CICSJ Bulletin Vol.19, No.1, March 2001

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

執筆者・協力者一覧

本特集は以下の団体・個人の方々にご協力いただきました。

（情報化学部会事務局）

エコケミストリー研究会	浦野　紘平	様
高分子学会 高分子計算機科学研究会	岡崎　慶二	様
科学技術振興事業団	金子　弘正	様
日本材料学会 分子動力学部門委員会	北村　隆行	様
新化学発展協会	高橋　由幸	様
化学情報協会	千原　秀昭	様
日本化学会 コロイドおよび界面化学部会	辻井　薫	様
構造活性相関研究会	寺田　弘	様
日本化学会 有機結晶部会	戸田　芙三夫	様
日本バイオインフォマティクス学会	西岡　孝明	様
高精度分子設計研究会	西本　吉助	様
生命化学研究会	馬場　嘉信	様
情報計算化学生物学会（CBI 学会）	平山　令明	様
分子シミュレーション研究会	樋渡　保秋	様
CAC フォーラム	船津　公人	様
CAS	時実　象一	様
触媒学会 コンピュータの利用研究会	宮本　明	様
環境動態研究会	宮本　純之	様
近畿化学協会 コンピュータ化学部会	安岡　則武	様
化学技術戦略推進機構	山田　知純	様
量子有機化学研究会	山邊　信一	様
化学ソフトウェア学会	吉村　忠与志	様
化学電池材料研究会	脇原　将孝	様

〔50 音順〕

◆特集：21世紀に臨む情報化学

「２１世紀に臨む情報化学」を特集するに当たって

旭硝子（株）中央研究所　高田 章
akira@agc.co.jp

情報化学部会では新しいミレニアムの節目に当たり、20 世紀の揺籃期、発展期における先達の優れた遺産を継承するとともに、いろいろな方々から広くご意見をいただきながら 21 世紀における新たな発展を目指したいと考えています。これまでに部会員の皆様からはアンケート形式で部会活動に対するご意見を、また企業の研究開発トップの方々からは寄稿を通して情報化学に対する要望をいただき、今後の活動の大変参考になりました。

今回の特集では、情報化学部会と関連の深いそして今後ますます関係が重要だと考えられる、20 を越える学協会の代表者の皆様から情報化学部会へのご意見をいただきました。あらためて当部会へのご関心の深さ並びに視点を変えての貴重なご意見をお持ちになられていることを痛感するとともに、これを契機とさせていただいて、広く社会の中で議論を発展させていけないものかと思います。部会の活動方針、取り組み課題については日頃より部会内で絶えず議論してきましたが、関連深い学協会の異なる視点からのご意見は社会の中で今後部会の果たすべき役割を考えた場合にとても貴重なものです。部会の中同様、外に対してもぜひ開かれた議論の場を提供していくことが重要だと思います。

ボーダーレス社会、情報化社会と言われる昨今、変化の激しい社会の中で発展していくためには情報収集と情報発信を積極的に進めていくことが必要です。また環境問題のような地球規模の問題に取り組んでいく上では既存の枠組みを越えた新しい取り組み方を考えていく必要もあります。そのためには、部会の存在意義（raison d'etre）は強化しつつも、他の学協会の皆様と共同で社会の中でさらに大きな流れを作っていく活動を企画していくことも不可欠だと考えています。

オリジナリティーのある質の高い研究成果の発信、社会にインパクトを与える産業技術の創出、次代を担う情報化学研究者の育成等の２１世紀の大きな目標実現を考えた時、今回ご意見をいただいた学協会の方々は理念あるいは志として共通部分も多く見受けられ、情報交換・意見交換を増やすことからまず始めていきたいと考えています。例えば学の方々とは講習会、国際会議の共催、産官の方々とは社会ニーズと研究シーズを繋げるための共通の議論の場作りが話題として挙げられます。

今後の CICSJ では情報化学討論会に対するアンケート及び部会活動の歴史を振り返る特集号も検討中です。これらの企画は部会員の皆様と一緒に今後の活動に対する議論の輪を広げていきたいという、部会長以下役員の思いが込められています。部会員の皆様方の忌憚のないご意見をお待ちしております。

最後になりましたが、ご多忙な中、大変貴重なご意見を執筆していただいた方々にこの場をお借りして厚くお礼を申し上げたいと思います。

化学物質の安全性に関する情報化学の発展を

横浜国立大学工学部教授（エコケミストリー研究会代表）　浦野　紘平

1．化学物質の安全性情報の現状

20世紀に入って、人類は多種類で大量の化学物質を生産、使用するようになった。米国のChemical Abstract Serviceには、2000年12月現在で約2,800万種類の物質が登録され、このうち日本では約7～8万物質が商業的に製造・販売されている。また、合成化学物質の不純物、燃焼・焼却や水の塩素処理での副生物、自然界での分解生成物など、非意図的に生成する物質も極めて多い。

これらの物質のうち、毒性情報が揃っている物質はほとんどない。様々な毒性のうちの一部でも、信頼できる機関から情報が得られている物質は4,000種類程度で、市販されている物質数の5%にすぎない。人や生態系に比較的強い毒性があるとされている物質の中には、大量に市販されている物質も多数あり、また、環境中からも千種類程度の多様な物質が検出され、様々な問題を起こしている。このような状況が合成化学物質の安全性全体についての不信感につながり、若者の化学離れにも影響している。そこでここでは、化学物質の安全性に関する21世紀の情報化学への期待を述べたい。

2．化学物質の安全性に関する情報化学の役割

化学物質の安全性に関する情報の中心は、①毒性、②生物濃縮性、および③生分解(代謝)性である。

①の毒性は、人に現れる毒性の症状からみると、急性(臓器・神経)毒性、発がん性、慢性(臓器・神経)毒性、感作(アレルギー誘発)性等々に分けられる。また、魚、ミジンコ、藻類などの水生生物に関する毒性もある。一方、毒作用の機構からみると、細胞機能障害性、変異原性、発がんプロモータ性、内分泌撹乱性、免疫反応性等々に分けられる。これらの毒性と物質の構造との関係(構造-活性相関)の研究は、従来からいくつか試みられているが、信頼できる毒性予測方法は確立されていない。21世紀の情報化学には、信頼できる毒性情報を集め、適切に分類、整理して物質の構造との関連を詳細に解析し、化学構造から毒性を予測し、莫大な経費がかかる動物毒性実験を軽減することが期待されている。

②の生物濃縮性は、生物濃縮係数(BCF)で表され、オクタノール・水分配係数Powとある程度の相関があることが分かっている。しかし、Powだけからは正確な予測はできず、Powと化学構造との関係も十分解析されていない。これは、試験生物の脂肪含有量、脂肪への溶解性、体内での代謝の速度、試験期間等によって変化する生物濃縮係数の求め方が確立されていないことにもよるが、情報化学には、一定の条件での情報を収集して化学構造との関係を詳細に解析し、予測できるようにすることが期待されている。

③の生分解(代謝)性は、好気条件と嫌気条件での微生物試験や動物実験によって調べられるが、21世紀の情報化学には、生体内での化学物質の代謝の機構を分類、整理して化学構造との関係を詳細に解析し、毒性やPowとの関係を含めて予測できるようにすることが期待されている。

これらの情報化学に対する期待に応えるためには、化学者だけでなく、医学、薬学、情報学、環境学等々の幅広い研究者が協力して取り組む必要がある。それには、従来の職場組織や学会、業績評価方法等々に拘らずに自由に協力できるシステムづくりが不可欠であり、また、これが最も難しいことでもある。情報化学部会がこのような場を組織し、成果を世界に発信して下さることを期待したい。

さらに、化学構造、基礎物性値、各種の毒性、生物濃縮性、生分解性、生産量、輸出入量、用途、環境中への排出量、環境中濃度等々の化学物質に関する信頼できる基礎情報のデータベースを構築し、誰でもが使えるようにすることも必要である。

筆者らは、世界中の信頼できる機関が発表している約4,000物質の毒性情報と様々な物性情報等を収集・整理し、一部をエコケミストリー研究会(http://env.safetyeng.bsk.ynu.ac.jp/ecochemi/；TEL/FAX 045-336-4036)で公開し、今後さらに多くの物質についても公開を予定している。

情報化学部会の方々が、21世紀には、化学物質の利用上の機能を研究するだけでなく、化学物質の負の部分を減らすための研究にも一層積極的に取り組んで下さることを期待したい。

２１世紀に臨む情報化学：高分子計算機科学研究会

三菱化学（株） 四日市事業所　岡崎 慶二
1404726@cc.m-kagaku.co.jp

近年、スーパーコンピュータのみならず、ワークステーション、パソコンまでの計算機が格段に高速化し、しかもコストパフォーマンスの良さで低価格のものが身近に、インターネットを通じた利用の広がりも見られるようになってきた。ソフトも特定のワークステーションでしか使えなかったのが、パソコンでの利用を前提に再構築されはじめ、パソコンレベルでのソフトも充実してきた。その中で、医薬や触媒の分野では、計算科学や情報化学を合わせた計算機科学が、実験的手段と相補的な、ある場合には主導的な役割を果たすようになりつつある。

こうしたことを背景に、高分子計算機科学の分野でも、電子状態計算、分子・メソシミュレーション、半経験的物性推算法やデータベースなどが高度化・拡張・統合化されてきた。それらを、高分子合成・反応、ミクロやメソスケールの構造性、基本物性や実用物性、成形加工での問題の解決に活用し、さらに、材料開発で要求される構造制御や物性予測につなげて、高分子のかかわる新たな材料を創出していくことが望まれている。そこでは、実験、理論、シミュレーションがうまく絡み合うことが重要である。それらが、総合的で体系化された情報になることが、高子科学を今後大きく飛躍させるひとつの起爆剤になっていくであろう。

このような認識のもと、高分子学会の中に、ひとつの研究会として、高分子計算機科学研究会が平成４年に設立された。多様な計算機利用技術の構築・活用・蓄積、実際の場面で遭遇する問題点、将来への展望などについて、活発な議論と情報交換を継続的に行っている。具体的には、毎年、主題を決めての研究会、初心者向けの講座、各自が抱えている問題や新しい研究の成果を持ち寄っての討論会を開催している。シミュレーションや理論の専門家だけでなく、汎用的なソフトをひとつの実験道具として使う実験研究者も含め、産学官の広範な分野で、特に将来の高分子科学を担う若い研究者や学生に高分子計算機科学が認知され浸透していくことを期待している。現在、個人会員約７５名（うち企業は約３５名）、法人会員は約１０社である。討論会での発表件数を除けば、各催しへの企業の参加は比較的活発である。

ここ３年間の活動を振り返ってみると、研究会では、"データベースとその応用技術の新展開"、"実験屋のためのシミュレーション及びデータ解析ノウハウ"、"特許における計算機科学の最前線"、講座では、"高分子の身近な問題における計算機科学の役割：その現状と可能性（合宿形式）"、"実験研究者にもわかる高分子のミクローメソーマクロ"、"一日でわかる分子計算ソフトの最前線"という話題を取り上げている。来年度は、"重合や反応周辺での問題" で研究会を、"シミュレーション・ＨＴＳ・コンビケム：医薬や材料分野での現状と展望" で講座を開催する予定である。討論会では、問題提起も含め、企業からの発表を増やし、産学官のうまい連携のきっかけを作る場になるようにしようとしている。

全体的には、産学官での最近のニーズに沿って、できるだけ他にはない場となるよう、テーマの選定や進行の工夫をしている。ただ、今後は、計算機科学や高分子科学の枠を越えた方向も模索していく必要性を感じている。高分子学会でも、今ある２４の研究会を、１０ぐらいに統合・合併することをこれから議論しようとしている。まずは、それぞれでの企画を共同で開催していくことから、始めていくことになるであろう。

計算機科学の分野では、私の知っている範囲でも、いくつかの学会や分野を越えた産学官の連携が試みられている。しばらく前に、新化学発展協会、分子シミュレーション研究会、理論化学研究会の間で試みられたサロンや、今年開かれる分子シミュレーション研究会での産官学連携フォーラム。化学会情報化学部会による今回の特集もそうである。各所で同様な想いのあることの表れであろう。計算機科学の力が分散するのではなく、それぞれが個性のあるものを求める中で、共通的なところではうまく連携してステップアップしていくスパイラルな発展を期待したい。

実用的物性予測への期待

（社）新化学発展協会先端化学技術部会　CC 分科会主査　高橋由幸

社団法人新化学発展協会では、異業種間あるいは産・学・官の共同研究に適したプロジェクトのテーマを発掘するため、研究開発技術動向について調査研究を行っている。（詳細については http://web.infoweb.ne.jp/aspronc/aspronc.htm を参照。）先端化学部会コンピュータケミストリー（CC）分科会には協会内の企業３８社８７名が参加しており、以下の活動を行っている。

・講演会--CC 関連の先端技術の動向について調査するため、各分野の専門の先生方に毎月１回講演して頂く。

・ワークショップ（WS）--CC 分科会で選定されたテーマに関して、学・官の先生方にまとめ役をお願いし、各企業の計算担当者が集まり、その応用技術のレベル向上を目指す。

・研究奨励金交付--産学連携の推進を目的とした新化学発展協会全体の事業。各社に共通するようなテーマを設定し、公募する。応募テーマの審査をし最適テーマに奨励金を交付する。

ＣＣ分科会の課題

CC 分科会の全般的な課題は、各企業の立場に立って CC をどのように研究や事業に役立てるかの調査・議論を行い、その中から同意の得られたプランを産学官の化学関連団体に提案する事である。CC は、企業の研究のある部分では役立っているのに、CC の技術シーズと研究開発現場におけるニーズが完全にマッチしないものが多いため、有益性を判断するケーススタディーが極めて少ないと思われる。CC 分科会では、その理由や障害となるものがどこにあるのかを議論し、企業間に共通な解決方法を模索してきた。その一つの理由として、CC が理想的な系についての問題にはある程度役立つが、企業の抱える現実的な問題を解決するには不十分ではないかと考えた。以下に、最近の議論から抽出された化学企業共通な実用的物性の予測の重要性とその問題点を挙げるので、現実にある典型的な問題として目を開き耳を傾けていただき、この分野固有の CC による問題解決技術として発展させるきっかけになることを希望する。（問い合わせ先：aspronc@infoweb.ne.jp）

実用的物性の予測の重要性とその問題点

<u>溶解度</u>　高分子材料の生産では、重合用溶媒を始めキャスト成形・塗膜・紡糸など多くの分野に溶媒が不可欠である。高分子材料の加工性あるいは弾性・強度などの性能は、加工溶剤への溶解性に大きく依存することがしばしばで、溶媒の選択は材料開発での重要な課題である。以上の観点から、新規な高分子材料の開発時には、おおよその溶解性を予測することが必要である。また、従来の高分子材料でも、環境・安全性の問題から代替溶剤への移行を迫られている場合には、溶解性予測は大きな鍵を握っていることは確かである。　溶液論の成果によれば、Hildebrand の溶解パラメータ δ と Flory-Huggins の相互作用パラメータ χ がそれぞれ低分子と高分子の溶解の基礎式に登場するが、いわゆる理想的な系に限られ、現実的な相互溶解度曲線（x-T プロット）を予測するまでの力は無い。一方、MD などのシミュレーション・計算機実験では、土井プロジェクトなどのめざましい発展がこの数年間にみられ、その溶液論への援用がこの分野の更なる発展に拍車をかけると思われる。今後の直接的な溶解度予測技術への展開を期待したい。

<u>接着性</u>　塗料、粘接着剤等の性能予測の一つで、基板と剤の相互作用の強さを表す。常に強さが求められるわけはではなく、用途に応じた接着強度のコントロールや他の物性（対衝撃性、耐水性等）とのバランスが必要である。剤の重合組成やその組成比、溶媒等数多くの組み合わせが考えられる。現状では勘と経験から開発を進めているが、新規材料開発を効率的に行うには理論的解析が必要である。接着について、計算科学は

・評価法によって、現れて来る接着性の本質を考えて行く上での手法

・接着に関わる化学結合や界面を分子レベルで考えるための手法

・重要と思われるマクロ的な効果（弾性など）を理解・整理できる手法

と捉えることができる。このようなアプローチでの開発を期待したい。

情報学の未来

(社)化学情報協会　千原秀昭
hchihara@jaici.or.jp

除夜の鐘とともに突然情報化学の世界に変化が起こるわけではないので，漠然とつぎの100年にどうなるか，あるいはどうなってほしいかを書いてみたい．これは予測というほど権威があるものでもないし，私自身で確かめることは不可能なことだからそのつもりで読んでいただきたい．

1．仏つくるなら魂入れよう

勇ましい掛け声で政府はIT（information technology）元年とかIT予算を宣伝しているが，その説明を聞いていると，要するに私の家まで光ファイバーを引けるようにしてくれることと，IPアドレスのパンクを防いで，外出先から風呂を沸かせるようにするということらしい．これは情報の通る道路工事と交通標識を整備するということである．どんな情報をその高速回線に通すのかについてのビジョンは聞こえてこない．にぎやかに動き回るライブのパフォーマンスも楽しいだろうが，それを通すための高速回線に赤字国債を当てるのでは寂しすぎる．必要で重要なデータを送受信するのに使おうではないか．画像データ等を高速・高分解能で送れるようになると，共同研究や小規模の研究会は時間をかけて集まらなくてもできるから，効率は格段に向上する．スペクトルなどの画像データベースのサービスも発達するだろう．

2．画像の部分一致検索

化学構造式の検索システムは Chemical Abstracts Service の Registry ファイルが最大であるが，（部分）構造検索のためには，一定のルールに従って構造式を組み立てなければならない．化学者がふつう紙に書く仕方で書いた構造式で検索ができるようになることが望ましい．この技術は研究段階としてはあるが，まだ実用に耐えるシステムはない．connection table でなく画像として扱うほうが簡単かもしれない．これと関連して，一般に二つの画像の共通部分を検出することができると，広い範囲の応用が生まれるだろう．

3．データベースの自動構築

いまはデータベースの作成は人手に頼る部分が多い．索引語の抽出は高度な知的作業だから，それをコンピュータにやらせるのは，２１世紀の終わりまで生き延びても多分実現していないだろう．しかし，データ入力はデータの種類によっては自動化できるだろう．これは測定機器の進歩に依存する．すべての測定器に IPv6 アドレスを与え，データの分散処理と集積をすれば，ファクトデータベースの構築が容易になり，網羅性が高まるから，利用がふえて安価になるだろう．

4．ソフトウエアの自動作成

やりたい仕事の大枠を指定すれば（概念設計），あとは interactive に詳細設計，フローチャート作成ができ，プログラムを書くところまでやってくれる．そういうソフト開発ツールがほしいものである．しかし，うっかりこんなものを開発すると，多くのソフト会社が倒産し，研究者が失業して叱られるかもしれない．

5．黙って坐れば・・・

結晶のX線解析ではかなりの線までいっている．単結晶を作りさえすれば，それを４軸回折計にセットして，あとはお祈りをすれば，結晶構造の図がモニターに現れる．化学合成でも希望の物を指定すれば，自動的に反応合成経路を検索し，条件を最適化し，最も安い原料をカタログデータベースから探して，マイクロリアクターでテストし，自分の気に入ったテスト結果を選択すれば合成してくれる．部分的には今でもできる．

6．失業するために働く？　失業しないためには？

いろいろな夢を実現しようと研究に励むことは，なるべく早く自分が失業することが目標になる．IT が進歩しても，２１世紀を越えて知的（あるいは情的）な活動として残るものはある．その一つは教育．もう一つは，次元は違うが，即時自動翻訳であろう．定形文ならばできるだろうが，自由文は望み薄である．まして，「わたし的には，とてもよかったかな，みたいな話とかの感じのほうでした」なんていうようなギャル語の文をちゃんと英語のほうに変えれるかな？

情報（計算機）化学への期待と要望

コロイドおよび界面化学部会・部会長（海洋科学技術センター）　辻井薫
tsujik@jamstec.go.jp

今回、「２１世紀に臨む情報化学」の特集に執筆させて頂く機会を与えられたので、日ごろ私が感じている情報（計算機）化学への期待と要望について、二つの観点から述べてみたい。一つは学会のインフラとしての情報化学（情報技術）の役割であり、もう一つは計算機化学に対する実験屋の印象に関わる問題である。

１．インターネット時代の学会の理念を！

今、殆どあらゆる学会が、会員数の減少に苦しんでいる。日本化学会も例外でないことは、皆様ご存知の通りである。その理由として、不況による産業界の学会活動からの撤退といった、一時的な現象とする見方もある。しかし私はその様な見方に組みしない。社会の構造変革がもたらす、もっともっと根の深い、本質的な問題であると捉えている。

かつて学会は、その専門の情報を得、それを学び、それを自ら発信する唯一の場であった。従って研究者たるもの、そこに所属し、そこで活動しない限り、その存在理由を確認できない種類の団体であった。その様な時代において学会は、自らは特に働きかけなくとも、研究者の方から参集してきてくれたであろう。しかし、今や世界中の情報は瞬時にしてパソコン画面に表われる。文献検索も研究者の検索も、優れたサーチエンジンが即座にやってくれる。自らの情報発信は、ホームページを開設することによって簡単に実行できる。学会のあるべき姿が、厳しく問われる所以である。

インターネット時代の学会とは、如何にあるべきか？　学会とはそもそも、同じ専門分野の研究者や技術者が、互いの仕事を理解し合い、それを利用して自らの専門的能力を高め、技術を磨き、もって社会に役立つために存在するはずである。この目的を達成するために、現在の学会の姿とは全く異なるシステムも可能であろう。例えば、年会はウェブ上で行い、討論は電子メールでやり取りする。論文も自らのホームページに発表する。いい論文には当然アクセス数が多く、自然に評価が行われるであろう。つまらない論文には誰もアクセスしてくれず、自動的に淘汰される。そうなれば、論文の審査などは不要であろう。学会の役割は、これらの活動がスムースに行われるための情報インフラの構築である。インフラ構築に必要な資金を払った者はアクセス出来、その人達が会員である。等々。情報と計算機の専門家集団である貴部会が、インターネット時代の学会の理念を構築して下されば、２１世紀に相応しい日本化学会が出来るのではないだろうか。

２．実験屋を感動させる計算機化学を！

私は常々、計算機化学に対して胡散臭さを感じている。ヴァーチャル化学というか、どうも本物ではないという印象がある。実験屋が感じるこの印象は、計算機化学にとって致命的であると、私は思う。では何故にその様な不信感が生じるのであろうか？　私の考えるところ、それは計算機化学が既知の現象の説明に終始し、未知の新しいことを予言することをして来なかったためではないだろうか。実験屋の知らない未知の現象を予言し、それが後に見つかるという事例が多くあれば、計算機化学は本物の化学であると実感できるであろうと思われる。

計算機化学の真の意義は、実験できない（あるいは大変難しい）現象の理解にある。この様な場合、通常シミュレーションが行われる。この時、シミュレーションで期待される結果が得られると、その現象が理解できた様に勘違いされることが多い。しかしシミュレーションである現象が出現したことと、その現象が何故起こるかを理解することとは全く別の事柄である。シミュレーションの結果を、理論化への一つのステップと考え、最終的にその理論化が行なわれなければ、真に理解できたことにはならない。２１世紀の計算機化学は、実験できない現象に対する、実感できる説明を与えてくれるものと期待している。

つじい　かおる　TSUJII, Kaoru　　連絡先：〒237-0061　横須賀市夏島町２－１５

「21世紀に臨む情報化学」

徳島大学　薬学部　寺田　弘

（構造活性相関研究会代表幹事）

20世紀における科学技術の飛躍的発展は地球の一員とての人類のあり方にも大きな影響を与えた。今世紀のサイエンスに於いて特筆すべきは，量子力学と分子（構造）生物学の出現であろう。量子論は哲学的にも物質の本質の理解に関し我々に大きな変革を迫ったばかりでなく、化学分野においても分子の反応性，構造等の本質を究明するうえでも不可欠である。一方、分子生物学はワトソン-クリックによるDNA立体構造の発見を嚆矢として発展し、その後最近にいたるまでの成果は、まさに20世紀が新しい生物像の確立の時代であったとも言えるほどである。両者の発展を支えたのはコンピュータの出現であり、これ無くしてはサイエンスの目覚ましい進歩はあり得なかった。「計算化学」はコンピュータを駆使し、量子論の理論的展開とその応用に関し支柱的な学問領域となり，また分子生物学はゲノム解析、タンパク質の構造解析などに関するbioinfomaticsとして20世紀後半のサイエンスをリードしつつある。これらはともに「情報化学」が最も得意とする領域である。

