二人の学科の卒業生は多種の企業で仕事をしているが、コンピュータのハード・ソフトの開発かコンピュータを利用し生産の合理化、効率化に携わっている者が殆どであった。そんな中で、彼と「これからはコンピュータを利用しての研究業務の効率化を目標にしよう」と、お酒を飲みながら話したことを記憶している。彼はまさに、企業のレベルを越えそれを推進してきていたと思うと、突然の死が残念でならない。

１０月２０日の朝、情報化学討論会参加の社内手続きの書類を書きながら、久しぶりにまた彼に会い話しもできると思っていた時、同期の友人より彼の訃報を伝える電話があり、呆然とした。その夜、ご家族と伴に彼の御霊が安置されている所へ、友人と一緒に弔問とともに最後のお別れに行った。その時、奥様の、「昨年の手術回復の後、国内外、公私を問わず会うべき人全てを、訪問していた」と言うお話に、余りにつらく申し上げられなかったことがあった。今春、豊橋技術科学大学の船津先生より、「ＣＡＣフォーラムで講演を」とのお話があったが、最近は話せるような仕事をしていないので辞退したところ、「吉田氏が、最近私としばらく会っていないので」と言っているので是非ということで、引き受けることとなり、６月２１日講演の司会をして頂き、その後の懇親会での会話が最後となってしまった。公私両面での貴重な仲間を余りにも早く失い、言葉では言い表せない残念な気持ちで一杯である。彼の笑顔を思い浮かべながら、ご冥福をお祈りいたします。

元二さんを悼む

お茶の水女子大学理学部　細矢治夫
hosoya@is.ocha.ac.jp

生前、あなたのことを「元二さん」と直接およびしたことはありませんでした。でもそれは、他の大勢の人達も同じだと思います。あなたのことが話題になるときは、誰でも、「元二さん」「元二さん」と言っていました。

それほどあなたは、上も下も、内も外も、みんなから愛され親しまれていたのです。

「元二さんが具合悪いようだ。」という話が、あなたの最初の入院のときにパッと広まりました。しばらくして、「でも経過は良くて、仕事に戻っておられる。ただ、夜の会合は遠慮をされているらしい。」という情報が伝わって来ていたので、私はとうとう、あなたに声を掛ける機会を失ってしまいました。それが、今になってとても悔まれます。この物臭さの人でなしを、どうか許して下さい。「元二さんなら許してくれるだろう。」、そう勝手にこちらで決めつけてしまう。それほど、あなたは寛大な人でした。

あなたとのお付き合いは、何時ごろ始まったのかよく覚えていません。情報化学、計算化学のことで、少しずつ、何時の間にか、という感じですね。情報化学部会の幹事会などでのお付き合いで、だんだん親しくなって行ったような気がします。この分野の企業関係のまとめ役の中の大事なお一人でした。

3年ほど前に、私の次の情報化学部会長を誰にお願いしようかという話が出ました。この分野は広い層の人から支えられているのだから、次は企業の方に、という話が出たら直ぐに、「住化の元二さんが最適だ。」という誰かの声で一気に決まりました。私も安心してバトンタッチをした後は、一切あなたにお任せっきり、という状態が続いていましたね。

あなたは、水を得た魚のように、組織をまとめ、新しい試みを次々と実行されて行かれました。情報化学の皆を代表して、あらためてあなたに、遅まきながらお礼とねぎらいの言葉を贈りたいと思います。

でもあなたは、この仕事を大変楽しんでおられた。それを端的に物語るのが、情報化学討論会のポスター賞の設定と、その表彰のセレモニーでした。あなたは何時も、受賞者の一人一人と一緒に、実ににこやかな元二スマイルで、記念写真の中に写っておられました。

2年ほど前のことでしたね。どういう訳か、ＮＥＤＯの関係で、計算化学のプロジェクトについての審査委員の役が私にまわって来ました。私は、かなりずけずけと、申請書の書き直しを要求しました。あなたが、その申請のチームのキーパーソンの一人であることはわかっていたのですが、後日あなたから、「お蔭で、二晩徹夜をしてしまいました。」と、例の元二スマイルで言われたときには、私も絶句してしまいました。「あんなに大勢のビッグプロジェクトなのだから、あなたは、若い人の何人かに号令をかける立場なのではないですか。それなのに、何であなた一人でやらなければならないの。」と言いたかったのですが、言えませんでした。「私の仕事ですから。」と言わず語りなあなたの心意気の強さに、私が圧倒されてしまったのだと思います。

元二さん、あなたは、企業の研究所での計算化学分野の仕事のてこ入れだけでなく、現場の若い人達と会社や関係団体の上層部との間の大事なインターフェイスの役を文字通り、体を張ってやりとげて来られたのです。

お通夜の晩、あなたの大好きだったお酒を仲間達と飲みながら、元二さんの後を継いでくれる人が欲しいな、と皆でつぶやいていたのです。元二さんも、そこが今、一番気掛かりなことだと、空の上から私達のことを見ておられるような気がしてなりません。元二さんが、本当に安心してゆっくりとおやすみになれるように、私達も頑張らなければなりません。

このように、あなたが亡くなった後も、あなたの思い出、あなたがやられたこと、あなたがやりたかったことは、私達の心に何時までも残っております。生前の楽しかったお付き合いと、その思い出をどうも有り難うございました。

巻頭言

図書館情報大学図書館情報学部　中山伸一

今世紀最後のCICSJ Bulletinの企画として、本誌創刊以来の総目次と著者索引をお届けします。

本号までの本誌の巻数は１８巻です。この数は２０世紀という長い歴史から見れば、ほんの一瞬に過ぎません。しかし、News Letterに始まるこれらの目次をながめるていると、情報化学部会を創り・育ててきた多くの人々の開拓者としての誇りと苦労とがかいま見られます。懐しい方々が名を連ねております著者索引も、一度お試し下さい。こんな人がこんな記事を書いていたんだ、という新たな発見があるかも知れません。

目次を年代順に読んで特集記事の変遷を見ていると、情報化学研究の歴史の一端が見えてくるような気がします。その中にはすでに過去のものとなった研究もありますが、これからの情報化学研究の方向性を指し示しているような特集も多く見受けられます。

本企画が情報化学の古きを温め新しきを知るための参考資料として、皆さまの情報化学研究活動の活性化のために少しでも役立つことができたなら幸いです。

CICSJ Bulletinの歴史は情報化学部会の情報化学に関する啓蒙活動の歴史を示していると考えられます。一方、情報化学部会の研究活動に関する歴史は情報化学討論会の歴史に現れているといえましょう。その意味で、啓蒙と研究という部会活動の車の両輪のうち、片方の歴史を今回公開することができました。残るもう一方の車輪の歴史を近いうちにお届けしたいと考えておりますので御期待下さい。

CICSJ Bulletin 目次

記載形式　ページ,記事区分,表題,著者名

NEWS LETTER Vol.1 No.1(1983.11.30)
1～2,,情報化学部会が発足して,佐々木慎一
3,関連行事,情報化学討論会,
4,関連行事,構造活性相関シンポジウム,
4～5,関連行事,その他,
6～7,情報化学部会内規,,
8～11,部会員名簿,,
NEWS LETTER Vol.2 No.1(1984.3.20)
1,,第6回情報化学討論会を終わって,大崎健次
1～2,,データベースと著作権について,石田嘉明
3～4,関連行事,化学研究における予知・予測のシンポジウム,
5,関連行事,第 49 春季年会情報化学関係プログラム抜卒,
6,関連行事,その他,
6,研究グループ紹介(海外編),,
7,部会員名簿,,
NEWS LETTER Vol.2 No.2(1984.7.20)
1,,情報還元主義の諸相,名和小太郎
2,部会行事,第7回情報化学討論会,
2,部会行事,第12回構造活性相関シンポジウム,
2,関連行事,分析化学夏期セミナー,
2,関連行事,日本分光学会夏期セミナー,
3,学会報告,国際情報知識コンファレンス-1984 からの報告,
4,学会報告,第11回構造活性相関シンポジウム,
5,部会員名簿,,
NEWS LETTER Vol.2 No.3(1984.11.19)
1～3,,分析化学を高次情報へ,大沢映二
4,部会行事,第7回情報化学討論会プログラム,
5,部会行事,第 12 回構造活性相関シンポジウムプログラム,
6,情報化学雑学講座,「情報」とはなんだろう？,細矢治夫
7,海外ニュース,,
7,部会員名簿,,
NEWS LETTER Vol.3 No.1(1985.3.20)
1,,PAC-CHEM'84 に参加して,藤原譲
2,,第7回情報化学討論会を振り返って,冨田研一
3,部会行事,日本化学会第50春季年会プログラム,
4,図書紹介,計算機化学関係図の紹介,大沢映二
5,情報化学雑学講座,「情報」とはなんだろう？Ⅱ雑誌の表紙,細矢治夫
6,海外ニュース,,
7,部会員名簿,,
7,事務局だより,,
NEWS LETTER Vol.3 No.2(1985.5.20)
1,,情報化学部会の大いなる発展を目指して,米田幸夫
2,関連行事,第8回情報化学討論会,
2,関連行事,第13回構造活性相関シンポジウム,
3～12,海外の動き,ACS 春季年会プログラムアブストラクト,
13～14,海外の動き,ICCCRE プログラム,
15～16,海外の動き,1985 ACM SIGMOD CONFRENCE プログラム,
17～18,文献紹介,Journal of Chemical Education,
19～20,文献紹介,Computer Handling of Generic Chemical Structures,
21,文献紹介,構造表現と構造処理に関する文献,
22～23,情報化学雑学講座,「情報」とはなんだろう？Ⅲ論文誌の活字,細矢治夫
24,機関利用案内,AICHE,
25,国際会議開催案内,INT'L OTTAWA CODATA CONFERENCE,
NEWS LETTER Vol.3 No.3(1985.7.31)
1～2,,情報化学と情報学,湯川泰秀
3,関連行事,第8回情報化学討論会シンポジウム,
4～5,関連行事,第 13 回構造相関活性シンポジウムプログラム,
6,海外の動き,7th ICCRE に出席して,阿部英次
7～11,文献紹介,米国化学会化学情報誌最近号の紹介,
12,文献紹介,有機合成の設計(有機合成経路探索),
13,国際会議案内,12th International Conference on very Large Data Bases,
14,国際会議案内,COBAC Ⅳ,
15～22,機関利用案内,QCPE について,
23,機関利用案内,化学 PC 研究会について,
NEWS LETTER Vol.3 No.4(1985.9.30)
1～2,,情報化学のはじまり,藤原鎮男
3～7,,データベースに関する著作権問題,文化庁著作権課
8,関連行事,第 2 回コンピュータ化学に関する日本・ソビエト合同シンポジウムの開催のお知らせ,
9～12,海外動向,米国化学会秋季年会 CINF, CONF プログラム,
13,文献紹介,ラボラトリー・オートメーション,
14～15,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences 2 5周年記念号目次,
16～21,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry 1984 目次,
22,情報化学講座,CAS レポート№18(春季号)より,
NEWS LETTER Vol.3 No.5(1985.11.30)
1～2,,情報化学の進路,千原秀明
3～6,,情報化学の進路,関崎正夫
7～8,関連行事,情報学シンポジウム,
9～12,海外動向,シンポジウム：人工知能の化学への応用に参加して,
13～15,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.1,№1～Vol.3,№3),
16～21,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.7,№1～Vol.9,№3),
22,会員の広場,,
23,情報化学雑学講座,"An,Cb,Em,Fl,Il,Ma,Tn...",細矢治夫
NEWS LETTER Vol.4 No.1(1986.1.31)
1～2,,"情報化学"雑感,田中信行
3,関連行事,第 52 春季年会化学情報・計算機化学プログラム,
4～5,国際情勢,米国企業におけるコンピュータ支援分子

設計システムの状況,花井荘輔
6～10,国際会議開催案内,第 10 回国際コデータ会議について,藤原譲
11～13,文献紹介,Computer Enhanced Spectroscopy (Vol.1,№1～Vol.2,№4),
14,国際機関案内,数理化学国際協会へのお誘い,細矢治夫
15,情報化学雑学講座,AIDS にならないように,細矢治夫
16,会員の広場,,藤枝修子
17,部会員名簿,,

NEWS LETTER Vol.4 No.2(1986.3.31)
1,部会行事,第 9 回情報化学討論会(発表募集),
1,関連行事,第 14 回構造活性相関シンポジウム(発表募集),
2,海外動向,191st ACS National Meeting:Division of Chemical Information,
3～6,海外動向,191st ACS National Meeting:Division of Computeras in Chemistry,
7,国際会議,Pittsburgh Conference & Exposition on Analytical Chemistry & Applied Spectroscopy,
8,国際会議,European Conference on Artifical Intelligence,
9,国際会議,AAAI-86 The national CONFERENCE on Artificial Intelligence,
10～13,文献紹介,Quantitative Structure Activity Relationships,
14～15,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences,
16,最近のニュースから,学術情報センターの創設,
17,最近のニュースから,電子図書館実現へ,
17,最近のニュースから,CAS の新しい情報処理技術,
18,最近のニュースから,Journal of Chemical Information and Computer Sciences 誌に新企画,鈴木功
19,機関利用案内,CAS ONLINE 大学割引制度,
20～21,図書紹介,A Handbook of Computational Chemistry,大沢映二
22,会員の広場,,

NEWS LETTER Vol.4 No.3(1986.5.31)
1～3,,物質から正しい情報を引き出すために,南茂夫
4～6,年会報告,,
7～8,海外動向,国際協力によるデータベースの作成-画像工学特許検索システム ITPAIS-,田淵利明
9,海外動向,20 th ACS Great Lakes Reginal Meeting:Computer in Chemistry,
10,海外動向,20 th ACS Great Lakes Reginal Meeting:Chemical Education,
11～12,国内の動き,国際科学技術情報オンラインネットワーク「STN-International」について,佐原卓
13～16,国内の動き,Full Text Database,中尾健治
17,国際会議,Calender,
18,国際会議,Second Symposium on Chemical Information,
19～20,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.9,№4～Vol.10.№1),
21,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.4,№1),
22,企画案内,,

NEWS LETTER Vol.4 No.4(1986.7.31)
1～2,,化学のエキスパートシステムへの期待,米田幸夫
3,特集：人工知能・エキスパートシステム,特集の意義,工藤善弘
4～16,特集：人工知能・エキスパートシステム,紙上パネル,丸山雅雄、土屋晉、服部忠、新重光、田中一雄、永井洋一郎、塩入孝之、伊藤健児、木坂一彦、山崎康男、小川秀明、紙上匿名、小山菊彦、安川民男、鬼頭繁治、今井賢
17～19,特集：人工知能・エキスパートシステム,AI に何が期待できるか,原尾政輝
20～24,特集：人工知能・エキスパートシステム,資料(宮原 是中 資料集より),
25～36,特集：人工知能・エキスパートシステム,会社研究所紹介,花王知識情報科学研究所（山下修）、蛋白工学研究所（八尾徹）、三菱総合研究所（美馬勝）、CKS 総合研究所、野村総合研究所（中村三平）
37～43,関連行事,第 9 回情報化学討論会プログラム,
44～46,関連行事,第 14 構造活性相関シンポジウムプログラム,
47,国際会議,World Congress Ⅲ of Chemical Engineering,

NEWS LETTER Vol.4 No.5(1986.9.30)
1～10,海外動向,192nd ACS National Meeting,
11～12,海外動向,Second Symposium on Chemical Information,
13,国際会議,Scientiic Computing and Automation,
14,国際会議,Automated Reasoning in Chemistry,
15～16,国際会議,International Conference on Graph Theory and Topoligy in Chemistry,
17,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.33,Nov),
17,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.10,№2),
18～19,文献紹介,Journal of Chemical Education,
20～21,最新のニュースから,Future ACS Meetings,
22,最新のニュースから,Journal of Mathematical Chemistry 発刊についてのニュース,
23,関連行事,,
24,企画案内,,
25,法人部会員リスト,,

NEWS LETTER Vol.4 No.6(1986.12.20)
1,,計算化学とグラフィックス,佐々木慎一
2～4,特集：モレキュラーグラフィックス,化学構造式(図)の入力から表示まで,阿部英次
5～6,特集：モレキュラーグラフィックス,CG のハードウェアについて,田中伸英
7～8,特集：モレキュラーグラフィックス,ベーシックソフトウェアパッケージについて,今井賢
9～11,特集：モレキュラーグラフィックス,モレキュラーグラフィックスにゆくえ,安岡則武
12～13,特集：モレキュラーグラフィックス,タンパク質・核酸の分子グラフィックス：我が国の憂うべき現状と展望,磯晃二郎
14～17,特集：モレキュラーグラフィックス,パーソナルコンピュータによる分子グラフィックス,中野英彦
18～19,特集：モレキュラーグラフィックス,化学関連のパソコンＣＧソフト,上山治貴

20,学会報告,分子グラフィックスの組織会議- The Molecular Graphis Society -,中村春木

21～22,学会報告,「分子の三次元構造と薬用活性」シンポジウム開かれる！,板井昭子

23～26,学会報告,Gordon 研究会議「計算化学」に出席して,大沢映二

27,学会報告,「化学の設計における計算法」国際会議に出席して,田辺和俊

28,学会報告,第 9 回情報化学討論会をふりかえって,佐々木慎一・船津公人

29,学会報告,第 14 回構造活性相関シンポジウムを終えて,佐々木慎一・高橋由雅

30,国際会議,Chemical Structures : The International Language of Chemistry,

31,企画案内,,

CICSJ Bulletin Vol.5 No.1(1987.1.31)

1～6,部会記事,第 9 回情報化学討論会総括,

7～8,年会プログラム,,

9,国際会議,Supercomputation in Chemistry and Chemical Engineering,

10,国際会議,International Conference on Japanese Information,

11,国際会議,Ⅷth ICCRE'87 における招待講演及び基調講演,

12,国際会議,1st International Workship on Data Banks inOccupational Health,

13,文献紹介,本号迄の紹介文献一覧,

14,文献紹介,Quantitative Structure-Activity Relationships,

15～16,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences,

17～18,関連行事,Journal of Computer-Aided Molecular Design 発刊のお知らせ,

19,関連行事,ゴードン会議「計算化学」についてのお知らせ,

19,関連行事,1987 American Conference on Theoretical Chemistry,

20～23,関連行事,1987QCPE Workshop on Semi-Empirical and AB Initio Techniques,

24,部会員名簿,,

CICSJ Bulletin Vol.5 No.2(1987.3.31)

1,部会行事,第 10 回情報化学討論会(発表募集),

2,部会記事,昭和 62 年度部会役員,

3～4,部会記事,「化学者のためのパソコン入門講習会」報告,藤枝修子

5,関連行事,第 15 回構造活性相関シンポジウム,

6～8,国内の動き,「異機種コンピュータの接続による化合物総合データベースシステム」の一般公開実験おこなわる,田辺和俊

9～13,国内の動き,スペクトルデータベース(SDBS)の公開デモを振り返って,平泉紀久子

14,国際会議,国際会議一覧,

15～16,国際会議,1987pittsburgh Conference & Exposition on Analytical Chemistry & Applied Spectroscopy,

16～17,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.4,No2～Vol.4,No4),

18～28,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.6,No1～Vol.7,No6),

29,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.10,No4～Vol.11,No1),

30,文献紹介,Quantitative Structure Activity Relationships (Vol.5,No3),

30,最近のニュースから,CHEMNETTM,

CICSJ Bulletin Vol.5 No.3(1987.5.31)

1～3,年会報告,,

4,部会行事,,

5～6,関連行事,,

7～11,国内の動き,学術情報センターと学術情報システム,根岸正光

12～13,国内の動き,CD-ROM フェア,鈴木功

14,国際会議,MATH/CHEM/COMP 1987,

14,国際会議,Eleventh British Combinatorical Conference,

15～16,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.8,No1～3),

17～19,文献紹介,Journal of Chemical Education,

20,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.5,No1),

20,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences,

21,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.11,No2),

CICSJ Bulletin Vol.5 No.4(1987.7.31)

1～4,部会行事,第 10 回情報化学討論会プログラム,

5～7,関連行事,第 15 回構造活性相関シンポジウムプログラム,

8～9,関連行事,第 55 秋季年会化学情報・計算化学プログラム,

10～19,国内の動き,JICST 化合物辞書データベースの構築,荒木啓介

20～25,国内の動き,コンピュータケミストリー、AI とその周辺,

26～27,海外動向,Ⅷth ICCPE'87 報告,

28～31,海外動向,194th ACS National Meeting,

32～35,国際会議,PACIFICHEM'89,

36,国際会議,7th European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relatonships,

37～38,国際会議,11th International CODATA Conference:Scientific and Technical Data in New Era,

39,求人,,

40,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.1,No1),

CICSJ Bulletin Vol.5 No.5(1987.9.30)

1～12,ネットワーク特集,化学研究者 コンピュータネットワーク,藤原譲・相曽益雄・岩田修一・小沢宏・宮原是中

13～16,海外動向,194th ACS National Meeting,

17,海外動向,Meetings,

18,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.64,No1～No6),

19～21,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.27,No2),

22～23,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.8,No1～No6),

24,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.5,No2),

24,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.11,No3),
25,文献紹介,Quantitative Structure Activity Relationships (Vol.5,No4～Vol.6,No1),
26,関連行事,,
27,「計算化学特集」原稿公募,,

CICSJ Bulletin Vol.5 No.6(1987.11.30)

1～13,部会記事,第10回情報化学討論会総括,
14～17,部会記事,情報化学部会内規,
18,年会報告,,
19,会員の広場,第2回化学PCソフトウェア研究討論会を終えて,吉村忠与志
20～21,会員の広場,第2回化学PCソフトウェア研究討論会に出席して,中野英彦
22～28,国際会議,Pacifichem'89,
29,海外動向,Workshop on Molecular Mechanics and Molecular Dynamics,
30,海外動向,Meetings,
30,海外動向,Computational Chemistry Gordon Research Confence,
31,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.6,No2),
31,文献紹介,Quantitative Structure Activity Relationships,
32,文献紹介,Computers & Chemistry (Vol.11,No4),
33,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.8,No7),
33,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.1,No2～No3),
34,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.27,No3),
34,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.5,No3),
35,部会員名簿,,

CICSJ Bulletin Vol.6 No.1(1988.1.31)

1,特集：計算化学,「計算化学」特集に寄せて,大澤映二・田辺和俊
2～4,プログラムカタログ,GAUSSIAN 86,平野恒夫
4～7,プログラムカタログ,MOLYX,岩田末廣
7～8,プログラムカタログ,MNDO,内田希
8～9,プログラムカタログ,MNDOC,豊田二郎・井畑敏一
10～11,プログラムカタログ,MOPAC,内田希
11～13,プログラムカタログ,AMPAC,高窪正明・渡辺好夫
13～15,プログラムカタログ,MM2/MMP2,小川桂一郎
15～16,プログラムカタログ,MMP2,都築誠二
16～17,プログラムカタログ,BIGSTRN-3,都築誠二
17,プログラムカタログ,QCMP,大沢映二
17～19,プログラムカタログ,3JHHPC,大沢映二
19～20,プログラムカタログ,ECEPP、UNICEPP、ECEPP/2,中馬寛
20～22,プログラムカタログ,AMBER、BIOSYM、CEDAS、CHARMM,八尾徹
23,企業における計算化学の現状,旭硝子（株）,石田嘉明
23～24,企業における計算化学の現状,エーザイ（株）,張ケ谷泰二
24～25,企業における計算化学の現状,花王（株）,山下修
25～26,企業における計算化学の現状,協和発酵（株）,白木千尋
26,企業における計算化学の現状,キリンビール（株）,飯島洋
26～27,企業における計算化学の現状,サントリー（株）,石黒正路
27～28,企業における計算化学の現状,塩野義製薬（株）,江角清志
28～29,企業における計算化学の現状,住友化学工業（株）,吉田元二
29～30,企業における計算化学の現状,第一製薬（株）,諸井黎明・坂元みや子
30～31,企業における計算化学の現状,大正製薬（株）,北村一泰
31～32,企業における計算化学の現状,武田薬品工業（株）,神谷和秀
32～33,企業における計算化学の現状,帝人（株）,小谷野和郎
33～34,企業における計算化学の現状,（株）東芝,酒井真理子
34～35,企業における計算化学の現状,東洋紡績（株）,相川泰
35～36,企業における計算化学の現状,東レ（株）,大野清隆
36～37,企業における計算化学の現状,日本化薬（株）,古後義也
37,企業における計算化学の現状,藤沢薬品工業（株）,田中明人
37,企業における計算化学の現状,松下電工（株）,安田歩
37～38,企業における計算化学の現状,三井東圧化学（株）,小田研悟
38～39,企業における計算化学の現状,三菱化成工業（株）,中村振一郎
39～40,企業における計算化学の現状,三菱油化（株）,朝倉立行
40～41,企業における計算化学の現状,持田製薬（株）,小貫慶昭
41,企業における計算化学の現状,明治製薬（株）,児玉佳男
41～42,企業における計算化学の現状,山之内製薬,古谷利夫
43～45,年会プログラム,,
46,関連行事,,

CICSJ Bulletin Vol.6 No.2(1988.3.31)

1,部会行事,第11回情報化学討論会(発表募集),
2,部会記事,第63年度部会役員,
3,関連行事,第16回構造活性相関シンポジウム,
4～8,学会報告,国際情報知識コンファレンス ICIK'87,石塚英弘
9,国内の動き,近畿化学協会コンピュータ化学部会発会記念講演会,
10,国内の動き,講演会"物質設計と材料の設計・創製の現場をコンピュータはどう変えつつあるか",
11～14,国内の動き,最近各社NWS性能・規格一覧表,
15～16,海外動向,Meetings,
17～18,文献紹介,本号迄の紹介文献一覧,

19 ～ 20, 文 献 紹 介 ,Journal of Computational Chemistry (Vol.8,№8～9,№1),
21,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.64, №7～12),
22,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.1,№1～2),
22,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.27,№4～Vol.28,№1),
23,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.5,№4),
24,文献紹介,Journal of Computational Chemistry (Vol.12,№1),
24,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.1,№4),
25,部会員名簿,,

CICSJ Bulletin Vol.6 No.3(1988.5.31)

1,部会行事,第1回情報化学夏期セミナー,
2～5,部会行事,ワークショップ「分子と反応の表現」報告,米田幸夫
6,部会行事,化学者のためのパソコン講習会,
7,部会行事,計算化学ワークショップ「機能物質・材料の設計のための計算化学手法」,
8～12,年会報告,,
13,関連行事,第3回化学PCソフトウェア研究討論会,
14～15,部会記事,,
16～22,研究会案内,,
23～26,学会報告,分子力学と分子動力学に関するワークショップ出席報告,大沢映二・中馬寛
27,海外動向,Meetings,
30～32,海外動向,Third Chemical Congress North America,
33,国際会議,Gordon Research Conference on Computational Chemistry,
34～35,図書紹介,計算化学ガイドブック－3大計算プログラムの解説,平野恒夫・吉田元二
36,文献紹介,"Tetrahedron Computer Methodology" 発刊のお知らせ,
37,文献紹介,Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.6,№3～Vol.7,№1),
38,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.2,№1),
38,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.12, №2),

CICSJ Bulletin Vol.6 No.4(1988.7.31)

1,部会行事,有機化学者のためのパソコン利用講習会,
2～14,部会行事,計算化学ワークショップ「機能物質・材料設計のための計算化学手法」報告,大沢映二・田辺和俊
15,年会プログラム,,
16,関連行事,「1989年情報学」シンポジウム論文募集,
17～18,国内の動き,量子化学におけるコンピューターワークステーションからスーパーコンピュータまで,安藤勲
19,会員の広場,「パソコンでも出来る本格的分子計算」のためのMM2プログラム配布について,大澤映二
20,学会報告,「第16回天然物化学国際会議」報告,田辺和俊
21～23,海外動向,Meetings,
24～28,国際会議,,
29,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.65, №1～№4),
30,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.12, №3),
30,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.6,№1～2),
31,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.1,№3),
31,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.2,№2),
32 ～ 34, 文 献 紹 介 ,Journal of Computational Chemistry (Vol.9,№2～5),
35,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.28,№2),

CICSJ Bulletin Vol.6 No.5(1988.9.30)

1,特集：人工知能,人工知能にあたって,宮原是中
2,特集：人工知能,企業におけるAIの現状：目次,
3,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,濱昭夫
3～4,特集：人工知能,エキスパートシステム開発の現状,日野水孝
4,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,天達洋文
5,特集：人工知能,企業における AI の現状,石田和文・加勢田茂
6,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,花熊克友
7,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,平山輝
7～8,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,宮本和男
8～9,特集：人工知能,花王(株)での知識システム開発,関根史麿
9～10,特集：人工知能,企業における AI の現状,藤原一郎
10～11,特集：人工知能,企業における AI の現状,斉藤豊一
11～12,特集：人工知能,企業における AI の現状,森章・矢島徹
12～13,特集：人工知能,企業における AI の現状,酒井俊彦
13,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,川合修平
13～14,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,斎藤巧
14～15,特集：人工知能,企業における AI の現状,松村司郎
15～16,特集：人工知能,企業における AI の現状,金納文治
16～17,特集：人工知能,企業における AI の現状,田中明志
17～18,特集：人工知能,企業における AI の現状,幸田和郎
18～19,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,脇一郎
19,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,大久保優晴
20,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,松村春生
20～21,特集：人工知能,企業における AI の現状,小口悟郎
21～22,特集：人工知能,企業におけるAIの現状,山路泰
22～23,特集：人工知能,企業における AI の現状,船越亮平
23～24,特集：人工知能,企業における AI の現状,仁井田和雄
25,特集：人工知能,用語解説,
26～31,特集：人工知能,アンケート,
31,特集：人工知能,AI特集誌リスト,

31～33,特集：人工知能,AI 関連新聞記事,
34,特集：人工知能,バイオ(ニューロ)コンピュータ関連新聞記事,
35,特集：人工知能,コンピュータケミストリーシステム関連新聞記事,
36,特集：人工知能,データベース関連新聞記事,
37～41,部会行事,第 11 回情報化学討論会プログラム,
42～43,部会行事,第 1 回情報化学夏期セミナー（情報化学入門)を終えて,高橋由雅・船津公人
44～47,関連行事,第 16 回構造活性相関シンポジウムプログラム,
48～50,関連行事,第 3 回 PC ソフトウェア研究討論会プログラム,
51,学会報告,Gordon Research Conference に参加して,
52,文献紹介,Tetrahedron Computer Methodology (Vol.1№1),朝永惇
52,文献紹介,Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.7,№2),
53,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.1,№4～Vol.2,№1),

CICSJ Bulletin Vol.6 No.6(1988.11.30)

1,特集：人工知能,ＥＳツールについて,宮原是中
2,特集：人工知能,ツールメーカーにおける AI の現状：目次,
3,特集：人工知能,IBM の AI および実用事例,占部薫
4,特集：人工知能,日本電気における化学 AI,吉田純
5,特集：人工知能,エキスパートシステム構築ツール ES/KERNEL の紹介,吉村紀久雄
6,特集：人工知能,富士通の AI に対する取り組み,岸田明
7,特集：人工知能,DIALOG のエキスパートシステム,岩澤まり子
8,特集：人工知能,NTT データ通信(株)における AI への取り組み,岩下安男
9,特集：人工知能,時間関係と因果関係をあつかう推論システムの開発,寺野隆雄
10～11,特集：人工知能,東芝のエキスパートシステム構築ツール,河野毅
11,特集：人工知能,化学工業分野における ART の適用について,中村重郎
12,特集：人工知能,日本 DEC の AI への取り組み,武藤猛
13,特集：人工知能,「エキスパートシステム開発」上の課題と対応,細川昭男
14,特集：人工知能,特定分野専門ツール(Genetic Task Tools),尾山伸一
15,特集：人工知能,富士電気の AI への取組みと化学工業への応用,萩原賢一
16,特集：人工知能,当社における AI への取組み,関本雅之
17,特集：人工知能,レンズ設計エキスパート・システム "HALDES",野口正弘
18,特集：人工知能,COREX(腐食用エキスパートシステム),池谷裕之
19,特集：人工知能,AI への取り組みについて,小林慎一
20～21,特集：人工知能,AI への取り組み,水野裕
22,特集：人工知能,エキスパートシステム構築支援ツール KDL とその応用,松本直彦
23,特集：人工知能,AI への横河電機の取組み,平田康郎
24,特集：人工知能,岩崎への AI への取組み　過去・現在・未来,繁周作
25～26,特集：人工知能,日本語エキスパートシェル「創幻」の現状と将来,林正明
27,特集：人工知能,反応経路選定エキスパートシステムについて,澤飯祐子
28,特集：人工知能,GoldWorks のご紹介,久保山誠士
29,特集：人工知能,ESPARON:分散協調型エキスパート・シェル,稲林昌二
30,特集：人工知能,評価エキスパート構築用シェル「コギト」の紹介,大野泰治郎
31,特集：人工知能,AI の実用化,中村徹
32,特集：人工知能,16 ビットパソコン用エキスパートシステム構築ツール MICCS,浜口顕行
33,特集：人工知能,連続系タンクシミュレーションとエキスパートシステムとの接続,福森利明
34,特集：人工知能,Super Expert PlusC,佐藤文臣
35,特集：人工知能,GURU(統合化エキスパート・システム開発環境）,松本常三郎
36～38,特集：人工知能,原稿執筆者連絡先,
39,特集：人工知能,特集後記,
40,部会行事,「化学者のためのパソコン講習会」報告,高山千代蔵
41～42,年会報告,,
43,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.28,№3),
43,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.2,№.2),
44,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.6,№3),
44～45,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.17, №4),
46,国内の動き,日本薬学会第 109 年会,
47～50,国内の動き,コンピュータケミストリーシステム一覧－,
51,海外動向,Meetings,

CICSJ Bulletin Vol.7 No.1(1989.1.31)

1～10,部会記事,第 11 回情報化学討論会総括,
11,部会記事,第 12 回情報化学討論会(予告),
12,部会記事,「有機化学者のためのパソコン利用講習会」開催報告,大澤映二
13～14,年会プログラム,,
15,関連行事,第 3 回化学 PC ソフトウェア研究討論会を終えて,吉村忠与志
16,国内の動き,日本化学会プログラム交換機構(JCPE)発足のおしらせと入会のご案内,大沢映二
17～18,国際会議,PACIFICHEM'89,
19,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.65, №5～№9),
20,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.6,№4),
20,文献紹介,Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.7,No.3),
21,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.2,№3),
21,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.2,№3),

22,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.13,No1),
22～23,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.28,No4),
24 ～ 26, 文 献 紹 介 ,Journal of Computational Chemistry (Vol.9,No6～Vol.10,No1),
27,部会員移動,,

CICSJ Bulletin Vol.7 No.2(1989.3.31)

1,部会行事,第 12 回情報化学討論会,,
2,部会記事,平成元年度部会役員,,
3,関連行事,第 17 回構造活性相関シンポジウム,,
4～6,学会報告,1989 情報化学シンポジウム,石塚英弘,
7 ～ 10, 海 外 動 向 ,「 Tetrahedron Computer Methodology」について,高橋由雅,
11～12,海外動向,Meetings,,
13,国内の動き,量子化学文献データベース(QCLDB)および会話的検索ソフトウェアの磁気テープによる頒布について,,
14～15,文献紹介,本号迄の紹介文献一覧,,
16,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.2,No4),,
17,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.29,No1),,
17, 文 献 紹 介 ,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.2,No4),,
18, 文 献 紹 介 ,Journal of Computational Chemistry (Vol.9,No7),,
18,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.65, No10～No11),,
19,部会員名簿

CICSJ Bulletin Vol.7 No.3(1989.5.31),

1,部会行事,第 2 回情報化学夏期セミナー,,
2～5,年会報告
6～7,部会記事
8,関連行事,第 4 回化学 PC ソフトウェア研究討論会,,
9～10,関連行事,「1990 年情報学シンポジウム」論文募集,,
11～15,国内の動き,コンピュータケミストリーーシステムー一覧,,
16～20,CCS の紹介,SYNLIB について,三枝利隆,
21～22,海外動向,Meetings,,
23, 文 献 紹 介 ,Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.7,No4),,
23,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.65, No12～Vol.66,No2),,
24, 文 献 紹 介 ,Journal of Computational Chemistry (Vol.9,No7),,
25, 文 献 紹 介 ,Journal of Molacular Structure (194('89)P2～1),,

CICSJ Bulletin Vol.7 No.4(1989.7.31),

1,国際会議,PACIFICHEM'89,,
2～4,部会だより
5,関連行事,近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会「化学におけるコンピュータの役割」,,
6～11,CCS の紹介,The Molecular Simulator,クボタ・コンピュータ,
12,情報化学雑考,List についての雑感,小出昭夫
13～14,海外動向,Meetings,
15, 文 献 紹 介 ,Tetrahedron Computer Methodology (Vol.1No2),
16 ～ 17, 文 献 紹 介 ,Journal of Computational Chemistry (Vol.10,No3～4),
18～21, 文 献 紹 介 ,Journal of Molacular Structure (No195～196),
22,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.29,No2),
23,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.13,No3),
24,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.3,No1～2),
25,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.66, No3～5),
25 ～ 26, 文 献 紹 介 ,Journal of Molacular Graphics (Vol.7,No1),
26, 文 献 紹 介 ,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.3,No1),

CICSJ Bulletin Vol.7 No.5(1989.9.30)

1～4,部会行事,第 12 回情報化学討論会プログラム,
5,部会行事,化学物質名の機械処理に関する研究会,
6,部会行事,「ミニフォーラムのテーマを募集します」,
7,部会行事,第 2 回情報化学夏期セミナーを省みて,岡田孝・河井俊一
8～25,国際会議,PACIFICHEM'89 情報化学関係プログラム,
26～27,国際会議,コンピュータの材料化学・工学への応用国際会議・展示会,
28～29,関連行事,第 17 回構造活性相関シンポジウムプログラム,
30～33,関連行事,第 4 回 PC ソフトウェア研究討論会,
34～37,CCS の紹介,分子設計支援システム"MATERIA"について,村井俊彰
38～40,国内の動き,情報学基礎研究会報告,廣田勇二
41,国内の動き,日本化学プログラム交換機構(JEPE)について,田辺和俊
42,海外動向,Meetings,
44,文献紹介,Journal of Computational Chemistry (Vol.10,No5),
45 ～ 46, 文 献 紹 介 ,Journal of Molacular Structure (197),
47, 文 献 紹 介 ,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.3,No2),
47,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.66, No6),
47, 文 献 紹 介 ,Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.8,No1),

CICSJ Bulletin Vol.7 No.6(1989.11.30)

1,部会行事,ワークショップ開催のお知らせ,
2,部会行事,化学命名法ワークショップ 第 2 回,
3～7,部会行事,化学物質名の機械処理に関する研究会報告,
8,部会記事,,
9,関連記事,シンポジウム「化学における情報の現状と将来」プログラム,
10～11,関連記事,「1990 年情報化学シンポジウム」開催案内,
12～17,CCS の紹介,実験台付近での分子設計・スペクトル解析ツール,三橋一夫

18～23,国内の動き,化学企業におけるコンピュータケミストリー,

24～25,国際会議,第 2 回　日独スペクトルデータベースワークショップ報告,阿部英次

26～28,海外動向,Meetings,

29～36,文献紹介,Journal of Molacular Structure (156～192,№198),

37,文献紹介,Tetrahedron Computer Methodology (Vol.1,№3～Vol.2,№1),

38,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.7№2),

39,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.29,№3),

40,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.66,№7～№8),

40,文献紹介,Journal of Computational Chemistry (Vol.10,№6),

41,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.13,№4～Vol.14,№1),

42,文献紹介,Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.8,№2),

CICSJ Bulletin Vol.8 No.1(1990.1.31)