さて，21世紀の「情報化学」を考えるにあたり，以下の視点があると考えている。一つはこれまでの「情報化（科）学」の成果が示しているように，21世紀は実用的ニュアンスをより強めた化学応用分野として発展するか、あるいは，「情報化(科）学」の中から今世紀の量子論や分子生物学に相当するような広範囲な領域を包括する新しい分野が出現するかである。これらは、それぞれ個々別々に考えるものではなく、おそらく複合した形で発展するであろう。例えば、触媒など高機能分子についての高精度な物性予測から開発など，応用的分野にこれまで以上に「情報化学」の果たす役割が期待され，そのポテンシャルは既に整いつつあると感じている。また、創薬の分野ではゲノム解析，コンビナトリアル合成とハイスループットスクリーニング技術とあいまって「新しい創薬情報化学」の構築と整備なくしては21世紀の創薬科学の発展は困難な状況に至っている。この場合、必要不可欠なのは生体分子間、およびタンパク質などの生体成分と内在性生理活性物質もしくは外来性の薬物との相互作用に関する情報である。特に相互作用に関与する物質の構造情報をダイナミックな視点で解

析することが重要である。これらは生体系の電子・原子・分子レベルでの機能解析から出発して生体システム全体の理解に向かうものであるので、応用分野としてばかりでなく生物体の機能を総合的に把握する方法論の構築に繋がる可能性が高いのではないだろうか。かつて、ハイゼンベルグが著書「部分と全体」で生体の部分（分子レベル）からの全体（生物個体レベル）の理解は程遠いであろうと述べているが，21 世紀は物質レベルからより複合した生体のトータルシステムの解析にチャレンジできる状況になるであろう。この様な状況は「情報化学」がこれからのサイエンスの発展を支えるべき存在になるであろうし、またそうでなければならないと確信する。基礎分野と応用分野の関係は「情報化学」を軸に従来にまして密接に関係しあい，互いにより迅速なフィードバックが行われることになるであろう。

さらに、情報関連の科学・技術発展によって学問領域の再編成が近い将来起こるであろう。21 世紀の細分化された学際領域，学会活動も「情報化学」を含めた情報関連分野の発展によって大きな変革を迫られるであろう。情報分野の発展は必然的に科学・技術分野ばかりでなく、一般社会全般に大きな影響を与えることになる。

これまで日本化学会情報化学部会主催の「情報化学討論会」と日本薬学会医薬化学部会主催の「構造活性相関シンポジウム」は共同で開催されてきた。このように異なる学会組織の学術集会が同一の日時と場所で長年に亘り共同して開催されている例は、密接な交流の歴史を持つ化学会と薬学会の間では勿論のこと他の学会に於いても見られない極めてユニークなものである。両者で用いられている方法論に共通性があることが持続性を支えてきた一因であるが、それと同時に友好的な人間関係の重要性も忘れてはならない。しかし、区切りの年となる 2001 年には、これまでの歴史をお互いに振り返り得られた成果は何か、これからの両分野の学術活動を一層発展させるためにはどの様な点を改善すべきかなどに関し大胆にしかも率直に総括をする必要がある。そうすることによりそれぞれの部会の学術活動が一層活性化すると同時に両者の関係がより "synergetic"に発展することになるであろう。躍動する 21 世紀であることを期待したい。

２１世紀に臨む情報化学

－有機合成法の情報化－

岡山理科大学理学部　有機結晶部会　部会長　戸田芙三夫
toda@chem.ous.ac.jp

化学者も高度なIT技術に裏打ちされた情報無くして暮らしていけないことは、今更申すまでも無いことで、書類や論文誌に埋れたかつての研究者の乱雑な机は、コンパクトなIT機器の乗ったスマートで小奇麗な机に変わっている。化学者が送受信する正確な情報が、化学の基礎や応用研究の進歩に多大の貢献をしてきていることは、停電すれば研究業務は停止し、人為ミスによる誤った情報は、つい最近の環太平洋化学会議（Pacifichem2000）のプログラミングの失態の如く、人々を著しく混乱させるなどの事例から明白である。

この化学情報操作を有効に活用したいと言う夢を、１人の有機結晶部会員の意見として申し述べたい。有機結晶部会には、構造解析、理論計算、有機合成化学、材料化学等々、各分野の会員が所属している。これらの研究分野の化学情報のうち、有機化合物のX線構造解析に関しては、ケンブリッジにX線解析のデータベースが存在しており、有効な活用が可能である。また、化合物のスペクトルデータ等の物性値や理論計算例なども化学情報として比較的取扱い易いと考えられる。これに対して、その数2000万にも達しようとする有機化合物の合成法に関する情報は、極めて煩雑で、そのIT技術による情報化は困難である。有機合成法の古典的な情報源は、Beilstein全書やOrganic Syntheses集、或いはChemical Abstractsなどであるが、日進月歩の合成技術を盛り込むことは至難の技である。有機合成化学に関する論文や特許は、新しい情報を加速度的な数量として提供し続けている。しかも、時代の要請に対応して、その情報の質やスタイルを変えつつである。例えば、環境汚染や資源、エネルギーの浪費が最小でなければならないなど、時代の要請を満足させる方法への転換を求められたりする。このためにも有機結晶部会では固体反応や無溶媒反応を開発して、環境汚染の少ない有機合成法を確立しようと努力している。

この環境問題も含めた最新の有機合成法を化学情報として提供するのは１国の能力の範囲を越える。Chemical Abstractsを支えているアメリカの手にも余るであろう。また、第一線の現役有機合成化学者には時間的余裕が無い。では、シニア有機化学者が情報化学者の助力のもと、情報収集、整理、発信を多国間協力で行うのはどうであろうか。IUPACに提案してみるのも良い。夢のような話で恐縮であるが、このような努力は能率良い合成ルートの情報提供だけでなく、有機化学者に「何でも合成すれば良い」とする意識の改革を促すことになり、惹いては化学物質即ち有害物質とする社会の意識をも変えて行こうと言う方向付けにもなる。

もう１つお願いしたいことは、研究分野を越えての有効な情報発信と交換である。いわゆる境界領域間の風通しを良くする努力である。興味深く、重要な化学や化学技術に関する情報を広く発信して、人々の関心を呼び、アイデアを集める有効な手段として機能することを願うものである。例えば、興味深い化合物が合成され、構造解析、物性研究、理論計算などは常套手段によって終了したとして、これらの情報を広く開示して新たな展開、科学での位置付けの哲学、応用に関するアイデアを交換できれば、その収穫は極めて大きい。このような国際的な作業によって、人類共通の財産が豊かになることを願うものである。

とだ　ふみお　TODA, Fumio
研究テーマ：有機固体化学、グリーンケミストリー、ホストーゲスト化学、分子認識、
分離と光学分割
連絡先：〒700-0005　岡山市理大町１－１　岡山理科大学理学部化学科、Tel 086-256-9604

バイオインフォマティクスからの期待

京都大学大学院農学研究科　西岡　孝明
nishioka@scl.kyoto-u.ac.jp

生物のゲノム DNA 塩基配列が断片的にしかわかっていない時代においては，バイオインフォマティクスの対象は，DNA の塩基配列の収集と配列に埋め込まれた生物学的情報を抽出し，遺伝子の翻訳産物である蛋白質の機能を同定することであった．しかし，ヒトゲノムの DNA 全塩基配列の決定で象徴されるポストゲノム時代においては，バイオインフォマティクスは遺伝子をはじめ蛋白質，代謝物質が統合された，細胞１個の生命活動を研究の対象としなければならなくなっている．また，実験解析技術も DNA マイクロアレイのように，細胞レベルにおいて発現している全遺伝子を網羅した解析データを提供するようになっている．それとともにバイオインフォマティクスの限界も明らかになってきている．特に化学反応が関係した生命現象の研究分野では情報化学の十分な協力がえられず，停滞すらきたしている．

これまで，バイオインフォマティクスと情報化学の接点を必要としてきた研究分野は，おもにドラッグデザインをはじめとする薬理関連研究であったが，２つの情報学の間に密接なリンクを必要とするにはいたらなかった．それは，従来の研究が，ある薬物の作用機構について研究する，その標的蛋白質の構造について研究するというように，個別的であったからであろう．例えば，ある薬物についてその作用機構を調べたいと考えると，まずその薬物に直接関係している蛋白質の構造や遺伝子のデータベース検索からバイオインフォマティクスの世界に入り，その世界を「サーフィン」しまわって終わる，ということで十分こと足りていた．すなわち，検索者がバイオインフォマティクスと情報化学の接点をつくっているだけで，２つの情報学の重なりはほとんどなかった．

生命活動のうち代謝活動は２つの情報学が重複している領域である．筆者は 1990 年からバイオインフォマティクスと情報化学との濃密なリンクをめざして，京都大学化学研究所において金久　實教授に協力して KEGG (Kyoto Encyclopedia Genes and Genomes) の構築と維持にたずさわってきた．これには現在，5,000 以上の生体内代謝物質について，酵素遺伝子，酵素蛋白質，その基質や阻害剤の化学構造，酵素反応の化学反応機構，複数の酵素反応が組み合わされた代謝経路などがデータベースとして収集され，生物学関連データベースとリンクされている．

実際にこのような作業にかかわってみると，バイオインフォマティクスに比べて生体内物質に関する情報化学のリンクはきわめて乏しいことが実感される．

このような違いがあるのは，２つの情報学の設立の由来や経済的基盤に起因することはまちがいない．なによりもバイオインフォマティクスははじめからインターネットを利用することを前提とし，ほとんどが公的な資金援助によって運営されている．ケミカルアブストラクツなどは財団など民間資金に依存しているため有料であることが，自由にリンクをサーフィンする高い障壁となっている．

しかし，情報化学部会の会員が寄与できることはずいぶん数多くあると私は思う．にもかかわらずなかなかそうはならないのはどうしてだろうか．１つはっきりしていることがある．バイオインフォマティクスでは，DNA 塩基配列やアミノ酸配列から蛋白質の立体構造や機能を予測するために必要なデータベースやツールを提供するという，共通の明瞭な目標がある．それに対して，情報化学がゲノム時代にあって何に寄与できるのかという共通の目標がまだ定まっていないのではないだろうか．

生命活動の解析やシミュレーション，薬物デザインなどに役立つ情報化学のデータベースやツールは何かという目標を設定することができれば，まちがいなく生命科学に大きな寄与をすることができるであろう．

これまで日本の情報化学は分析データベースやそれを利用した構造決定システムの開発，有機合成経路探索システムの開発などにおいて，多大な寄与してきたという輝かしい実績がある．そこで培った考え方を是非生命科学に応用してほしい．

シロイヌナズナが虫にかじられると，植物は約 1,000 種もの多様な遺伝子を発現させて食害に対抗していることが DNA マイクロアレイの解析から明らかにされている．しかし，これらの遺伝子発現から，植物内で誘導されている代謝活動の変化を推定することを可能にする情報化学的研究は未だほとんどみられない．有機合成経路探索という情報化学の優れたアイデアを生命活動の解析やデザインに応用するだけでも極めて大きな活躍の場が開けてくるだろうし，またそのように積極的な関与が生命科学から期待されているのではないだろうか．

２１世紀に臨む情報化学

２１世紀の量子化学計算と情報化学

西本吉助

１９世紀は化学者たちの想像力と洞察力と化学哲学によって、原子・分子の世界が確立され、化学が驚異的な発展を遂げた世紀であった。しかし、原子・分子の世界は見ることができない極微の世界であり、その点で神秘とロマンに包まれた想像上の世界であった。２０世紀に入って相対性理論と量子力学が誕生し、科学のビッグバーンが起きた。そして、莫大な量の科学知識と科学技術が生み出された。また、原子・分子の実体が理論的に明らかにされ、技術的には、原子を１粒づつ操作できる時代が到来した。

化学の研究も飛躍的な進歩を遂げ、２０世紀末には、合成された化合物の数は２０００万種類に達し、人間の手で整理して、必要に応じて検索し、目的の化合物の情報を取り出すことなどは絶対不可能なことになった。化学者の手で化合物を合成しておきながら、化学者の手におえない数になってしまったのである。２１世紀には、化学情報はさらに大きな洪水となって化学者を襲ってくる。しかし、幸いなことに、コンピュータが常識を超えるスピードで性能アップし、化学情報の大洪水を手際よく整理できるようになったことは朗報である。

情報化学は、化学情報（化合物の合成法、原子・分子の構造と性質、化学物質の物性と機能、化学反応のメカニズムなど）をデータベース化して、コンピュータに記憶し、必要なときに必要な化学情報を、有効適切に、そして速やかに提供する方法を研究する学問である。また、量子化学計算やシミュレーションによって、未知の分子の構造と性質（分子の理論設計）や機能設計、触媒設計、溶媒設計、反応設計などについての新しい化学情報を、有効適切に作り出す学問である。

ところが、分子の理論設計などの柱となる量子化学計算は、量子化学の第１原理であるシュレディンガー方程式が一体問題しか解けないという宿命のため、近似計算しかできない。それでも量子化学計算がもたらす知識は計り知れないほど豊富であるし、量子化学計算なしに、原子・分子や分子間相互作用の実体を理解し、化学反応のメカニズムを解明することはできない。ただ、難点はab initio計算の場合には、人間の手に負えない量の積分を計算しなければならないことであった。幸いにも、コンピュータの大進歩によって、現在では、人間の手で１００万年かかる量の積分も一瞬でできるようになり、さらに、計算結果を画像処理することによって、化学者の豊かな感性に快感をあたえてくれる結果が得られるようになった。かくして、量子化学計算を主体とするcomputational chemistryは、２１世紀の化学にとって必須のtoolとなった。

現在は、まだ、isolated moleculeの量子化学計算が主体であるが、２１世紀には、量子コンピュータが実用化され、計算速度が現在の１００億倍以上になると予測されているので、非線形問題や多体問題も含めた新しい量子化学理論の出現と、有効適切なプログラムの開発に支援されて、固体表面の分子、溶媒中の分子、化学反応のポテンシャルエネルギー曲面の計算とダイナミックス、DNA、たんぱく質分子、デンドリマー、複雑な金属錯体などの高機能性分子の量子化学計算が楽々とできるようになるであろう。そのような時代になれば、化学研究の楽しみはますます大きくなる。その２１世紀は今やってきた。

21 世紀に臨む情報化学

徳島大学薬学部・科技団 CREST ・生命化学研究会次期会長　　馬場嘉信

ymttbaba@ph.tokushima-u.ac.jp

日本化学会生命化学研究会は、生命現象を化学、あるいは分子の観点からとらえ、生命現象の本質の化学的理解を得ること、ならびに生体機能に学びあるいはそれを応用し、生体分子由来の新しい分子の創成を行うことを目的として、1998 年 3 月に発足しました。この間、生命化学に関連した非常に幅広い研究分野の研究者が集まり、研究成果の交流を行ってきました。

さらに、2000 年には、21 世紀の生命化学研究の方向性について、1 年かけて議論してきました。その結果、ゲノム解析の進展のなかで、生命を真似るのではなく、核酸なりタンパク質なりを改変して、自分たちの欲しいものを思うがままに作る“テーラーメード・バイオケミストリー”を実現するとともに、核酸、タンパク質、糖、細胞などの生命分子研究者が、各分野で活躍し、その範疇を越えない時代から、互いに情報を交換し、それらの分子の相互作用を明らかにし、生命化学の『ニューセントラルドクマ』を構築する時代を創り出していくことを目標にして、21 世紀に活動をさらに発展させることにしました[1]。

このように、生命化学研究会は、21 世紀に壮大な目標に向かって進み始めましたが、膨大なゲノム情報およびその多型情報・発現情報・相互作用情報・ネットワークなどを解析し、ゲノム科学を基盤として、化学による生体機能の創製と生命活動の再構築を目指した、新しい生命化学研究を進めるには、情報化学・バイオインフォーマティクス無くしては、これを実現できないことは明白です。

これまでも、生命化学研究は、情報化学から非常に多くの恩恵を受けてきました。しかし、ゲノム情報から全ての生物の個体、種としての生命のみならずその進化をも含めて解き明かし、ゲノム情報に基づいて、生命現象を演繹的に再構築していくには、もはや、生命化学研究者が情報化学を活用するのみでなく、両者の積極的な共同研究のみが、その解を見いだすことが出来ると考えられます。さらに、このような共同研究は、生命の理解から一歩進んで、人工 DNA、人工タンパク質に代表されるような化学による生体機能の創製をも可能とするものです。

生命化学研究会は、21 世紀に、化学において若い人を引きつける新たなコンセプトを生命化学を軸に提案したいと考えています。生命化学と情報化学の協力・共同が、新たなコンセプトを創り出すことを期待したいと思います。

1) 馬場嘉信、三原久和、浜地格、杉本直己, 化学, **56**(2), 12-18 (2001).

ばば　よしのぶ　BABA, Yoshinobu

81 年九州大学理学部卒業、86 年同大学院博士課程修了、86 年学振特別研究員、大分大教育学部助手・講師、神戸薬科大学講師・助教授を経て、97 年より徳島大学薬学部教授、99 年より科技団 CREST 研究代表者、00 年より通産省 NEDO 地域コンソーシアム研究開発事業研究代表者、01 年より日本化学会生命化学研究会会長

連絡先　〒770-8505　徳島市庄町 1-78　徳島大学薬学部薬品物理化学教室

21世紀には発信できる情報化学へ

東海大学開発工学部　平山令明
hirayama@wing.ncc.u-tokai.ac.jp

残念ながら日本は情報科学および情報技術の先進国ではない。特に情報化学は欧米先進国に大きく遅れていると言わざるを得ない。情報という言葉が単なるデータの寄せ集めという見方が日本では長い間支配的であり、現在もその状況は大きく変わっているとは言い難い。日本で始めから作られ、それが世界中で使われているデータベースは少なくとも著者の研究分野周辺では皆無と言える。情報化学を遂行していくための基本的なデータベースの役割は非常に大きく、信頼できる十分大きなデータベースがなければ、情報化学は成り立ち得ないとも極論できる。21世紀も日本はこうしたデータベースを欧米に頼っていて良いのだろうか。

ゲノム情報の読み取りの目鼻がほぼつき、21世紀にはこれらの情報も活用した何かが具体的にできるようになる。その中でも薬を作ること（創薬）が重要な項目の一つに挙がっている。創薬を行っていく上で、情報化学は極めて重要な役割を果たす。ゲノム情報は、開発を目指す標的分子については教えてくれるが、具体的に薬を作るとなると、その情報だけでは何の役にも立たない。薬を創製するには、少なくとも標的分子の構造に適合し、生体の他の部位で好ましくない作用をなるべくしない化学物質を見つける必要がある。こうした化学物質を発見する作業には、少なくとも2つの重要な立体構造データベース、特にX線結晶解析で得られる原子座標データが必須である。一つは標的分子になり得る生体高分子のデータベースであり、もう一つは新しい医薬品を設計するための土台になる低分子有機化合物データベースである。

生体高分子のX線解析座標データはProtein Data　Bank（PDB）に収録されている。数年前より米国ラトガース大学が中心になってその管理運営が行われている。PDBの運営にはアメリカ合衆国が深く関与している。しばらく前までは企業での研究者はPDBを使用するにあたり、若干の費用を支払う必要があったが、現在ではそのデータはインターネット経由で自由にアクセスすることが可能になり、かつ基本的に誰が利用しても無料である。一方、低分子有機化合物の座標データは、現在ではThe Cambridge Crystallographic Data Centreにその管理運営が任されている。数年前までは国内のアカデミアの研究者には無料で配布されていたが、現在では基本的に有料である。また企業で使用する場合には極めて高額の使用料を払う必要がある。これら2つの国際的なデータベースの運営方式は実に対照的であるが、そのどちらの運営にも日本は余り深く関わっているとは言い難い。日本は殆どがエンドユーザーに徹していると言える。少数の研究者が欧米の機関と接触しているが、その内容はガラス張りではなく、ユーザーからは全く見えない。例えば、データの配布が遅れたり、データの書式が変われば、大きな影響が各分野に波及するはずであるが、日本ではそのような問題に殆ど関心が払われていないのが現状であろう。

科学をバランス良く発展させるための情報化学の役割を考える時、データベースの重要性は今後益々高くなることはあっても低くなることはない。これに関与する情報化学の専門家の責任は本来かなり重くなるはずである。国内には、情報化学の専門家が作る幾つかの組織がある。情報化学の一つの大きな基盤であるデーベースの重要性はどの組織にとっても変わらないはずである。私は、21世紀にはこうした組織が共通の基盤としている化学の基本データベースについて、共同して意見を発信し、活動をすべきであると思う。例えば、先の二つのデータベースについても、その運営に日本としてもっと積極的に協力して行くべきであり、その具体的な事柄について産業界も含め広く意見を集約すべきであろうと考える。少なくとも公知のデータは産官学を問わず原則無料にすることが、学問および産業の発展のために必須であろうし、いわゆる情報公開の原則にも適うだろう。私はこのような科学技術に関する情報の流通にこそ各種学会が果たすべき大きな役割のひとつがあると思う。21世紀には、日本がデータベースのエンドユーザーから抜け出して、積極的に発信できるようになって貰いたい。できれば、国際的に通用するデータベースの開発にも進んで貰いたい。その為には、学界横断的な組織を作る必要が大いにあると強く感じている。

ひらやま　のりあき **HIRAYAMA,Noriaki**（〒410‐0321 沼津市西野317　東海大学開発工学部生物工学科）

２１世紀に臨む情報化学

分子シミュレーション研究会会長　金沢大学理学部教授　樋渡保秋

液体に対する最も単純なモデルとして、二次元剛体球流体の計算機シミュレーションがはじめて報告されてからすでに約半世紀になる。この間、分子動力学（ＭＤ）法やモンテカルロ（ＭＣ）法などの分子シミュレーション手法を用いた研究の発展には目を見張るものがあり、当初の低分子溶液やガラスにとどまらず､現在では液晶やたんぱく質をも研究領域に含む大きな学問体系を形成しつつある。これは、２０世紀後半におけるコンピュータの飛躍的な発展を追い風として、統計力学や古典力学、そして量子力学をも駆使した方法論の長年にわたる地道な発展の成果として実現されたものである。

これまでの分子シミュレーションの方法論開発においては、物質の複雑きわまるふるまいに対する物性研究の一環として、これをいかにして高精度にシミュレートできるようにするかが主たる目標であった。そして分子シミュレーションは、あくまで分子間相互作用から得られた力に基づいて、多数の原子、分子に対する運動方程式を厳密に解いていくというスタイルを保ちながら、凝集系の理論的研究に多大な成功を収めてきたわけである。

この方向は､２１世紀においても多くのシミュレーション分野でそのまま受け継がれていくだろう。たとえば、密度汎関数法や *ab initio* 法とＭＤ計算を組み合わせることにより、系の電子状態をも同時に記述することのできる第一原理ＭＤ法の展開もその一つである。今後、方法論の改良を着実に積み重ねていくことにより、化学者にとって長年の課題であった溶液内化学反応の理論的研究にも新たな道が切り開かれるだろう。また、現在ポストゲノム研究として注目を集めているアミノ酸配列からのたんぱく質の折れたたみ構造の予測も、アンサンブル発生技術に対する不断の努力に加えて、バイオインフォーマティックスなどとも組み合わせることにより、ある程度は可能になるのではないかと期待される。

しかしながら、生命現象そのものや高分子材料のダイナミックスに代表されるような巨大な系の長時間にわたる運動を直接追跡していくことは、現在のＭＤ法のスタイルに従う限りとうてい実行不可能であるように思われる。現在すでに、系や力の疎視化という考え方に沿っていくつかの試みがなされてはいるが、このような問題に対して、原子、分子の運動方程式を解くという現行のＭＤ手法を越えたどのような方法論があり得るのか、そしてその中でどのようなものが有効であるのかについてはほとんど不明のままである。これは、分子シミュレーションにおいて解決すべき大きな課題のひとつである。

一方で、ＭＤ計算の工学的応用、産業技術としての確立ももうひとつの大きなテーマである。ここで目指すのは、物理化学や物理の研究として実験を補完することではなく、たとえば材料開発指針を得るために実験に代わる物性予測技術を確立することである。しかしながら、これもなかなかに難しい課題である。つまり、これは実験とシミュレーションのどちらが優れているかという比較の問題であり、極めて特殊な場合をのぞくと、今のところ実験の方がはるかに強力だからである。これを逆転できる道筋をつけ、材料開発をより効率的なものとすることが２１世紀に求められている。

分子シミュレーション研究会は、分子シミュレーションという方法論を共通にする化学、物理、生命科学などの研究者の集まりとして､既存の学会の枠組みを越えて横断的に組織された研究会であり、上に述べたような考えに立って、新しい計算機シミュレーション手法の開発と、分子シミュレーションの具体的な系への応用を二本柱としている。研究成果の普及はは活動の重要な部分を占め、年一回の分子シミュレーション討論会を主催し、さらには分子シミュレーション分野における産官学連携のあり方についても検討を進めてきている。一方で、若手研究者の育成を目的に学生を対象とした夏の学校を開き、また、計算現場のレベルアップの一助となるべく講習会開催等の活動も行っている。