1,特集：新しい FORTRAN,「新しい FORTRAN」特集にあたって,今井賢

2～7,特集：新しい FORTRAN,FORTRAN8X の総説,菅忠義

8～10,特集：新しい FORTRAN,IBM VF FORTRAN について,高橋信隆

11～12,特集：新しい FORTRAN,CRAY FORTRAN について,三上和徳

13～14,特集：新しい FORTRAN,日立の FOTRT77/HAP について,後藤志津雄・青山明夫

15～16,特集：新しい FORTRAN,FORTRAN8X について,富士通

17～31,部会行事,第 21 回情報化学部会討論会総括,

32,部会行事,第 13 回情報化学討論会(予告),

33～34,年会プログラム,,

35～45,国際会議,PACIFICHEM'89 情報化学関係報告,

46～55,将来展望,「21 世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」アンケート報告,

56,関連行事,パソコンによるコンピュータケミストリー入門講習会,

57,関連行事,Schleyer 博士及び Stewart 博士による計算化学講習会,

58,関連行事,第 4 回化学 PC ソフトウェア研究討論会を終えて,吉村忠与志

59～64,国内の動き,コンピュータケミストリーシステム一覧,

65～73,海外動向,化学情報フォーマット標準化案について,

73～75,海外動向,Meetings,

76,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.29,№4),

77,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.66,№9),

78,部会員異動,,

CICSJ Bulletin Vol.8 No.2(1990.3.31)

1,部会行事,第 13 回情報化学討論会,

2～4,部会行事,ワークショップ報告「新しい領域としてのケモメトリックス-その現状と将来展望」,

5,部会行事,化学命名法ワークショップ第 3 回命名の歴史から機械処理まで,

6,部会記事,平成 2 年度部会役員,石塚英弘

7,関連行事,第 18 回構造活性相関シンポジウム,高橋由雅

8～9,関連行事,近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会パソコンによるコンピュータ化学の実際,

10～14,CCS の紹介,分子設計のための統合システム「ACACS」,菊園康雄

15～20,CCS の紹介,分子設計支援システム"ANCHOR"について,富士通（株）

21,学会報告,「1990 年情報学シンポジウム」参加報告,工藤喜弘

22,学会報告,シンポジウム「化学における情報の現状と将来」報告,米田幸夫

23～27,海外動向,Meetings,,

28,国際会議,コンピュータの材料科・工学への応用　国際会議・展示会,,

29～30,国際会議,The Montreux 1989 International Chemical Information Conference & Exhibition に参加して,船津公人,

31～32,文献紹介,本号迄の紹介文献一覧,,

33,文献紹介,Journal of Computational Chemistry (Vol.11,№1),,

34,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.7,№3～4),,

35,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.30,№1),,

36,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.3,№3～№4),,

37,文献紹介,Quantitative Structure Activity Relationships (Vol.8,№3),,

37,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.66,№10),,

37～38,文献紹介,Tetrahedron Computer Methodology (Vol.2,№2),,

39,部会員名簿

CICSJ Bulletin Vol.8 No.3(1990.5.31),

1,特集：ネットワーク-LAN を中心として-,編集委員会からの前書き,,

2～6,特集：ネットワーク-LAN を中心として-,ネットワーク・システム技術,佐賀啓一郎,

7～11,特集：ネットワーク-LAN を中心として-,構内ネットワークとイーサーネット,長谷部紀元,

12～16,特集：ネットワーク-LAN を中心として-,研究所のネットワークシステム基盤,ソリトンシステムズ,

17～20,特集：ネットワーク-LAN を中心として-,分散型研究開発支援システム,塩田正二,

21,部会行事,第 3 回情報化学夏期セミナー,,

22～24,年会報告

25～31,部会行事

32～45,将来展望,「21 世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」アンケート結果に寄せて,,

46,関連行事,第 5 回化学 PC ソフトウェア研究討論会,,

47～51,海外動向,Meetings,,

52,国際会議,10th International Conference on Computers in Chemical Research and Education

(ICCRE),,

53,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.14,No2),,

53,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.66, No11),,

54～80,文献紹介,Journal of Molacular Structure (Vol.199～206、Vol.212～Vol. 214、Vol.216～220),,

81,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.8,No 1),,

81,文献紹介,Tetrahedron Computer Methodology (Vol.2,No3),,

CICSJ Bulletin Vol.8 No.4(1990.7.31),

1,部会行事,第3回情報化学セミナー,,

2～3,部会記事,,

4～6,年会プログラム,近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会,

7～8,関連記事,1991 情報化学シンポジウム論文募集,

9,関連記事,講演会「理論化学のフロンティアーab initio 法は何に使えるか」,

10,関連記事,計算化学講習会「第 4 回パソコンによるコンピュータケミストリー入門」,

11～14,CCS の紹介,高分子材料設計支援システム EXPOD,山内正

15～23,国際会議,2nd International Meeting on Chemical Structures,岡田孝

24～27,海外動向,Meetings,

28,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.14,No2～No 3),

29,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.67, No2～No4),

30,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.5,No1),

30,文献紹介,Tetrahedron Computer Methodology (Vol.2,No4),

31,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.30,No2),

CICSJ Bulletin Vol.8 No.5(1990.9.30)

1～9,部会行事,第13回情報化学部会討論会プログラム,

10～11,部会行事,「第 3 回情報化学夏期セミナー」報告,今井賢・佐藤明子

12～16,関連行事,第 18 回構造活性相関シンポジウムプログラム,

17～19,関連行事,第 5 回化学 PC ソフトウェア研究討論会,

20～23,国際会議,2nd Beilstein Workshop-Computer reaction Management in Organic Chemistry,船津公人

24～27,海外動向,Meetings,

28,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.30,No3.),

29,文献紹介,Tetrahedron Computer Methodology (Vol.2,No5～No6),

30,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.8,No 2),

31～33,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.11,No3～5),

34～37,文献紹介,Journal of Molacular Structure (Vol.221～222),

38,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.5,No2),

CICSJ Bulletin Vol.8 No.6(1990.11.30)

1,特集:ワークステーション,「ワークステーション特集」にあたって,小出昭夫

2～5,総論,ワークステーションの現状と展望,石田晴久

6～7,総論,ワークステーションの DBMS,山口和紀

8,ユーザの視点から,ワークステーションと分子力学計算,大澤映二

9～10,ユーザの視点から,化学技術研究所におけるワークステーションの利用状況,杉江正昭

11～12,ユーザの視点から,ワークステーション雑考,石田嘉明

13～14,ユーザの視点から,ワークステーションを中心とした研究開発支援システム,河内山勝春

15～16,ユーザの視点から,研究のデスクワークをワークステーションで,柏谷宏之

17～18,ユーザの視点から,三菱化成総合研究所における EWS の利用,佐藤信之

19,ユーザの視点から,コンピュータシステムの進歩の中のワークステーション,古谷利夫

20～21,メーカーの視点から,ワークステーションとグラフィックス,旭化成情報システム

22,メーカーの視点から,CCS 分野におけるワークステーションの利用,清水孝次

23～24,メーカーの視点から,IBMRISC システム/6000 ファミリー(POWER ステーション),野村宣生

25～26,メーカーの視点から,FUJI XEROX ネットワークステーションのご紹介,吾妻和泉

27,部会行事,第 2 回ケモメトリックス・ワークショップ,

28～34,国内の動き,最新コンピュータケミストリーシステム一覧,

35～37,関連行事,1991 情報学シンポジウム 知的情報の資源とその高次処理をめざして,

38～41,海外動向,Meetings,

42,文献紹介,Quantitative Structure Activity Relationships (Vol.8No4～Vol.9,No2),

43,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.14,No4),

44～47,文献紹介,Journal of Molacular Structure (Vol.223～224),

48～50,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.11,No6～9),

51,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.8,No 3),

CICSJ Bulletin Vol.9 No.1(1991.1.31)

1,特集:ニューラルネットワーク,「ニューラルネットワーク」特集にあたって,編集委員会

2～5,特集:ニューラルネットワーク,脳の科学とコンピュータ,甘利俊一

6～13,特集:ニューラルネットワーク,ニューラルネットとその応用,桑原敏

14～23,特集:ニューラルネットワーク,APPLICATION OF NEURAL NETWORKS IN CHEMISTRY, J.Gasteriger and J.Zupan

24～25,特集:ニューラルネットワーク,ニューラルネットワークによるタンパク質の高次構造予測,中山伸一・吉田政幸

26～27,特集:ニューラルネットワーク,ニューラルネットワークによるスペクトルパターン認識,田辺和俊

28～29,特集:ニューラルネットワーク,ニューラルネ

ットワークによる類似化合物の分類,湯田浩太郎
30～31,特集：ニューラルネットワーク,ニューラルネットワークによる複合酸化物の酸強度の予測,鬼頭繁治・服部忠
32～33,特集：ニューラルネットワーク,ニューラルネットワークによる実験データの整理と推定,伊藤建彦・佐々木基
34～50,部会行事,第 13 回情報化学討論会総括,
51,部会行事,第 13 回情報化学討論会(予告),
51,部会行事,第 1 回情報化学部会講習会,
52,部会行事,ワークショップ「化学構造式の自動解読」話題提供者募集,
53～54,年会プログラム,,
55～62,部会記事,,
63,関連行事,第 5 回化学 PC ソフトウェア研究討論会を終えて,細矢治夫・藤枝修子
64,関連行事,データベース講演会,
65,関連行事,第 1 回計算化学シンポジウム,
66,国際会議,ICAS'91 へのお誘い,
67,学会報告,1991 情報化学シンポジウムに参加して,花井荘輔
68～74,話題,化学構造式考現学,米田幸夫
75～79,海外動向,Meetings,
80～81,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.5,№3～4),
82,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.30,№4),
83,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.15,№1),
84,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.67, №1,～№5～№9),
85～87,部会員異動,,
88,会員の広場,,

CICSJ Bulletin Vol.9 No.2(1991.3.31)

1,部会行事,第 14 回情報化学討論会,,
2,部会行事,第 4 回情報化学夏期セミナー,,
3,部会行事,第 4 回情報化学部会ワークショップ「化学構造式の自動解読」参加者募集,,
4,部会記事,平成 3 年度部会役員,,
5,関連行事,第 19 回構造活性相関シンポジウム,,
6,学会報告,CCS 展＆セミナーに参加して,金内徹,
7～10,海外動向,Meetings,,
11～13,文献紹介,本号迄の紹介文献一覧,,
13, 文 献 紹 介 ,Quantitative Structure Activity Relationships (Vol.9,№3),,
13,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.31,No1),,
15,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.67, №10～№12),,
16, 文 献 紹 介 ,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.6,№1),,
16,部会員名簿

CICSJ Bulletin Vol.9 No.3(1991.5.31),

1,部会行事,第 14 回情報化学討論会,,
2,部会行事,第 5 回情報化学部会国際ワークショップ「国際的視野からみた情報化学の現状と将来」参加者募集,,
3～5,部会行事,第 2 回ケモメトリックス・ワークショップ報告,山崎昶・藤枝修子,
6,部会行事,情報化学部会第 1 回講習会報告,,
7～9,年会報告
10～13,部会記事
14,関連行事,第 19 回構造活性相関シンポジウム,,
15,関連行事,講習会「分子場計算の基礎と応用」,,
16,国内の動き,日本化学プログラム交換機構(JCPE)について,田辺和俊,
17～24,国内の動き,最新コンピュータケミストリーシステム一覧,,
25～29,CCS の紹介,総合研究開発システム(EASY-LABO),関西電気ソフトウェア,
30～32,海外動向,Meetings,,
33 ～ 37, 文 献 紹 介 ,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.11,№2№10,Vol.12, №1～№3),,
38,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.15,№2),,
38, 文 献 紹 介 ,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.6,№2),,
39～52, 文 献 紹 介 ,Journal of Molacular Structure (Vol.237～240,Vol.242～244),,
53,話題

CICSJ Bulletin Vol.9 No.4(1991.7.31),

1～5,部会行事,第 14 回情報化学討論会プログラム,
6,部会行事,第 5 回情報化学部会国際ワークショップ「国際的視野からみた情報化学の現状と将来」開催のおしらせ,
7～10,部会行事,第 4 回情報化学部会ワークショップ「化学構造式の自動解読」,
11～13,年会プログラム,,
14～15,部会記事,,
16～19,関連行事,第 19 回構造活性相関シンポジウムプログラム,
20,関連行事,第 6 回化学 PC ソフトウェア研究討論会の開催要項,
21,関連行事,薬物受容構築と医薬品設計シンポジウム,
22,話題,,
23～24,海外動向,Meetings,
25, 文 献 紹 介 ,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.6,№3),
25, 文 献 紹 介 ,Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.9.№4),
26,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.31,No2),

CICSJ Bulletin Vol.9 No.5(1991.9.30)

1,部会行事,日本化学会情報化学部会第 5 回国際ワークショップ報告,藤枝修子
2～3,部会行事,第 4 回情報化学夏期セミナーの報告,橋本正雄・工藤喜弘
4～5,年会報告,,
6,部会記事,,
7,関連行事,,
8～10,CCS の紹介,SAVVY パターン認識による質量分析データベースの試作,荒井敏博
11 ～ 15,CCS の 紹 介 , 計 算 化 学 統 合 パ ッ ケ ー ジ "MOTECC",栗田康男
16～19,CCS の紹介,化学情報管理・検索システム(ISIS)について,富士通
20～21,海外動向,Meetings,

22,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.15,No3),
23,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.31,No3.),
24,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.12,No5～No6),
26～31,文献紹介,Journal of Molacular Structure,
32,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.6,No4～Vol.7,No1-4),
33,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.9,No 2),
34 ～ 36,文献紹介,Tetrahedron Computer Methodology (Vol.3,No2),
37,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.9 No.6(1991.11.30)

1,部会行事,第 3 回ケモメトリックス・ワークショップ(情報化学部会講習会 No2),
2,部会行事,第 4 回化学命名法ワークショップ(情報化学部会ワークショップ No6),
3～5,部会行事,1992 年 情報学シンポジウム,
6～7,部会記事,情報化学部会ワークショップ主催申請要項・申請書,
8～9,学会報告,第 4 回北米化学会議に参加して,片倉晋一
10～17,国内の動き,コンピュータケミストリーシステム一覧(平成 3/10/15、化学工業日報から転載),
18～19,海外動向,Meetings,
20～21,文献紹介,Computer & Chemistry (Vol.15,No 4),
22 ～ 24,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.12,No7～8),
25,文献紹介,Journal of Computers-Aided Molecular Design (Vol.5,No4),
26,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.9,No 3),
27 ～ 28,文献紹介,Quantitative Structure Activity Relationships (Vol.10,No1～2),
29,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.10 No.1(1992.1.31)

1,特集：計算化学,計算化学：分子軌道の現在と将来」特集にあたって,小出昭夫
2～4,特集：計算化学,計算化学の現状と展望,平野恒夫
5～8,特集：計算化学,分子軌道法理論－電子相関理論－の現状と将来,平尾公彦
9～12,特集：計算化学,化学反応遷移状態のポテンシャル面と遷移状態分光,山下晃一
13～16,特集：計算化学,電子計算機からみた分子軌道法,長嶋雲兵
17～36,部会行事,第 14 回情報化学討論会 総括,
37,部会行事,第 15 回情報化学討論会 予告,
38,部会行事,日本化学会第 63 春季年会 プログラム抜粋,
39～41,関連行事,日－ソ コンピュータ化学シンポジウムについて,阿部英次
42,関連行事,「化学ソフトウェア学会」創立記念会,
43～44,海外動向,Meetings,
45,文献紹介,論文紹介「A Group Contribution Approach to Computer Aided Molecular Design」,十河信二
46～48,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.8,No1～4),
49,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.5,No5),
50,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.19, No4),
51 ～ 52,文献紹介,Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.10,No3～4),
53 ～ 55,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.12,No9～10,Vol.13,No.1),
56～57,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.31,No4),
58,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.68, No7～10),

CICSJ Bulletin Vol.10 No.2(1992.3.31)

1,部会行事,第 5 回情報化学夏期セミナー,
2,部会行事,化学におけるパソコン利用講習会,
3,部会記事,平成 4 年度情報化学部会役員,
4～36,部会記事,情報化学部会 部会員名簿,
37～40,ＣＣＳの紹介,ＯＭＬ(OXFORD MOLECULAR 社) ソフトウェアの概要,田島邦生
41～42,海外動向,Meetings,
43～44,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.32,No1),
45,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.9,No1),
46～47,文献紹介,Computers& Chemistry (Vol.16,No 1),

CICSJ Bulletin Vol.10 No.3(1992.5.31)

1～2,部会記事,情報化学部会の新しい問題,大澤映二
3～5,特集：情報化学教育,情報化学と情報科学,阿部英次
6～9,特集：情報化学教育,有機化学教育雑感,上田充
10～13,特集：情報化学教育,理学部化学科における情報処理教育,藤枝修子
14～17,特集：情報化学教育,化学教育における日本とアメリカのソフトウェア事情,吉村忠与志
18～21,特集：情報化学教育,内外ケモメトリックス教育事情,相島鐵郎
22～23,特集：情報化学教育,分子設計とコンピュータ,神谷和秀
24～26,特集：情報化学教育,呉羽化学における計算機化学の教育普及の現状,谷中幹郎・中馬寛
27～28,特集：情報化学教育,情報化学教育について想うこと,吉田元二
29,部会行事,第 15 回情報化学討論会,
30,部会行事,情報化学部会収支報告書,
31,部会行事,第 63 春季年会報告,
32,関連行事,第 20 回構造活性相関シンポジウム,
33,関連行事,Third International Conference on Chemical Structure,
34～36,記事,著作権とデータベース,藤原譲
37～38,海外動向,Meetings,
39,文献紹介,Computers& Chemistry (Vol.16,No1),
40,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.9,No2～3),
41,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.32,No3～4),

42,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.68, №12～69,№3),

CICSJ Bulletin Vol.10 No.4(1992.7.31)

1～5,特集：オンライン検索システムの最近の動向,JICST化合物辞書とJOIS-Ⅲとの結合,荒木啓介

6～9,特集：オンライン検索システムの最近の動向,Dialog 情報検索システムの最近の動向,上森まり子

10～15,特集：オンライン検索システムの最近の動向,STNの特徴－データベースの統合利用,原修

16,部会記事,第2回情報化学部会講習会,

17,部会記事,計算化学講演会,

18～19,部会記事,日本化学会第64秋季年会プログラム抜粋,

20,部会記事,情報化学部会活動報告書（役員会・常任幹事会）,

21,関連行事,1993年情報学シンポジウム,

22,関連行事,バイルシュタインとデータベース,

23,掲示板,CHEMICS研究会,

24～25,海外動向,Meetings,

26～32,CCS 紹介,コンピュータケミストリーシステム一覧(H4.5.22 化学工業日報から転載),

33,文献紹介,書評「Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry」,花井荘輔

34,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.9,№4),

34,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.69, №5),

35,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.32,№5～6),

36,文献紹介,Computers& Chemistry (Vol.16,№2),

CICSJ Bulletin Vol.10 No.5(1992.9.30)

2～5,特集：超並列処理と化学への応用,ユーザからみた超並列計算機,小柳義夫

6～9,特集：超並列処理と化学への応用,化学における超並列処理の可能性,柏木浩

10～14,特集：超並列処理と化学への応用,コネクション・マシンCM-5,山田實

15～18,特集：超並列処理と化学への応用,高並列コンピュータAP1000,白石博

19～22,特集：超並列処理と化学への応用,高並列コンピュータAP1000(2)分子動力計算プログラムAMBERの並列処理,佐藤弘幸

23～26,部会行事,第15回情報化学討論会プログラム,

27～30,関連行事,第20回構造活性相関シンポジウムプログラム,

30～31,関連行事,化学ソフトウェア学会'92研究討論会,

32～36,海外動向,米国計算機化学情報見て歩き,田中一雄

37,海外動向,Meetings,

38～41,CCS 紹介,OML（OXFORD MOLECULAR社）ソフトウェアの紹介,寺前正一・桜井隆史

42～44,CCS 紹介,BIOSYM社"Polimer"の紹介,柏原誠一

45～50,文献紹介,Journal of Computational Chemistry (Vol.13,№2～7),

51,文献紹介,Computers& Chemistry (Vol.16,№3),

52,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.69, №6～7),

52,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.10, №1～2),

CICSJ Bulletin Vol.10 No.6(1992.11.30)