本会と日本化学会情報化学部会とは共通の理念も多々見出され、ジョイントシンポジウムの開催や国際会議の共同企画など、互いに協力しながら活動を広げていくことができればと思っている。

ひわたり　やすあき　　HIWATARI, Yasuaki
連絡先　〒920-1192　金沢市角間町　金沢大学理学部

２１世紀に臨む情報化学　－　その学際的な広がり

Computer Aided Chemistry (CAC) フォーラム代表　船津公人
funatsu@tutkie.tut.ac.jp

情報は相互に連鎖し合いながら発見的世界を創出する。もはや特定の分野だけの情報だけでは、今後直面する課題には対処できないと言ってよい。効率的な研究開発の実現、環境問題への対応など、コンピュータ化学に関わる情報は多岐に亘り始めている。分子設計、材料設計そして合成設計を行うにしても、プロダクトライフサイクルやレシポンシブル・ケアを意識しただけで、他の分野からの様々な情報を必ず加味しなければならない。一人の研究者が直接関わることのできる分野や情報には限りがあることを考えると、いわゆる学際的な広がりを持つ情報の流れを円滑なシステムとしてどのように実現し、研究開発の効率を上げる仕組みとするか。今まさにその仕掛けを具体的にイメージし形として実現すべき時期に来ているのではないだろうか。このような設計や予測のために必要な情報の円滑な流れには、その源流とも言うべきデータベースの構築と整備が肝要であると同時に、関連する情報を有機的にリンクする仕掛けも求められる。まさに情報の体系化であり、知識の構造化である。

これまでに研究開発されてきたデータベースや計算ツールなどは、それ自身で完結するものとして開発され、必ずしも他のシステムとの間で整理されているとは言い難い。したがって、すべての計算ツールやデータベースの利用法に通じていないと適切な利用はできないという問題を抱えていた。最近これを解決する方策として、XMLによるデータ表記や知識の体系化が取り組まれようとしており、さらにCORBAなどの分散オブジェクト指向言語を用いて、計算ツールの規格化された通信を実現するオブジェクト化が検討され始めた。このメリットは、ネットワークを通してさまざまなデータベースや最新の計算ツールを開発者自身が容易に提供できることや、それらが世界的な規模で一つのシステムのように組織化されることにある。このために、場所や計算ツールの煩雑さなどを意識することなく目的とする情報を検索・計算することができ、利用者の負担の大幅な軽減につながる。

２１世紀は、このように情報自体が新たなネットワークを構成し、それがあたかも設計や予測のための地図のような役割を果たすことになろう。この地図（知識の構造化）によって、求めるべき位置への適切なナビゲーションが行われ新しい知見の発見がもたらされるものと期待される。研究開発のみならず生産活動の効率化などにおいても、関係する情報の入力と出力の連鎖の流れの中でコンピュータ化学の新たな役割も見えてくるのかも知れない。まさに情報が整然とした一つのかたまりとなる時代を予感させる。

Computer Aided Chemistry (CAC) フォーラムは、有機化合物の構造推定システムCHEMICSを正しく理解し、コンピュータ化学の理解者の裾野を広げることを目的に平成２年に発足したCHEMICS研究会の発展的な集まりとして平成８年にスタートした、産業界と大学、公的機関のメンバーにより構成される組織である。構造解析・合成設計・分子設計・材料設計・ケモメトリックスなど幅広い分野を対象分野として活動を展開している。その活動の内容などについてはＣＡＣフォーラムホームページ (http://www.cac-forum.gr.jp)に詳しいのでそれをご覧下さい。ＣＡＣフォーラムの活動では、国産のしかも大学で開発されたソフトウェアの実用的な利用を中心として活動を展開している点で特色があるが、立場や考え方の異なる企業・大学の研究者が率直に意見を出し合い、真に役立つコンピュータ化学ソフトウェア設計とその実現を目指そうとしている。いわば草の根的な活動である。その草の根的な活動を通して自分達が関わっている情報の真の意味を理解し、他の情報との連携のあり方などを浮き彫りにさせようとしている。化学は多くの分野と関係する極めて学際的な分野へと変貌している。情報化学は知識の構造化を通してそれを先導する大切な役割を担っているのではなかろうか。

ふなつ　きみと　FUNATSU, Kimito
連絡先：〒441-8580 愛知県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
Tel: 0532-44-6879（直通）, Fax: 0532-47-9315（直通）

21 世紀の化学情報

CAS 所長　Robert J. Massie

今後数年間は、後半で極めて多様な科学技術データのリポジトリが Web もしくはそれがさらに発達した通信チャンネル上に誕生すると思われます。科学技術情報産業界は、最近までは夢物語と考えられていた、「真に統合されたデジタル科学技術研究環境」を構築しようとするでしょう。リンクやデータ蓄積にかかる費用がますます低下することに伴い、この統合環境は一層国際的で、学際的なものとなります。出版界の大手はすべてその方向を目指しています。

電子情報をリンクしている例には Ovid の OpenLinks や Elsevier の ScienceDirect があります。また出版社の共同事業として最近始まった CrossRef もその例です。米国化学会の出版部門のひとつである CAS と STN の共同事業として開始された ChemPort はさらに広範なものであり、多くの雑誌出版社との協力がますます広がっています。ChemPort では、CAS または STN 電子情報の利用者が、データベースの文献から、該当する出版社や特許庁の Web 上にある雑誌論文や特許の全文にリンクできます。ごく最近にはこの ChemPort の技術を使って、各出版社の電子ジャーナルの引用文献からデータベースの文献情報にリンクすることもできるようになりました。

米国政府機関の一部では、たとえば国立衛生研究所 (National Institutes of Health: NIH) のように、税金を使って科学情報を Web 上で提供するのが使命のひとつである、と考えるところもでてきています。NIH は、研究者が一切の「障壁無し」に研究報告にアクセスできるようにするため、PubMed Central で論文を受け付けるようにしました。科学論文の著者は、彼らの知見を Web を使って直接出版し、同僚に無償で読んでもらえるような新たな道を模索しています。

過去には、情報サービスの力点は「価値へのアクセス」、すなわち「見つけるのが困難な」情報を的確に検索できるという点に置かれていました。今後は、情報サービスの力点は「価値の統合」に置かれると思われます。すなわち Web その他の場所に散在する情報をいかに統合して提供するかということです。個々の情報は Web 上のどこかには「無料で」存在しているでしょうが、これらをいかに統合して便利に、有効に提供して、生産性を向上させるか、というのがサービスの価値となります。先んじて立ちあがった「価値の統合サービス」提供者は、この新しい Web 世界において強力な位置を占め、利用者と協力して成長し、引き続く情報産業の発展の成果を享受することになるでしょう。

触媒のコンピュータケミストリー

触媒学会コンピュータの利用研究会代表 東北大学工学研究科　宮本　明
miyamoto@aki.che.tohoku.ac.jp

ドラッグデザインから始まったコンピュータケミストリーも、２１世紀に入り、いよいよ複雑な実用系への展開が拡がっているが、触媒のコンピュータケミストリーもそのような領域の一つである。触媒学会のコンピュータ利用研究会は、触媒分野へのコンピュータ利用を飛躍的に有効かつ実用的な手法にするために、長年の活動を続けてきたが、いよいよ本格的な成果が現れる時期となった。幅広い連携を推進する核としての情報化学部会への期待は大きい。

1　はじめに

触媒学会にコンピュータ利用研究会が創設されたのは、１２年前のことである。現在では、産官学の研究会会員７０名を擁し，毎年、触媒討論会に合わせて、コンピュータ利用セッションを開くとともに、講演会、講習会の開催に加え、国際会議も開催している。量子化学を中心に、分子動力学、ニューラルネットなど多彩な手法を駆使することにより、触媒分野へのコンピュータ利用の促進を図っている。この間の地道な努力により、触媒分野へのコンピュータ利用が急速に拡がってきている。

2　触媒計算化学の進歩

２年前に、ノーベル化学賞を量子化学に関するPople 教授と、Kohn 教授が受賞したが、これは、触媒の歴史の中でも極めて意義あることであると思っている。特に、Kohn 教授による密度汎関数法により周期表の全ての元素について、信頼性のある計算が、比較的高速かつ大きな系にも適用されてきた。これにより、触媒に量子化学が急速に普及し、多彩な触媒機能の解析に活用されてきている。すなわち、貴金属、希土類、酸化物、硫化物など多様な状態についての計算が日常化することにより、触媒の構造や機能が電子レベルで解明されてきている。また、ab initio 分子動力学法も触媒分野に適用され、触媒の本質であるダイナミックスに関しても原理的な理解が進んできている。信頼できる量子理論は、信頼できる原子間ポテンシャルの開発を促進し、分子動力学法、モンテカルロ法の有用性を高めることにより、吸着現象、複合触媒構造、拡散ダイナミックスの解明を進め、触媒調製、活性劣化、被毒現象など実用触媒系への展開、触媒設計への発展を推進している。まさに、理論をベースにする新しい触媒の化学と工学の到来を実感させてきている。そのような進歩を背景に、最近では、計算化学による絨毯爆撃的なスクリーニングを目指すコンビナトリアル計算化学の概念も生まれ、新しい触媒系の予測も行われてきている。

3　２１世紀の触媒技術とコンピュータケミストリー

２０世紀の後半より環境分野への触媒の適用が急速に進んでいるが、２１世紀においてもさらに大きな期待が高まっている。光触媒、燃料電池技術、高温触媒反応、グリーンケミストリー、メソポーラス多孔体など触媒の役割は益々拡がっている。計算化学は、このような触媒への期待を実現するキーテクノロジーとしての役割が期待されている。

4　情報化学部会への期待

コンピュータ化学も草創期から成長期に入り、具体的な課題に対し、成果を出せるような時代になって来たので、各専門分野ごとに、特化したやり方での活動が進んでいるが、同時にそれらの成果を交流し、さらに質の高い貢献ができるようにすることも必要であろう。その面で、化学会に基礎をおく情報化学部会が、今回のように、統合的な役割を果たすことは意義深いことと考えている。

化学物質の環境挙動に関する研究

（財）化学物質評価研究機構
宮本純之

よく知られているように環境に放出された化学物質はその物理化学的性状と環境諸要因との相互作用の結果、移動、拡散、局在（濃縮）、分解を受け、また生物体内で代謝を受ける。これらの過程で生成した分子種の中には生物に対して有害な作用を及ぼすものもある。したがって化学物質のリスク評価を行うにあたっては、このような代謝を含む環境挙動を明らかにすることがその前提として必要である。

最近内分泌攪乱作用をもつとされている化学物質においても環境挙動に結びつけてはじめてその作用の全貌が明らかになることがすでにいくつか知られている。例えば、エストロゲン様作用をもつ ***p,p'*-DDT** はある環境条件下や生物体内で ***p,p'*-DDE** に変換されるが、後者は前者とことなり、抗アンドロゲン作用をもつ。

また、ヒトや家畜から女性ホルモン（エストラジオール）はグルクロン酸抱合体となりもはや女性ホルモン作用をもたない形で排泄されるが、水系環境では微生物によってもとのエストラジオールを再生することが確かめられている。例えば、英国の河川で観察されている淡水魚の女性化の主原因はこのように生成したエストラジオールであることがほぼ明らかになっている。このような例は、化学物質に関する広域的な環境モニタリングにおいてももとの化合物のみならず生成物に対しても十分に留意すべきことを示している。

日本化学会はその環境関連活動を強化するためすでに「環境憲章’99」を策定し、その活動の一環として化学物質の総合管理に関する研究の推進に努めているが、その一部として環境動態研究会を昨年発足させ、第７８春季年会においてシンポジウム「内分泌攪乱物質の代謝・分解とその生成物の評価」を行った。これにひき続き平成１３年１月２９日には「内分泌攪乱性化学物質研究の最近の動向」と題した集会を実施する計画である。

いよいよ２１世紀

姫路工業大学理学部　安岡則武

世紀の切れ目で、技術が一足飛びに発展するわけではない。年が改まったから　いいことが始まるわけではない。こんなひねくれたことを考えるのは　明らかに人生の半分以上を生きてしまった者だからであろう。

２０世紀を振り返って、大きい影響を与えた技術革新はさまざまであるが、やはり最大のものはコンピューターであろう。筆者はX線による結晶構造解析とその関連分野に数十年間従事してきた。そろばん、計算尺、手回しの計算機（タイガーという商標であった）からはじめて、電動加算機、リレー計算機、そして電子計算機へ移ってきた。それぞれの時代における最高の計算機能を求め歩いた。大型計算機システムの時代を経て、ダウンサイジングの現段階に至った。筆者たちの計算需要は　数年前の段階で手元における規模のもので間に合うようになった。もちろん、データベースとかグラフィックスとか計算機能にプラスするハードウェア、ソフトウェアが必要であるし、機種の更新に追われて貧乏暮らしであることには変わりがない。

２０世紀の半分くらいの年月でこれだけの発展があったのだから、２１世紀中にはこの２倍の発展が望めるのであろうか。おおざっぱに言って　１０年で１００倍の性能になるという右肩あがりの成長が期待できるのであろうか。それを予測するには具体的な要素技術の検討が必要であり、筆者には分からない。１０年で１００倍、したがって１００年では１００の１０乗倍の発展があるとすると、これは予測不可能の事態である。

２０世紀における各種の技術の発展を眺めて見ると、分野による違いが大きいことに気がつく。コンピューターは発展の大きい分野の代表であるが、実際にものを作る農業や工業は、発展はあるものの１０年で１００倍というような発展は期待できない。ということは、コンピューターの発展にはどこかでブレーキがかかることを示唆している。

今　IT ブームである。たとえばインターネットで新しい市場が開けることなどが喧伝され、ITが景気回復の鍵を握るように考えられている。しかし、それは錯覚である。既存の市場が移動するに過ぎない。もちろん一時的には新規の需要が喚起されることもあろうが、定常状態になったときを考えると　ある商品の総需要には大した変化がないであろう。IT はものを作り出すわけではない。

コンピューターを道具として使う計算化学・情報化学の分野もそうである。コンピューターの著しい性能の向上で　たとえば今まで計算できなかったタンパク質超分子複合体などの ab initio 計算が可能になる時代が来るかも知れない。しかし　そのような　規模の拡大、量的拡大はあまりインパクトにはならないのではないか。大切なことは質的な進歩である。発展したコンピューターの性能に惑わされることなく、本質的なことを発展させたいものである。ある世界的な計算機メーカーがコンピューターの側に置いていた　標語　think を思い出す。

２１世紀に臨む化学反応予測

旭化成　山田知純

省資源、省エネルギー、そして有害な副産物を出さないグリーンケミストリーへの要請は化学界のコンセンサスになっている。化学反応の分野では、化合物合成、高分子重合用の収率、選択性の高い新規触媒の発見や、また現行触媒の改良などが強く求められている。この分野で情報化学に課せられた課題は非常に大きい。

新規触媒の開発では、反応機構を解明し、中間体が出来るのであればその構造を知り、遷移状態、活性化エネルギーを予測することが情報化学の王道である。残念ながら、今の情報化学にはこのための常道（実用になるほど精度があって、かつ高速に行える常道）はない。

低分子同士の反応では、構造は精度よく求められるからその点では問題ない。しかし、触媒、特に不均一系の触媒を用いる場合は、構造からして大問題である。正確な構造が分からなくては、活性点も分からず、機構の解明のしようもない。ゼオライト系触媒は構造が比較的よく分かっているようだが、金属酸化物触媒などはなかなか分からない。構造を求めるにMMでは心許なく（パラメーターもない）、かといって第一原理分子動力学は計算速度から言って事実上不可能である。しかも、分析で構造を求めることも困難なことが多い。

計算化学による分子構造と電子構造の解明は触媒設計に関する多くの有用な情報を与える。計算化学の使命は重大である。

触媒改良の場合には、改良された触媒の活性化エネルギーが現行触媒に比べて、高くなるのか低くなるのかを高い信頼性で予測する必要がある。0.1kcal/mol 低くなっても反応速度は約２０％アップする。収率で比べれば、場合によってはもっと大きな差になることもあるだろう。企業では数％収率を上げることに血眼になっている。当たり前のことだが、この程度の差がはっきり出ると情報化学を使って良かった、と言う気になるのではないか。絶対値が分かる必要は無い。比較対象（現行触媒）との相対値でよい。ここまでは無理としてもせめて 1kcal/mol の相対精度は欲しいところである。この程度の相対精度があれば良いスクリーニングが出来る。高い信頼性を保障するには、モデル化するのではなく、リアルな系がそのまま扱えなくてはならない。また、活性化エントロピーも無視できないはずである。しかし、こうなると計算は数段困難になる。リジッドと見なされる分子であれば、理論的な計算が可能であるが、フレキシブルであればいまのところお手上げに近い。

計算機性能の進歩は誰もが指摘するように目を見張るものがある。しかし、どれほど進歩しても、それだけでは今要求される信頼性や精度に必要な計算量をまかなうことはまず不可能である。計算化学の側での理論の進歩、アルゴリズムの改良がなければならない。例えばHOMO-LUMOを越える反応理論の出現が望まれる。何かブレーク・スルーが必要なことは確かである。非常に困難ではあろうがこれを避けて通ることは出来ない。

問題の複雑さを考えると、計算で解析・予測出来る範囲は当面限定されてくる。既知の実験値と計算値から有用な関係を見いだして推論する構造活性相関や知識データベースの方法論を有効に利用することが必要である。

combinatorial chemistry による触媒探索も非常に有効な手段となりうるが、高速合成、高速評価が出来るのは限られた領域であろうし、高速合成、高速評価ができても組み合わせの数はそれ以上ある。計算化学によるガイドとの相乗効果を出すことが課題である。

ＪＣＩＩの「化学反応シミュレータ」開発先導研究ではこれら困難な課題に答えるべくプロジェクトを立ち上げようとしているところである。

注）ＪＣＩＩの立場からのコメントという話であったが、上記は全くの個人的見解であることを付記しておきたい。

「21 世紀に臨む情報化学」

奈良教育大学　教育学部　山邊信一
yamabes@nara-edu.ac.jp

インターネットの普及、演算速度の飛躍的増大等、この 10 年間を振り返っても、化学に限らず、コンピュータの進歩とその貢献は目を見はるものがあった。著者は、情報化学の中の計算機化学の仕事に従事して約 30 年になるが、このコンピュータの状況により、扱う研究テーマが現実化したと実感している。今や、実験を行う前に、化学反応の起こり方を予測し、設計に寄与するような計算機シュミレーションは日常化していると言っても過言ではない。このようにコンピュータの進歩と優秀な計算機化学のソフトウェアのおかげで、化学の中で「計算機化学」の分野は１つの地位を築いた。この分野の発展のため、次世代を担う若い研究者に、多く参画してもらう必要がある。反応制御、機能性新物質創製のため、彼らが企業での戦力たるための技術・能力を挙げる。

１）物理化学、有機化学の基本的知識・理解と、これを基にした情報"洪水"への取捨選択能力。

この素養が無ければ、いかにコンピュータを駆使して反応をシミュレーションしても、その数値計算の結果の解析・評価ができない。情報化学の別の分野、情報リテラシー・化学情報の戦略的活用、の活性化のためには、上記の基本的な学問の素養が必須である。化学情報は狭い専門分野を縦断して流れてくる。これらを自分のテーマへの付加価値とするか見逃してしまうかは、結局は基礎学力が左右する。計算機化学の手法は、化学の総合的問題解決である。

２）実験化学者との日常的なコンタクト。

化学は、やはり、実験科学である。モデルの設定、反応経路の可能性、実験条件等、計算機シミュレーションを実行するに際し、現実の問題を正しく反映しているかの検討が必要である。このため、生の情報として、実験の"実況中継"を観察するか又はその臨場感を聞き出す努力が必要。それならば、計算機化学者が実験も行うことが最善ではないかの考え方もある。しかし、21 世紀になり、計算機化学の手法が高度化・複雑化した段階では、これでは組織グループ全体としては生産性は向上しないだろう。

３）　計算結果の多角的な分析・吟味・評価能力。

ある反応体の組み合わせにより起る化学反応での生成物の予測や、経路のシミュレーションを行うと、多量の数値計算結果が出力される。まず、エネルギーと構造に目が向き、それらへの考察で終始してしまう事が多い。もちろん、それらは計算機化学での標準量であるが、これ以外にも分子軌道のエネルギー、電荷分布、分子軌道の係数等、多くの情報が算出されている。計算機化学が求める分子・分子集団系の電子状態は化学の最も基本的情報である。１）で「化学の総合問題解決」と述べたが、この基本的情報を注意深く吟味・評価し、対象としている反応系の姿を明らかにしていく姿勢が求められる。化学は物質の個性（反応性・物性）を追求する学問である。上記の有用な数値情報をていねいに、化学的に吟味、検討すれば、必ず、何らかの物質の個性が見えて来るはずである。

計算機化学の手法で、起こっている現象への論理的枠組みが構築できた時、知的感動を覚える。上記の３点を踏まえて、21 世紀に日本で優秀な計算機化学の研究者が育ち、この感動を覚えていただきたいと思う。

やまべ　しんいち　　YAMABE, Shinichi
連絡先　〒630-8528　奈良市高畑町　奈良教育大学

21 世紀に向けた情報化学系の学協会のあり方

福井工業高等専門学校　物質工学科　　吉村　忠与志
tadayosi@fukui-nct.ac.jp

1　はじめに

高度情報化社会となり、IT(Information Technology)革命とか言われて、インターネット利用がモバイル主流となりつつある今日、少しも景気は良くならないが、IT 機器だけは時間の経過が早く、驚異的な進歩であっという間に機種が古くなってしまっている。ほんのちょっと前に公開されたインターネットが今やあらゆる分野で利用されて、1 つの情報の流通形態を形成し無視できないところまできている。お願い事はメールで、情報の公開はホームページで、モバイル使用はｉモードでと、凄まじい情報化社会である。IT 革命は社会生活における時間と空間に大きな変革をもたらしている。学協会でもしかり、ホームページを持たない団体は無く、学術論文誌も電子ジャーナル化しつつある。IT 革命の波とともに 21 世紀に向かわんとしているミレニアム師走の現在である。

2　情報化学系の学協会

これまでの情報化学系の学協会は、いい意味で切磋琢磨の時代であった。個々に必要とあれば、学協会を結成し学術活動を行なってきた。我々も 1982 年に「化学 PC 研究会」を結成し、学術活動を推進していく中で、必要に応じた学術活動を実施してきた。特に、オンラインで無かった時代での無償利用ソフトの頒布、デモンストレーション付きの研究討論会、プログラム公開の学術論文誌の発行等がある。それは、1992 年に「化学ソフトウェア学会」と改組して日本学術会議に登録し、論文誌 *"The Journal of Chemical Software"* の発行をメインに、先の学術活動を継承してきた。情報化学系の学協会における学術論文誌では、日本語でも採用されるのはこの論文誌だけという時代があった。さらに、論文誌の全文データベースの公開も実施し、早くからの電子出版を実現してきた。この電子ジャーナルの存在は、インターネット上での検索･閲覧では他の論文誌に対して群を抜いていたと自負している。

3　21 世紀に向けた学協会のあり方

情報化学系の学協会を挙げると、本学会情報化学部会、化学ソフトウェア学会、日本化学プログラム交換機構(JCPE)、CBI(情報計算化学生物)学会、構造活性相関シンポジウム、理論化学計算研究会、分子構造討論会などがあり、個々に学会活動しているものの、会員は二重に三重にと重なって不自由な思いをしている。個々に古今奮闘する時代を終え、一統団結した学協会運営が必要な時期に来ていると思われる。我々化学ソフトウェア学会が電子ジャーナルを発行しているが、各学協会でも学術論文雑誌や電子ジャーナルを個々に発行し始めている。それは決して 21 世紀に向けたあり方ではない。小さい山がたくさんあっても大きな木はならない。海外の雑誌に負けてしまう。この辺で論文誌 *"The Journal of Chemical Software"* の先進性を認めていただき、海外に誇れるジャーナルを育てようではないか。我々は化学ソフトウェア学会と JCPE との合併を 2001 年 4 月に行ない、新たなる大きな輪を広げようとしている。

よしむら　ただよし　YOSHIMURA, Tadayosi
連絡先　〒916-8507 鯖江市下司町 16-1　福井高専物質工学科

21世紀に臨む情報化学

化学電池材料研究会会長 (東京工業大学大学院 教授) 脇原將孝

21世紀は地球規模で環境問題、エネルギー問題、人口問題等に対峙せざるをえない事が明白である。これらの事柄は科学技術の利用・発展とも密接に関連し、これからの情報科学(情報化学)はその潤滑材の役割を努めて行く事になろう。