2,特集：情報化学のフロンティア,特集にあたって,編集幹事

3～7,特集：情報化学のフロンティア,化学CAIの新しい動き,吉村忠与志

8～11,特集：情報化学のフロンティア,ケモメトリックス・計測の自動化の進歩,山田明文

12～15,特集：情報化学のフロンティア,情報のセキュリティ,名和小太郎

16～19,特集：情報化学のフロンティア,生体関連物質に関する情報化学の諸問題－ﾀﾝﾊﾟｸ質・核酸研究とﾆｭｰﾗﾙﾈｯﾄﾜｰｸ,中山伸一

20～23,特集：情報化学のフロンティア,バッキーチューブにおける金属的物性発見と電子状態,田中一義

24～27,特集：情報化学のフロンティア,プラズマCVDにおける分子設計,佐藤浩太

28～31,特集：情報化学のフロンティア,昆虫フェロモンの分子設計,島崎和子

32～35,特集：情報化学のフロンティア,分子動力学法の基礎と最近の話題,三上益弘

36,部会行事,第5回情報化学夏期セミナー報告,中野英彦

37,部会行事,第4回ケモメトリックスワークショップ,

38,部会記事,開かれた情報化学部会へ,宮下芳勝

39～40,部会記事,情報化学部会ワークショップ主催申請要項・開催申請書,

41～54,CCS 紹介,MOL-MOLIS,CRYSの概要,佐野均

45～52,CCS 紹介,コンピュータケミストリーシステム一覧(H4.10.22.23 化学工業日報から転載),

53,海外動向,Meetings,

54～55,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.0,№1～4,Vol.11,№1～3),

56,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.69, №8),

56～58,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.32, July/Aug, Sept/Oct),

CICSJ Bulletin Vol.11 No.1(1993.1.31)

2,特集：ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを利用したﾄﾞﾗｯｸﾞﾃﾞｻﾞｲﾝ-研究の現場から,特集にあたって,編集幹事

3～5,特集：ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを利用したﾄﾞﾗｯｸﾞﾃﾞｻﾞｲﾝ-研究の現場から,構造化学とドラッグデザイン,秋本利夫

6～9,特集：ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを利用したﾄﾞﾗｯｸﾞﾃﾞｻﾞｲﾝ-研究の現場から,Pharmacophoreの探索に基づく薬物設計,小貫慶昭

10～12,特集：ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを利用したﾄﾞﾗｯｸﾞﾃﾞｻﾞｲﾝ-研究の現場から,コンピュータを利用したドラッグデザイン－研究の現場から,片倉晋一

13～16,特集：ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを利用したﾄﾞﾗｯｸﾞﾃﾞｻﾞｲﾝ-研究の現場から,コンピュータを利用したドラッグデザイン－研究の現場から,多田幸雄

17～19,特集：ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを利用したﾄﾞﾗｯｸﾞﾃﾞｻﾞｲﾝ-研究の現場から,3Dデータベースの状況,時実象一

20～23,特集：ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを利用したﾄﾞﾗｯｸﾞﾃﾞｻﾞｲﾝ-研究の現場から,コンピュータを利用したドラッグデザイン－研究の現場からの雑感,張ヶ谷泰二

24～26,特集：ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを利用したﾄﾞﾗｯｸﾞﾃﾞｻﾞｲﾝ-研究の現場から,ドラッグデザインのためのコンピュータ利用－研究の現場からの雑感,藤原巌

27～36,部会行事,第 15 回情報化学部会討論会　報告,

37～38,部会行事,第 3 回ケモメトリックスワークショップ　報告,高木達也

39～41,部会行事,第 2 回情報化学部会講習会－化学者のためのパーソナルコンピュータ利用講習会　報告,張ヶ谷泰二

42,部会行事,第 3 回情報化学部会講習会－パーソナルコンピュータを利用した文献整理講習会　案内,

43,関連行事,実践パソコン分子科学計算講習会,

44～47,記事,UNIX は本当に難しいものだろうか,小出昭夫

48,海外動向,Meetings,

49,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.10, No3～4),

50,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.69, No9),

50 ～ 52, 文 献 紹 介 ,Quantitative Structure Relationships (Vol.11,No1～4),

53 ～ 56, 文 献 紹 介 ,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.13,No8～10,Vol.14,No.1),

57～58,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.32,Nov./Dec.),

58, 文 献 紹 介 ,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.11,No4),

59～,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.11 No.2(1993.3.31)

2,部会行事,第 16 回情報化学討論会,

3,部会行事,第 3 回情報化学部会講習会－パーソナルコンピュータを利用した文献整理講習会　案内,

4,部会行事,計算化学・情報化学サマーセミナー　案内,

5～37,部会記事,情報化学部会　部会員名簿,

38,関連行事,第 21 回構造活性相関シンポジウム,

39～42,記事,データベース作成における機械翻訳の利用,佐藤雅之

43～50,記事,日本特許情報機構の特許情報サービスについて,大山勝弘

51～53,記事,日本の研究者は CCS で困っている？,黒坂厚

54,掲示板,ケモメトリックス関連ソフトウェアの利用状況のアンケートと執筆協力のお願い,

55,掲示板,CHEMICS 研究会「第 2 回特別講演会」のお知らせ,

56,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.6,No6),

57 ～ 58, 文 献 紹 介 ,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.14,No2～3),

59～60,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.33,Jan./Feb.),

CICSJ Bulletin Vol.11 No.3(1993.5.31)

2,特集：ケモメトリックス,ワークショップの報告,相島鐵郎・藤枝修子

3～4,特集：ケモメトリックス,測定値の不確かさ Fuzzy 回帰法による取扱と定量分析への応用,北森武彦

5～8,特集：ケモメトリックス,たばことケモメトリックス,榊武彦

9～13,特集：ケモメトリックス,ニューラルネットワーク事始め,清水昇市

14～17,特集：ケモメトリックス,FT-NIR によるパターン認識手法と製造現場におけるその利用,桜井香織

18～22,特集：ケモメトリックス,FT-IR へのケモメトリックスの応用,新見栄

23～26,特集：ケモメトリックス,C-13 NMR 化学シフトデータの PLS 解析,石山純一

27～31,特集：ケモメトリックス,Novel Kalman Filtering Techniques in Chemometrics,Zhiliang Li

32,部会行事,第 16 回情報化学部会討論会　案内,

33,部会行事,計算化学・情報化学サマーセミナー　案内,

34,部会行事,情報化学部会ワークショップ：第一線若手研究者によるコンピュータケミストリー活用事例　案内,

35～37,部会記事,平成 5 年度情報化学部会への課題,大澤映二

38,部会記事,情報化学部会収支報告書,

39,年会記事,日本化学会第 65 春季年会(東京)記事,

40～43,年会記事,化学物質と特許の現状にまつわる諸問題,植田賢三

44,関連行事,第 21 回構造活性相関シンポジウム,

45～53,記事,機械翻訳入門,石塚英弘

54～62,記事,研究開発におけるコンピュータ化学の活用,石田嘉明

63,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.70, No1～2),

64,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.33,March/April),

65,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.11 No.4(1993.8.31)

2～4,特集：蛋白工学とコンピュータ,蛋白質立体構造の理論計算の現状と展望,郷信宏

5～9,特集：蛋白工学とコンピュータ,ペプチドの立体構造シミュレーション－徐冷モンテカルロ法による構造予測,岡本祐幸

10～13,特集：蛋白工学とコンピュータ,タンパク質分子シミュレーション（分子動力学法）の応用－分子動力学計算を用いたタンパク質構造と機能の研究,山登一郎・古明地勇人

14～17,特集：蛋白工学とコンピュータ,蛋白質分子シミュレーションの進歩,斉藤稔

18～21,特集：蛋白工学とコンピュータ,蛋白質のデータ・知識ベースによる機能予測,中井謙太

22～24,特集：蛋白工学とコンピュータ,相同配列比較による構造機能解析,藤博幸

25～28,特集：蛋白工学とコンピュータ,蛋白質のデータベースと立体構造予測,西川建

29～32,特集：蛋白工学とコンピュータ,蛋白質のＸ線結晶構造解析,三木邦夫

33～36,特集：蛋白工学とコンピュータ,NMR を用いたタンパク質の立体構造解析,嶋田一夫

37～39,特集：蛋白工学とコンピュータ,蛋白質のモデリングと設計,谷村隆次・木寺詔紀・中村春木

40～45,特集：蛋白工学とコンピュータ,蛋白工学におけるコンピュータ利用,八尾徹

46～48,トピックス,第 5 回日本蛋白工学会年会報告,北尾彰朗

49～51,トピックス,INPEC'93 の話題,須貝潤一

52～53,部会行事,第 3 回情報化学部会講習会　報告,張

ケ谷泰二
54,部会行事,第４回情報化学部会講習会　案内,
55,部会行事,第５回情報化学部会講習会　案内,
55,部会行事,講習会「研究室で実現できる最新の化学計算」,
57～58,読者の広場,部会長の「提案」に関して,花井荘輔
59,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.70, No3/5),
59,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.11, No1),
60～61,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.33,May/June),
62～63,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.13,No1～2),
64 ～ 67, 文 献 紹 介 ,Journal of Computational Chemistry (Vol.14,No4～7),
68, 文 献 紹 介 ,Quantitative Structure Relationships (Vol.12,No1～2),

CICSJ Bulletin Vol.11 No.5(1993.9.30)

2～10,特集：ニューラルネットワーク,Applications of Computational Neural Network in Chemistry,Peter C.Jurs
11～14,特集：ニューラルネットワーク,ホップフィールドネットワークを用いたタンパク質の高次構造予測,中山伸一・吉田政幸
15～18,特集：ニューラルネットワーク,Hopfield アルゴリズムによる蛋白質の構造予測,吉沢強・安川民男
19～22,特集：ニューラルネットワーク,ニューラルネットワークの分析化学への応用,田辺和俊
23～26,特集：ニューラルネットワーク,QSAR を指向したニューラルネットワークシフト検定法の応用と予測上の向上,高木達也
27～30,特集：ニューラルネットワーク,ニューラルネットワークの特質を医学品開発へ応用する,市川紘
31～34,特集：ニューラルネットワーク,バックプロパケーションのネットワーク構造から情報を読む,湯田浩太郎
35～38,特集：ニューラルネットワーク,触媒設計とニューラルネットワーク－触媒の性能予測への応用,服部忠
39～43,特集：ニューラルネットワーク,ニューラルネットワークと PLS 法,宮下芳勝
44～47,部会行事,第 16 回情報化学討論会　プログラム,
48～49,部会行事,計算化学・情報化学サマーセミナー参加　報告,山中計
50～52,部会行事,第 4 回情報化学部会講習会　報告,張ケ谷泰二
53～55,関連行事,第 21 回構造活性相関シンポジウムプログラム,
56～58,関連行事,化学ソフトウェア学会'93 研究討論会プログラム,
59,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.70, No6～7),
59,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.10, No11～2),
60～61,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.33,July/Aug),
62～63,文献紹介,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.13,No3/4, No1),
64 ～ 65, 文 献 紹 介 ,Journal of Computational Chemistry (Vol.14,No8～9),
66,文献紹介,Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.7,No3),
67,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.11 No.6(1993.11.30)

2～4,特集：情報化学教育(2),計算化学教育雑感,阿河喜一郎
5～9,特集：情報化学教育(3),情報化学教育の一断面,荒木啓介
10～13,特集：情報化学教育(4),生物・化学のための情報教育－九工大・生化システムのケース,柏木浩
14～16,特集：情報化学教育(5),情報化学教育雑感,上森まり子
17～19,特集：情報化学教育(6),情報処理教育、大学と企業,小出昭夫
20～22,特集：情報化学教育(7),日本化薬における計算(機)化学の教育普及活動事例,古後義也
23～24,特集：情報化学教育(8),情報化学教育と部会改称問題,藤田眞作
25～28,特集：情報化学教育(9),情報化学教育の必要性,町田勝之輔
29～32,特集：情報化学教育(10),「情報化学教育」の抱える問題,山崎昶
33～34,特集：情報化学教育(11),情報化学と情報科学(その 2),山田文明
35,部会行事,第 5 回ケモメトリックスワークショップ「メトリックス集合」シンポジウム　案内,
36,年会記事,日本化学会第 66 秋季年会　報告,宮下芳勝
37～39,記事,臨床試験に於けるデータ特性,市川宏司
40,掲示板,「CHEMICS 研究会」会員募集のお知らせ,
41,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.70, No8～No9),
42, 文 献 紹 介 ,Journal of Mathematical Chemistry (Vol.0,No14,V,No2),
43～44,文献紹介,Computer& Chemistry (Vol.17, No 2～3),
45,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.33,Sept./Oct.),
46, 文 献 紹 介 ,Proceedings of Montreux 1993 Chemical Information Conference,

CICSJ Bulletin Vol.12 No.1(1994.1.31)

2,特集：コンピュータを利用したドラッグデザイン,特集にあたって,編集幹事
3～6,特集：コンピュータを利用したドラッグデザイン,Where are we going to? A View point of a CADD scientist,大田雅照
7～10,特集：コンピュータを利用したドラッグデザイン,リードジェネレーションを目的とする新しい計算機手法,西端芳彦
11～14,特集：コンピュータを利用したドラッグデザイン,PLS 法とニューラルネットワーク法による QSAR モデリング,長谷川清
15～18,特集：コンピュータを利用したドラッグデザイン,CoMFA 法における統計学的基礎－PLS とその周辺技術,冨永幸雄
19～22,特集：コンピュータを利用したドラッグデザイン,CoMFA 法の実用性と問題点,西村民樹

23～26,特集：コンピュータを利用したドラッグデザイン,コンピュータによるドラッグデザイン：新しい課題は何か,神沼二眞

27～36,部会行事,第16回情報化学討論会　報告,

37～38,部会行事,コンピュータ薬物設計についての1日講演会,板井昭子

39～45,記事,将来の産業基盤技術としてのコンピュータケミストリー-新化学発展協会での調査研究を通じて-,荒井康全

46,文献紹介,新刊紹介:Neural Networks for Chemists,田辺和俊

47,文献紹介,Journal of Chemical Education (Vol.70,№10),

47,文献紹介,Computers& Chemistry (Vol.17,№4),

48～49,文献紹介,Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol.33,Nov./Dec.),

49,文献紹介,Journal of Molacular Graphics (Vol.11,№3～4),

50～53,文献紹介,Journal of Computatuinal Chemistry (Vol.14,№10～12),

53,文献紹介,Quantitative Structure Activity Relationships,

54,文献紹介,Perspectives in Drug Discovery and Design (Vol.1,№1),

CICSJ Bulletin Vol.12 No.2(1994.3.31)

2～3,部会行事,第17回情報化学討論会　案内,

4,部会行事,情報化学部会ワークショップ№10:第6回ケモメトリックスワークショップ　案内,

5～40,部会記事,情報化学部会　部会員名簿,

41～43,部会記事,情報化学部会　アンケート,

44,関連記事,第22回構造活性相関シンポジウム　案内,

45,関連記事,CHEMICS 研究会第3回特別講演会　案内,

46,関連記事,講演会　ドイツの科学・技術情報活動　案内,

47～48,記事,「コンピュータケミストリー」を執筆して,吉田元二

CICSJ Bulletin Vol.12 No.3(1994.5.31)

2～6,特集：知的財産権,知的財産権特集にあたって-学術的情報と著作権制度の調和と不調和-,名和小太郎

7～10,特集：知的財産権,データベースと著作権,千原秀昭

11～15,特集：知的財産権,ファクトデータベース,小野寺夏生

16～17,特集：知的財産権,コンピュータソフトとインターフェース,椙山敬士

18～23,特集：知的財産権,マルチメディアの著作権による保護,松田政行

24～27,特集：知的財産権,電子出版と著作権,合庭惇

28～31,特集：知的財産権,ソフトウェア開発と共有にうついての代替的視点：GNU の考え方について,土屋俊

32～35,特集：知的財産権,複写権－日本複写権センターの発足によせて,神森大彦

36～38,部会記事,情報化学部会長になって振り返る4半世紀,細矢治夫

39～40,部会記事,第17回情報化学論会　案内,

41,部会記事,第6回情報化学講習会-ひらけゆく巨大生体分子計算の最先端　案内,

42,部会記事,ワークショップ：コンピュータによる有機合成経路探索　案内,

43～44,関連記事,第22回構造活性相関シンポジウム案内,

45～47,関連記事,化学ソフトウェア学会年会「'94 研究討論会」　案内,

48,関連記事,第5回計算化学サマーセミナー　案内,

49,関連記事,SUN ワークステーションを用いたMOPAC 実習,

50,文献紹介,新刊紹介：化学者・生化学者のためのLATEX-パソコンによる論文作成の手引き,

CICSJ Bulletin Vol.12 No.4(1994.7.31)

2～4,特集：コンピュータによる有機合成経路探索,「コンピュータによる有機合成経路探索」の特集にあたって,船津公人

5～8,特集：コンピュータによる有機合成経路探索,SECS-知識ベースの構築について,谷中幹郎

9～12,特集：コンピュータによる有機合成経路探索,FORTUNITS-虚遷移構造による反応データベースの開発,藤田眞作

13～16,特集：コンピュータによる有機合成経路探索,有機合成ルートデザインシステム SYNSUP-MP,高畠哲彦

17～20,特集：コンピュータによる有機合成経路探索,REACCS-図書室に出かける前に,岸本隆太郎

21～24,特集：コンピュータによる有機合成経路探索,化学反応データベース SYNLIB,山口裕樹

25～29,特集：コンピュータによる有機合成経路探索,有機合成設計支援システムの CASINO について,田辺和俊・内丸忠文

30～33,特集：コンピュータによる有機合成経路探索,有機合成設計システム AIPHOS,船津公人

34,部会記事,第17回情報化学討論会　案内,

35,部会記事,第6回情報化学講習会-ひらけゆく巨大生体分子計算の最先端　案内,

36,部会記事,ワークショップ：コンピュータによる有機合成経路探索　案内,

37,部会記事,第6回ケモメトリックスワークショップ報告,相島鐵郎・藤枝修子

38～39,部会記事,情報化学部会ワークショップ　主催申請要項・開催申請書,

40,部会記事,日本化学会情報化学部会会員勧誘のお願い,

CICSJ Bulletin Vol.12 No.5(1994.9.30)

2～5,特集：メトリックス集合,サイコメトリックス多変量データ解析,宮埜壽夫

6～9,特集：メトリックス集合,衛生による地球環境の解析-地球表面の情報把握とその分析-,宇都宮陽二郎

10～11,特集：メトリックス集合,マルチメディア情報システムと感情情報処理,加藤俊一

12,特集：メトリックス集合,ケモメトリックス：化学データと情報抽出,相島鐵郎

13～16,部会行事,アンケート集計,

17,部会行事,日本化学会への入会案内,

18,部会行事,第6回情報化学講習会-ひらけゆく巨大生体分子計算の最先端-,

19～22,部会行事,情報化学講習会-ひらけゆく巨大生体分子計算の最先端-について,米田茂隆

23～29,部会行事,第17回情報化学討論会・第22回構

造活性相関シンポジウム　プログラム,
30,関連記事,1995 環太平洋国際化学会議(PACIFICHEM'95)講演募集のお知らせ,

CICSJ Bulletin Vol.12 No.6(1994.11.30)

2～6,特集：マルチメディア,マルチメディアの目指すもの,藤原譲
7～9,特集：マルチメディア,マルチメディアで何ができるか,小出昭夫
10～14,特集：マルチメディア,マルチメディア技術が拓く新しい研究開発環境,石塚英弘
15～18,特集：マルチメディア,化学教育とマルチメディア,吉村忠与志
19～22,特集：マルチメディア,メディア技術による化学教育の新展開－演示実験のビデオ作成によるマイクロティーチングの試み,松村竹子
23～27,記事,九州・山口地区における CCS の現状とその方向性,堀憲次
28～31,記事,分子動力学法の課題と最近の発展,三上益弘
32～33,海外動向,米国化学会秋季年会に参加して,田辺和俊
34～35,海外動向,藤田　稔夫先生のアメリカ化学会賞受賞と受賞セッション,中馬寛
36～37,関連行事,1995 情報学シンポジウム案内,
38,部会記事,情報化学部会ワークショップ　主催申請要項・開催申請書,