我々化学電池材料研究会のメンバーは種々の電池材料の開発に携わり、エネルギー貯蔵・有効利用等につき常に問題意識を持っている。電池の重要性は携帯電話をはじめとする各種小型電子機器の発達と共に急速に高まり、それはやがて21世紀の主用産業の一つとなるであろう電気エネルギー貯蔵あるいは電気自動車(EV)用電源のような大型電池開発につながって行くと考えられる。

電池には使い捨て電池である一次電池と充放電が可能な蓄電池である二次電池がある。二次電池は廃棄型社会から循環型社会への移行に対応できるため、現在既に電池産業の約7割を占めているが、近い将来にはその比率を益々高めて行くだろう。1990年代に入って、従来の二次電池である鉛蓄電池やニカド電池に代わってあらたにニッケル水素電池とリチウムイオン電池が登場した。ニッケル水素電池は公称放電電圧が従来のニカド電池と同じ1．2Vであるがエネルギー密度がニカド電池の約1．5倍に達する高性能を有する。一方リチウムイオン電池は公称平均放電電圧が約3．6Vであり、特に重量当りのエネルギー密度はニッケル水素電池に比し約1．5倍に達する。リチウムイオン電池は従来の他の電池とは異なり、充放電には一般的な化学反応ではなく構造の隙間にリチウムイオンが挿入・脱離するインターカレーション反応を利用している。このため正極および負極の材料設計にはイオンの拡散パスの有無や構造内にイオンが占めるサイトの情報が必要となる。リチウムイオンの拡散が容易であればあるほど出力密度即ち大電流が取り出せる電池になる。また構造内にリチウムイオンの占めるサイトが多くあればあるほど高エネルギー密度材料となる。しかしながら構造にそのようなサイトが増えれば自ずと構造が不安定になり、電池材料開発においては常に二律背反の世界を実感する。

最近、電池材料開発においても計算機化学、分子動力学等が導入され、それらの結果に基づいたミクロからマクロへのシミュレーションも行われるようになり、情報化学との接点が見え始めた。バランス感覚を必要とする電池材料設計にこそ情報化学からのミクロな“状報”が大切となる。

化学電池材料研究会では毎年6月に日ごろの研究成果を発表するミーテイングを開催している。情報化学部会のメンバーの方々が電池材料に関係するあるいは関係すると思われる研究成果を是非当研究会ミーテイングに積極的に発表していただき、“情報公開”の役割を果たしていただければ幸甚である。

◆部会記事

部会役員会・委員会報告

平成１３年度第６回拡大編集委員会議事録

日　時：平成１３年１月２４日（水曜）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，藤田眞作，
矢野米雄，坂本直紀，清水弘一

議事内容

（１）CICSJ bulletin について

Vol.19 No.1「21 世紀に臨む情報化学」特集については 22 件の寄稿が集まりつつある。2 月始め頃発送予定である。編集後記、No.6 の訂正作業に関するお知らせは有國委員が担当する。No.6 の訂正作業については No.4 に掲載する案と HP 上で公開する案が出された。No.6 の訂正作業、今後発行予定の No.4 の校正作業の進め方については有國委員が中心となり委員の分担作業も含めて案を検討することとした。

No.2 はグリーンケミストリー及び討論会アンケートのまとめを特集予定で、2 月末頃原稿締切、3 月下旬発行を目指す。グリーンケミストリーについては北尾委員が中心となり執筆候補者を検討中である。討論会アンケートについては高田委員が取り纏めを行っている。今後予定している構造活性相関シンポジウムとの合同幹事会で議論した結果も踏まえて、No.2 に掲載する予定である。編集後記は市川委員が担当する。

No.3 は工藤委員が担当し、「(仮) 黎明期の日本の情報化学」を特集し、6 月初旬発行予定である。編集後記は高田委員が担当する。

No.4 は討論会特集号で、情報化学討論会要旨集の目次及び著者索引を掲載する予定である。編集後記は坂本委員が担当する。

No.5 以降の予定については未定であるが、バイオ、ナノ、情報の流通等の候補テーマが挙げられた。No.5、No.6 の編集後記はそれぞれ高畠委員、有國委員が担当する。

（２）情報化学討論会について

藤田委員から第 23 回の会計報告について報告された。開催期間が 2 日になり、また参加者が予想を上回ったため、次年度繰越金が大幅に増えた。現在自弁となっている構造活性相関シンポジウムとの合同幹事会の旅費に充当する案も出された。

矢野委員から第 24 回の準備状況について報告された。会期は 11 月 7 日から 9 日の予定で会場は既に決まっている予約してある。参加登録費の振り込みは郵便振り込みのみとする、また条件付きでプロジェクター利用の発表を認める方向で準備することとなった。

特別講演、キーノート講演の演者については役員全員で候補者を考えることとなった。

共通セッション企画については、構造活性相関シンポジウムとの合同幹事会までに候補を考えておくこととした。

アンケート結果について高田委員から中間報告された。より討論の場とするための発表形式の見直し、及び予稿集・会場の工夫による参加登録費値下げの可能性について議論した。電子版予稿集配布の試行、レヴュー講演・JCACへの掲載、オーガナイザーが企画するセッション等のアイデアが出された。構造活性相関シンポジウムとの合同幹事会において報告する予定である。

（3）構造活性相関シンポジウムとの合同幹事会について

2月20日に京都にて開催予定である。出席者は時田部会長、船津委員、矢野委員、有國委員、相田委員、高田委員の予定である。

（4）JCACについて

船津委員から JCAC へ投稿促進について、相馬委員から J-STAGE の説明会及び J-STAGE へのアクセス回数集計データの出力機能追加の要望書案について報告された。

JCAC 賞については時田部会長が3月の役員会で詳細を提案することとした。

（5）次回役員会

年会期間中の3月28日（水曜）の12時から14時まで甲南大学で開催することとした。事務局より新旧委員に案内を出すこととした。

（6）CICSJ の表紙の色

濃桃色とすることとなった。

以上

◆関連行事

化学ソフトウェア学会年会「2001研究討論会」

主　　催　化学ソフトウェア学会
共　　催　日本化学会，日本化学会情報化学部会，日本分析化学会，
日本化学プログラム交換機構，ＣＢＩ学会
開催日時　２００１年９月２９日(土) 午後，９月３０日(日) 全日
会　　場　埼玉大学　理工学研究科棟
所在地　〒338-8570 埼玉県浦和市下大久保255（さいたま市へ変更予定）
ＪＲ京浜東北線北浦和駅西口下車　埼玉大学行きバス20分　または
ＪＲ埼京線南与野駅下車　埼玉大学行きバス10分
主　　題　化学の研究・教育におけるコンピュータの利用
年会案内　記念講演，口頭発表，デモンストレーション，ポスター，および総会
記念講演　未　定
総　　会　９月３０日(日) 13:00～13:30 （予定）
発表申込　７月２日(月)　締切(必着)

１件毎にはがきあるいは E-mail に次の事項を記入の上，下記連絡先宛てにお送りください。デモ用機器には原則として，本体のみとし，ハードディスクは準備できません。これ以外の必要な機器は各自ご用意ください。機器の準備が不可能でデモンストレーションができない方はポスターでご発表ください。発表申込者には後日ヘッダー用紙と使用するデモ用機器用紙（詳細）をお送りします。

1）発表題目
2）発表者と所属（講演者に○印）
3）使用機器，インターネットの利用（以下の［　］内から選択）
・機器本体［IBM-PC/AT互換機，NEC PC-9800シリーズ，Macintosh］
・インターネットの利用［ あり　なし ］
※希望機種，システム（“Windows2000”，“MacOS System8.5 以上”など）を付記してください。なお，使用機種のご希望に添えない場合があります。
4）連絡先（連絡者，住所，電話番号，FAX 番号，E-mail アドレス）

講演要旨　８月２０日(月)　締切(必着)［印刷用（ヘッダー＋要旨でA4版２枚），オンライン用］
参加予約　９月２１日(金)　締切(必着)［**発表申し込み者も参加予約が必要です。**］
郵便，FAXまたは E-mailで，参加者氏名，勤務先，連絡先（住所，電話・FAX番号，所属学会），懇親会出席の有無を明記して，下記連絡先にお申し込みください。
すべての会費は当日、会場にてお支払いください。
予約参加登録　本学会会員　3,000円　共催学会会員　4,000円
一般　5,000円　学生　1,500円
当日参加登録（予約なしの場合）は，予約参加登録に1,000円が加算されます。
懇 親 会　９月２９日(土)　17:30～19:30　会場：埼玉大学大学会館きゃら亭
参加費　4,000円
連 絡 先　〒338-8570 埼玉県浦和市下大久保255
埼玉大学　工学部　野口文雄
〔TEL/FAX: 048-858-3536 ,E-mail:noguchi@apc.saitama-u.ac.jp〕
実行委員会　化学ソフトウェア学会年会実行委員会
実行委員長　埼玉大学理学部教授　田隅三生
準備委員　埼玉大学工学部助教授　野口文雄
※インターネット上で最新情報を追加・広報いたします。
〔http://www.apc.saitama-u.ac.jp/~chemsoft/〕

◆編集後記

３０億余りの文字で表すヒトの全遺伝情報、つまりヒトゲノムの全内容が発表された。ヒトの遺伝子は、約３万個であるなど、驚くべきことが次々に語られている。ゲノム情報がこれからの科学特に医学や薬学の分野に大きなインパクトを与えていくであろう。

（国際チームによるヒトゲノム解析結果は、ネイチャー誌２００１年２月１５日号。セレラ・ジェノミックス社による解析結果はサイエンス誌２００１年２月１６日号に掲載されている。）

筆者もこの歴史的な両誌を眠い目をこすりながら毎夜の友としている。まさに、生物情報科学の時代の到来である。

、、、、、、と思いつつ、深更。　(H.A)

CICSJ Bulletin Vol.19, No.2, April 2001

目次

◆特集：グリーンケミストリーと情報化学

「グリーンケミストリーと情報化学」を特集して

産業技術総合研究所・東京大学大学院工学系研究科　北尾　修
osamu-kitao@aist.go.jp, kitao@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

グリーンケミストリー（GC）は既に色々なところで紹介がありご存知の方も多いと思うが、今回はそのGCと情報化学との係わりについて特集が組まれた。

この巻頭言に引き続き、特集記事を読んでいただく予備知識として、筆者から「グリーンケミストリーと情報化学の係わり」という解説を行う。GCとは一言でいうと「環境に優しいものつくり」、「ものつくりからの環境保全」ということになる。今、何故この議論をしないといけないかをご理解いただくために、この考えの出てきた背景、経緯、さらにこれからについて述べる。筆者は化学のあらゆる分野がGCにとって重要であることを強調するが、特に情報化学はGCの推進にあたって重要な役割を果たすと考えている。今GCの推進にあたって緊急の話題は、
　グリーン度をどう考えればよいのか？
　グリーンな化学プロセス・化学製品いかに設計・提案し、評価すればよいのか？
となる。ここに寄稿を願った以下の記事はこれらの問いかけに対してヒントを与えてくれるであろう。

まず東京大学の伊藤貴志・髙橋宏両氏と筆者による「二酸化炭素排出量による生分解プラスチックの評価」をつうじてGCの指標について考えていただく。従来環境に優しいと考えてられてきた生分解性プラスチックに関し、石油化学由来の汎用プラスックと比べて必ずしも環境に優しいとは言えないとの議論もあり、その点について検討を行った研究内容である。化学プロセス・化学製品のグリーン度をどう評価するのかというのは現在様々な議論がある。基本的にはライフサイクルアセスメントとなるが、内容を精緻すると言うよりかは、簡便に方針を示してくれる手法とその妥当性が求められている。読者はこの記事を通して自らの定義するグリーン指標に考えをめぐらせていただきたい。

次に東京大学の平尾雅彦氏に「化学プロセスシステムからみたグリーンケミストリー」という表題でグリーンな化学プロセスシステムを設計することの問題点とその解決の方針について解説していただく。GCでは化学品自体が環境に及ぼす影響も考慮するため、単に化学プロセスのみならず、化学品のライフサイクルまで境界を広げた評価が必要であること、従来プロセスをよりグリーンなプロセスへと代替する際にどのように取組めばよいかについて説明される。この代替案生成には広い分野の専門家の知識を幅広い関係者に共有情報として利用できるようにすることが必須であり情報化学の役割が力説される。読者は情報化学の専門家或いはその分野に興味を持つ者だから、ＧＣの議論への取組みの切っ掛けをえるだろう。

最後に旭硝子の山本博志氏に「グリーンケミストリーにおける物性推算」という表題でＧＣにおける物性推算の役割を山本氏が取組んだフロン代替品開発を例に解説していただく。ＧＣの議論では化学製品自体の環境への優しさのみならず、製造プロセスや後始末の環境への優しさを考慮する必要があり、しかもその評価を簡便にかつより良い精度で行うことが求められる。情報化学の分野においては従来からその要望に答えるべく原子団寄与法やニューラルネットワーク法など様々な道具が研究・応用されてきている。したがって、読者は情報化学がＧＣを推進するにあたり大きなポテンシャルをもっていることを実感されるであろう。

本特集を通じて、より多くの方々にGCの考え方への賛同者が増えることを祈ってやまない。

グリーンケミストリーと情報化学との係わり

産業技術総合研究所・東京大学大学院工学系研究科　北尾　修
osamu-kitao@aist.go.jp, kitao@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

グリーンケミストリー（ＧＣ）は持続可能な社会システムにむけての化学からのアプローチであり「ものつくりの立場から環境を守りつつ社会の発展を目指そうというアイデア」である。ここではこの考えの出てきた背景、提案の内容を紹介し、最後にＧＣと情報化学との係わりについて述べる。

１．グリーンケミストリーの背景

これまで我々が経験してきた豊かな生活は化学製品を始めとする生活物資の大量生産・大量消費・大量廃棄に支えられてきている。そして現在世界の各地で「今の社会システムは現状のままでは維持できなくなるのではないか」という議論が行われている。すなわち、現在の社会システムが天然資源の枯渇・地球環境の破壊を招き、最終的には我々の豊かな生活の維持を不可能にするかもしれないのである。

その最悪の事態を回避するために、現在の生活レベルを維持発展しつつ、同時に地球・環境・人への負荷を極力少なくし、文明を持続的に発展させる方法、つまり「持続可能な発展」を目指して、発展の質を変えることが求められている。現在、この最終目的に向けて全産業で様々な取り組みがなされているところではあるが、グリーンケミストリー（GC）は「ものつくり」を担当する「化学」が持続可能な発展を実現する切り札であることを強調する。ここで重要なことは化学の技術開発をより持続可能な発展を支えるものへと向けていくことである。GC では研究開発を市場原理だけに任せたままでは最終目標への到達が遠いことを意識して、より多くの人に「ものつくりからの持続可能な社会システム構築」という意識を持たせようという精神運動を展開し、様々な仕組みを提案している。

２．米国からの提案

GC という単語そのものが提案されたのは１９９４年のアメリカ化学会シンポジウム「Benign by Design」における EPA（Environmental Protection Agency、USA））のまとめの中である。ここにおいて強調されたのは環境に優しい新規合成プロセスの設計であり、「予防による環境問題解決」がキーワードとなっている。さらに翌１９９５年3月１６日にクリントン大統領とゴア副大統領の名前で発表された「環境規制に関する再計画」が切っ掛けとなり、この GC という言葉と概念は多くの人の知るところとなった。ここで GC についての理解を深めていただくために、「予防」ということについて力点をおきつつ、上記宣言を解説しよう。

１９９５年というのは EPA 設立があった１９７０年から２５年目で、環境行政に関して、過去の取り組みを検証し、来るべき２１世紀におけるあり方を検討する時期にあたっていた。そのような経緯から、この宣言では、現在の規制システムを著しく改善し、２１世紀における新しくより良い環境行政を推進させるための「最優先２５行動」を提言している。その２５番目の行動がここで紹介している「環境のための設計－GC の挑戦－」である。宣言本文においてこの行動は次の様に定義されている。

２５．環境のための設計―GC の挑戦―

EPA は国と化学産業がともに出資して、化学品開発と使用に関し、環境汚染防止プロセスを開発した企業に国家賞を与えることを提案する。その主な対象は、化学品開発において再生資源を使用すること、

溶媒を大気汚染へ影響を及ぼさないものに置換すること、そしてより安全で環境に優しい化学品や化学プロセスを設計することである。

化学品が人体や生態系に対する影響は「危険度」と「暴露量」の２つの要因から構成される。過去３０年に渡る環境に優しい研究開発の中では、どちらかと言えば、化学品の機能やコストに重視したものつくりが進められ、その危険度が判明してから暴露量（規制）でリスクを下げようというものが主であった。もちろん暴露量の点から環境問題に対応する事も重要ではあるが、GC の議論では、それでは持続可能な発展の要請には間に合わない、と考える。特に化学品に関する規制法はますます増加しており、その対処にかかるコストを考えた際「ものつくり」が産業として成り立たなくなる恐れがある。そこで、リスクを下げるにあたり危険度の低減（予防）の方に重点を置くことが強調される。すなわち化学が得意とする「ものつくり」を通じて環境問題の解決を目差そうというものである。その観点から、上の大統領宣言で「化学品開発」、「化学プロセス」に力点を置いている。付け加えるに危険度の低減は化学品のライフサイクル全ての段階（原料、製造、製品、廃棄、リサイクル等）において検討すべきことも強調しておきたい。

大統領宣言に関してもう２点述べる。まず「国と化学産業がともに出資」する点である。国はともかく、化学産業は慈善団体ではないから出資する以上利益があがることが求められる。従来、環境問題への対応はコスト高となって競争力を削ぎ、利益はあがらないものと捉える向きが普通であった。GC では、環境に優しいものづくりをすることを化学品の付加価値とし、その点をもって競争力強化を図り利益を上げうることを強調する。環境と経済を両立させるシステム実現をはかり持続可能な社会システム実現をはかる具体的な技術としての役割を化学に期待しているわけである。

次に「国家賞」である。この提言を受け「GC 大統領賞」が制定された。従来の手法を GC の概念にそって変化させるためには、最初の段階において何らかの動機が働く仕組みを作ることが必要である。この大統領賞の設定はその具体的な行動である。大統領賞は１９９６年より毎年 GC に基づいた化学品の設計・合成・使用に関する優れた化学技術に対して贈られており、現在次の三分野が対象となっている。

GC 大統領賞の対象三分野

（1）代替合成経路の利用
・触媒又はバイオ触媒
・光化学や生体模倣的合成などの天然プロセス
・より無害で再生利用可能な代替原料
（2）代替反応条件の利用
・人の健康や環境への悪影響が低い溶媒の使用
・選択性の向上と、廃棄物や排出物の低減
（3）より安全な化学品の設計
・現在の化学品よりも低毒性
・偶然に起こりうる危険に関して本質的に安全

この賞は上記三重点領域の研究開発に携わる団体、年間売り上げ４０億円以下の中小企業、および学術機関が受賞対象となり、１９９６年以降１６団体と５人に与えられている。今までの GC 受賞例をみると、環境に優しい研究開発は当然であるが、それがビジネスとしてなりたっている点も大きな評価項目になっていることが伺われる。上述の様に、環境と経済の両立が強く意識されており、その実現の手段としての「化学」の大きな役割が強調されていることが明快である。

さらに上の対象分野を見ると、化学のあらゆる項目が挙げられていることが了解される。すなわち、GC の概念に沿うには、今までと全く違う分野のことに手をだす必要は必ずしもない。研究者自らが得意とする分野において、その研究の方向性を少しでも GC の概念に合わせていけばよいのである。

なお GC 運動の中心的役割をはたしてきたアナスタス博士とワーナー博士による著書[1]は邦訳がでており日本における GC 普及に大きな役割をはたしている。この本には GC の１２原理が述べられており、この分野の初心者に一つの方向性を示している。以下に引用する。

グリーンケミストリーの１２原理(The twelve principle of green chemistry)

ＧＣ１：廃棄物は、出してから処理するのではなく、出さないようにする。
ＧＣ２：合成は、原料が最終生成物の中に最大に取り込まれるようなプロセスにする。
ＧＣ３：反応物と生成物は、人と環境に害の少ない物にする。
ＧＣ４：化学物質は、機能を維持しながら、毒性を低下させるように設計する。
ＧＣ５：溶媒、分離溶剤等補助物質は、使わないか、使うにしても無害なものにする。
ＧＣ６：エネルギーを要する場合は、環境と経費の負荷を考え、できるだけ最少にする。
ＧＣ７：原料は、枯渇性の資源ではなく、再使用可能なものにする。
ＧＣ８：保護／脱保護基、プロセスの一時的修飾等反応途中の操作は可能な限り避ける。
ＧＣ９：化学量論的な試薬より、可能な限り選択的な触媒反応をめざす。
ＧＣ１０：化学物質は、使用後は、環境に影響を与えずに分解するように設計する。
ＧＣ１１：反応最適化と危険物質発生を監視するため、実時間プロセス計測を導入する。
ＧＣ１２：物質および化学プロセスは、化学事故の可能性を最小にするように設計する。

３．日本におけるＧＣの推進

日本におけるＧＣ推進は化学技術戦略推進機構に事務局を置くグリーン・サステイナブルケミストリーネットワーク（ＧＳＣＮ）［２］が中心となって進められている。この組織は今まで産学官で個別に取組まれてきたＧＣへの動きを組織化し諸外国との連携を取っていくもので、

化学に係わるものは自らの社会的責任を自覚し、化学技術の革新を通して「人と環境の健康・安全」を目指し、持続可能な社会の実現に貢献する。

を基本理念とし、次の７項目を行動指針としている。

ＧＳＣ１：製品の全ライフサイクルを見通して、「人と環境の健康・安全」を最重要視して経済効率の高い製品の設計・製造方法の確立を目指す。

ＧＳＣ２：副生成物や排出物の低減、リサイクルおよび環境浄化などに貢献する製品・技術を開発する。

ＧＳＣ３：資源・エネルギーの消費低減、および資源の循環的利用を実現する。
ＧＳＣ４：枯渇資源への依存度を低減し、再生可能資源の積極的使用と再生利用を推進する。
ＧＳＣ５：産学官、業際・学際および国際連携を積極的に推進する。
ＧＳＣ６：社会の信頼性を高めるため情報の収集・開示および対話に積極的に取り組む。
ＧＳＣ７：ＧＳＣ理念を浸透させるために教育・啓蒙活動に積極的に取り組む。

技術開発の観点からはＧＳＣ１～ＧＳＣ４が指導原理となろう。

４．ＧＣと情報化学

前節までで GC の出てきた背景と提案の内容を紹介した。さらにＧＣと情報化学の係わりについては巻頭言ならびに本特集の他記事を参照していただきたい。ここではそれら以外の点について触れておく。前節のＧＳＣ５～ＧＳＣ７は何れも広範囲の地域における情報交換に係わるものである。昨今のインターネットによる情報交換の普及は著しく、毎日流れてくる膨大な情報から我々自身にとって有用な情報を選び出すのすら困難を感じるほどであり、それはＧＣに関しても同様である。その膨大な情報の中でＧＣを推進させるために、情報化学の分野において培われてきた様々な情報収集・整理の手段が大きく役に立つものと考えられる。

５．GC のこれから

「ものつくり」の立場から、環境を守りつつ社会の発展を実現させる「持続可能な社会システム」構築という難問に挑戦する GC を紹介した。GC は現在欧米をはじめ我が国でも盛んに議論されており、意識改革を緊急に押し進める手段として、報賞制度・広報·教育に力点が置かれている。それらの運動を通じて、持続的発展可能な社会システム実現のために GC のアイデアが一人でも多くに浸透し、この理念に則った新製品・新プロセスの開発がすすめられ新産業が創出されることが急務である。最終的にはすべての化学は GC となるべきであり、その日が一日でも早く来るためには、より多くの若き優秀な人材を化学に迎える必要がある。そのためには「化学」のイメージアップをはかることが必須である。この動きを加速する上で情報化学は大きなポテンシャルをもっている。

参考文献

[1] P.A. Anastas and J.C. Warner, "Green Chemistry: Theory and Practice", (Oxford Univ. Press, 1998)。渡辺、北島訳「グリーンケミストリー」(丸善、1999)。

[2] http://www.gscn.net/

きたお　おさむ KITAO, Osamu

1998年7月より1年間通商産業省基礎産業局に併任したのがグリーンケミストリーとの出会いでした。専門は理論化学・計算化学で現在、生体系・材料系の光誘起電子移動に関心をもっています。

連絡先 〒305-8565 つくば市東 1-1 産業技術総合研究所 電話 0298-61-4574

〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1 東京大学大学院工学研究科化学システム工学専攻

電話 03-5841-7782

二酸化炭素排出量による生分解性プラスチックの評価

東京大学工学部　伊藤　貴輝・北尾　修・高橋　宏
it@ecolab.t.u-tokyo.ac.jp, kitao@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp, htakaha@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

生分解性プラスチックは従来環境に適合した製品とされていたが、その定量評価は充分に行われていなかった。さらにGC技術として生分解性プラスチックをリサイクルする研究がなされている。この技術の評価を通して新技術の評価方針を考えてみる。

1. 緒言

1.1. グリーンケミストリー

グリーンケミストリーとは簡潔に「環境にやさしいものづくりのための化学」と言い表せ、原料・試薬・触媒・溶媒・反応経路・製品の選択、輸送、使用、回収、リサイクル、そして廃棄に至る様々な過程に関しての新化学技術開発を促進する概念である[1]。グリーンケミストリーはその性質上多岐の分野にまたがった概念であり、局所的にみて「環境にやさしい」とされる技術が開発されてもプロセス全体としてみると逆に環境負荷を増加させる事も起こりうる。この問題に対処するためにある新技術の導入が全体のプロセスにおいて環境に及ぼす影響の評価が必要とされる。環境対策を構築するにあたって数ある選択肢のうちどのプロセスが最も「環境にやさしい」かの判断を明確かつ即座に与える事や、研究開発テーマの優先順位決定などのためにもこのような評価の確立が求められている。

今グリーンケミストリーで特に求められている評価方法は「簡便である」ことを鑑みると、LCAの CO_2 だけに注目するというのも一つの立場になる。この時評価の対象物が環境に与える影響のうち、地球温暖化への寄与が注目されているほどこの評価方法は有用となる。そのような対象として生分解性プラスチックが挙げられる。本製品は単体では毒性を持たず、製造過程等で特に有害物質を排出しない。また生分解性という特徴だけでなく地球温暖化対策やエネルギー資源の節約の観点からも注目されてきている。そのため CO_2 換算による評価が適切であると考えられる。

1.2. 生分解性プラスチック

既存のプラスチックは廃棄後環境に少なからず影響を与える。回収が不可能で直接環境中に放出される物は生態系を直接的に脅かし、また景観を損なわせる。回収された分はそのうち6割程度が焼却されるが、その際発生する熱により焼却炉を傷める。残灰は埋め立て処分場に運ばれるが、国土の狭い我が国では最終処分場の逼迫が深刻な問題となっている。これらの問題点を解決する手段として生分解性プラスチックが開発された。

近年は地球温暖化対策やエネルギー資源の節約という環境保全の観点から生分解性プラスチックを評価する研究がなされている。バイオマスを原料として利用できることから原料由来の CO_2 排出量を削減できることが利点とされているが、製造過程では既存のプラスチックと比較してより大きいエネルギーを必要とすることが指摘されている[2]。

ここで生分解性プラスチックの廃棄方法を調べると、コンポスト化のみが研究されている。しかし既存のプラスチックは様々なリサイクル手法が検討されており、例えばマテリアルリサイクルを行うことによって製造過程で生じる環境負荷を抑制することが達成されている。そこで生分解性プラスチックのリサイクルの可能性を検討してみた。

生分解性プラスチックのリサイクル技術として酵素を用いたケミカルリサイクルが実験されている[3]。従来コンポスト処理されていた使用済みポリマーを酵素によってオリゴマーに加水分解し、さらに

条件を調節して再重合させるプロセスである。これによって生分解性プラスチックの循環型利用が達成される。しかしパイロットプラントでの実証例は報告されていない。そこでケミカルリサイクルを想定した生分解性プラスチックと、コンポスト処理した場合や既存のプラスチックとを CO_2 排出量を基準として比較検討してみた。その結果から今後の研究指針を与えるものとする。

2. 評価方法

2.1. 評価対象

生分解性プラスチックは大きく次のように分けられる。

A) 微生物生産　　バイオマスを微生物の体内で発酵させる。
B) 多糖類誘導　　動植物中の多糖類を抽出する。
C) 化学合成　　　石油から人工的に合成する。

以上の分類にあてはまる代表的な生分解性プラスチックとして順に poly 3-hydroxybutyrate (PHB)、poly caprolactone(PCL)とデンプンのブレンド体、poly ester carbonate(PEC)を選択した。また既存のプラスチックのデータとしてポリスチレン(PS)とペット(PET)を直接ゴミ発電・油化後発電・マテリアルリサイクル・モノマー回収した場合を比較した。

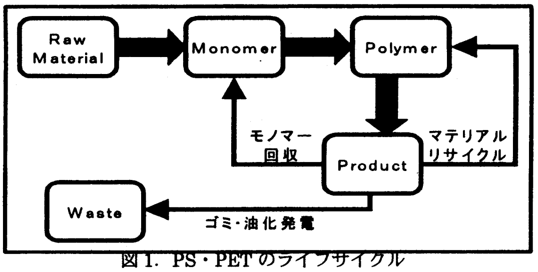


図1. PS・PETのライフサイクル

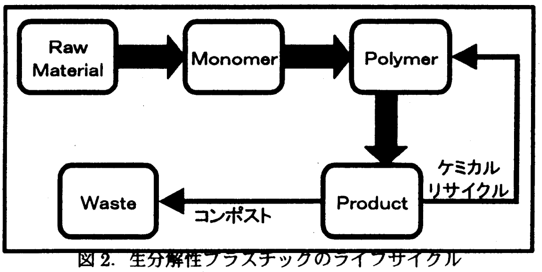


図2. 生分解性プラスチックのライフサイクル

2.2. 評価手法

上記の対象物からプラスチックトレーを製造する場合についてそれぞれLCAを行った。バウンダリーは原油・バイオマスの採掘・採取過程から CO_2 として大気中に排出されるまでとして設定した。ライフサイクルは図1、2のように定義し、既存のプラスチックはごみ発電、油化発電、マテリアルリサイクル、及びモノマー回収を検討した。また生分解性プラスチックはコンポスト処理とケミカルリサイクルを考慮している。LCA のインベントリー分析では既往の研究結果を参照した[4]。累積 CO_2 排出原単位で計算を行う際にリサイクル率を設定した。その定義は使用後の製品のうちリサイクルに回される物の割合とし、100回リサイクルされるまでに製造される製品量が1トンになるように原料の量を決定した。結果は製品1トンあたり排出される CO_2 の重量(kg)で表した。

ケミカルリサイクルのプロセスフローは消費済みポリマーの加水分解、水及び未反応物の分離、再重合、触媒分離、溶媒分離、触媒乾燥とユニットを決定した。触媒は酵素の一種であるリパーゼを、溶媒はトルエンを用いた。実験結果に即して加水分解時のオリゴマー収率を 99%、再重合時のポリマー収率を 75%とした。触媒は乾燥後 100%回収されるとし、溶媒の回収率はパラメータとして設定した。また加水分解で投入される熱の一部は分離された水やトルエンから回収するとし、熱回収率もパラメータとした。最も CO_2 排出量が大きかったトルエン分離に関しては、トルエンからポリマーを分離できる膜を仮定した膜分離と蒸留の場合を計算した。前者は分離の際のエネルギー消費が最小の場合に、後者は最大の場合に相当する。

3. 結果及び考察

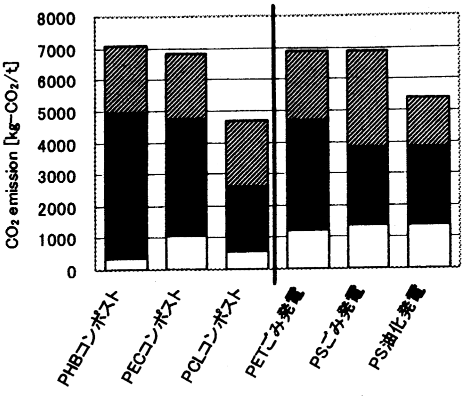


図 3. リサイクルしない場合のＬＣＡ評価結果

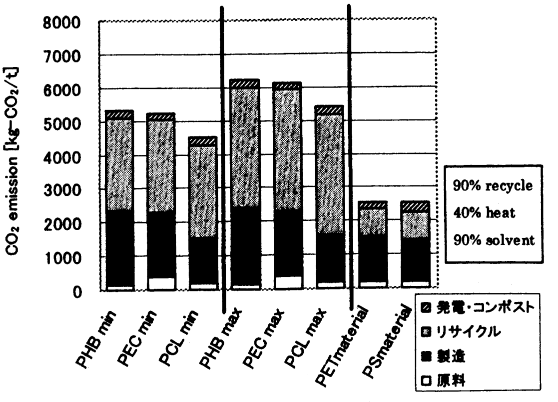


図 4. リサイクルした場合のＬＣＡ評価結果

3.1. LCA の評価結果

図 3、4 に LCA の評価結果を示す。リサイクルを行わない場合 PCL は PET や PS と十分競合しうる。またコンポスト過程から排出される CO_2 は発電からの分とほぼ同じ値であり、環境保全性を決定する支配的要因は製造過程から排出される分であった。

図 4 ではリサイクル率、溶媒回収率、熱回収率をそれぞれ 90%、90%、40%とした結果である。このときケミカルリサイクルを行うことで生分解性プラスチックはコンポスト処理した場合より概ね累積 CO_2 排出量を削減できた。しかしマテリアルリサイクルを行った既存のプラスチックが最も有利な結果となった。

PHB において溶媒回収率の与える影響は図 5 のようになった。これより溶媒回収率を 81%にすることでコンポスト処理よりケミカルリサイクルが有利となる。PEC、PCL においてはそれぞれ 82%、89%であった。通常のプラントでは 90%程度の溶媒回収率が達成されているので、その場合 3 種類ともケミカルリサイクルが有利となる。同様の解析を熱回収率に対して行ったところ、熱回収をしない場合(0%)からすべて回収する場合(100%)の差は製品全体の CO_2 排出量の約 2%と小さかった。よって熱回収率の影響は無視できる。

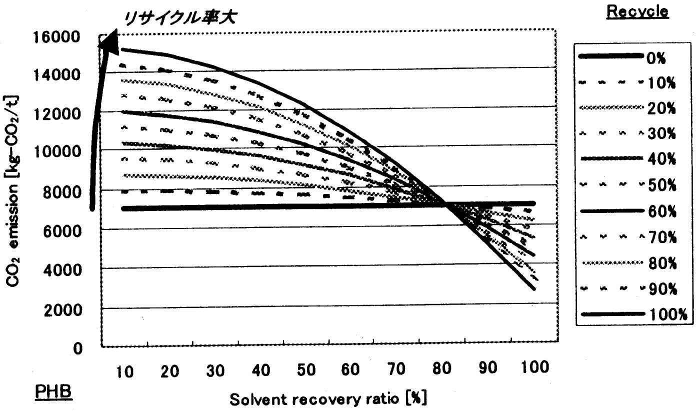


図.5 溶媒回収率の影響

3.2. 改善案

既存のプラスチックより累積 CO_2 排出量を削減するための改善案を検討した。ケミカルリサイクルによって排出される CO_2 の内訳は図 6 のようになり、トルエンの製造からの累積 CO_2 排出量がその大部分を占める。トルエンの累積 CO_2 排出原単位が 1463 [kg－CO_2

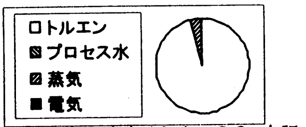


図 6. ケミカルリサイクルのＣＯ₂内訳

／t]と水と比べてかなり大きいことや、実験状況を忠実に再現しているためにトルエン投入量の最適化がなされておらず余分に多いことがその主な原因と見られる。

そこで改善案として累積 CO_2 排出原単位がトルエンの 1/10 の溶媒で代替することと、トルエン投入量を 1/10 に削減することを検討した。その結果を表 1 にまとめた。このときリサイクル過程から排出される CO_2 は既存の物とほぼ同じとなったが、製造過程の分がより大きいため生分解性プラスチックが有利にはならなかった。

表 1. トルエンに関する改善案

	PHB	PEC	PCL
改善前	5304	5221	4493
代替溶媒	3353	3271	2543
トルエン比	3317	3234	2506

さらに製造過程からの CO_2 排出量を削減するためにケミカルリサイクルのポリマー収率に着目した。オリゴマーの再重合では 1/4 が別の環状オリゴマーになる結果が得られているが、この環状オリゴマーは反応条件を変えることで 99％以上の収率でポリマーを合成することが知られている[3]。そこで 95％のポリマー収率が達成できたと仮定して計算を行うと製造過程からの CO_2 排出量が削減できた。またリサイクルの分も多少減少した。

トルエンとポリマー収率の両方に関する改善が同時になされた場合の LCA 評価結果を図 7 に示す。このときケミカルリサイクルを行った生分解性プラスチックは既存のプラスチックのマテリアルリサイクルより累積 CO_2 排出量が少なくなった。

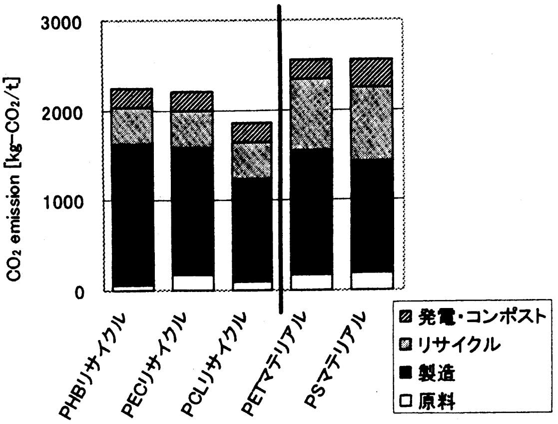


図 7. 改善後の LCA 評価結果

4. 結言

本来 LCA ではすべての環境負荷項目について排出量を定量的に評価し、さらに定性的な側面を含む単一指標による統合化を行っていた。しかしそのような手法は現在求められている簡便性に欠けると言わざるを得ない。本研究では CO_2 排出量のみで評価する手法を実践し、それが GC 技術の評価方法として有効であることを示した。

生分解性プラスチックに関して以下の知見を得た。

① 生分解性プラスチックはケミカルリサイクルを行うことでコンポスト処理した場合よりも累積 CO_2 排出量を削減できたが、マテリアルリサイクルには及ばなかった。

② 溶媒回収率はケミカルリサイクルの CO_2 排出量に大きく影響し、90％以上を達成することが要求される。一方熱回収率はほとんど影響を及ぼさない。

③ ケミカルリサイクルの改善策として以下のものが有効であることを示した。

A. 累積 CO_2 排出量がトルエンの 1/10 の溶媒で代替するか、トルエン投入量を 1/10 に削減する。

B. 再重合過程でポリマー収率を 95％まで向上させる。

参考文献

1) Paul T. Anastas & John C. Warner ; Green Chemistry, 1999
2) Slator & Gerngross ; 日経サイエンス, 11 月号, 2000
3) 松村秀一 et al ; Macromolecular Rapid Communications **21**(10), 2000
4) NEDO ; 生分解性プラスチック研究開発成果報告書, 1997

いとう たかあき ITO, Takaaki、きたお おさむ KITAO, Osamu、たかはし ひろし TAKAHASHI, Hiroshi
伊藤は平成 13 年度の卒業論文としてこのテーマに取り組みました。
連絡先 〒113-0032 東京都文京区弥生 7-3-1 東京大学工学部化学システム工学科 電話 03-5841-7782

化学プロセスシステムからみたグリーンケミストリー

東京大学工学系研究科　平尾雅彦
hirao@chemsys. t. u-tokyo. ac. jp

1．はじめに

グリーンケミストリーという言葉は、最近しばしば耳にするようになってきたが、この原稿の依頼を受け、あらためて調べてみると、いくつかの基準というものがあるようである。例えば、「原料の利用率を最大にするべきである」、「副生成物を最小にするべきである」、「化学プロセスはうまくコントロールせよ」、「化学物質は無害な物質に分解する事が望ましい」などと記載されている[1]。グリーンケミストリーは実際の化学製品の生産において実現するためのアプローチであるから、化学プロセスを考慮して検討しなければならない[2]。本稿では、化学プロセスからみたときのグリーンケミストリーについて考察し、問題点とその解決への方法を議論する。

2．システムバウンダリーの重要性

原料の反応率の高い反応系を開発するとそれはグリーンケミストリーだろうか。反応率が高いと原料から目的物質への転化率が高くなるので、資源を無駄にしなくなるのだろうか。現実のプロセスでは、図１のように反応器を通過したときの反応率が低くても、反応後、未反応原料と製品を分離し、未反応原料や溶媒は反応器の入り口へリサイクルすることによって無駄にすることはない。プロセスとしてみた場合は、反応率は１００％に近いのである。むしろ、未反応原料と製品の分離のしやすさがこの製品生産の原料利用効率を決めていると言ってもよい。

例えば触媒を改良して反応率を上げたとしても、新たな副反応が生じ、その副生成物が製品と分離しにくい場合は、このプロセスのエネルギー原単位（単位量の製品を製造するために必要なエネルギー）は増加する。分離は、蒸気圧の差（蒸留や吸収）、吸着能の差（吸着）、溶解度の差（抽出や晶析）、拡散速度の差（膜分離）などを利用していて、必ずエネルギーの投入が必要だからである。化学プロセスにおける分離でよく用いられ

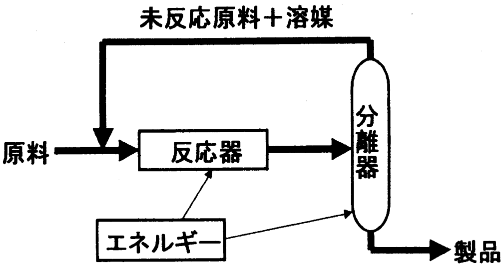


図１　化学プロセスシステムの基本構造

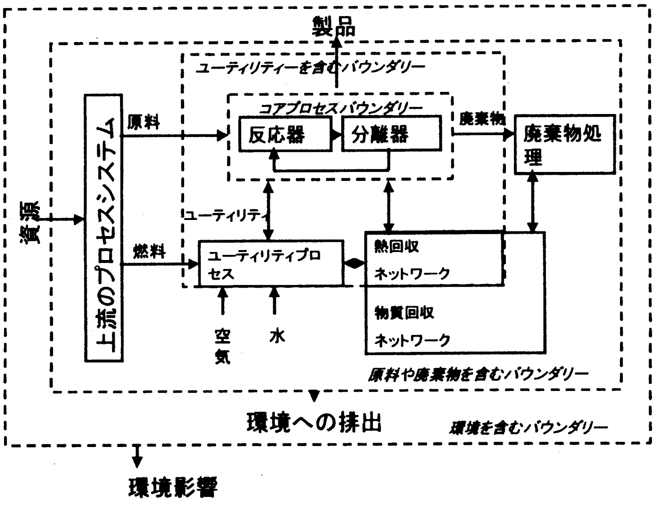


図２　様々なレベルのシステムバウンダリー

る蒸留は、蒸気圧の差で分離するのだが、それが小さい物質どうしの場合は還流比と呼ばれる設計変数を大きくとる必要があり、一方、分離に必要なエネルギーはほぼ（還流比＋１）に比例するので消費エネルギーは増える。また、溶媒によっては、製品物質と共沸するので、共沸点以上の分離が困難になり、共沸を避けるために第３成分を投入したり、圧力を変えたりする必要がでてくる。つまり、反応条件や溶媒の選択によっては、分離のために新たな資源やエネルギーを投入しなければならないということが起きうる。もっとも、分離のエネルギーを、化石資源の燃焼から得るのか、プロセスシステム内外から得られる廃熱を利用するのかによってもその意味は異なってくる。

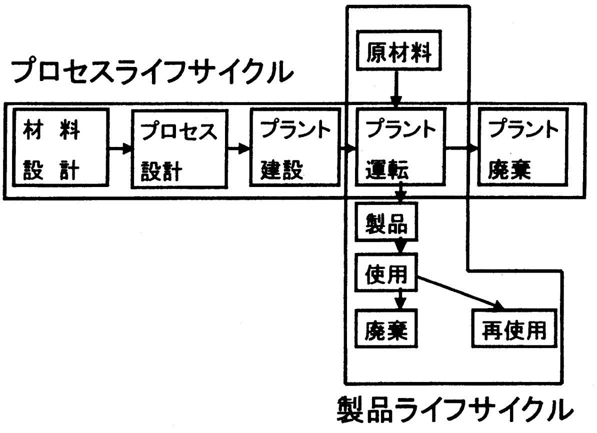


図３　プロセスライフサイクルと製品ライフサイクル

このように、図２で示されるような検討対象のシステムバウンダリーを反応器単体から分離器とリサイクルからなるコアプロセスバウンダリー、エネルギーなどの供給を行うユーティリティーを含むバウンダリー、原料や廃棄物を含むバウンダリー、資源や環境への排出物を含むバウンダリーと広げていくことによって、より総合的なグリーンケミストリーのための評価が可能となるが、評価の困難さも増していく。しかしながら、システムバウンダリーを明確にしなければ、結論や個々の技術の評価は意味をもたないのである。

グリーンケミストリーの考え方では、化学製品自体が環境で及ぼす影響も考慮している。その場合は、図３のように製品ライフサイクル全体にまでシステムバウンダリーを拡張する必要がある。天然資源からの原料採取から、製造、使用、廃棄または再使用に至るまでのすべての物質の流れを評価対象にしなければならない。これは近年、ライフサイクルアセスメントと呼ばれている解析を同時に実施する必要があることを意味する。図２のような形でのバウンダリーの拡張は、ほとんどの要素情報が生産者の持つ情報の範囲の中にあるが、図３の製品ライフサイクルに関する情報は、生産者だけでは通常はわからないものを含んでいる。これまで化学産業は、素材産業として化学製品を利用する製品メーカーをユーザーととらえ、直接最終消費者を視野に入れることは少なかったが、そのような領域や廃棄、製品のリサイクルもバウンダリーに入れたグリーンケミストリーの実現が要求されている。

３．最適化の目的関数は何か

化学プロセスの設計においては、まず、単位操作の組み合わせとしてプロセスシステムを構成する概念設計という作業を行う。反応条件、原料、触媒、溶媒、関係する物質の蒸気圧、溶解度などの物性、分離膜や吸着剤などの情報を総合して、プロセスシステムの概観をスケッチしてみるのである。このスケッチをプロセスフローダイアグラムと呼び、プロセスシステム内の操作をユニットオペレーション（単位操作）と呼んでいる。このプロセスフローダイアグラムに対して、反応速度、反応熱、蒸気圧などの具体的な情報を与えてプロセスシミュレーションを行い、物質収支、エネルギー収支を計算し、評価を行う。評価においては、プロセスシステム内の設計変数を用いて目的関数を設定し、これを最大化あるいは最小化する最適化を実施する。この目的関数としては、図２で示したようなバウンダリーの拡張は進められてきたものの、固定費や変動費などを合わせたコストを目的関数とすることがこれまでの考え方であった。これに対し、グリーンな化学プロセスシステムを設計するということは、環境影響を何らかの形で目的関数とすることにあたる。環境影響は、それ自体が一つの目的関数では表すことが難しく、資源消費、エネルギー消費、廃棄物量、二酸化炭素排出量、毒性、爆発

危険性など多くの目的関数を挙げることができる。第1にこのような目的関数を列挙することが難しく、第2にこれらの目的関数を設計変数で表現できるかどうかが自明ではない。そして第3にこのような多数の目的関数を持つ問題の最適化が難しい問題である。このため個々の目的関数に重み付けして線形和の形で一つの目的関数に統合しようとする試みや、多目的関数としての最適化手法の提案が行われている。いずれにしても、すべての目的関数を同時に最適にすることはできず、どこかで各目的関数間のトレードオフを考慮することになる。グリーンケミストリーの基準として挙げられている項目を同時に最適化することは恐らく不可能であるし、さらに企業活動として成立させるためのコストという目的関数との同時最適化は一層困難な作業となる。しかしながら、グリーンケミストリーを実体ある客観的なものとするためには目的関数の設定とそれによる評価、最適化が重要なことなのである。

4．代替案の生成

これまで述べてきたシステムバウンダリーと目的関数の問題は、ある1つのプロセスフローシートの案がある時の評価や設計変数による最適化の問題であった。しかし、これ以上に困難で、かつ重要な問題が代替案の生成である。グリーンな化学プロセスを設計するといった場合、1つのプロセスフローダイアグラムについて最適化すればグリーンな化学プロセスになるわけではない。反応経路、触媒、反応器、溶媒、分離方法などについて様々な代替案を列挙し、その個々の代替案における最適化設計の中から、あらためて最も良いものを選ばなければ本当の意味でグリーンなプロセス設計を行ったとは言えない。このような代替案の生成とそれに対する評価と最適化という繰り返しによる設計作業の流れを図4に示した。