CICSJ Bulletin Vol.13 No.1(1995.1.31)

2,特集：ネットワーク,ネットワーク特集を企画するにあたって,高木達也
3～6,特集：ネットワーク,省際ネットワーク,神沼二眞
7～10,特集：ネットワーク,ネットワークと分子生物学,安永照雄
11～14,特集：ネットワーク,インターネットと化学情報,豊田二郎
15～19,特集：ネットワーク,インターネットのアドレス体系,中山雅哉
20～23,特集：ネットワーク,日本ゲノムデータベースネットワーク,宮澤三造
24～25,部会記事,第 17 回情報化学討論会を終えて,板井昭子
26～27,部会記事,第 69 春期年会（抜粋）,
28,掲示板,情報化学関連テキスト残部のお知らせ,

CICSJ Bulletin Vol.13 No.2(1995.3.31)

2,部会行事,情報化学講習会「並列計算」,
3～4,部会行事,副部会長退任にあたって,吉田元二
5,部会記事,情報化学部会役員一覧,
6,部会記事,ワークショップ「コンピュータによる有機合成経路探索」を終えて,船津公人
7～42,部会記事,情報化学部会会員名簿,
43,関連記事,AFMC 国際医薬化学シンポジウム,
44～47,記事,ワークステーションクラスタによる分散並列処理,長嶋雲兵・日向寺祥子・細矢治夫・関口智嗣・佐藤三久
48,掲示板,Chemical Exchange Format について,広田勇二

CICSJ Bulletin Vol.13 No.3(1995.5.31)

1～2,特集：触媒設計,特集「触媒設計」にあたって,宮田壽
3～6,特集：触媒設計,ニューラルネットワークを利用した触媒性能支配因子推定の試み,鬼頭繁治・服部忠
7～10,特集：触媒設計,分子計算の現状と展望,小林久芳
11～14,特集：触媒設計,ラボラトリーオートメーションおけ LAN/EWS の活用,石垣慎也
15～18,特集：触媒設計,分子グラフィックス　,久保百司・山田谷導幸・三浦隆治・姫井浩明・宮本明
19～22,特集：触媒設計,オレフィン重合触媒の分子設計,栗林浩
23～27,特集：触媒設計,反応経路の分析と設計,小林正義・ BorisGolman
28～31,特集：触媒設計,分子軌道法による有機光触媒の解析・設計,和田雄二・柳田祥三
32～34,部会記事,情報化学部会は、今・・・・・・,細矢治夫
35,部会行事,第 18 回情報化学部会討論会,
36,部会行事,ワークショップ「コンピュータケミストリーの課題と展望」,
37,関連行事,第 23 回構造活性相関シンポジウム,
38,関連行事,SUN4(EWS)を用いた新 MOPAC93 実習,
39～42,記事,ニューロコンピュータによるポリマーの識別,田辺和俊
43～44,資料,日本化学会情報化学部会内規,

CICSJ Bulletin Vol.13 No.4(1995.8.31)

1,特集：スペクトルデータベース,スペクトルデータベース特集を組むに当たって,阿部英次
2～5,特集：スペクトルデータベース,物質研におけるスペクトルデータベース活動の現状と問題点,早水紀久子
6～8,特集：スペクトルデータベース,企業におけるスペクトルデータベース,増井秀行
9～10,特集：スペクトルデータベース,プロトン NMR スペクトルデータベースの構築,阿部英次
11～14,特集：スペクトルデータベース,WWW 上でのスペクトルデータベース検索,奥山徹
15～16,部会記事,第 18 回情報化学部会討論会,
17,部会記事,第 6 回ケモメトリックスワークショップ,
18,関連行事,化学ソフトウェア学会年会「'95 研究討論会」,
19～20,関連行事,第 23 回構造活性相関シンポジウム,
21,関連行事,第 17 回工業界面化学研究会,
22 ～ 23,関連行事,環太平洋国際化学会議(PACIFICHEM'95) : Symposium Frontiers Mathematical Chemistry,
24,関連行事,環太平洋国際化学会議(PACIFICHEM'95) : Symposium On Computer-aided Prediction Thechniques in Chemistry,
25,関連行事,環太平洋国際化学会議(PACIFICHEM'95) : Symposium Artifical Intelligence in Organic and Medicinal Chemistry,
26,関連行事,第 4 回 CHEMICAL STRUCTURES 国際会議,
27～29,記事,阪神大震災：コンピュータネットワークの受けた被害について,有國尚
30,訃報,開かれた情報化学部会へ-部会編集幹事としての宮下氏を偲ぶ-,四居靖彦
31～32,部会員広場,名簿にローマ字を,木村美実子
33,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.13 No.5(1995.9.30)

1～4,特集：グラフ理論、組合せ理論,グラフ理論、組合せ理論の招待,細矢治夫

5～8,特集：グラフ理論、組合せ理論,数え上げの新方法(USCI法)の開発と化学への応用,藤田眞作

9～12,特集：グラフ理論、組合せ理論,芳香族分子の安定性と磁性の統一的解釈,相原惇一

13～16,特集：グラフ理論、組合せ理論,ゼオライト構造のトポロジー,佐藤満雄

17,特集：グラフ理論、組合せ理論,Combinatorial Chemical Library について,関谷哲雄

CICSJ Bulletin Vol.13 No.6(1995.11.30)

1～4,特集：実験化学の視点から見た情報化学,情報化学/計算機化学は実験化学を支援できたか,高木達也

5～8,特集：実験化学の視点から見た情報化学,実験化学の視点からみた情報化学,小比賀聡

9～12,特集：実験化学の視点から見た情報化学,創薬研究に計算機化学は役立つか？,田中明人

13～16,特集：実験化学の視点から見た情報化学,一企業研究者からみた実験化学と情報化学の接点,三戸邦郎

17～20,特集：実験化学の視点から見た情報化学,分子構造から発癌の秘密をさぐる-化学発癌とホルモン発癌のはざま-,児玉昌彦

21～24,特集：実験化学の視点から見た情報化学,溶液反応論の視点からながめた計算機化学,近藤泰彦

25,部会行事,第 7 回ケモメトリックスワークショップ報告,相島鐵郎

26,関連記事,量子有機化学研究会の発足の経緯,市川紘

27,関連記事,第 1 回量子有機化学シンポジウム,

28,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.14 No.1(1996.2.29)

1,特集：データベース構築の現状と課題,ファクト・データベースのすすめ,千原秀明

2～5,特集：データベース構築の現状と課題,量子化学文献データベース,山辺信一

6～8,特集：データベース構築の現状と課題,EMIL データベースの特色と課題,藤田稔夫

9～11,特集：データベース構築の現状と課題,社内化合物データベースのローカル化,小沢啓一郎・保田敏雅・藤田真作

12～15,特集：データベース構築の現状と課題,ファクト・データベースから高機能データベースへ,小野寺夏生

16,部会行事,第 18 回情報化学討論会を終えて,阿部英次

表紙裏,部会行事,情報化学部会総会,

17～18,関連行事,第 70 春季年会プログラム(抜粋),

19～20,部会記事,情報化学部会ポスター賞の紹介,米田茂隆

22～23,部会記事,情報化学部会ワークショップ　主催申請要項,

21,関連記事,オンライン検索関係書籍の執筆の難しさ,時実象一

24,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.14 No.2(1996.3.31)

1～5,特集：World Wide Web と情報化学,World Wide Web と情報化学～日本化学会情報化学部会における WWW,Welcom Page の試験的運用を中心に～,高木達也

6～8,特集：World Wide Web と情報化学,日本化学会の WWW ホームページ,伊藤卓

9～11,特集：World Wide Web と情報化学,化学ソフトウェア学会におけるインターネットへの取り組み,中野英彦

12,部会記事,バトンタッチ,細矢治夫

12,部会記事,平成 8 年度情報化学部会役員一覧,

13～15,関連記事,計算機化学の国家プロジェクトをめざして,田辺和俊・吉田元二

表 2,部会行事,第 19 回情報化学討論会(予告),

16～17,関連記事,第 71 秋季年会講演募集(抄),

18,関連記事,化学ソフトウェア学会年会,

表 3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.14 No.3(1996.5.31)

1,部会記事,本年度の部会活動について,吉田元二

4,部会記事,平成 7 年度事業報告、平成 8 年度事業計画等,

8,部会記事,CICSJ Bulletin Vol.14№2 クイズ当選者のお知らせ,

2～3,部会行事,第 19 回情報化学討論会,

5～6,部会行事,第 3 回計算化学セミナー,

7,部会行事,第 8 回ケモメトリックスワークショップ,

表 3,編集後記,表 3,

CICSJ Bulletin Vol.14 No.4(1996.8.31)

1,特集：第 19 回情報化学討論会,巻頭言　第 19 回情報化学討論会の開催にあたって,吉田元二

2～5,特集：第 20 回情報化学討論会,第 19 回情報化学討論会　プログラム,

6～24,特集：第 21 回情報化学討論会,第 19 回情報化学討論会　アブストラクト,

25～27,特集：第 22 回情報化学討論会,特別講演：自然界・生物界における「Complex Dynamics」の役割を探る,奈良重敏

28～30,特集：第 23 回情報化学討論会,第 24 回構造活性相関シンポジウム　プログラム,

31,部会記事,第 3 回計算化学セミナーを終えて,松岡俊和

表 2,部会行事,情報化学部会　総会のお知らせ,

32,部会行事,第 3 回 Combinatorial Chemistry 研究会,

33,関連行事,CAC フォーラム公開セミナー－情報化学の最前線－,

34,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.14 No.5(1996.10.31)

1,特集：化学情報の原点：化学物質の認識と記述,特集を組むにあたって,木村美実子

2～5,特集：化学情報の原点：化学物質の認識と記述,物質の同定と表現の諸問題,花井荘輔

6～9,特集：化学情報の原点：化学物質の認識と記述,書く人と読む人のための化合物－情報検索に備えて－,畑一夫

10～15,特集：化学情報の原点：化学物質の認識と記述,SDBS（スペクトルデータベースシステム)における化合物の考え方,早水紀久子

16～19,特集：化学情報の原点：化学物質の認識と記述,CA データベースにおける化学物質の認識,井上直巳

20～21,特集：化学情報の原点：化学物質の認識と記述,Internet 時代の有機化合物の表現法雑感,阿部英次

22,特集：化学情報の原点：化学物質の認識と記述,WWW上の化学関連サイト,嶋裕

表2,部会行事,情報化学部会　総会のお知らせ,

表3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.14 No.6(1996.12.31)

2,特集：先導研究「計算機材料設計」,先導研究「計算機材料設計」の目指すもの,平石次郎

4,特集：先導研究「計算機材料設計」,Ab intio ケミストリー,山下晃一

1,部会記事,総会報告,

10～11,部会記事,第 19 回情報化学討論会を終えて,藤原英明

12～13,部会記事,第 19 回情報化学討論会ポスター賞について,高木達也

14,部会記事,第 8 回ケモメトリックス・ワークショップ,相島鐵郎

6～9,関連記事,インターネット上の電子学会,米谷慎

表2&15,部会行事,第 8 回情報化学講習会　インターネットにおける情報発信と情報収集,

18,部会行事,第 1 回分析化学のためのケモメトリックス討論会,

16,関連行事,Combinatorial Chemistry&High Throghput Screening -Theory to Practice-,

表3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.15 No.1(1997.2.28)

1,シクスジェイエッセイ,きのうのきょう,佐々木慎一

2～5,特集：情報化学と環境化学,化学物質のリスクアセスメント・システム,伊東嶽

6～9,特集：情報化学と環境化学,数理モデルによる環境中の化学物質の動態と暴露の評価,吉田喜久雄

16,部会記事,ワークショップ報告　最先端構造解析と情報化学,宮本明

10～11,関連記事,日本化学会第 72 春季年会プログラム(抜粋),

14～15,関連記事,「理論化学討論会」設立に向けて,

表2,部会行事,情報化学部会　総会,

12,部会行事,第 20 回情報化学討論会,

13,関連行事,第 25 回構造活性相関シンポジウム,

15,関連行事,1997 計算化学・理論化学討論会,

表3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.15 No.2(1997.4.30)

3～6,特集記事,生体高分子の解析における構造探索の新しいアプローチ,中村春木

7～10,特集記事,専用計算機を用いた生体高分子シミュレーションシステムの構築,古明地勇人

1～2,部会記事,情報化学部会総会、役員会の報告,

11～13,部会記事,情報化学部会総会 Web ページの1年,高木達也

14,部会記事,第 8 回情報化学講習会「インターネットにおける情報発信と情報収集」を終えて,中山伸一

15～17,部会記事,日本化学会、部会規定、部会規定内規、情報化学部会内規,

18,部会記事,編集委員会報告,

表2,部会行事,第 20 回情報化学討論会,

18,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.15 No.3(1997.6.30)

1,特集：情報化学教育,「情報化学教育」特集の序にかえて,阿部英次

2～5,特集：情報化学教育,企業の望む情報化学・コンピュータリテラシー教育,福島信子

6～9,特集：情報化学教育,物質工学科の情報処理概論の中に現れた情報化学,工藤喜弘

10～13,特集：情報化学教育,手探りの情報化学教育　群馬大学工学部化学系の例,佐藤満雄

14～17,特集：情報化学教育,生物・化学のための情報教育－九工大・生化システムのケース－その2,柏木浩

18～21,特集：情報化学教育,理学部化学科における計算機化学の教育,藤枝修子・鷹野景子・木下朋子・平野恒夫

22～25,特集：情報化学教育,化学情報教育の実際,時実象一

26～27,部会記事,第 1 回分析化学のためのケモメトリックス討論会を終えて,三井利幸

28,部会記事,第4回計算化学セミナー報告,染川賢一

29,部会記事,部会役員会報告,

29,部会記事,企画幹事より,

30,関連記事,アジア／太平洋地域における情報基盤整備に関する国際会議,

表3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.15 No.4(1997.8.31)

1～4,特集：第 20 回情報化学討論会,第 20 回情報化学討論会　プログラム,

5～22,特集：第 21 回情報化学討論会,第 20 回情報化学討論会　アブストラクト,

23～25,特集：第 22 回情報化学討論会,第 25 回構造活性相関シンポジウム　プログラム,

26～27,関連記事,日本化学会第 73 秋季年会プログラム(抜粋),

28～30,部会記事,投稿WWW上での構造検索手法,時実象一

31,部会記事,部会役員報告,

31,部会記事,7月部会員異動,

31,部会記事,平成9年度会員名簿訂正,

32,部会行事,第9回ケモメトリックスワークショップ,

表3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.15 No.5(1997.9.30)

1,特集：生体高分子の量子化学計算,量子化学計算の夢：「生体高分子の量子化学計算」特集の序にかえて,相田美砂子

2～4,特集：生体高分子の量子化学計算,タンパク質の全電子計算について,柏木浩

5～8,特集：生体高分子の量子化学計算,生体分子の軌道計算,高田俊和

9～12,特集：生体高分子の量子化学計算,高分子の電子状態計算に向けて,鮫島圭一郎

13～15,関連記事,化学ソフトウェア学会年会「'97 研究討論会」,

16,関連記事,第 163 回 CBI 研究講演会,

17,部会記事,部会役員会報告,

17,部会記事,8，9月部会員異動,

17,部会記事,平成9年度会員名簿訂正,

18,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.15 No.6(1997.12.10)

1 ～2,シクスジェイ・エッセイ,日本語の化学文献をinternetで送るには,米田幸夫

3～11,特集：ケモメトリックス,新しいモデリング・ツールとしてのKohonenネットワーク,船津公人

12～15,特集：ケモメトリックス,ケモメトリックスを用いた茶の品質評価-拡張カルマン・ニューロと近赤外吸光度と測色値の利用-,後藤正

16～19,特集：ケモメトリックス,分析化学における実験計画法の活用,岩崎浩一郎

20～23,特集：ケモメトリックス,反応熱分解による動物プランクトンの個体識別への主成分分析の適用,石田康行

24～27,特集：ケモメトリックス,主成分回帰分析、Pertial Least Squares Regression,主成分分析による定量分析結果の比較,三井利幸・肥田宗政

28～29,部会記事,第 20 回情報化学討論会を終えて,松岡俊和

30～31,部会記事,第 20 回情報化学討論会ポスター賞発表,

32,部会記事,部会役員会報告,

32,部会記事,10、11 月部会員異動,

33,部会行事,第 9 回情報化学講習会「21 世紀の研究開発と特許～情報発信と権利取得」,

34,部会行事,第 10 回情報化学講習会「生体分子シミュレーション～基礎から 21 世紀への展望まで」,

35,関連行事,先導研究シンポジウム　コンピュータケミストリーへの期待,

35,関連行事,1998 計算化学討論会,

36,関連行事,第 166 回　CBI 研究講演会　研究を支援する情報と計算基盤,

37,関連行事,第 167 回　CBI 研究講習会　大規模計算,

38,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.16 No.1(1998.2.10)

1,特集：バイオインフォーマティックス,バイオインフォーマティックスの進展-特集にあたって-,八尾徹

2～5,特集：バイオインフォーマティックス,進化するゲノムデータベース,高木利久

6～9,特集：バイオインフォーマティックス,ゲノム配列データにおける最近の進歩,中井謙太

10～14,特集：バイオインフォーマティックス,配列情報からタンパク質立体構造・機能へ,Mark B.Swindells・古谷利夫

15～19,特集：バイオインフォーマティックス,ゲノム情報から生命の設計図へ,坊農秀雅・金久實

20～27,特集：バイオインフォーマティックス,計算構造生物学とゲノム情報解析の融合-欧米の動向-,八尾徹

28～29,関連記事,日本化学会第 74 春季年会(1998)プログラム抜粋,

30,部会行事,第 2 回分析化学のためのケモメトリックス討論会,

表 2,部会記事,第 21 情報化学討論会のお知らせ,

表 2,部会記事,情報化学部会　総会のお知らせ,

31,部会記事,部会役員報告,

31,部会記事,12,1 月部会異動,

32,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.16 No.2(1998.4.20)

,特集：専用計算機,大規模科技術計算の夢：「専用計算機」特集の序にかえて,相田美砂子

2～5,特集：専用計算機,非経験的分子軌道計算専用システム MOE のソフトウェア,小原繁・村上和彰・長嶋雲兵・網崎孝志・田辺和俊・北尾修・北村一泰・高島一・宮川宣明・稲畑深三郎・山田想

6～12,特集：専用計算機,非経験的分子軌道計算専用システム MOE のハードウェア,村上和彰・小原繁・長嶋雲兵・網崎孝志・田辺和俊・北村一泰・高島一・宮川宣明・稲畑深三郎・山田想

13～16,特集：専用計算機,分子動力法への応力が可能な専用計算機 ITL-MD　One,高田亮

17,部会記事,副部会長就任にあたって,三戸邦郎

18,部会記事,平成 9 年度事業報告・平成 10 年度活動計画　等,

19,部会記事,第 9 回情報化学講習会「21 世紀の研究開発と特許～情報発言と権利取得」を終えて,高木達也

20,部会記事,第 10 回情報化学講習会「生体分子シミュレーション～基礎から 21 世紀の展望までを終えて」,高木達也

21,部会記事,第 9 回ケモメトリックス・ワークショップ開催報告,相島鐵郎

27,部会記事,部会役員会報告,

27,部会記事,2，3 月部会員異動,

28,部会記事,前号訂正,

表 2、22,部会行事,第 21 回情報化学討論会,

23,関連行事,第 26 回構造活性相関シンポジウム,

24,関連行事,第 170 回 CBI 研究講演会「医薬分子設計の新展開」,

25～26,関連行事,第 6 回 Combinatorial Chemistry 研究会　公開セミナー,

表 3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.16 No.3(1998.6.30)

,会員名簿（H10/6/22 現在）,,

CICSJ Bulletin Vol.16 No.4(1998.8.20)