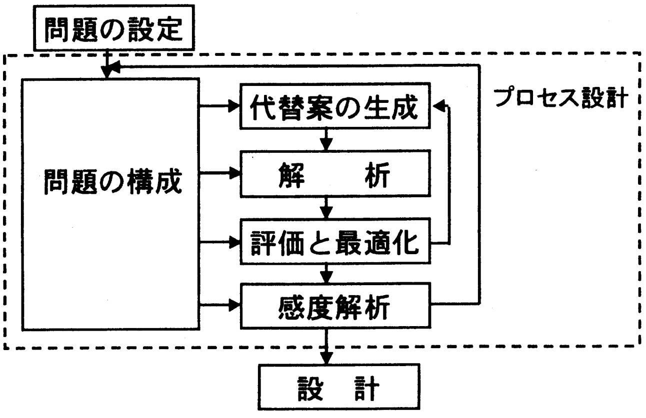


図4　化学プロセス設計の流れ

この代替案の生成は、目的の機能を果たすための化学プロセスを創造する作業である。問題の設定を行い、その問題に応じた解析、評価手法を与えれば実際の評価計算はコンピュータに行わせることができるが、代替案の生成と評価手法の設定をコンピュータに行わせることは容易ではない。特に代替案の生成には、ユニットオペレーションに関する知識とそのユニットオペレーションの機能を決定する物性、反応に関する情報を得た上で、実施可能な組み合わせを合成する必要がある。十分な情報がなければ実施可能な代替案であるにもかかわらず、それを生成することはできない。プロセスエンジニアは化学反応について専門家ではないので、自身の知識で新しい反応経路を創造することはできない。分離すべき混合物の組成や各成分の物性についての情報がなければ分離方法の決定はできない。一方でプロセスエンジニアの知識がなければ、実施可能性を判断できない場合もある。固体を蒸留では分離できないし、適切な膜がないのに膜分離を用いることはできない。気相反応を混合槽型反応器で行うことはないであろう。

このように代替案の生成のためには、知識や情報の収集と統合的な利用が不可欠である。量子論に基づいた反応機構から、素反応解析、触媒設計、合成経路設計、溶媒探索、単位操作設計、プロセス設計、プロセス制御などと広い知識が必要である。しかし、グリーンケミストリーの実現のためには、これらの知識が別々に存在するのではなく、代替案の生成に役立つように利用できる仕組みがなければならない。

5．グリーンケミストリーを実現するための情報化学

ここまで述べたようなグリーンな化学プロセスの設計のためには、すべてのフェーズでコンピュータの支援が不可欠である。図４に対応して次のようなツールが必要となる。

1．　代替案の生成のための知識を得るための様々なツール
2．　化学プロセスとして代替案を構成するためのツール
3．　代替案を解析し、評価、最適化するためのツール

例えば、複数の反応経路を代替案として考える場合では、1．で必要なものは、様々な既知反応データベース、知識ベースを利用して反応経路を推論するツール、生成物分布を予測する素反応解析ツール、素反応速度定数を予測するための量子化学計算ツールなどが挙げられる。もちろん、物性データベースやその推定ツールも不可欠であろう。2．で必要になるのは、プロセスフローダイアグラムから物質収支、エネルギー収支を計算するプロセスシミュレータや図２に示されている熱回収ネットワークや物質回収ネットワークの設計ツールである。3．の評価ではプロセス自体の原単位やコストを解析するツールとともに、図３の製品ライフサイクル解析ツールも必要である。

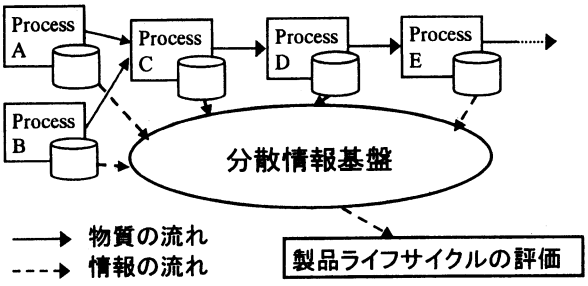


図５　製品ライフサイクル評価のための分散情報基盤

これらのツール群は１つの設計環境の中で統合的に利用できなければ、実用的ではない。プロセスシミュレータで必要とされるデータが化学物質の物性値でありシミュレータと一体化できるのに対し、ライフサイクル解析に必要とされるデータは、プロセスの上流、下流、直接関連しない製品など必要なデータが広範に渉る。このため、図５のように広い範囲のプロセス毎に分散したデータとして、プロセス設計時にリアルタイムに利用できるような仕組みを構築すべきである。このためには、近年の分散情報処理を可能とする情報技術を有効に利用し、ユーザーはデータが分散していることを意識せず、代替案の評価時に情報が取得できる仕組みが開発されなければならない。

6．終わりに

グリーンケミストリーの考え方を実際に活かすために、化学物質の生産プロセスからみた問題点を議論し、バウンダリーや目的関数の設定、代替案の生成の重要性を示した。特に代替案の生成には、広い分野の専門家の知識とそれを共有情報として利用できるようにすることが必須である。システムとしてのグリーンケミストリーの実現への道を開くためには、まず多くの要素技術研究を推進し、さらにそれを化学プロセス設計に利用するための広い意味での情報化学の役割が期待される。

参考文献

[1] http://www.chemsoc.org/networks/gcn/about.htm
[2] J. A. Cano-Ruiz and G. J. McRae; Environmentally Conscious Chemical Process Design. *Annu. Rev. Energy Environ.* **23**, 499-536 (1998)

ひらお　まさひこ　HIRAO, Masahiko
連絡先　〒113-8656　東京都文京区本郷 7-3-1 東京大学工学系研究科化学システム工学専攻

グリーンケミストリーにおける物性推算

旭硝子中央研究所　化学生産技術 Gr.　山本博志
yamahiro@ba2.so-net.ne.jp

先日新聞を読んでいると「カーエアコン１台分のフロンの温室効果は車が 27000km 走った分の CO2 に匹敵する」とあった。

グリーンケミストリーとは「環境にやさしいものづくりの化学」である。それと物性推算がどう関係するのか疑問をもたれる方も多いと思う。事実、グリーンケミストリーをインターネット [1] で検索してみると、「グリーン」+「ケミストリー」で 325 件ある。しかし、それに「推算」を加えると 2 件になってしまう。「推算」ではなく「計算」にしても 77 件しかない。それを英語で「Green」+「Chemistry」で検索すると 306000 件、「estimation」を加えると 8860 件と日本語での検索にくらべ、どちらも 1000 倍の情報がネット上に存在する。グリーンケミストリーに物性推算はどう使われているのだろうか？

筆者は 1995 年 1 月から 1999 年 5 月まで地球環境産業技術研究機構（RITE)に出向し、つくばの経済産業省 産業技術総合研究所 物質工学工業技術研究所（当時は通商産業省 工業技術院 物質工学工業技術研究所）にてフロン代替化合物の開発に携わった。フロンは分子中にフッ素や塩素を含む化合物の総称で主に冷媒、発泡剤、洗浄剤に用いられてきた。このフロン中の塩素原子がオゾン層を破壊することがローランド博士らによって 1974 年に指摘され CFC（クロロ・フルオロ・カーボン）は 1996 年全廃された。また、分子中に水素を持つ HCFC（ヒドロ・クロロ・フルオロ・カーボン）はその大気寿命が短いためオゾン破壊係数は小さくなるが 2015 年には全廃される。いわゆる代替フロンと呼ばれる分子中に塩素を含まない HFC（ヒドロ・フルオロ・カーボン）はオゾン破壊係数は 0 だが地球温暖化係数が炭酸ガスの１万倍を超えるものもある。フロン自体は毒性もなく、燃えない非常に”良い”化学物質であったが地球環境に破滅的な影響を与えうる事が明かとなった。グリーンケミストリーはこうした反省を踏まえ、できあがった製品が環境にやさしく、製品を作るプロセスが環境にやさしく、製品の後始末が環境にやさしいの３点を目指した化学であると言える。本稿ではグリーンケミストリーにおける物性推算の役割を主にフロン代替の開発を例に紹介したいと思う(2a-2c)。

オゾン層を破壊しない事、地球温暖化係数の小さい事という環境にやさしいフロンの開発に対し、塩素の代わりに酸素などのヘテロ原子が入った化合物が候補にあげられた。こうした構造をコンピュータを使ってすべて書き出してみると、フッ素を含有する鎖状のエーテル化合物で炭素数が 6 以下のものは 19056 化合物存在する。同じくケトン化合物は 2752 化合物存在する。環状になったり複数官能基を持つ物を考えると飛躍的に化合物数は増える。こうした化合物を実際に合成しその物性をすべて測定する事は不可能だし意味がない。そこで、実際に化合物を合成する前にその物性値を推算して目標値に合っているものをスクリーニングする。そして可能性の高いものから実際に合成するという戦略がたてられた。

フロンは用途ごとに要求される沸点範囲が異なる。冷媒なら沸点が 20℃以下、洗浄剤なら沸点が 40℃以上 100℃以下、発泡剤で室温から 60℃以下である。例え環境にやさしいフロンの分子設計ができても、沸点範囲が大きく外れる場合にはその用途には使えない。沸点の推算には原子団寄与法、トポロジカル・インデックス法、ニューラルネットワーク(NN)法などが用いられている。
<u>原子団寄与法</u>とは分子をそれを構成する原子団に分割し原子団ごとの物性に対する寄与率を求めておき、原子団の数 * 寄与率の総和を物性値とする方法である。最も著名な推算法は JOBACK 法 [3] で

ある。この方法をフロン類に適用したところ相関係数 0.65552,平均誤差 85.3K であった。推算精度が低いのは JOBACK 法で定義された原子団のうちハロゲン原子に関する原子団は F, Cl, Br, I の4種類しかなくフッ素の付く位置が違う異性体を区別できないためである。そこで JOBACK 法の原子団を拡張[4]すると相関係数 0.97755、平均誤差 8.16K で沸点を推算することが可能となった。

トポロジカル・インデックス法[5]は分子の大きさ（炭素数）、枝別れの数などから沸点を推算する。例えば直鎖化合物でメタン（N=1）からデカン（N=10）までの沸点は

$$Bp=745.42*\log(N+4.4)-416.31$$

と表すことができる。こうした関係をトポロジカル・インデックスなどを使ってさらに複雑な化合物にまで拡張している。この方法は化合物の構造をデータベースから検索するなどの技術にも関連し発展している。しかしこうした方法をハロゲン化合物に応用した例は不勉強なのか知らない。おそらくハロゲン原子が入るとトポロジーがものすごく複雑になり適応できないのではないかと思う。

ニューラルネットワーク(NN)法は人間の脳の記憶、認識、判断の機構をコンピュータ上に実現したもので最近注目を集めている。筆者が知るニューラルネットワークを使って沸点を推算した一番古い例は第 18 回情報化学討論会(1995)での JICST の水野らの発表である。他のニューラルネットワーク法を用いた沸点の推算では、分子の表面積、部分電荷等をニューラルネットワークに入力する方法[6a-6g]などがとられている。これらの解析のほとんどは誤差逆伝播法を用いた階層型（3 層）ニューラルネットワークである。

筆者が構築したニューラルネットワーク[4]では相関係数 0.99685、平均誤差 3.51K、最大誤差 15.02K でハロゲン化合物の沸点を推算することができた。

臨界温度、臨界圧力、臨界体積の臨界定数の推算に関しては原子団寄与法[3]、NN 法[4,6b,6h,7]、モンテカルロ法（MC 法）[8]などが知られている。

沸点、臨界定数が判ると対応状態原理[3]を用いる事によって様々な物性値が推算できる。

対応状態原理とは、ある状態 T,P,V における物性値を化合物の臨界温度(T_c)、臨界圧力(P_c)、臨界体積(V_c)を用いて無次元化すると、還元温度（$T_r=T/T_c$)、還元圧力（$P_r=P/P_c$)、還元体積（$V_r=V/V_c$)で表される物性値は化合物の種類によらなくなるという方法である。例えば PV=RT という理想気体の法則で体積が 1 の容器にある化合物 A を 1mol 入れる。ある温度 T のとき圧力 Pa は簡単に求まる。しかし違う沸点（蒸気圧）の化合物 B を入れた時の圧力 Pb は Pa とは異なる。これを還元温度、還元圧力で表せば、ある Tr の時の化合物 A の圧力 Pra(=Pa/Pca)は化合物 B の圧力 Prb(=Pb/Pcb)と等しくなる。この原理を使うと物性値は化合物の種類にはよらなくなる。（極性物質では補正項が必要になることもある）

この対応状態原理[3]を用いた物性推算法には

液体密度の推算方法: Gunn-Yamada 法、Yen-Woods 法、Chueh-Prausnitz 法

蒸発潜熱の推算式: Giacalone 式、Riedel 式、Chen 式、Vetere 式、Pitzer-Carruth-Kobayashi 式

表面張力σの推算法: Brock-Bird 式

液体粘度の推算法には: Letsou-Stiel 式

液体熱伝導率の推算法には: Sato-Riedel 式

などが知られている。これらの式はハロゲン化合物には適さないものもあるが、通常の炭化水素化合物に対してはそれなりに使えるようである。

筆者はこうした物性値に関しても NN 法を用いた推算式[4,9]を構築した。

このようにして主だった物性値の推算方法が確立すると例えば洗浄剤として用いられていたフロン-113 と同等の物性値を持つ化合物のスクリーニング[4]が可能と成る。沸点、表面張力、SP 値がフロン-113 に近いクロロフロオロカーボン（CFC）は 17 化合物見つかり、その中には、現在フロン-113 の代替として用いられている HCFC-225cb も含まれていた。さらに含酸素化合物なども多数見い出された。

また、冷媒として用いる場合にもこれらの推算値が得られるとその冷媒の冷凍効率まで推算する

THEDYNA というシステムが RITE、新規冷媒等プロジェクト室と物質工学工業技術研究所の間で開発が進められている。
発泡剤として用いる場合にはその熱伝導率が問題となる。熱伝導率は原子団寄与法[3]、対応状態原理[3]、NN 法[9]などでも推算されるが、モレキュラーダイナミクス（MD)法[10]を用いた推算もなされている。
このスクリーニングする際、洗浄剤、発泡剤、冷媒に共通して問題になってくるのが溶解度の問題である。洗浄剤は松やになどを溶かすか？発泡剤はポリウレタンやその原料との溶解性は？冷媒はコンプレッサー油の溶解性は？である。溶解度は Small の原子団寄与法[11](官能基ごとの凝集エネルギー密度とモル容積）を使った Solubility Parameter（SP 値）が一つの指標になるが、これで合うのは 7 割程度とされており様々な改良[12]がなされている。水に対する溶解性[6l-6m]、水／オクタノール分配比率[6n]、無限希釈活量係数[6o]の推算が NN 法などを用いてなされている。

次に合成する化合物が絞り込まれると、また、様々な物性推算が必要になる。例えばある反応は発熱反応なのか吸熱反応なのか？発熱量はどのくらいでそれを除熱するのにどのくらいの冷却能力が必要なのか？その粘度は[6p]？反応を無溶剤化した場合、水系に変えた場合、その溶解度は？反応速度は？できたものを分離する時に副反応生成物の沸点は？蒸留塔の段数は？抽出の溶媒は？等々である。生成熱、Gibbs エネルギー、生成エントロピーの算出に関しては古くは原子団寄与法[3]による推算であったが、最近は分子軌道計算によっても比較的簡便に精度よく計算できるようになった。

実際に化合物が合成されると必要になるのが分析である。NMR、IR、MASS、ガスクロマトグラフィーなどの分析がなされているが、これらのケミカルシフト[6q,6r,13] IR ピーク位置[6s],リテンションタイム[6t]の推算も NN 法などを用いてなされている。

フロンは可能な限りクローズドなシステムで用いるべきであるが、同時に大気にもれた場合の影響評価もすませておく必要がある。その際にも様々な物性推算が必要になる。例えば水に対する溶解度、これは雨にどの程度溶けて地表に戻ってくるかの指標となる。OH ラジカルとの反応速度の推算、これは大気中に大量に存在する OH ラジカルによってフロンが分解されるのだが、その分解速度、すなわち大気寿命の推算につながる。赤外吸収スペクトルの予測、これは赤外吸収と大気寿命から地球温暖化係数を計算するので非常に重要な物性値となる。この、OH ラジカルの反応性に関しても様々な物性推算が利用されている。分子軌道法によるものとしてはハロゲン化合物と OH ラジカルとの反応速度をその遷移状態を求めることによって予測する研究が物質工学工業技術研究所の杉江、内丸[14]らによって進められている。アメリカ、JPL(Jet Propulsion Laboratory)の DeMore 博士らは OH ラジカルとの反応速度を C-H 結合の BDE（Bond dissociation energy)と相関[15]したり、G-value 法[16]という原子団寄与法にさらに遠距離の効果を取り込んだ推算法を開発している。また、カルフォニア大学の Atkinson 教授らはハロゲン化合物に限らず広範な化合物の OH ラジカルとの反応速度を原子団寄与法[17]によって推算している。赤外吸収スペクトルの予測には NN 法を用いたもの[18]、分子軌道計算を用いたもの[16]、分子軌道計算の結果を NN 法を用いて補正[6s]したものが知られている。

地球環境だけでなく人体に対する影響も考慮に入れなければならない。
毒性、水に対する溶解性、水／オクタノール分配比率、生物分解性、燃焼性[6u]などの推算が重要である。例えば、水／オクタノール分配比率は親水性と親油性の比率を示す物性値だが薬や毒物の体内への吸収と相関がある。現在の技術では毒性（薬効）推算はまだまだ難しいが物質工学工業技術研究所の田辺、松本ら[19]によって精力的に研究が行われている。

以上簡単に新規なフロン代替化合物を設計する時に用いた物性推算法を紹介したが、それはフロン類に限らず、例えばある環境ホルモンがどのくらいの蒸気圧を持ち、水に対する溶解度がどのくらいかとか、ポリ塩化ビニルに相溶する可塑剤で環境毒性のないものはどう設計できるかとか、界面活性剤問題、ダイオキシン問題など広い範囲で応用が可能である。

こうした物性推算が進歩してくると冒頭の「カーエアコン1台分の新規フロン代替化合物」はどのくらいの環境影響なのかを実際にモノを作る前から見積もる事ができるようになるが、これには情報化学のさらなる発展が必要である。

参考文献

1) http://www.google.com/ 2001.1.25
2) 乙竹ほか 化学工学論文集 a) 第13巻、第5号 710-713 (1987) b)第12巻 第5号 542-549 (1986) c) 第14巻、第1号 32-37 (1988)
3) Robert C. Reid, John M. Prausnitz,and Bruce E. Poling, The Properties of GASES & LIQUIDS Fourth Edition McGRAW-HILL INTERNATIONAL EDITION
4) 山本 博志、 JCPE Journal, **11**, 65-76 (1999)
5) 朝倉化学講座5 構造と物性 細矢治夫、円山有成
6) J. Chem. Inf. Comput. Sci.
a) **33**, 616-625 (1993) 沸点
b) **34**, 947-956 (1994) 沸点、臨界温度
c) **34**, 1118-1121 (1994) 沸点
d) **37**, 1146-1151 (1997) 沸点、密度、屈折率
e) **38**, 28-41 (1998) 沸点
f) **38**, 158-164 (1998) 沸点
g) **39**, 491-507 (1999) 沸点、引火点
h) **38**, 639-645 (1998) 臨界温度、臨界圧力
i) **36**, 100-107 (1996) 水に対する溶解度
j) **38**, 1-7 (1998) 水に対する溶解度
k) **38**, 283-292 (1998) 水に対する溶解度
l) **38**, 489-496 (1998) 水に対する溶解度
m) **38**, 720-725 (1998) 水に対する溶解度, 蒸気圧
n) **37**, 615-621 (1997) logP
o) **38**, 200-209 (1998) 無限希釈
p) **37**, 1122-1128 (1997) 粘度
q) **36**, 58-64 (1996) C13NMR
r) **37**, 587-598 (1997) C13NMR
s) **38**, 483-488(1998) IR PM3補正
t) **39**, 59-67(1999) GCリテンション
u) **37**, 538-547(1997) 燃焼
7) Ohe S., Sekiyu Gakkaishi, **35**, 107-110 (1992)
8) Fluid Phase Equilibria **104**, 349-361(1995)
9) 山本 博志、旭硝子研究報告、**49**, 53-72 (1999)
10) 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション 日本機械学会編 コロナ社 P182
11) P.A. Small J. Appl. Chem. **3**,71(1953)
12) 沖津 俊直, 日本接着学会誌, **29**, 204-211(1993)
13) Analytica Chimica Acta **321**,127-135 (1996)
14) 2000年 計算化学討論会予稿集 P12
15) K-J.Hsu and W. B. DeMore、J. Phys. Chem., **99**, 11141-11146 (1995)
16) International Symposium on Environmental Impacts of Advanced Alternatives to CFCs
17) Roger Atkinson、Atomospheric Enviroment **29**, 1685-1695 (1995)
18) 松本高利ほか、化学とソフトウエア、**21**, 3-10 (1999)
19) http://www.aist.go.jp/NIMC/recent/r99-03-01.html

やまもと ひろし Yamamoto, Hiroshi

ニューラルネットワーク、遺伝的アルゴリズムを使った物性推算から入って、最近は人工知能、人工生命へ惹かれつつあります。マックとPalmのプログラミングが趣味です。

連絡先 〒221-8755 横浜市神奈川区羽沢町 1150番地 旭硝子株式会社、中央研究所、化学生産技術Gr. 電話：0.45-374-8745 FAX：0.45-374-8871

情報化学討論会に対するアンケート結果の報告

情報化学部会では、1998年に部会活動全般に関するアンケートを実施し、部会員の皆様から今後の活動に役立つ貴重なご意見をいただくことができました。部会ではそのアンケート結果をもとに重要課題に継続的に取り組んで参りました。第一の課題は研究者の発表機会増加、レベルアップを目的とした電子ジャーナル刊行であります。皆様のご協力により昨年発刊することができました。第２の課題は情報化学分野に係わる層の拡大とそのために必要な環境作りを目的とした討論会の充実であります。一つの試みとして構造活性相関シンポジウムと共同のポスターセッションを設けました。部会では、今後の更なる討論会の充実に向けて討論会参加者の皆様からの忌憚の無いご意見をいただき、21世紀への発展に繋げていきたいと考え、第二弾として「情報化学討論会に対するアンケート」を実施致しました。126名の部会員の方々から貴重なご意見をいただきました。ようやく結果がまとまりましたので報告させていただきます。皆様のご協力に対して厚く御礼申し上げます。

1　アンケート結果のまとめ

（以下の数字は全て回答者の人数を示す。）

１．１　回答者のプロファイル

（１）所属機関

A：大学（現、元）（教官、学生）	５０
B：企業	５５
C：国公立研究所（含む、その他）	２１
合計	１２６

（２）所属学会、研究会

日本化学会（８１）、アメリカ化学会（２０）、日本薬学会（１７）、
日本高分子学会（１３）、有機合成化学協会（１１）、化学ソフトウエア学会（９）、
情報処理学会（９）、日本物理学会（９）、日本分析化学会（８）、化学工学会（７）、

１．２　情報化学討論会への参加経験

（３）過去の参加頻度

１：ほとんど毎回	１９（大９、企７、国３）
２：５～１０回	２７（大１０、企９、国８）
３：１～４回	４８（大１７、企２６、国５）
４：０回	３１（大１４、企１２、国５）

（４）発表経験

１：口頭発表

１回	１２（大４、企４、国４）
２回	１０（大１、企６、国３）
３回	６（大５、企１、国０）
４回	１（大０、企１、国０）
５～９回	１２（大５、企３、国４）
１０回超	２（大２、企０、国０）

２：ポスター発表
1回　８（大３、企５、国０）
2回　１１（大４、企２、国５）
3回　２（大１、企１、国０）
4回　１（大０、企１、国０）
５～９回　５（大４、企０、国１）
１０回超　３（大３、企０、国０）
３：ない　６４（大２２、企３４、国８）

（５）今後の発表
１：発表したい　３７　（大１９、企９、国９）
２：どちらともいえない　４６　（大２０、企２０、国６）
３：発表は考えていない　３６　（大１０、企２３、企３）

（６）発表は参考になったか？
１：時々参考になった　５９（大２０、企２４、国１５）
２：直接参考にはならないが刺激になった　３３（大１６、企１５、国２）
３：どちらともいえない　１２（大４、企６、国２）
４：ほとんど参考にならない　１（企１）

（７）昨年度討論会への参加有無
１：参加した　４８（大１８、企２０、国１０）
２：参加しなかった　７７（大３２、企３５、国１０）

（８）今後の情報化学討論会
１：ぜひ参加したい　２７（国１８、企８、国１）
２：時間があれば参加したい　６７（国２２、企３１、国１４）
３：参加したいが時間がとれない　３０（国９、企１６、国５）
４：参加したくない　１（大１）
（４回答者の理由：興味分野が変わり、時間の余裕もなくなった。）