1,特集：コンビナトリアルケミストリー,コンビナトリアルケミストリー　特集の序にかえて,有國尚

2～5,特集：コンビナトリアルケミストリー,Cmbinatorial Chemistry & High-Throughput Screening 最近のトピックス,井上佳久

6～7,特集：コンビナトリアルケミストリー,雑感：計算化学者からみた CC&HTS の取り組み,井口潔

8～11,特集：コンビナトリアルケミストリー,有機合成化学者の立場から見たコンビナトリアルケミストリー,深瀬浩一

12～17,特集：コンビナトリアルケミストリー,Unification of Bioinformatics, Combinatorial Chemistry and Chemoinformatics with a Structure Based Approach, K.Ramnarayan, D.Rideout, J.Wang, H.Zhu and E. Maggio

18～19,部会記事,「The Internet を利用した情報化学部会からのおしらせ」について～情報化学部会員の皆様へのお知らせ～,高木達也

20～21,部会記事,部会役員報告,

21～22,部会記事,4～7 月部会員異動,

22,部会記事,平成 10 年度会員名簿訂正,

表 2、23,部会行事,第 11 回情報化学講習会,

24～25,関連行事,第 7 回 Combinatorial Chemistry 研究会　公開セミナー,

26,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.16 No.5(1998.9.30)

1～5,特集：第 21 回情報化学討論会,特集：第 21 回情報化学討論会　プログラム,

6～25,特集：第 22 回情報化学討論会,特集：第 21 回情報化学討論会　発表の概要,
26,特集：第 23 回情報化学討論会,第 26 回構造活性相関シンポジウム　プログラム,
表 2,部会行事,情報化学部会総会のお知らせ,
表 3、29,部会行事,第 11 回情報化学講習会,
30,部会行事,第 10 回ケモメトリックス・ワークショップ,
31,部会記事,幹事会報告,
32,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.16 No.6(1998.11.30)

1,特集：ビブリオメトリックス,「ビブリオメトリックス特集」の序にかえて,小野寺夏生
2～6,特集：ビブリオメトリックス,ビブリオメトリックスをやってみませんか,小野寺夏生
7～10,特集：ビブリオメトリックス,図書館経営とビブリオメトリックス,岸田和明
11～16,特集：ビブリオメトリックス,引用分析によるリサーチ・オン・リサーチ,窪田輝蔵
17～20,特集：ビブリオメトリックス,特許解析で見る技術開発動向-引用分析を中心として-,富澤宏之
21～25,特集：ビブリオメトリックス,研究活動評価とビブリオメトリックス,根岸正光
26～27,部会記事,第 21 回情報化学討論会報告,米田茂隆
28,部会記事,第 11 回情報化学講習会報告,高田章
29,部会記事,部会員異動,
30,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.17 No.1(1999.2.15)

1～2,巻頭言,僕の 1999 年問題,細矢治夫
3,特集：巨大分子をめざしたソフトウェア,大規模科学技術計算の現在：「巨大分子をめざしたソフトウェア」特集の序にかえて,相田美砂子
4～8,特集：巨大分子をめざしたソフトウェア,Q-Chem:Quantum Chemistry Software for Large Systems,Peter M.W.Gill
9～12,特集：巨大分子をめざしたソフトウェア,大きな分子を精度よく計算できる ONIOM 法,松原世明
13～17,特集：巨大分子をめざしたソフトウェア,MOZYME の蛋白質科学への利用法を探る,櫻井実
18,部会記事,第 10 回ケモメトリックス・ワークショップ開催報告,相島鐵郎
21～22,部会記事,部会役員会報告,
23,部会記事,部会員異動,
表 2,部会行事,情報化学部会　総会のお知らせ,
19,部会行事,第 3 回分析化学のためのケモメトリックス討論会及び初心者のための分析化学に利用されるケモメトリックス講習会,
20,関連行事,日本化学会　第 76 春季年会(1999)プログラム抜粋,
24,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.17 No.2(1999.4.20)

1,巻頭言,アンケート,吉田元二
2～3,特集Ｐａｒｔ１：部会員からの声,情報化学ってどんな学問？,伊藤眞人
4～5,特集Ｐａｒｔ２：部会員からの声,情報化学・計算化学・理論化学,岩田末廣
6,特集Ｐａｒｔ３：部会員からの声,情報化学討論会をそまりあるものにしていただきたい,金谷重彦
7,特集Ｐａｒｔ４：部会員からの声,CICSJ アンケート結果を読んで-感想と要望-,河合隆
8,特集Ｐａｒｔ５：部会員からの声,情報化学部会の活性化のための提言,田辺和俊
9,特集Ｐａｒｔ６：部会員からの声,「情報化学」雑感,中馬寛
10,特集Ｐａｒｔ７：部会員からの声,Mosaic な情報化学部会,平尾義郎
11,特集Ｐａｒｔ８：部会員からの声,研究者とデータベース作成者の接点として,前田知子
12～17,特集Ｐａｒｔ２：情報化学部会活動に対するアンケート結果の報告,1．アンケート結果のまとめ,
18,特集Ｐａｒｔ３：情報化学部会活動に対するアンケート結果の報告,2．アンケート結果の分析,
18～19,特集Ｐａｒｔ４：情報化学部会活動に対するアンケート結果の報告,3．今後の活動に向けて,
20～21,特集Ｐａｒｔ５：情報化学部会活動に対するアンケート結果の報告,(参考)アンケート設問,
22～26,関連記事,Web における構造作図・検索ツール,時実象一
27,関連記事,Chemical Structure Association 会員募集,
表 2、28,部会行事,第 22 回情報化学討論会,
29,関連行事,第 27 回構造活性相関シンポジウム,
30,関連行事,構造活性相関講習会 99,
31,部会記事,平成 10 年度事業報告・平成 11 年度活動計画　等,
32,部会記事,部会役員報告,
32,部会記事,部会員異動,
表 3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.17 No.3(1999.7.10)

,会員名簿(H11.5.25 現在),,

CICSJ Bulletin Vol.17 No.4(1999.8.30)

1,特集：データマイニング,データマイニング特集を企画するにあたって,高木達也
2～8,特集：データマイニング,テータマイニング技術の現状,塩田千幸
9～14,特集：データマイニング,決定木学習：実用期を迎えたノンパラメトリック統計手法,金田重郎
15～20,特集：データマイニング,統計的データマイニング法の適用とその解釈,渡辺秀章・田崎武信
21～25,特集：データマイニング,化学構造を対象としたデータマイニング,岡田孝
26,部会記事,新任の挨拶,坂本直紀
27,部会記事,部会役員会報告,
28,部会記事,部会員異動,
29,部会行事,第 12 回情報化学講習会　参加のお誘い,
30,部会行事,第 11 回ケモメトリックス・ワークショップ,

CICSJ Bulletin Vol.17 No.5(1999.10.10)

1～5,特集：第 22 回情報化学討論会,第 22 回情報化学討論会　プログラム,
5～8,特集：第 23 回情報化学討論会,第 27 回構造活性相関シンポジウム　プログラム,
8,特集：第 24 回情報化学討論会,第 12 回情報化学講習会,
9～35,特集：第 25 回情報化学討論会,第 22 回情報化学

討論会　発表の概要,
表2,部会行事,情報化学討論会　特別企画のお知らせ,
表2,部会行事,情報化学部会総会のお知らせ,
36,部会記事,部会役員報告,
37,関連記事,5th International Conference on Chemical Structure,時実象一
38,関連行事,フォトニクス材料の分子設計に関する国際ワークショップ,
39,関連行事,先導研究シンポジウム　化学反応シミュレータ,
40,部会行事,第12回情報化学講習会　参加のお誘い,
表3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.17 No.6(1999.11.30)
1,特集：材料を探る,「材料を探る」を特集するに当たって,船津公人
2～5,特集：材料を探る,機能材料分野における高分子と計算科学,岡崎慶二
6～11,特集：材料を探る,物性推算法を利用した分離膜のシステム設計,山口猛央・王保国・中尾真一
12～17,特集：材料を探る,高分子データベースと物性予測,長坂匡介
18～22,特集：材料を探る,材料設計・開発とケモメトリックス,西村竜一
23～26,特集：材料を探る,粗視化分子動力学法の概要と応用,青柳岳司
27～30,特集：材料を探る,シミュレーションによる高分子の粘弾性予測,田崎弘恭
31～32,部会記事,第22回情報化学討論会の報告,工藤善弘
33,部会記事,第22回情報化学討論会　ポスター賞発表,
34,部会記事,第22回情報化学討論会特別企画ミキサー「化学における計算機利用の明日を考える」の報告,相田美砂子
35,部会記事,第12回情報化学講習会を終えて,高田章
36,部会記事,新任の挨拶,相馬融
37～38,部会記事,部会役員会報告,

CICSJ Bulletin Vol.18 No.1(2000.2.15)
1,追悼：佐々木　慎一先生,佐々木さんを悼む,米田幸夫
2,追悼：佐々木　慎一先生,佐々木　慎一先生を偲んで,千原秀昭
3,追悼：佐々木　慎一先生,初代部会長　佐々木　慎一さんを偲んで,吉田元二
4～5,追悼：佐々木　慎一先生,厳しく、優しかった佐々木慎一先生を偲ぶ,高山千代蔵
6～7,特集：続・材料をさぐる,「特集　続・材料をさぐる(触媒分野)」を企画するにあたって,久保百司
8～13,特集：続・材料をさぐる,新規触媒の発見手法～均一系オレフィン重合触媒を題材に,山崎輝昌
14～20,特集：続・材料をさぐる,クラスターモデルの光と陰,兵頭志明
21～27,特集：続・材料をさぐる,密度汎関数法プログラム、Dmol, TURBOMOL の利用経験：窒素酸化物の物性計算、及びチタノシリカライト－1触媒による過酸化水素水を用いた酸化反応機構検討,宗像弘明
28,部会記事,電子ジャーナル"Journal of Combinatorial Aided Chemistry"刊行のお知らせ,
29,部会記事,第11回ケモメトリックス・ワークショップ開催報告,相島鐵郎
30,部会記事,部会役員会報告,
31～33,関連行事,2000環太平洋国際会議(PSCIFICHEM2000 シンポジウムからの案内),
34,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.18 No.2(2000.4.20)
1,巻頭言,高度情報社会における情報化学部会,時田澄男
2～3,特集：21世紀に期待される情報化学,21世紀の情報化学に期待する,旭化成工業瀬田重敏
4,特集：22世紀に期待される情報化学,21世紀の情報化学に対する大きな期待と要望,旭硝子真瀬洋
5,特集：23世紀に期待される情報化学,期待する21世紀の情報化学について,宇部興産長澤俊夫
6,特集：24世紀に期待される情報化学,計算機化学の発展を願って,花王美濃順亮
7,特集：25世紀に期待される情報化学,21世紀への情報化学への期待,JSR丹沢嘉夫
8,特集：26世紀に期待される情報化学,マイクロファクトリーと情報リテラシー,昭和電工佐久間洋
9,特集：27世紀に期待される情報化学,21世紀の情報化学への期待,住友化学工業大庭成弘
10,特集：28世紀に期待される情報化学,21世紀の情報化学への期待,田辺製薬中島昭英
11,特集：29世紀に期待される情報化学,企業の研究トップが期待する21世紀の情報化学,日本触媒佐野禎則
12,特集：30世紀に期待される情報化学,21世紀の情報化学にかける期待,日本ゼオン渡辺浩志
13,特集：31世紀に期待される情報化学,21世紀の情報化学への期待,三井化学高瀬勉
14～26,第2特集：続・材料をさぐる(触媒分野)－Part3,化学企業における触媒開発と触媒反応シミュレーション,志賀昭信
27～31,第2特集：続・材料をさぐる(触媒分野)－Part4,点重荷モデルを用いた酸化スズ触媒上でのメタンの反応,山口洋一・田畑研二・鈴木栄二
32～40,第2特集：続・材料をさぐる(触媒分野)－Part5,燃料電池関連技術への第一原理計算の応用～金属・合金の水素溶解熱の算出～,横井泰治
41～44,部会記事,ChiN Web Page: a Navigater for Chemical Information on Internet,XiaoxiaLi
45～46,部会記事,部会役員会・委員会報告,
表3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.18 No.3(2000.6.30)
,部会員名簿（H12.5/15現在）,,

CICSJ Bulletin Vol.18 No.4(2000.8.31)
1～6,特集：第23回情報化学討論会,第23回情報化学討論会　プログラム,
7～11,特集：第24回情報化学討論会,第28回構造活性相関シンポジウム　プログラム,
12～27,特集：第25回情報化学討論会,第23回情報化学討論会　発表の概要,
表2,部会行事,情報化学部会総会のお知らせ,
28,部会記事,電子ジャーナル(Journal of Computer Aided Chemistry)の創刊と投稿のお願い,船津公人
29,部会記事,部会役員会・委員会報告,
表3,編集後記,,

CICSJ Bulletin Vol.18 No.5(2000.11.10)
1,特集：ポストシークエンス時代に臨む情報化学,巻頭言,有國尚

2～8,特集：ポストシークエンス時代に臨む情報化学,21世紀ゲノム創薬に向けた１つの提案－輸送機構に基づいた創薬分子デザイン,石川智久
9～13,特集：ポストシークエンス時代に臨む情報化学,マイクロアレイデータの解析技法,河合隆利・一石英一郎
14～16,特集：ポストシークエンス時代に臨む情報化学,細胞表面工学とコンビナトリアル・バイオエンジニアリング－ポストゲノムシークエンシング研究へのニューウェーブ－,植田充美・田中渥夫
17～20,特集：ポストシークエンス時代に臨む情報化学,分子標的薬剤のバイオインフォマティクス,矢守隆夫
21,部会行事,第12回ケモメトリックスワークショップ,
表 2,部会記事,電子ジャーナル(Journal of Computer Aided Chemistry)の創刊と投稿のお願い,船津公人
22～24,部会記事,部会役員会・委員会報告,
表 3,編集後記

CICSJ Bulletin 著者索引

記載形式　著者名,巻(号)ページ

排列：JIS コード順（主として漢字の音読み順；第二水準はその音読みに従って再配置）

BorisGolman,B13(3)23～27
D.Rideout,B16(4)12～17
E.Maggio,B16(4)12～17
H.Zhu,B16(4)12～17
J.Gasteriger,B9(1)14～23
J.Wang,B16(4)12～17
J.Zupan,B9(1)14～23
K.Ramnarayan,B16(4)12～17
MarkB.Swindells,B16(1)10～14
PeterC.Jurs,B11(5)2～10
PeterM.W.Gill,B17(1)4～8
XiaoxiaLi,B18(2)41～44
ZhiliangLi,B11(3)27～31
あ
阿河喜一郎,B11(6)2～4
阿部英次,B3(3)6
阿部英次,B4(6)2～4
阿部英次,B7(6)24～25
阿部英次,B10(1)39～42
阿部英次,B10(3)3～5
阿部英次,B13(4)1
阿部英次,B13(4)9～10
阿部英次,B14(1)16
阿部英次,B14(5)20～21
阿部英次,B15(3)1
安永照雄,B13(1)7～10
安岡則武,B4(6)9～11
安川民男,B4(4)4～16
安川民男,B11(5)15～18
安田歩,B6(1)37
安藤勲,B6(4)17～18
伊東嶽,B15(1)2～5
伊藤健児,B4(4)4～16
伊藤建彦,B9(1)32～33
伊藤卓,B14(2)6～8
伊藤眞人,B17(2)2～3
井口潔,B16(4)6～7
井上佳久,B16(4)2～5
井上直巳,B14(5)16～19
井畑敏一,B6(1)8～9
磯見二郎,B4(6)12～13
一石英一郎,B18(5)9～13
稲畑深三郎,B16(2)2～5
稲畑深三郎,B16(2)6～12
稲林昌二,B6(6)29
宇都宮陽二郎,B12(5)6～9
永井洋一郎,B4(4)4～16
塩田正二,B8(3)17～20
塩田千幸,B17(4)2～8
塩入孝之,B4(4)4～16
奥山徹,B13(4)11～14
横井泰治,B18(2)32～40
王保国,B17(6)6～11
岡崎慶二,B17(6)2～5
岡田孝,B8(4)15～23
岡田孝,B17(4)21～25
岡本祐幸,B11(4)5～9
か
加勢田茂,B6(5)5
加藤俊一,B12(5)10～11
河合隆,B17(2)7
河合隆利,B18(5)9～13
河内山勝春,B8(6)13～14
河野毅,B6(6)10～11
花井荘輔,B4(1)4～5
花井荘輔,B9(1)67
花井荘輔,B10(4)33
花井荘輔,B11(4)57～58
花井荘輔,B14(5)2～5
花熊克友,B6(5)6
甘利俊一,B9(1)2～5
管忠義,B8(1)2～7
関口智嗣,B13(2)44～47
関根史麿,B6(5)8～9
関崎正夫,B3(5)3～6
関谷哲雄,B13(5)17
関本雅之,B6(6)16
丸山雅雄,B4(4)4～16
岸田明,B6(6)6
岸田和明,B16(6)7～10
岸本隆太郎,B12(4)17～20
岩下安男,B6(6)8
岩崎浩一郎,B15(6)16～19
岩田修一,B5(5)1～12
岩田末廣,B6(1)4～7
岩田末廣,B17(2)4～5
岩澤まり子,B6(6)7
鬼頭繁治,B4(4)4～16
鬼頭繁治,B9(1)30～31
鬼頭繁治,B13(3)3～6
菊園康雄,B8(2)10～14
吉村紀久雄,B6(6)5
吉村忠与志,B5(6)19
吉村忠与志,B7(1)15
吉村忠与志,B8(1)58
吉村忠与志,B10(3)14～17
吉村忠与志,B10(6)3～7
吉村忠与志,B12(6)15～18
吉沢強,B11(5)15～18
吉田喜久雄,B15(1)6～9
吉田元二,B6(1)28～29
吉田元二,B6(3)34～35
吉田元二,B10(3)27～28
吉田元二,B12(2)47
吉田元二,B13(2)3～4
吉田元二,B14(2)13
吉田元二,B14(3)1
吉田元二,B14(4)1
吉田元二,B17(2)1
吉田元二,B18(1)3
吉田純,B6(6)4
吉田政幸,B9(1)24～25
吉田政幸,B11(5)11～14
久保山誠士,B6(6)28
久保百司,B13(3)15～18
久保百司,B18(1)6～7
宮下芳勝,B10(6)38
宮下芳勝,B11(5)39～43
宮下芳勝,B11(6)36
宮原是中,B5(5)1～12
宮原是中,B6(5)1
宮原是中,B6(6)1
宮川宣明,B16(2)2～5
宮川宣明,B16(2)6～12
宮田壽,B13(3)1～2
宮埜壽夫,B12(5)2～5
宮本明,B13(3)15～18
宮本明,B15(1)16
宮本和男,B6(5)7～8
宮澤三造,B13(1)20～23
橋本正雄,B9(5)2～3
郷信宏,B11(4)2～4
近藤泰彦,B13(6)21～24
金久實,B16(1)15～19
金谷重彦,B17(2)6
金田重郎,B17(4)9～14
金内徹,B9(2) 7～10
金納文治,B6(5)15～16
窪田輝蔵,B16(6)11～16
栗田康男,B9(5)11～15
栗林浩,B13(3)19～22
桑原敏,B9(1)6～13
原修,B10(4)10～15
原尾政輝,B4(4)20～24
古後義也,B6(1)36～37
古後義也,B11(6)20～22
古谷利夫,B6(1)41～42
古谷利夫,B8(6)19
古谷利夫,B16(1)10～14
古明地勇人,B11(4)10～13
古明地勇人,B15(2)7～10
吾妻和泉,B8(6)25～26
後藤志津雄,B8(1)13～14
後藤正,B15(6)
工藤喜弘,B8(2)21
工藤喜弘,B9(5)2～3
工藤喜弘,B15(3)6～9
工藤善弘,B4(4)3
工藤善弘,B17(6)31～32
幸田和郎,B6(5)17～18
廣田勇二,B7(5)38～40
広田勇二,B13(2)48
江角清志,B6(1)27～28
荒井康全,B12(1)39～45
荒井敏博,B9(5)8～10
荒木啓介,B5(4)10～19
荒木啓介,B10(4) 1～5
荒木啓介,B11(6)5～9
高橋信隆,B8(1)8～10
高橋由雅,B4(6)29
高橋由雅,B6(5)42～43
高橋由雅,B7(2)7～10
高橋由雅,B8(2)6
高窪正明,B6(1)11～13
高山千代蔵,B6(6)40
高山千代蔵,B18(1)4～5
高瀬勉,B18(2)13
高田俊和,B15(5)5～8
高田章,B16(6)28
高田章,B17(6)35
高田亮,B16(2)13～16
高島一,B16(2)2～5
高島一,B16(2)6～12
高畠哲彦,B12(4)13～16
高木達也,B11(1)37～38
高木達也,B11(5)23～26
高木達也,B13(1)2

高木達也,B13(6)1～4
高木達也,B14(2)1～5
高木達也,B14(6)12～13
高木達也,B15(2)11～13
高木達也,B16(2)19
高木達也,B16(2)20
高木達也,B16(4)18～19
高木達也,B17(4)1
高木利久,B16(1)2～5
合庭惇,B12(3)24～27
黒坂厚,B11(2)51～53
今井賢,B4(4)4～16
今井賢,B4(6)7～8
今井賢,B8(1)1
今井賢,B8(5)10～11
根岸正光,B5(3)7～11
根岸正光,B16(6)21～25
さ
佐賀啓一郎,B8(3)2～6
佐久間洋,B18(2)8
佐原卓,B4(3)11～12
佐々木基,B9(1)32～33
佐々木愼一,B1(1)1～2
佐々木愼一,B4(6)1
佐々木愼一,B4(6)28
佐々木愼一,B4(6)29
佐々木愼一,B15(1)1
佐藤雅之,B11(2)39～42
佐藤弘幸,B10(5)19～22
佐藤浩太,B10(6)24～27
佐藤三久,B13(2)44～47
佐藤信之,B8(6)17～18
佐藤文臣,B6(6)34
佐藤満雄,B13(5)13～16
佐藤満雄,B15(3)10～13
佐藤明子,B8(5)10～11
佐野均,B10(6)41～52
佐野禎則,B18(2)11
斎藤巧,B6(5)13～14
細川昭男,B6(6)13
細矢治夫,B2(3)6
細矢治夫,B3(1)5
細矢治夫,B3(2)22～23
細矢治夫,B3(5)23
細矢治夫,B4(1)14
細矢治夫,B4(1)15
細矢治夫,B9(1)63
細矢治夫,B12(3)36～42
細矢治夫,B13(2)44～47
細矢治夫,B13(3)32～34
細矢治夫,B13(5)1～4
細矢治夫,B14(2)12
細矢治夫,B17(1)1～2
坂元みや子,B6(1)29～30
坂本直紀,B17(4)26
榊武彦,B11(3)5～8
桜井香織,B11(3)14～17
桜井隆史,B10(5)38～41
櫻井実,B17(1)13～17
鮫島圭一郎,B15(5)9～12
澤飯祐子,B6(6)27
三井利幸,B15(3)26～27
三井利幸,B15(6)24～27
三浦隆治,B13(3)15～18
三橋一夫,B7(6)12～17
三戸邦郎,B13(6)13～16
三戸邦郎,B16(2)17
三枝利隆,B7(3)16～20
三上益弘,B10(6)32～35
三上益弘,B12(6)28～31
三上和徳,B8(1)11～12
三木邦夫,B11(4)29～32
山下晃一,B10(1)9～12
山下晃一,B14(6)4
山下修,B4(4)25～36
山下修,B6(1)24～25
山口猛央,B17(6)6～11
山口裕樹,B12(4)21～24
山口洋一,B18(2)27～31
山口和紀,B8(6)6～7
山崎輝昌,B18(1)8～13
山崎康男,B4(4)4～16
山崎昶,B9(3)3～5
山崎昶,B11(6)29～32
山中計,B11(5)48～49
山田想,B16(2)2～5
山田想,B16(2)6～12
山田谷導幸,B13(3)15～18
山田文明,B11(6)33～34
山田明文,B10(6)8～11
山田實,B10(5)10～14
山登一郎,B11(4)10～13
山内正,B8(4)11～14
山辺信一,B14(1)2～5
山路泰,B6(5)21～22
四居靖彦,B13(4)30
市川宏司,B11(6)37～39
市川紘,B11(5)27～30
市川紘,B13(6)26
志賀昭信,B18(2)14～26
児玉佳男,B6(1)41
児玉昌彦,B13(6)17～20
寺前正一,B10(5)38～41
寺野隆雄,B6(6)9
時実象一,B11(1)17～19
時実象一,B14(1)21～23
時実象一,B15(3)22～25
時実象一,B15(4)28～30
時実象一,B17(2)22～26
時実象一,B17(5)37
時田澄男,B18(2)1
酒井俊彦,B6(5)12～13
酒井真理子,B6(1)33～34
宗像弘明,B18(1)21～27
秋本利夫,B11(1)4～5
十河信二,B10(1)45
諸井黎明,B6(1)29～30
小貫慶昭,B6(1)40～41
小貫慶昭,B11(1)6～9
小原繁,B16(2)2～5
小原繁,B16(2)6～12
小口梧郎,B6(5)20～21
小山菊彦,B4(4)4～16
小出昭夫,B7(4)12
小出昭夫,B8(6)1
小出昭夫,B10(1)1
小出昭夫,B11(1)44
小出昭夫,B11(6)17～19
小出昭夫,B12(6)7～9
小川桂一郎,B6(1)13～15
小川秀明,B4(4)4～16
小沢啓一郎,B14(1)9～11
小沢宏,B5(5)1～12
小谷野和郎,B6(1)32～33
小田研悟,B6(1)37～38
小比賀聡,B13(6)5～8
小野寺夏生,B12(3)11～15
小野寺夏生,B14(1)12～15
小野寺夏生,B16(6)1
小野寺夏生,B16(6)2～6
小柳義夫,B10(5)2～5
小林久芳,B13(3)7～10
小林愼一,B6(6)19
小林正義,B13(3)23～27
松岡俊和,B14(4)31
松岡俊和,B15(6)28～29
松原世明,B17(1)9～12
松村司郎,B6(5)14～15
松村春生,B6(5)20
松村竹子,B12(6)19～22
松田政行,B12(3)18～23
松本常三郎,B6(6)35
松本直彦,B6(6)22
上山治貴,B4(6)18～19
上森まり子,B10(4)6～9
上森まり子,B11(6)14～16
上田充,B10(3)6～9
植田賢三,B11(3)40～43
植田充美,B18(5)14～16
新見栄,B11(3)18～22
新重光,B4(4)4～16
森章,B6(5)11～12
深瀬浩一,B16(4)8～11
真瀬洋,B18(2)4
神沼二眞,B12(1)23～26
神沼二眞,B13(1)3～6
神森大彦,B12(3)32～35
神谷和秀,B6(1)31～32
神谷和秀,B10(3)22～23
仁井田和雄,B6(5)23～24
須貝潤一,B11(4)49～51
水野裕,B6(6)20～21
杉江正昭,B8(6)9～10
椙山敬士,B12(3)16～17
瀬田重敏,B18(2)2～3
清水孝次,B8(6)22
清水昇市,B11(3)9～13
西川建,B11(4)25～28
西村民樹,B12(1)19～22
西村竜一,B17(6)18～22
西端芳彦,B12(1)7～10
青山明夫,B8(1)13～14
青柳岳司,B17(6)23～26
斉藤豊一,B6(5)10～11
斉藤稔,B11(4)14～17
石垣慎也,B13(3)11～14
石黒正路,B6(1)26～27
石山純一,B11(3)23～26
石川智久,B18(5)2～8
石塚英弘,B6(2)4～8
石塚英弘,B7(2)4～6
石塚英弘,B8(2)5
石塚英弘,B11(3)45～53
石塚英弘,B12(6)10～14
石田嘉明,B2(1)1～2

石田嘉明,B6(1)23
石田嘉明,B8(6)11～12
石田嘉明,B11(3)54～62
石田康行,B15(6)20～23
石田晴久,B8(6)2～5
石田和文,B6(5)5
千原秀昭,B12(3)7～10
千原秀昭,B18(1)2
千原秀明,B3(5)1～2
千原秀明,B14(1)1
占部薫,B6(6)3
川合修平,B6(5)13
染川賢一,B15(3)28
船越亮平,B6(5)22～23
船津公人,B4(6)28
船津公人,B6(5)42～43
船津公人,B8(2)29～30
船津公人,B8(5)20～23
船津公人,B12(4)2～4
船津公人,B12(4)30～33
船津公人,B13(2)6～ 7
船津公人,B15(6)3～11
船津公人,B17(6)1
船津公人,B18(4)28
船津公人,B18(5)表 2
前田知子,B17(2)11
早水紀久子,B13(4)2～5
早水紀久子,B14(5)10～15
相原惇一,B13(5)9～12
相川泰,B6(1)34～35
相曽益雄,B5(5)1～12
相田美砂子,B15(5)1
相田美砂子,B16(2)1
相田美砂子,B17(1)3
相田美砂子,B17(6)34
相島鐵郎,B10(3)18～21
相島鐵郎,B11(3)2
相島鐵郎,B12(5)12
相島鐵郎,B13(6)25
相島鐵郎,B14(6)14
相島鐵郎,B16(2)21
相島鐵郎,B17(1)18～20
相島鐵郎,B18(1)29
相馬融,B17(6)36
増井秀行,B13(4)6～8
村井俊彰,B7(5)34～37
村上和彰,B16(2)6～12
村上和彰,B16(2)2～5
た
多田幸雄,B11(1)13～16
大久保優晴,B6(5)19
大崎健次,B2(1)1
大山勝弘,B11(2)43～50
大庭成弘,B18(2)9
大田雅照,B12(1)3～6
大野清隆,B6(1)35～36
大野泰治郎,B6(6)30
大澤映二,B2(3)1～3
大澤映二,B3(1)4
大澤映二,B4(2)20～21
大澤映二,B4(6)23～26
大澤映二,B6(1)1
大澤映二,B6(1)17
大澤映二,B6(1)17～19
大澤映二,B6(3)23～26
大澤映二,B6(4)19
大澤映二,B6(4)2～14
大澤映二,B7(1)16
大澤映二,B7(1)12
大澤映二,B8(6)8
大澤映二,B10(3)1～2
大澤映二,B11(3)35～37
鷹野景子,B15(3)18～21
谷村隆次,B11(4)37～39
谷中幹郎,B10(3)24～26
谷中幹郎,B12(4)5～8
丹沢嘉夫,B18(2)7
池谷裕之,B6(6)18
中井謙太,B11(4)18～21
中井謙太,B16(1)6～9
中山雅哉,B13(1)15～19
中山伸一,B9(1)24～25
中山伸一,B10(6)16～19
中山伸一,B11(5)11～14
中山伸一,B15(2)14
中村三平,B4(4)25～36
中村重郎,B6(6)11
中村春木,B4(6)20
中村春木,B11(4)37～39
中村春木,B15(2)3～6
中村振一郎,B6(1)38～39
中村徹,B6(6)31
中島昭英,B18(2)10
中馬寛,B6(1)19～20
中馬寛,B6(3)23～26
中馬寛,B10(3)24～26
中馬寛,B12(6)34～35
中馬寛,B17(2)9
中尾健治,B4(3)13～16
中尾真一,B17(6)6～11
中野英彦,B4(6)14～17
中野英彦,B5(6)20～21
中野英彦,B10(6)36
中野英彦,B14(2)9～11
張ヶ谷泰二,B11(1)39～41
張ヶ谷泰二,B11(1)20～23
張ケ谷泰二,B6(1)23～24
張ケ谷泰二,B11(5)50～52
朝永惇,B6(5)52
朝倉立行,B6(1)39～40
町田勝之輔,B11(6)25～28
長坂匡介,B17(6)12～17
長谷川清,B12(1)11～14
長谷部紀元,B8(3)7～11
長嶋雲兵,B10(1)13～16
長嶋雲兵,B13(2)44～47
長嶋雲兵,B16(2)2～5
長嶋雲兵,B16(2)6～12
長澤俊夫,B18(2)5
天達洋文,B6(5)4
田崎弘恭,B17(6)27～30
田崎武信,B17(4)15～20
田中渥夫,B18(5)14～16
田中一義,B10(6)20～23
田中一雄,B4(4)4～16
田中一雄,B10(5)32～37
田中伸英,B4(6)5～6
田中信行,B4(1)1～2
田中明志,B6(5)16～17
田中明人,B6(1)37
田中明人,B13(6)9～12
田島邦生,B10(2)37～40
田畑研二,B18(2)27～31
田淵利明,B4(3)7～8
田辺和俊,B4(6)27
田辺和俊,B5(2)6～8
田辺和俊,B6(1)1
田辺和俊,B6(4)20
田辺和俊,B6(4)2～14
田辺和俊,B7(5)41
田辺和俊,B9(1)26～27
田辺和俊,B9(3)16
田辺和俊,B11(5)19～22
田辺和俊,B12(1)46
田辺和俊,B12(4)25～29
田辺和俊,B12(6)32～33
田辺和俊,B13(3)39～42
田辺和俊,B14(2)13
田辺和俊,B16(2)2～5
田辺和俊,B16(2)6～12
田辺和俊,B17(2)8
渡辺好夫,B6(1)11～13
渡辺浩志,B18(2)12
渡辺秀章,B17(4)15～20
都築誠二,B6(1)15～16
都築誠二,B6(1)16～17
土屋俊,B12(3)28～31
土屋晉,B4(4)4～16
鳥崎和子,B10(6)28～31
嶋田一夫,B11(4)33～36
嶋裕,B14(5)22
湯川泰秀,B3(3)1～2
湯田浩太郎,B9(1)28～29
湯田浩太郎,B11(5)31～34
藤原一郎,B6(5)9～10
藤原英明,B14(6)10～11
藤原巌,B11(1)24～26
藤原譲,B3(1)1
藤原譲,B4(1)6～10
藤原譲,B5(5)1～12
藤原譲,B10(3)34～36
藤原譲,B12(6)2～6
藤原鎮男,B3(4)1～2
藤枝修子,B4(1)16
藤枝修子,B5(2)3～4
藤枝修子,B9(1)63
藤枝修子,B9(3)3～5
藤枝修子,B9(5)1
藤枝修子,B10(3)10～13
藤枝修子,B11(3)2
藤枝修子,B15(3)18～21
藤田稔夫,B14(1)6～8
藤田眞作,B11(6)23～24
藤田眞作,B12(4)9～12
藤田眞作,B13(5)5～8
藤田眞作,B14(1)9～11
藤博幸,B11(4)22～24
な
奈良重敏,B14(4)25～27
内丸忠文,B12(4)25～29
内田希,B6(1)10～11
内田希,B6(1)7～8
南茂夫,B4(3)1～3
日向寺祥子,B13(2)44～47
日野水孝,B6(5)3～4

は
萩原賢一,B6(6)15
柏原誠一,B10(5)42～44
柏谷宏之,B8(6)15～16
柏木浩,B10(5)6～9
柏木浩,B11(6)10～13
柏木浩,B15(3)14～17
柏木浩,B15(5)2～4
白石博,B10(5)15～18
白木千尋,B6(1)25～26
畑一夫,B14(5)6～9
八尾徹,B4(4)25～36
八尾徹,B6(1)20～22
八尾徹,B11(4)40～45
八尾徹,B16(1)1
八尾徹,B16(1)20～27
板井昭子,B4(6)21～22
板井昭子,B12(1)37～38
板井昭子,B13(1)24～25
繁周作,B6(6)24
飯島洋,B6(1)26
肥田宗政,B15(6)24～27
尾山伸一,B6(6)14
美濃順亮,B18(2)6
美馬勝,B4(4)25～36
姫井浩明,B13(3)15～18
浜口顕行,B6(6)32
濱昭夫,B6(5)3
富澤宏之,B16(6)17～20
冨永幸雄,B12(1)15～18
冨田研一,B3(1)2
武藤猛,B6(6)12
服部忠,B4(4)4～16
服部忠,B9(1)30～31
服部忠,B11(5)35～38
服部忠,B13(3)3～6
福森利明,B6(6)33
福島信子,B15(3)2～5
兵頭志明,B18(1)14～20
平山輝,B6(5)7
平石次郎,B14(6)2
平泉紀久子,B5(2)9～13
平田康郎,B6(6)23
平尾義郎,B17(2)10
平尾公彦,B10(1)5～8
平野恒夫,B6(1)2～4
平野恒夫,B6(3)34～35
平野恒夫,B10(1)2～4
平野恒夫,B15(3)18～21
米谷慎,B14(6)6
米田幸夫,B3(2)1
米田幸夫,B4(4)1～2
米田幸夫,B6(3)2～5
米田幸夫,B8(2)22
米田幸夫,B9(1)68～74
米田幸夫,B15(6)1～2
米田幸夫,B18(1)1
米田茂隆,B12(5)19～22
米田茂隆,B14(1)19
米田茂隆,B16(6)26～27
片倉晋一,B9(6)8～9
片倉晋一,B11(1)10～12
保田敏雅,B14(1)9～11
豊田二郎,B6(1)8～9
豊田二郎,B13(1)11～14
坊農秀雅,B16(1)15～19
北森武彦,B11(3)3～4
北村一泰,B6(1)30～31
北村一泰,B16(2)2～5
北村一泰,B16(2)6～12
北尾彰朗,B11(4)46～48
北尾彰朗,B16(2)2～5
堀憲次,B12(6)23～27
ま
名和小太郎,B2(2)1
名和小太郎,B10(6)12～15
名和小太郎,B12(3)2～6
網崎孝志,B16(2)2～5
網崎孝志,B16(2)6～12
木下朋子,B15(3)18～21
木坂一彦,B4(4)4～16
木寺詔紀,B11(4)37～39
木村美実子,B13(4)31
木村美実子,B14(5)1
や
野口正弘,B6(6)17
野村宣生,B8(6)23～24
矢守隆夫,B18(5)17～20
矢島徹,B6(5)11～12
柳田祥三,B13(3)28～31
有國尚,B13(4)27～29
有國尚,B16(4)1
有國尚,B18(5)1
ら
林正明,B6(6)25～26
鈴木栄二,B18(2)27～31
鈴木功,B4(2)18
鈴木功,B5(3)12～13
わ
和田雄二,B13(3)28～31
脇一郎,B6(5)18～19

◆部会記事

Journal of Computer Aided Chemistry (JCAC)の論文掲載状況（2000年12月6日現在）

Vol.1 (2000)　ISSN 1345-8647

1. 4way PLS法を用いた活性コンフォメーションと重ね合わせルール選択手法
　－ タンパクの3次元構造によるバリデーション (1-7)
　荒川　正幹、長谷川　清、船津　公人

2. 4Way PLS法を用いた活性コンフォメーションと重ね合わせルール選択手法
　－ 外部予測によるバリデーション (8-14)
　荒川　正幹、長谷川　清、船津　公人

3. A similarity score of protein three dimensional structures by hard ball model using a genetic algorithm (15-21)
　Shin-ichi Nakayama, Masayuki Yoshida, and Peter Willet

4. Kohonenネットワークと3way PLS法を用いた新しい3D-QSAR手法の開発 (22-34)
　松岡　成郎、長谷川　清、荒川　正幹、船津　公人

5. ケモメトリックス手法を用いた材料開発支援プログラムの開発 (35-46)
　棚田　東作、荒川　正幹、船津　公人、西村　竜一

6. DASTを用いたフッ化物アニオンによるS_N2反応に関する理論的研究 (47-56)
　福田　昌平、大和　信介、堀　憲次

7. Molecular Structure of *Rhodopseudomonas viridis* (57-62)
　Osamu Kitao, Kozo Aoki, and Tetsuji Ogawa

8. 色素増感型太陽電池における電子移動反応 (63-67)
　北尾　修、小川　哲司、青木　孝造、荒川裕則

9. 仮想現実感を利用した原子軌道の新しい動画表示 (68-75)
　時田　澄男、杉山　孝雄、細矢　治夫

10. Detection of transfer RNA based on the cloverleaf secondary structure (76-81)
　Makoto Kinouchi, Shigehiko Kanaya, and Yoshihiro Kudo