１．３　情報化学討論会の開催方法

１．３．１　討論会の時期、開催期間、開催都市

今年度の討論会は徳島大学において、11月7日（水曜）から9日（金曜）まで開催される予定です。

（９）時期（従来、１０月、１１月頃開催）
１：春　７（大２、企２、国３）
３月＝３、４月＝１、５月＝１、７月＝１
２：秋　３４（大 １９、企１２、国３）
９月＝３、１０月＝１１、１１月＝１２
３：いつでもよい　５２（大１１、企３３、国８）
４：その他　１４（大８、企３、国３）
・年会と同時開催がよい＝７
・大学の休みの時期＝３
・主要学会と重ならないように＝１
・構造活性相関と一緒に＝１

（１０）期間（従来、大都市開催の場合２日間、それ以外は３日間）

１：現状でよい　６４（大２１、企３１、国１２）
２：すべて２日間　３２（大１８、企１２、国２）
３：すべて３日間　１５（大６、企７、国２）

意見：

・できるだけ短くしてほしい
・発表件数によって変わってよい
・一日行けば参加意義を大きく感じられるプログラム編成に
・すべてポスターにすれば１日で十分

（１１）開催都市（従来、毎年異なる都市をローテーション）

１：現状でよい　９４（大３６、企４５、国１３）
２：いつも同じ都市がよい　１５（大６、企６、国３）
（東京＋京阪神）＝７、（東京）＝２、（東京＋京阪神＋札幌）＝１、
（東京＋京阪神＋東海）＝１、（東京＋京阪神＋九州）＝１、
（京阪神＋名古屋）＝１
３：その他　４（大２、企２、国０）

・年会と同じ＝２（内、春年会の方がよい＝１）
・交通の便のよいところ（１泊２日）＝１
・部会員の多いところ＝１
・大都市で開催期間を短くせざるを得ないならば大都市開催を見送ることも一案

１．３．２　発表形式

（１２）発表時間（従来、口頭１５分あるいは２５分）

１：現状でよい　９７（大３７、企４６、国１４）
２：以下の長さぐらいがよい　７（大３、企１、国３）
１０分＝１、１２分＝１、１５分＝１、２０分＝３、２５分＝１
３：すべてポスターでよい　２（大１、企１、国０）
４：その他　（大４、企２、国０）

・１０分枠もあると発表しやすい
・発表方法を見直す方が重要、本来の討論会のあるべき姿を考える必要あり

（１３）質疑時間

１：現状でよい　８７（大３２、企４４、国１１）
２：以下の長さぐらいがよい　１２（大６、企４、国２）
４分以下＝１、５分＝４、５〜１０分＝３、１０分＝４
３：その他　１（国１）

意見：

・時間よりも内容の充実を、そのためには座長が活性化の役割を果たすように
・質疑時間を残すためには発表時間を厳守するように
・現状は討論の場になっていない

（14）休憩時間（本年はスケジュールがタイトでほとんど取れなかった）

1：現状でよい　　　　　　　53（大18、企28、国7）

2：以下の長さぐらいがよい　38（大17、企15、国6）

5分＝1、10分＝9、15分＝16、20分＝6、20分超＝6

3：その他　　　　　　　　　5（企3、国2）

・休憩必要＝2

・移動時間取れるように＝2

・もっと余裕あるスケジュール企画を＝1

（15）ポスターセッション

1：現状でよい　　93（大43、企37、国13）

2：なくてもよい　　2（大1、国1）

3：その他　　　　17（大3、企11、国3）

・会場をもっと広く＝9

・すべてポスターでよい＝2

・時間をもっと長く取ってほしい＝2

・部屋は一つがよい

・多すぎても困る

・インターネットを通してポスターできないか

（16）特別講演、キーノート講演

1：現状でよい　69（大33、企34、国2）

2：数が少ない　11（大3、企7、国1）

3：数が多すぎる　6（大2、企2、国2）

4：なくてもよい　2（企2）

5：その他　　　　3（大1、企2）

・名声よりも内容が面白い講演を

・質疑時間をもっと増やしてほしい

・重要な話はCICSJにも掲載してほしい

・人寄せ目的ではない、その領域でのレビュー的な企画ができないか

（17）展示会（収入源として重要ですが皆様のお役に立つ企画にします）

1：現状でよい　71（大26、企34、国11）

2：数が少ない　26（大9、企13、国4）

3：数が多すぎる

4：なくてもよい　4（大1、企3）

（18）討論会の国際化

1：現状でよい（発表言語はどちらでもよいが日本語主体である）

99（大36、企47、国16）

2：海外からも発表者を募り、発表言語は原則的に英語とする。

14（大6、企6、国2）

3：その他　1（企1）

・特別講演は海外から募る

・提携国との持ち回り

・英文でも日本語抄録はほしい

・発表言語の前に討論の場にすることが先決

・発表形式全般に関するご意見：

①手法の適用、②手法の開発・改良とに大きく分けてはどうか。
①については、更に、適用する分野別に分ける。
②については、現状の切り口が妥当であると考える。）

1．4　情報化学討論会の運営方法および参加費用

部会では、参加者の皆様のご負担を減らすよう種々努力しております。例えば、展示・広告等による収入を組み入れています。参費用について皆様のご要望があれば、利便性と費用のバランスの見直しにより改定することも可能です。

（19）参加登録費（本年は一般予約8,000円、学生予約4,000円）

1：現状でよい　　79（大27、企37、国15）
2：一般予約で2000円程度値上げしてもよい　10（大4、企5、国1）
3：値下げしてほしい　28（大16、企10、国2）
　1000円以下＝1
　2000円　＝2　（内1名、学生向け2000円）
　5000円　＝16
　6000円　＝4
犠牲にしてもよい項目
　会場＝9、予稿集＝5

（20）予稿集

1：現状でよい　53（大18、企24、国11）
2：アブストラクトだけでよい　13（大9、企2、国2）
3：WWWページ上で事前に電子配布すれば不要　45（大15、企24、国6）
4：その他（大7、企3、国1）
回答者の意見：
・縮小＋紙を薄くして軽くする
・紙と電子ファイルの両方あるとよい
・フルペーパーはJCACとして原稿に載せる
・4ページがよい
・ページ数減らし、電子ファイルと併用する
・2ページで十分
・電子配布を利用して必要な分だけ持ち歩けばよい

（21）会場（従来、ホテルあるいは会議場使用）

1：現状でよい　36（大12、企18、国6）
2：年会のように大学でもよい　83（大37、企34、国12）
回答者の意見：
・併催の場合は会場が近いように
・収入に応じて考える
・大学付属の記念館等を活用する

（２２） 懇親会（従来、参加登録料とは別に参加料を徴収）

　　１：現状でよい　　　　　　　　　　６３（大２４、企３５、国１４）
　　２：簡素にして参加料を安くする　　２４（大１１、企９、国４）
　　３：簡素にして参加登録料に含める　１７（大８、企９）

　　　回答者の意見：
　　　・学生が参加しやすいように安く＝２
　　　・基本＋追加のような形で、２部制に
　　　・選択できるように
　　　・夕食の代わりになる量を
　　　・参加登録料に含めて強制的に負担することはやめてほしい

１．５　他の討論会への参加状況

従来、春の日本化学会年会に情報化学関連のセッションを持っております。また構造活性相関シンポジウムとの共催により討論会の期間中、両方自由に参加できるようになっています。

（２３）春の日本化学会年会

　　１：参加することが多い　３７（大２０、企９、国８）
　　２：ほとんど参加しない　７８（大２４、企４２、国１１）

（２４）構造活性相関シンポジウム

　　１：構造活性の発表を聞く　　３４（大１０、企１５、国９）
　　２：特別講演は聞く　　　　　３０（大１１、企１４、国５）
　　３：ほとんど発表を聞かない　５４（大２１、企２７、国６）

　　回答者の意見：
　　・オーバーラップする部分がある、分類を整理しては
　　・シンポジウムと統合することを考えてみては

（２５）本討論会と関連深い分野でよく参加される討論会等

　　１：計算化学討論会　　　　　　　３０（大１０、企１５、国５）
　　２：分子シミュレーション討論会　１５（大４、企８、国３）
　　３：理論化学討論会　　　　　　　１２（大８、企２、国２）
　　４：高分子計算機科学研究討論会　　６（大１、企５）
　　５：化学ソフトウエア学会年会　　１５（大８、企４、国３）
　　６：その他
　　（JCPE,分子構造総合討論会、光化学討論会、日本生物物理学会、計算機統計学会、ケモメトリックス討論会、有機反応討論会、触媒討論会、薬学会の計算化学分野、NMR討論会、電池討論会、高分子討論会）

　他学会との交流促進についての回答者からの意見：
　・前向きに進めてほしい
　・構造活性相関との共催続けてほしい、また他との共催も検討の価値はある
　・他学会との合同の会合を積極的に持つ
　・共催よりも独自性をしっかりさせることの方が重要
　・どんどん交流したい
　・この分野は細分化しすぎている、統合すべき
　・領域広げるのが望ましい

・重複する領域の学会とは情報交換すべき
・共同事業（シンポ、講習会等）を進めてほしい
・情報系学会との連携
・積極的に進めるべき、講演会・シンポ等、企画段階から共催しては

1．6　その他のご意見

回答者からの意見：
・若手の会のような気軽にディスカッションできる場があるとうれしい
・発表内容に応じてランク付け必要では
・先輩の業績をしっかり引用する、自分の業績のように見せかけない
・専門性の高いもの＋話題提供とがあると参加しやすくなる
・統一性ある興味深い内容ならば開催場所は問わない
・個人的に経済的に参加しやすいように
・マニア向けに偏していないか
・若くて柔軟で優秀な頭脳を養成する環境を
・もっと教育に力を入れてほしい
・討論会の活動内容をもっと知りたい
・プログラム、OSも重要、日本独自のソフトほとんど無い
・ドクメン関係、図書館の人々も参加しやすいようになればよい
・インターネットを通じて１年中討論することもできる
・バイオインフォマティクスを取り入れる
・よい発表はインターネットで流してほしい
・ファクトデータベースのグループの発表が少ない

その他、部会活動に関連した意見：
・関連する国家プロジェクトの情報もHPに載せてほしい
・ソフト、論文の安価な入手を

2　アンケート結果の分析及び今後の活動に向けて

部会では今回の貴重なご意見をもとに、討論会に関して今後継続的に議論していく問題、あるいは次回の討論会から試行的に実施を検討中の項目を以下にまとめます。

１）討論会への参加目的、参加経験
・部会員の75%は参加経験がありますが、１～２回のみ発表する人と毎回発表する人に２極化しています。続けて発表してもらう討論会にするには更なる工夫が必要であると考えられます。
・討論会への参加目的は３つ（発表すること、情報収集、及び教育の場）あります。この観点から討論会のあり方を見直すことも必要です。
・部会員の88%の人は討論会が参考になる、あるいは刺激になると感じています。

２）開催時期・期間・都市
・「従来でよい」との意見がもっとも多いのですが、期間短縮を希望する意見も多くあります。プログラム編成の仕方とも関係しますが、一部分しか出席できなくても十分参加価値が得られる編成を考えることも今後の検討課題です。

3）発表形式

・基本的には本来あるべき討論の場にすべきであり、そのためには逆説的ではありますが画一的な形式ではなく、多様性（参加者のニーズに応える形の分類分け、あるいはいくつか異なる要求レベル、発表形式を設ける）も取り入れる必要を感じます。

・上記の一例として少数ではありますが発表しやすいようにして欲しいとの意見もあります。時間枠の短いもの、専門的に深くないが話題提供として価値あるもの等を検討する必要があります。

・皆さんのご意見をもとに今後検討すべきいくつか改善の方向案を挙げます。

①先達が築かれた成果をレヴューし（特別講演あるいはキーノート講演？）、周知してもらうために CICSJ あるいは WEB で公開します。発表者は必ず事前に目を通すようにしてはどうでしょうか。

②基礎（理論、新手法の開発）と応用（既存手法の小改良・応用）に分類分けして、それぞれに発表の要領ガイドライン（今までとの違い、背景・目的の明瞭化等、分類分けに応じて要求したいこと）を示してはどうでしょうか。

4）運営方法、参加費用

・「現状でよい」がもっとも多いのですが、会場・予稿集を犠牲にしても値下げしてほしいとの意見も多くあります。極力、大学を利用することと予稿集（紙）は別料金とすることも考えられます。

特に学生が参加しやすい形にするために、学生の参加登録・懇親会の費用はもっと安くすることを考える必要があります。

5）他学会との共催

・構造活性相関シンポジウムの発表を聞く人の割合は 29%（特別講演も含めると 54%）で、共催している価値は十分出ていると思われます。

・構造活性相関以外の他学会との共催についても積極的に進めてほしいとの意見が多くあります。特に重複する部分が多い学会とは意見交換・情報交換から始めることが考えられます。

上記の検討課題につきましては、今後も CICSJ Bulletin、電子メール等を通してあるいは情報化学討論会の場で継続的に議論を進めながら実施していく予定です。今回のアンケートのまとめに対する自由なご意見等をお待ちしております。

ご意見の送り先：（社）日本化学会 情報化学部会
E-mail：cicsj@chemistry.or.jp　　FAX：(03)3292-6318

部会役員会・委員会報告

平成１３年度第１回役員会議事録

日　時：平成１３年3月２８日（水）１２時～１４時

場　所：甲南大学岡本キャンパス３号館３６６教室

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，坂本直紀，重光保博，高木達也，高畠哲彦，中野英彦，中山伸一，藤田眞作，清水弘一

議事内容

（1）平成１３年度役員紹介

時田委員長より，役員役割の一部訂正が行われた後，役員の自己紹介が行われた。

（2）平成１２年度事業報告および会計報告

清水部会担当より，平成１２年度情報化学部会事業報告と会計報告があった。平成１２年度は最終的にほぼ収支が０になりそうであるが，黒字を出していないのは化学会の５部会中本部会だけであり，今後部会の収益をあげる工夫を検討することで，報告は了承された。

（3）平成１３年度事業計画案および予算案

清水部会担当より，平成１２年度とほぼ同様の平成１３年度事業計画案と予算案が示され，了承された。

（4）第２４回情報化学討論会について

高田委員より，２月２０日に行われた合同幹事会で話し合われた第２４回情報化学討論会の進捗状況について報告があった。開催までのスケジュール，特別講演（細矢先生、西本先生），共通セッションをより交流を促進する方向で行うことなどが報告された。

情報化学討論会のキーノートレクチャーの演者が提案され，了承された。また，電子化要旨集の試験版を作成することが船津委員より提案され，pdf ファイルでのみ受け付ける方針で了承された。

講演要旨集は，色を CICSJ と同じとすることとした。ページ数とサイズについては，A4 にするという前提で２ページにしたことを確認した上で，４ページの必要性を構造活性シンポジウムに対して確認し，大きさについては A4 にこだわらないこととした。

さらに，参加費が高すぎるという意見があり，特に学生の参加費について検討することとした。

第２５回については，構造活性相関シンポジウムの考えを聞いた上で東京地区で検討す

ることとした。

（5）ＪＣＡＣ

船津委員より，電子ジャーナルＪＣＡＣの状況について報告があった。技術的な問題はほぼクリアしたこと，投稿論文の増大が期待されることが報告された。

時田委員長より提案されていた論文賞については実施することとした。

高木委員より，３月１５日に開かれたJ-STAGE利用学会懇談会の報告があった。

（6）科研費細目の新設要望について

時田委員長より，科研費に「情報化学」という細目の新設を要望したことが報告された。なお関連する７団体が支援してくれたことが併せて報告された。

以上

平成１３年度第１回拡大編集委員会議事録

日　時：平成１３年３月２８日（水）１４時～１５時

場　所：甲南大学岡本キャンパス３号館３６６教室

出席者：時田澄男，高田 章，船津公人，相田美砂子，北尾 修，工藤喜弘，坂本直紀，
　　　　重光保博，高木達也，高畠哲彦，中野英彦，中山伸一，藤田眞作

議事内容

（1）CICSJ Bulletin Vol.19No.1，2 について

高田委員より，No.1 はすでに発行済み，No.2 は北尾委員が中心となり，原稿を集め終えた状況であるという報告があった。

（2）CICSJ Bulletin Vol.19No.3 について

工藤委員より，No.3 の原稿依頼の状況について報告があった。その手続きに問題があるということで，まず原稿依頼の内諾を確認し，受諾されたものについて正式な原稿依頼を出すこととなった。

（3）総目次・著者索引の改訂作業について

Vol.18 No.6 の改訂作業および情報化学討論会の総目次・著者索引の誤り発見作業を次回の拡大編集委員会において行うこととした。なお作業分担などの詳細は中山委員がまとめることとした。

次回委員会は４月２３日（月）１５時から行うこととした。

以上

第２４回情報化学討論会

主催　日本化学会情報化学部会

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

協賛　教育システム情報学会

会　期：平成１３年１１月７日（水）～９日（金）

会　場：徳島大学蔵本キャンパス〔徳島市蔵本３-庄町１〕

交　通：JR 徳島駅前バスターミナル１番乗り場より市バス 1,4,17,19 系統，「医学部前」下車後すぐ

特別講演

１）西本　吉助（大阪市大名誉教授）「IT時代の量子化学」

２）細矢　治夫（お茶の水女子大）「私の構造活性相関」

討論主題

(1) 化学情報学(化学論理学，情報検索，DB コンピュータネットワーク，CG，グラフ理論，反応設計など)

(2) 理論化学・計算化学(MO，MM，MD，MC，各種シミュレーションなど)

(3) ケモメトリックス及びそのソフトウェア(ニューラルネットワーク，ファジィ，カオス，遺伝的アルゴリズム，構造物性相関，データマイニングなど)

(4) 化学教育・学習システム

(5) その他情報化学に関するもの(コンビナトリアル・ケミストリー，遺伝情報，環境ホルモン情報など)

(6) 学際的な広がりの中の情報化学と構造活性相関のクロスオーバー(構造活性相関シンポジウムとの合同セッション)

発表形式　口頭(25 分または 15 分，討論 5 分を含む)またはポスター

発表申込　7 月 18 日(水)締切〔必着〕。WWW にて行う。詳細については文末の URL をご覧下さい。

講演要旨　9 月 28 日(金)締切〔必着〕。A4 判用紙で和文または英文 2 ページ，英文半ページ。執筆要項は発表申込受理後にお知らせします。

参加登録予約申込　9 月 28 日(金)締切〔必着〕。WWW にて行う。参加登録および送金方法などの詳細については文末の URL をご覧下さい。

参加登録費　(構造活性相関シンポジウムと共通，要旨集合本 1 冊を含む)〔一般〕予約 8,000 円，当日 9,000 円　〔学生〕予約 3,000 円，当日 4,000 円。要旨集前送希望の場合は郵送料 1,000 円を別途申し受けます。

懇親会　(構造活性相関シンポジウムと合同)　11 月 8 日(木)ホテルグランドパレス徳島にて。会費：〔一般〕予約 6,000 円，当日 8,000 円　〔学生〕予約 4,000 円，当日 6,000 円

連絡先　770-8506 徳島市南常三島町 2-1 徳島大学工学部知能情報工学科　矢野 米雄

TEL: 088-656-7495，FAX: 088-623-2761　E-mail: cics24-desk@is.tokushima-u.ac.jp

URL: http://www-chemist.is.tokushima-u.ac.jp/cics24/

（ご都合により WWWをご利用になれない方は，上記連絡先までお問い合わせ下さい）

◇編集後記

春爛漫．景色は印象派の絵画を見るような陽気である．ふと思った．化学というのは絵画でいうと印象派の描写手法に似ているなと．

"共役", "芳香族性", "立体障害"などの概念はどうもぼんやりしている．共役・芳香族性は電子分布の仕方の問題だから分子の構造は不変のはずである．しかし，それらを観測するとなると異なる幾何構造間のエネルギー差を求め共役エネルギーなどとのたまう．

立体障害はかさばった原子団同士の何が反発するのであろうか？ 電子同士，原子核同士，それとも何かほかの要因で？ しかし，化学では"かさばった"で片付けてしてしまう．対象が全体的にはなんとなくわかったようであるが実態は明確でない．この曖昧な描写の絵画を描いたり鑑賞したりして楽しんでいるのがわれわれ化学者みたい．

しかし，考えてみれば化学の基礎である量子力学もまた曖昧な量を与えている．力学的諸量を求めることはできるが，統計概念の期待値であり確定値ではないのである．こう考えると自然科学の曖昧は受け入れなくてはならないものかもしれない．ただ，化学の概念の曖昧さはヒド過ぎはしないか？ 絵の具をいくつか混ぜると味のある色を出せるが，科学ではなくなる．

(H. I.)

CICSJ Bulletin Vol.19, No.3, June 2001

目次

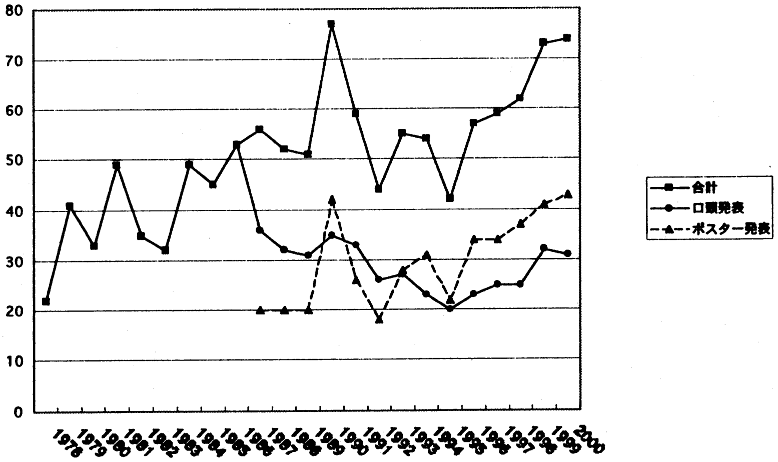
巻頭言

図書館情報大学図書館情報学部　中山伸一

CICSJ Bulletin18 巻 6 号で予告致しましたように、情報化学部会の活動のもう一方の車輪であります研究に関する歴史をまとめる意味で、昨年までの情報化学討論会講演要旨集の総目次と著者索引を作成致しましたのでお届けします。

情報化学討論会は 1978 年の「化学と情報に関する討論会」を起源とし、昨年（2000 年）で 23 回を数えます。その間、1980 年から「第 3 回情報化学討論会」と名称を変え、1982 年の第 5 回から構造活性相関シンポジウムと併催となり、1987 年の第 10 回からポスター発表を設けるなどの変遷を経て今日に至っております。

総目次をもとにした発表件数の推移は以下のように全体として右肩上がりの傾向を示しており、その総件数は 1174 件（内特別講演 38 件、ポスター発表 416 件）に達します。



討論会に発表された方を、著者索引を使って数えると 1400 人を越えます。最も多く発表された方は１０９件、第 1 回から第 23 回まで皆勤の方も一人いらっしゃいました。総目次や著者索引を読むと、多くの人々が情報化学研究を支えて来たことが伺えると同時に、新たな人々がこれからの情報化学研究を築き上げて行きつつあることも感じさせます。

これからの研究を考えるときに、先人の研究に目を配ることは大変有意義なことと考えます。その意味で本企画が、先の CICSJ Bulletin の総目次・著者索引と併せて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 の総目次・著者索引につきましては、校正が不十分であったためにあちらこちらにミスがあります。一重に担当委員の不徳の致すところであり、関連の方々にご迷惑をおかけしていることをまことに申し訳なく思っております。

できるだけ早期に改訂した CICSJ Bulletin の総目次を、今回の情報化学討論会講演要旨集の総目次とともに部会のホームページ上で公開致しますのでそれまでご容赦下さい。