11. Prediction of proteolytic process based on N-terminal sequences and molecular weights by proteomics and proteome analysis (82-88)
　Yoshifumi Ujiie, Kouji Sasaki, Makoto Kinouchi, Yoshihiro Kudo, and Shigehiko Kanaya

12. 遷移状態探索システムの構築 (89-97)
　堀　憲次、名越　康浩、山崎　鈴子

電子ジャーナル(Journal of Computer Aided Chemistry)の創刊と投稿のお願い

日本化学会情報化学部会では、かねてよりOn-line only journal, "Journal of Computer Aided Chemistry"(JCAC)の発行の準備を進めてまいりましたが、8月8日に公開の運びとなりましたので会員の皆様にお知らせいたします。

この電子ジャーナルは、日本化学会ホームページの定期刊行物のページにありますJCACサイト(http://www.chemistry.or.jp/journals/jcac/index.html)から無料でアクセス可能です。

JCACは、査読システムの整った学術雑誌としての位置付けを持っていると同時に、投稿および公開を電子化し、投稿から公開までの期間を短縮することを目指している点に第一の特色があります。また、電子体の特色を活かし、動画や高解像度の図、音響を伴った資料などのマルチメディア付録を論文と共に提供でき、これまでの論文誌とは一味違った情報豊かな内容にできる点に第二の特色があります。なお、JCACの公開プラットフォームは、科学技術振興事業団が開発を進めているJ-STAGEを利用しています。J-STAGEの詳細は、http://www.jstage.jst.go.jp をご覧下さい。

新しいジャーナルを軌道に乗せるには何と言っても皆様からの論文の投稿が不可欠です。研究の成果をぜひ投稿頂きたいと考えています。また、情報化学部会では年に一度情報化学討論会を開催していますが、ここで発表される内容やさらに完成度を高めたものを論文としてぜひJCACに投稿頂きたいと考えております。編集委員会メンバー一同、このJCACを日本のコンピュータ化学を代表する学術誌として育て上げて行きたいと考えていますので、会員の皆様のご理解とご協力を宜しくお願い申し上げます。

なお、JCACの投稿規程は上記の日本化学会ホームページのJCACアクセスポイントに示しています。投稿の便を図るためにスタイルファイルもダウンロードして利用できるようになっています。ご投稿の際にはこれをご使用の上、論文を作成になり、下記の編集事務局宛てに電子メールの添付ファイルとしてお送り頂くか、フロッピーなどの電子媒体でお送り頂きますようお願い致します。

皆様からの投稿をお待ち申し上げております。

Journal of Computer Aided Chemistry 編集委員長
船津　公人

編集事務局所在地
441-8580　豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1
豊橋技術科学大学知識情報工学系
船津研究室気付
TEL：　0532-44-6879（直通）
FAX：　0532-47-9315（直通）
編集局e-mail：　jcac@chemistry.or.jp

第23回情報化学討論会報告

藤田 眞作
第23回情報化学討論会世話人 (京都工芸繊維大学工芸学部物質工学科)

第23回情報化学討論会が2000年10月26日・27日の二日間，京都市の京都リサーチパークにて開催された．例年通り，日本薬学会主催の構造活性相関シンポジウム (以下シンポジウムと略称) と併催であり，同シンポジウム世話人の赤松助教授 (京大) と連携して準備をおこなった．2000年という区切りの年に開催される学会であり，内容のある学会を目差して，共通セッションを設けるなどの工夫を盛り込んだ．次の表に示すように，幸いにして全体で400名をこえる参加者があり，盛会裡に終ったことはよろこばしいことであった．

参加者	情報化学			構造活性相関			合計
(会費納入)	予約	当日	計	予約	当日	計	
総数	85	68	153	218	58	276	429
(一般)	66	54	120	204	53	257	377
(学生)	19	14	33	14	5	19	52
懇親会	34	21	55	65	19	84	139

発表件数を次の表にまとめた．特別講演 (千原氏) およびキーノート講演 (Maggin，岡田，山辺，各氏) のほか，一般講演およびポスター発表として，(1) 化学情報学 (口頭6件，ポスター12件)，(2) 理論化学・計算化学 (口頭11件，ポスター20件)，(3) ケモメトリックスおよび関連ソフトウェア (口頭3件，ポスター8件)，(4) ゲノム情報と創薬 (ポスター3件)，(5) その他情報化学に関するもの (該当なし) の各セッションで発表がおこなわれた．「ゲノム情報と創薬」のセッションは，両学会の共通セッションとして設けたものである．また，これらのセッションのほかに，故佐々木慎一教授 (元部会長) の追悼セッション (口頭6件) を設けた．

発表	情報化学	構造活性相関	共通	合計
特別	1	1		2
キーノート・招待	3	7		10
口頭	26	18		44
ポスター	40	23	3	66
計	70	49	3	122

併設された展示会は，14件の展示があり盛況であった．加えて，情報化学部会より発刊された電子ジャーナルのデモンストレーションが，展示会場で同時におこなわれた．これは，IT (information technology) 時代を象徴する意義深いものであった．このジャーナルを盛り上げるため，また，情報化学討論会での発表が発表し放しならないためにも，発表内容をまとめて投稿下さるよう発表者各位の協力をお願いする次第である．というのは，情報化学討論会の発表については，事実上レフリーなしで発表許可になっている現実があるからである．発表し放しにせず，レフリーの審査を経て公表することが，情報化学討論会での発表の質をあげる推進力になると信ずる．

懇親会は，130名余りの参加があり，懇親の実をあげることができた．料理が足りず，しかも追加するタイミングが遅れるなどで参加者にはご迷惑をかけたことが世話人としては心残りであった．討論会開催直前に，吉田元二前部会長の逝去という悲しいできごとがあり，故佐々木教授 (元部会長) の追悼とあわせて，細矢教授の音頭で献杯をおこなった．

以下に，若干私事にわたるところもあるが，準備に関する覚書を記す．1999年5月に，故吉田前部会長より，京都での討論会 (2000年) の世話をして欲しいとの依頼があったときには，大いに躊躇した．というのは，(1) 現在の職場に転職して間がなく，スタッフが揃わないこと，(2) 転職後は研究と教育に専心するつもりであったことなどの理由である．引き受ければ，1年余り忙殺されるのは目に見えていたが，京都近辺で情報化学部会の会員は少なく，観念して承引したというのが実態であった．

承引と同時にシンポジウムと共同で，すぐに会場の選定を始め，検討の結果，京都リサーチパークに決めた．これは，二つの講演会場をもつ大きい施設である必要と，会場係等のスタッフを世話人側で手当てすることが難しいことを考慮したためである．施設側で設営などをおこなってくれる反面，その費用が上乗せされるということであったが，会期を2日に圧縮することによって，財政上のバランスをとることにした．会期を圧縮して開催した分，財政的には楽になったが，スケジュールが非常にタイトになったことは，反省点である．会場へのアクセスにやや難があったが，垢抜けた施設については，参加者にはおおむね好評であったように感じた．

前回の山形での討論会で次回の京都開催を告知したのち，1999年の終わり頃に，特別講演，キーノート講演の講演者の選定をおこない，一部は依頼状の送付をおこなった．ただし，本格的に準備を始めたのは，2000年に入ってからである．会費の設定，締切日の協議，協賛協会への依頼，郵便振り込みの口座の開設をおこなった．会場付近に食堂等が少ないことから，予約によって弁当を用意することにした．これに基づいて会告の原稿を作り，日本化学会の「化学と工業」などに送付したのは，3月半ばであった．

「化学と工業」などの会告の公表が5月半ばになることから，それにあわせて，申し込み用のEメール窓口とホームページの開設をサーバー管理者に依頼した．ホームページの内容は，会告をHTML化したものにし，5月に運用をはじめた．そのほか，前回の討論会の発表者を中心に50人程度に会告を送付し，発表を募った．

発表申し込みの締切は2000年7月14日とした．申し込みはすべてEメール経由で，フロッピーディスク郵送のものはなかった．締め切り後，プログラム編成会議をシンポジウムと共同で開き，各セッションのプログラム，座長などを決定した．この結果をふまえて，目次，内容概要，索引を整備して，ホームページに掲載した．同時に，CICSJ Bulletin用の各種原稿もできあがるようにした．これらの作業は，LaTeXのクラスファイルを自作して対処した．リンクの機能を利用した著者索引を作成したことが工夫の一つである．別に，「化学と工業」および協賛学会用にプログラム原稿を作成し，8月はじめに送付した．同じころ，各発表申し込み者に，要旨集原稿の執筆依頼状を，また座長予定者に座長の依頼状を送付した．

9月1日が要旨集原稿の締め切りであったが，おおむね良好な原稿が届いた．原稿整理ののち，印刷に回すためシンポジウム世話人に送付した (印刷上りは10月はじめ)．9月22日に参加者予約を締め切った．例年なみの予約がえられたことで大いに安堵した．10月5日に要旨集の前送業務を，シンポジウムと共同でおこなった．10月半ば，当日の会場用に各種の用具をそろえ，会場要員として学生アルバイト5名を依頼．討論会当日の受付業務はおおむねスムーズにいった．講演の進行もスムーズであった．

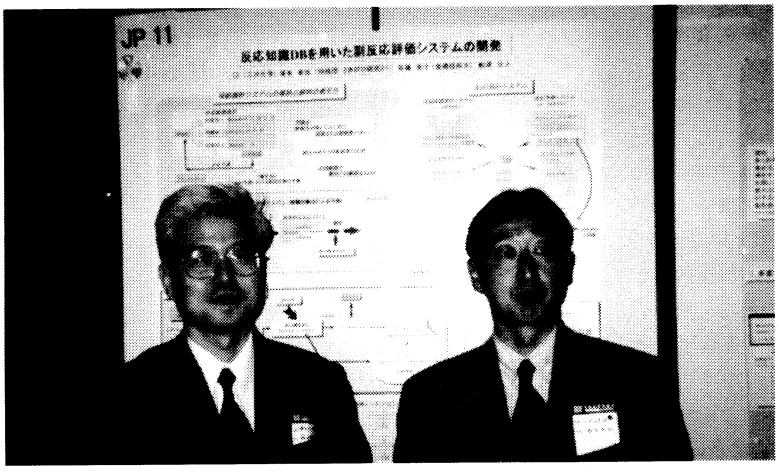
前回のノーハウをお教えいただいた工藤教授 (山形大) に感謝する．シンポジウム側の世話人として行き届いた配慮によって，筆者の抜けていたところを完璧にカバーしていただいた赤松助教授 (京大) に感謝する．とくに，会場となった京都リサーチパークとの折衝のほとんどを担当していただいた．併設された展示会の出展について，役員のみなさんに積極的に勧誘いただいたことに感謝する．そのほかにも，準備中や当日の進行に関して，いろいろな方々にお世話になった．名前はあげることはしないが，深く感謝する．

第 23 回情報化学討論会　ポスター賞発表

（講演番号順）

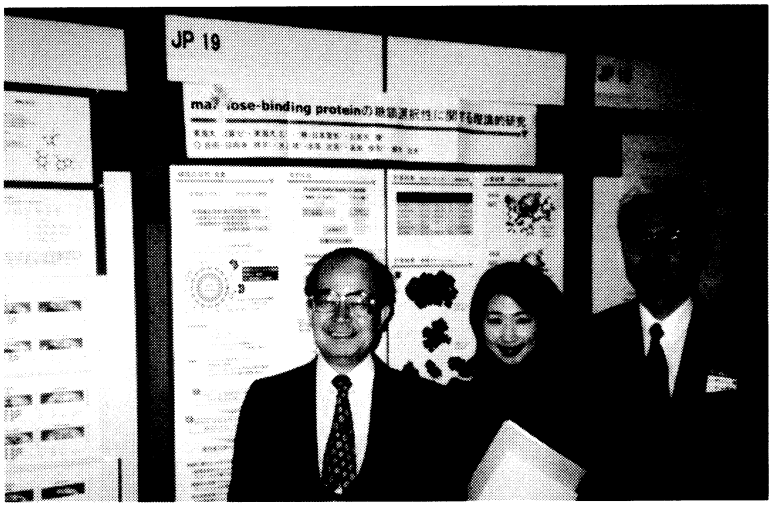
JP11　反応知識 DB を用いた副反応評価システムの開発

（三井化学）○塚本 幸治（科技団・さきがけ研究 21）佐藤 寛子（豊橋技科大）船津 公人



JP19　mannose-bindnig lectin の糖鎖選択性に関する理論的研究

（東海大・電子計算セ）○合田-日向寺 祥子，井上 靖（東海大・工）水落 次男（日本電気）高田 俊和（お茶大・理）細矢 治夫



JP22　タンパク質全電子計算のための自動計算プログラムの開発

（九工大・情報工）○時枝 浩司，　吉廣 保，　佐藤 文俊，　柏木 浩



JP35　反応試薬機能予測ニューラルネットワークモデルの化学実験による検証とフィードバック

（科技団さきがけ研究 21，理研）○佐藤 寛子（理研）長澤 和夫（豊橋技科大）船津 公人（お茶大）鷹野 景子（理研）中田 忠



第12回ケモメトリックス・ワークショップ開催報告

キッコーマン（株）研究本部　相島鐵郎
taishima@ga2.so-net.ne.jp

同数のアミノ酸残基からなるペプチドやタンパク質の三次元立体構造の一致度を調べる作業を考えてみよう。まず重心の位置を合わせ、左右を揃えるために投影したり、立体を回転させたり、さらには絶対的な大きさを調節するために各方向へ伸ばしたり、縮めたりして2つの立体をできるだけ一致させ、最後に平均値をとると一致した構造(consensus)が得られる。全く違う分野で、A国とB国の消費者グループが数種類の食品を味、香り、外観など複数の特性について評価したとしよう。両集団の評価がどの程度一致するかは、特性数の次元数からなる多次元空間に分布したA国とB国の評価結果を、タンパク質の立体構造を比較した際と同じように処理すれば明らかにできる。このように、2つのデータのconsensusをとっておけば、それからのずれを計算することにより、全体的な評価の類似性や特性の一致度合いを定量化できる。このような解析を可能にするのが「一般化したプロクラステス分析(GPA:Generalized Procrustes Analysis)」である。

そこで今回のワークショップは、市場調査会社を経営しながら官能評価分野を中心に"Senstools"というGPAのソフトウェアを開発、販売するOP&P社の経営者Dr. Pieter Punterをオランダから招き、「プロクラステス分析法を利用した官能評価と機器分析における多変量データの比較、統合及び情報抽出」という演題で12月1日（金）、10〜17時、日本化学会会館5階会議室で開催した。本ワークショップの生みの親であるお茶の水女子大学藤枝修子先生による開会の挨拶に続き、ベッドよりお客の背丈が長ければ足や頭を切り取り、逆に短ければ引き延ばすという、プロクラステスの語源である古代ギリシャの恐ろしい宿屋の紹介を皮切りに、下記プログラムにより講演は進められた。

1．プロクラステス分析法とは
　・プロクラステス回転法
　・主成分分析や因子分析との比較
2．各種官能評価パネルとデータ特性
　・分析型パネルと消費者パネルデータの特徴
　・各パネリストの変動性と全体的な調和度の評価
3．プロクラステス分析法による官能評価データの解析
　・分析型パネルデータと消費者パネルデータの統合
4．フリーチョイス・プロファイル法
　・プロクラステス分析法による解析
5．官能評価データと機器分析データの関連づけ

プロクラステス分析は官能評価以外では日本の研究者に余り馴染みがないせいか、35名の参加者はほとんど食品関連企業の官能評価部署からであり、いわゆるケモメトリックス分野からの参加者が極めて少なかったことは残念である。しかし昼休み、醤油試料について会場で実際に収集した官能評価データを用いたGPAによる解析では、現実に見たサンプルと当事者の評価が解析されることから大いに会場がわいた。講演終了後、お茶の水駅近くの居酒屋の一角を借り切って催したDr. Punter夫妻を囲んだ懇親会は、例年にもまして豊富なメニューとアルコールの効果も手伝い、非常にフランクな雰囲気のもと大いに盛り上がった。

ケモメトリックスの解析手法はデータ行列さえ整理すれば、分析手段を問わずに目的とする情報を効率的に抽出する。つまり手法自体に馴染みがなければ、自分の問題やデータに置き換えてその手法の意義を解釈し価値を判断すればよい。そのような意味では今後、より多様な分野からの参加者の増加が望まれる。

あいしま　てつお　AISHIMA, Tetsuo
連絡先　〒278-0037 千葉県野田市野田 399 キッコーマン（株）研究本部　電話 0471 23 5980

平成１２年度第５回拡大ＣＩＣＳＪ編集委員会議事録

日　時：平成１２年１１月３０日（木）１５時～１８時
場　所：化学会２０２号室
出席者：時田澄男，高田章，船津公人，有國尚，市川紘，相馬融，高畠哲彦，中山伸一，藤田眞作，清水弘一

議事内容

（１）情報化学討論会アンケートについて

高田委員よりアンケートの発送が終了し、返送が始まっていることが報告された。集計については高田委員が担当することとした。

（２）第２３回情報化学討論会について

藤田委員より討論会についての最終的な報告があり、時田委員長からのねぎらいの言葉があった。なお、決算報告は次回の委員会で行うこととした。また、次々回討論会の開催場所について意見交換が行われた。

（３）CICSJ Bulletin について

Vol.18 No.6 について清水部会担当より吉田前部会長の追悼記事の状況が説明された。また中山委員より CICSJ Bulletin と情報化学討論会要旨集の目次および著者索引の作成状況が説明され、これらを全て掲載すると大部になるので、No.6 では CICSJ Bulletin のみを掲載することとした。なお巻頭言は中山委員に変更することとした。

Vol.19 No.1 の特集記事「２１世紀に臨む情報化学」の進捗状況について高田委員より説明があった。量子有機化学研究会は代表が替わったため、市川委員が対応することとした。Vol.19 の表紙の色は、次回委員会まで有國委員が決めることとした。

No.2 はアンケートの報告と北尾委員担当の「(仮) グリーンケミストリー」か工藤委員担当の「(仮) 黎明期の日本の情報化学」のどちらかの特集とすることとした。

No.3 は年間のページ数を抑えるため、例年の会員名簿をやめて、NO.2 で扱わなかった方の特集とすることとした。なお、本年度の名簿からの変更情報は調査して掲載することとした。

No.4 は討論会特集とした。討論会のホームページで公開される発表要旨の掲載をやめて目次だけとし、Vol.18 No.6 で予定されていた情報化学討論会要旨集の目次および著者索引を掲載することとした。

NO.5 および 6 については、次回委員会で検討することとした。

（4）部会メーリングリストおよびホームページ移転について

清水部会担当より北尾委員の協力を得て、無事終了したことが報告された。なお、新しいURLアドレスの告知はメーリングリストおよびCICSJを用いて行うこととした。

（5）平成１３年度部会役員について

時田委員長より現状の体制を維持したい旨の説明があったが、数名の委員からの申し出により若干名の交代を検討することとなった。

（6）平成１３年度予算案（第２次）

清水部会担当より、日本化学会から固定費の負担を４０％から５０％に増やしてほしいという申し入れ（これは約２０万円の収入減となる）があったことが報告された。部会の予算状況がぎりぎりであり、ＪＣＡＣなどの新規事業を立ち上げている最中であることを理由に据え置いてくれるよう要望することとした。なお、部会としてもCICSJや部会ホームページの広告を集めることや、部会員を増やして収入の増に努めることとした。

（7）ＪＣＡＣについて

船津委員より現状の報告があった。さらに情報化学討論会の発表者に対する投稿依頼を進行中であることが報告された。

（8）ＪＣＡＣ賞について

時田委員長より表彰規定の案が示された。次回の委員会で決定し、３月の役員会に提案することとした。

（9）次回役員会について

次回役員会を春季年会中に開催できるよう、プログラム編成委員に日程の調整を要望することとした。

次回委員会は１月２４日（水）１５時から行うこととした。

以上