◆特集：情報化学討論会講演要旨集　総目次

情報化学討論会講演要旨集　目次

記載形式　ページ[講演番号],表題,（著者所属）著者名

島時生
94 [5-4],学習機能をもつマス・スペクトル自動構造解析システム,（クラレ中研）中山堯・（筑波大電子情報）黒川淳介・藤原譲
99 [6-1],分子設計のためのグラフ生成操作について,（学習院大理）三浦均・菅忠義・（群馬大教育）飯塚健
105 [6-2],毒性情報ネットワーク(TOXIN)の概念設計,（都臨床医総研）神沼二真・倉科周介・山本正・（埼玉大）栗原章浩
111 [6-3],半経験的分子軌道法による制癌性 Mitosanes の構造活性相関,（慶大医）稲山誠一・大坂哲司
116 [6-4],ピラゾロン誘導体の構造活性相関,（豊橋技科大・第一製薬）四居靖彦・関友子・宮下芳勝・山崎憲一・佐野光司・阿部英次・佐々木慎一
121 [6-5],構造-活性相関へのパターン認識の応用－抗菌スペクトルの解析,（豊橋技科大）高橋由雅・宮下芳勝・（第一製薬）四居靖彦・（豊橋技科大）阿部英次・佐々木慎一
125 [特別講演 7-0],有機構造解析の現状,（豊橋技科大）佐々木慎一
130 [7-1],簡単な構造式入力器,（化技研）和佐田宣英・橘詰昭夫
132 [7-2],グラフノードの分割函数,（東工大資源研）内野正弘
135 [7-3],全自動要因解析システムの開発,（群馬大工）佐藤満堆
140 [7-4],位相幾何学的配位子デザイン III－複合配位子グラフにおける図形の縮合と分解,（学習院大理）高本進
144 [7-5],デルタ多面体の性質、系統樹、その化学への応用,（お茶大理）山田景子・細矢治夫
149 [8-1],立体化学の分野における経験的力場法による大型計算,（北大理）大沢映二
153 [8-2],数理計画法の量子化学への応用(6)－ 新アルゴリズムによる活性化状態への反応経路探索,（東大工）野村英樹・御園生誠・米田幸夫
155 [8-3],化学におけるデータ解析と SALS システム,（東大理）中川徹・（筑波大電子情報）小柳義夫・（理研）伊藤徹三・（東工大理）竹中章郎
161 [8-4],炭化水素の転位経路を推定するアルゴリズムと得られた経路の特徴,（学習院大計セ）田中伸英・（学習院大理）今井賢・菅忠義・（群馬大教育）飯塚健
167 [8-5],任意の分子内力場からＦ及びＢ行列を求める数値計算法と、その応用,（学習院大理）今井賢・（群馬大教育）飯塚健・（学習院大理）菅忠義

第 3 回情報化学討論会(1980,11,28-29)都市センターホール（東京）

1 [1-1],^{13}C-NMRによる化粧品成分の自動検索システム,（資生堂研究所）芝本耿・西谷宏・難波隆二郎・田中宗男・森川良広
5 [1-2],コンピュータによる ^{13}C-NMR スペクトルデータ解析システム,（宇部興産中研）〇斎藤啓治・石田嘉明・大島時生
9 [1-3],「既存化学物質ハンドブック」における化学物質表現法,（化情協）工藤喜弘
12(未受理) [2-1],新しい有機化合物の自動構造解析システムの構想とその現状,（豊橋技科大）佐々木慎一・阿部英次・藤原厳
13 [2-2],薬理活性化合物の分類問題におけるシンプレックス法の応用,（豊橋技科大）〇高橋由雅・宮下芳勝・（第一製薬）四居靖彦・（豊橋技科大）阿部英次・佐々木慎一
19 [2-3],BCT による化学構造データベースの構成,（クラレ中研）〇中山堯・ （筑波大）藤原譲
22 [3-1],ABC-Representation of Molecular Structure Diagram and Its Compact Code,（東工大資源研）内野正弘
28 [3-2],テクト珪酸塩構造のトポロジー,（群馬大工）佐藤満雄
31 [3-3],縮合多環共鳴エネルギーの環分割に関して,（九産大工）天野隆史
33 [4-1],結合情報の無過誤入力(チェック済み結晶構造データによる),（京大薬）大崎健次・東常行
38 [4-2],日本の化学文献データベースの作成－Chemical Abstracts への入力の検討,（化情協）〇時実象一・谷本謙一・（阪大理）千原秀昭
42 [4-3],PDB による個人用文献データベースの作成 II－溶媒抽出文献集,（電通大）〇山崎昶・（東理大理）阿部満・山岸悦子・関根達也・長谷川佑子
46 [5-1],化学のための COOD 応用プログラムとその利用 I,（東北大理）田中信行・〇吉川悦子・山田明文・（東北大大計セ）松田孝子
51 [5-2],TRACIS におけるデータベースの統合と提供の方式,（東北大理）田中信行・高橋理・（東北大大計セ）〇松田孝子
57 [5-3],オンライン COOD システムによる電気二重層データベースの作成,（東北大理）〇山田明文・加藤良清・田中信行
61 [5-4],電気化学データベース－電極反応パラメーター,（横浜国大工）〇佐藤寿邦・仁木克巳・（理研）玉虫伶太
63 [6-1],化技研におけるスペクトル・データバンクシステム「SDBS」について,（化技研）佐伯慎之助・〇山本修・染野和雄・平石次郎・和佐田宣英
67 [6-2],^{1}H NMR スペクトルの集積方法およびデータ・ファイルについて,（化技研）〇山本修・柳次勝
71 [6-3],赤外スペクトルデータの集積と検索,（化技研）〇平石次郎・田辺和俊・田村禎夫・佐伯慎之助
73 [7-1],質量スペクトル検索プログラムと、その利用システムの試作,（化技研）〇和佐田宣英・西川利男
78 [7-2],常磁性共鳴スペクトルデータバンクについて,（化技研）染野和雄
81 [7-3],経験的力場計算法の転位反応への応用,（学習院大計セ）〇今井賢・（学習院大理）菅忠義・（群馬大教育）飯塚健
86 [7-4],BASICによる質量スペクトルデータの構築,（電総研）〇小山保二・前田浩五郎
なし [8-0],"島内先生のこと",（東京理科大）竹田政民
90 [8-1],分子振動計算プログラムシステム MVIB における原子団と対称座標の取扱いについて,（広島大理）〇松浦博厚・村田弘・（東大理）原田一誠・田隅三生・(故)島内武彦
94 [8-2],赤外スペクトルデータファイルおよび検索システム,（東大理）田隅三生・（筑波大）〇鈴木功・藤原譲
97 [9-1],触媒化学データベースの提案－専門分野の文献情報と数値情報,（東大工）御園生誠・〇米田幸夫
100 [9-2],量子化学文献データベース(QCLDB)－その企画、収集とサービス,（阪市大理）長村吉洋・（北大理）冨樫雅文・（奈良教育大）山辺信一・（静岡大教育）広田文彦・（お茶大理）細矢治夫・（理研）岩田末広・（分子研）柏木浩・小原繁・〇諸熊奎治・（北大理）田中皓・大野公男
104 [9-3],データベースとしての分子研プログラム・ライブラリ,（分子研）〇柏木浩・西本史雄
106 [9-4],毒性情報ネットワーク:TOXIN 第 2 報－プロトタイプとしての CIS/J システム,（都臨床医総研）神沼二真・（都臨床医総研、フジミック）〇栗原章浩・（フジミック）河崎浩・坂西秀男・千葉光一
112 [10-1],計算機による長期琵琶湖観測データのファイル化とその利用,（京大理）藤永太一郎・岡崎敏・〇増田薫
118 [10-2],ロケット及び気球観測に於けるパーソナル化された PCM データ処理システム,（東大宇宙研）〇松崎章好・長谷部彬敏・丹下甫澄・佐々木誠・中村良治・伊藤富造
123 [10-3],TOOL-IR on ORION:異なる情報検索システムの結合による化学情報検索,（東大大計セ）〇山本毅雄・牛丸守・（東大情図研セ）根岸正光・（国文研）石塚英弘・（東大理）藤原鎮男

第 4 回情報化学討論会(1981,10,19-20)東京大学工学部

1 [1],手軽に利用できる DBMS「DBR」システムとその利用(I)－システム概説,（日本電子計算）〇佐藤和夫・工藤昭夫・横尾孝義・永井光俊・吉岡健三

7 [2],手軽に利用できる DBMS「DBR」システムとその利用(II)－応用例(1)総合臨床情報システム,（日本電子計算）〇工藤昭夫・横尾孝義・佐藤和夫・藤原篤子

13 [3],新 CI－計算とデータ管理－,（北大理）〇佐々木不可止・冨樫雅文・田中皓・野村力・野呂武司

18 [4],化技研スペクトルデータベースにおけるプロトンスペクトルのファイル化,（化技研）〇山本修・柳沢勝

22 [5],プロトン NMR スペクトルデータベースの開発と検索システムの実用化,（第一製薬）〇四居靖彦・（チッソ石化）大草忠雄・（三菱レイヨン）片桐禅・（国立衛試）叶多謙蔵・（三菱油化）酒井稔夫・（出光興産）津村修・（豊田中研）長沢一彦

28 [6],電子計算機による ^{13}C-NMR スペクトル解析システム(3),（宇部興産中研）〇斉藤啓治・石田嘉明・大島時生・高光永明

31 [7],電子計算機による ^{1}H-NMR スペクトル・データ解析システム,（宇部興産中研）〇石田嘉明・斉藤啓治・大島時生・高光永明

34 [8],強度データを含む赤外スペクトルファイルの検索,（化技研）〇田辺和俊・田村禎夫・平石次郎・（筑波大電子情報）鈴木功・（東大理）田隅三生

38 [9],スペクトルファイルを利用した赤外定性分析の自動化,（化技研）〇佐伯慎之助・田辺和俊・田村禎夫・（東大理）田隅三生・（筑波大）鈴木功

42 [10],BASIC による質量スペクトルデータの構築とその利用(III)－基準ピーク、分子イオンピークと化学構造,（電総研）〇小山保二・新国偵倖・前田浩五郎

46 [11],質量スペクトルデータベースの作成,（日本質量分析学会）佐々木慎一・阿部英次・酒井稔夫・鈴木真言・中川有造・林陽・前田浩五郎・（JICST）内田尚子・〇小野寺夏生

50 [12],非正弦直交変換による質量スペクトルデータ処理－Slant 変換の適用と Hadamard 変換、Haar 変換との比較,（化技研）〇西川利男・和佐田宣英

56 [特別講演 1],学術情報と知識ベースシステム,（東工大総合理工）市川惇信

58 [13],定量薬物設計の研究(第 4 報)－薬物分子の X 線結晶構造データベースの作成とそのディスプレイ表示,（名大工）〇江崎俊之

63 [14],計算機による結合情報の抽出 II,（京大薬）〇東常行・大崎健次

67 [15],核四極共鳴スペクトルデータベース,（化情協核四極共鳴委員会）〇千原秀昭（代表）

70 [16],ESR スペクトルデータの集積と検索,（化技研）〇染野和雄

73 [17],高感度元素分析法に関する個人用データベース,（豊橋技科大）〇神野清勝・小泉達則・故武内次夫

79 [18],イオン選択性電極データベースの作成と利用,（京大理）〇岡崎敏・藤永太一郎

85 [19],流体の熱物性データベースの作成,（京大理）大杉治郎・（神戸大工）壽田薫・（生産開発科学研）大門博・（JICST）内田尚子・〇小野寺夏生

90 [20],データベース構築にあたって化学物質データ要素の取扱い方に関する標準化の提案,（阪大理、化情協）〇千原秀昭

91 [21],化学構造適応型データベースにおけるブロック辞書の構成,（国際科学振興財団）〇中山堯・（筑波大）藤原譲

95 [22],電報文型抄録を利用した索引の作成と文献検索手法の開発,（蛋白質研究奨励会）〇瀬戸保彦・野崎佳子・榊原俊平

101 [23],化合物検索における検索手段の使いわけ,（京大薬）〇大崎健次・東常行

107 [24],医薬品文献情報の社内データベース化,（エーザイ）〇裏木健司・洞口昇・畑山英俊・高橋春男・星野節子・浅山俊彦

113 [25],農業技術における化学および化学技術－現行研究課題データベースの利用,（東京農大総合研）吉村典夫・〇安藤達彦

119 [26],光化学研究の動向と討論会の位置付け,（千葉大教養）〇北村彰英・大橋国雄・（筑波大化）新井達郎・徳丸克己・（図情大）吉田政幸

122 [27],化学文献の標題による自動分類,（化情協）〇時実象一・谷本謙一・（阪大理）千原秀昭

126 [28],学術雑誌におけるキイワードの検討(2)－Chemical & Pharmaceutical Bulletin ,（電通大）〇山崎昶・（北里大薬）関久美子・三田智子・木下俊夫

129 [29],大学間コンピュータネットワークにおける統合学術情報システム TRACIS,（東北大理）田中信行・（東北大大計セ）〇松田孝子・坂田真人・（東大工）猪瀬博・（東大地震研）安永尚志・（阪大大計セ）磯本征雄・（京大大計セ）北川一

135 [30],ポリアダマンタン異性体の列挙とその歪みのエネルギー,（学習院大計セ）〇田中伸英・（学習院大理）塚原佳子・菅忠義・（群馬大教育）飯塚健

141 [31],高次グラフと高次トポロジカル・インデックスによるグラフの特性化,（お茶大理）〇細矢治夫・池田成子

145 [32],テクト珪酸塩構造のトポロジー(2)－配位ネットワークの数え上げと分類,（群馬大工）〇佐藤満雄・（化情協）工藤喜弘

147 [33],ドデカヘドランの符号化,（東工大資源研）〇内野正弘

153 [34],部分構造の共存･独立･排反性(II)－TOOL-IR・MOLECULE 及び XDC システムを用いて－,（国文研資）〇石塚英弘・（東大情図セ）根岸正光・（図情報大）山本毅雄・（千葉大理）藤原鎮男

157 [35],CHEMICS の出力構造式の検定,（豊橋技科大）佐々木慎一・〇阿部英次・藤原巖・奥山徹・喜田徹・（三井石油化学）山崎徹

162 [36],構造-活性相関における主成分分析と因子分析の応用,（豊橋技科大）〇宮下芳勝・高橋由雅・台場信一・阿部英次・佐々木慎一

165 [特別講演 2],計算機技術の展望,（東大大計セ）石田晴久

169 [37],X 線粉末パターン構造解析システム,（群馬大工）〇佐藤満雄・町井昌徳・中島隆一

173 [38],化学反応機構改良の仮説提示に関する考察,（関学大情報セ）〇岡田孝

178 [39],鎖状分子のブラウン運動のスペクトル解析(第 3 報),（東北大非水研）〇安川民男・村上謙吉

182 [40],データのあてはめプログラム・パッケージ、その化学への応用,（名大大計セ）〇秦野やす世・（福井大工）秦野和郎

188 [41],マイクロプロセッサ制御型多目的電気分析装置の試作と解析処理プログラムの開発,（阪府大工）〇和佐保・（柳本）山本弘

194 [42],モンテカルロ法によるアルコール水溶液の熱力学的性質と水和構造に関する研究(1),（京大工）中西浩一郎・〇岡崎進・東原秀和・渡辺信淳

196 [43],エチレンの動力学"連続反応槽のシミュレーション",（昭和電工）荒井康全・田中信義・上杉瑞穂・安田慎一・片岡達・〇茂木義博

202 [44],分子科学におけるカラーグラフィックスの展開,（分子研電算セ）〇柏木浩・伊奈論

204 [45],定温 molecular dynamics 法の種々の流体系への応用,（京大工）〇田中秀樹・中西浩一郎

208 [46],レナード・ジョーンズ液体混合物の自由エネルギー、相の安定性および局所組成に関する計算機実験,（京大工）〇中西浩一郎・岡崎進・碇賢史・樋口哲二・田中秀樹・渡辺信淳

214 [47],系統的計算による鎖状分子の基準振動数と力の定数の集積,（広島大理・東大理）〇松浦博厚・原田一誠・田隅三生・島内武彦

第 5 回情報化学討論会(1982,11,24-25)豊橋技術科学

大学
1 [特別講演],定量的構造活性相関の現状と展望,（京大農）藤田稔夫
3 [1],SYSOUT Manager と MT Manager－科学計算とデータベースを結ぶツール,（分子研）○柏木浩・西本史雄
6 [2],COOD における会話型データ検索言語 CRL,（東北大大計セ）○松田孝子・（東北大理）田中信行
12 [3],化学のための COOD 応用プログラムとその利用 II－酸化還元反応データベース OXRER の作成とその応用プログラム,（東北大理）○吉川悦子・我妻貞子・田中信行
18 [4],化技研における赤外スペクトルデータバンクシステム,（化技研）○田辺和俊・田村禎夫・平石次郎・佐伯慎之助
22 [5],強度情報を利用した赤外スペクトルデータ検索システム,（日本電子）○森井正夫・落合周吉
26 [6],$C_nH_mO_l$ 化合物の質量スペクトルデータベース II－全 m/z ピークの統計的処理,（電総研）○小山保二・前田浩五郎
32 [7],NIES 法によるマススペクトル検索システムの開発と評価(第 3 報)－混合スペクトルの検索について,（国立公害研）新藤純子・伊藤裕康・○安原昭夫・溝口次夫
38 [8],化合物データベースシステム(MOL V2)の開発,（東大計セ）小澤宏・（図情報大）○石塚英弘
44 [9],部分構造の名称間に設定した結合関係を手がかりとする化学物質検索,（化情協）工藤喜弘
48 [10],高分子データベースにおけるデータへのアクセス法,（筑波大）○藤原譲・広瀬裕・天田明・大保信夫・鈴木功・（国際科学振興財団）中山堯
54 [11],会話型実験データ解析システムとその将来,（富士通）中川徹
60 [12],KINDSIP におけるソフトウェア設計法,（関学大情報セ）岡田孝
64 [13],学習方式分析ロボット FORTH 言語による AUTIR システム開発の評価,（化技研・サイエンスハウス）○西川利男・小笠原一郎・舟橋秀和
70 [14],ミニコンピュータによる分子軌道計算,（日本データ・ゼネラル）○田澤豊彦・（電総研）前田浩五郎
76 [15],TSS による NMR シミュレーションシステム,（化技研）○山本修・柳沢勝・早水紀久子
82 [16],液体クロマトグラフィにおける保持予測システム,（豊橋技科大）○神野清勝・川崎和也
87 [17],アルコール周囲の水和構造のグラフ表示,（京大工）○中西浩一郎・岡崎進・碇賢史・東原秀和
91 [18],鎖状分子溶液の熱力学と動力学(第 1 報)－高分子ラジカルの再結合過程,（東北大非水研）○安川民男・村上謙吉
97 [19],CAMSEQ-II の移殖について,（都臨床医総研）○村田恵美子・鈴木勇・（フジミック）栗原章浩・（都臨床医総研）神沼二真
101 [20],適用範囲を拡大した CHEMICS の開発(2)－NMR スペクトルデータの解析プログラム－,（豊橋技科大）阿部英次・藤原巌・○市川正寿・宮林延良・佐々木慎一
107 [21],適用範囲を拡大した CHEMICS の開発(3)－候補構造式の創出プログラム－,（豊橋技科大）阿部英次・藤原巌・○宮林延良・市川正寿・佐々木慎一
113 [22],テクト珪酸塩構造のトポロジー(4)－五員環を含む配位ネットワークの系統的導出,（群馬大工）佐藤満雄
118 [23],RECOGNITION AND FEATURE EXTRACTION OF A CHEMICAL GRAPH.,（東工大資源研）内野正弘
121 [24],ダイヤモンド格子探索法による最小規模炭化水素分子の構造推定,（学習院大計セ・学習院大理・群馬大教育）○今井賢・島田万佐彦・菅忠義・飯塚健
127(未受理) [25],Turecek らのダイアマンタン合成の解析,（群馬大教・学習院大計セ・学習院大理・北大理）○飯塚健・今井賢・田中伸英・菅忠義・大沢映二
128 [26],3 次元座標発生について－環状構造－,（フジミック）○大坂哲司・栗原章浩
132 [27],分子の構造と表示,（都臨床医総研）○鈴木勇・村田恵美子・（フジミック)栗原章浩・（都臨床医総研）神沼二真
136 [28],分子設計支援システム:MOSAIC の開発－Chemical Work Station の試み－,（フジミック）○栗原章浩・大坂哲司・（都臨床医総研）鈴木勇・村田恵美子・（フジミック）河崎浩・（都臨床医総研）神沼二真
142 [29],化学文献の自動分類－分類用キーワード辞書の自動作成,（化情協・阪大理）○時実象一・千原秀昭
146(未受理) [30],CAS 文献被抄録数の分野別パターン,（図情大）○山本毅雄・石川徹也
147 [31],コーアジャーナル制文献データベースの改良－QCLDB(量子化学文献データベース)の場合,（お茶大理）○細矢治夫・（電通大）山崎昶
152 [32],学術雑誌におけるキイワードの検討(第三報)－「薬学雑誌」を対象として,（北里大薬）大竹優子・武田幸子・木下俊夫・（電通大）○山崎昶
156 [33],学術雑誌におけるキイワードの検討(第四報)－KWIC 索引による「分析化学」のタイトルとキイワードの精査,（電通大）○蔡紹瑩・山崎昶
160 [34],学会講演要旨のデータベース作製(第三報),（東大教養）岩本振武・（広島大理）久司佳彦・（電通大）○山崎昶

<u>第 6 回情報化学討論会</u>(1983,12,6-7)京都大学薬学部・京大会館
1 [特別講演],構造活性相関と計算機化学の接点としての分子力場計算,（北大理）大沢映二
7 [1],数学ソフトウェア NUMPAC の開発とその管理・検索システム,（名大大計セ）○秦野やす世・（名大工）二宮市三
12 [2],アレイプロセッサのための分子積分変換のアルゴリズム,（分子研）○柏木浩・長嶋雲兵・（FHL）加藤充
15 [3],物質とその変化に関する情報モデル,（関学大情セ）岡田孝
21 [4],化学のための行列作業空間:MAWS,（東工大資源研）内野正弘
26 [5],尿素-水ポテンシャルと尿素の平衡および動的水和構造,（京大工）田中秀樹・○中西浩一郎・東原秀和・渡辺信淳
30 [6],二成分混合液体の混合パタンの解析,（お茶大理）大下浩美・○細矢治夫
35 [7],パターン認識法における記述子の新分類,（ペンシルバニア州立大）○湯田浩太郎・P. C. Jurs
41 [8],ペプチドの物性、構造、文献データベースを結合したシステムの開発と問題点,（蛋白研奨励会）○瀬戸保彦・野崎佳子・榊原俊平
47 [9],合成ペプチドの物性値(融点、旋光度)データベースの作成と問題点,（蛋白研奨励会）○野崎佳子・瀬戸保彦・榊原俊平
51 [10],化学反応知識獲得のためのグラフィック・エディタ,（国際科学振興財団）○中山堯・（筑波大）藤原譲
56 [11],反応式入力による化学反応データベースの作製と検索システムの開発,（中外製薬）松浦育敏
62 [12],マイクロコンピュータによる有機合成のシステム化,（東京薬大）○内丸忠文・原昭二
68 [13],Markush 式を含む化学物質表現検索システムのための化学構造式簡易入力法,（化情協）工藤喜弘
72 [14],グラフィックディスプレイを用いた化合物構造処理システム-SPHINCS-の開発(2)－検索,（富士写真フイルム足柄研）○宮川正美・花井荘輔・妹尾忠明・山田隆幸
78 [15],タンパク質データベースの新しい図示システム,（システム）○伊賀祐一・（阪大蛋白研）安岡則武
82 [16],パーソナルコンピュータによる分子構造模型の

組立ておよび表示システム,（姫工大）○中野英彦・三軒齊

86 [17],パーソナル・コンピュータによる分子表示システム,（コンピュータイメージ）○羽太謙一・（日本曹達FC研）中山章

90 [18],マイクロコンピュータを使用する個人用情報ファイル,（お茶大理）藤枝修子

94 [19],マイクロコンピューターによる化合物名読み取りの試み－I 炭化水素に於ける構造辞書の構築,（東京高専）佐藤真一・（電総研）六車裕孝・前田浩五郎

99 [20],大規模化学物質辞書システムに関する研究(5)－CAS Registry Nomenclature File 検索システムの開発,（東大計セ）○小澤宏・（図情大）石塚英弘・（阪大理）千原秀昭

105 [21],化合物基本性質検索システム COMPRES の開発,（広島大理）松浦博厚

109 [22],NMR スペクトルデータベースの作成,（豊橋技科大）奥田治和・湯田浩太郎・高橋由雅・阿部英次・○佐々木慎一・（旭リサーチセンター）田中一雄・山口晃

112 [23],有機化合物の構造推定システム CHEMICS の開発の現状－任意の部分構造入力による出力構造の精選－,（豊橋技科大）吉富一之・藤原巌・○阿部英次・佐々木慎一

117 [24],立体異性体列挙のためのアルゴリズム,（豊橋技科大）○早坂浩史・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一

123 [25],構造情報による ^{13}CNMR データベースの検索,（化技研）○山本修・早水紀久子・柳沢勝

129 [26],IR、^{13}C-NMR、MS スペクトル検索システム,（化技研）○田辺和俊・平石次郎・田村禎夫・山本修・柳沢勝・和佐田宣英

133 [27],対話型式による GC/MS データ検索システム,（国立公害研）溝口次夫・（大阪府公害監視セ）奥村爲男・今村清・○葉山幸雄

139 [28],NIES 法によるマススペクトル検索システムの開発と評価(第 6 報),（国立公害研）○新藤純子・安原昭夫・伊藤裕康・溝口次夫

145 [29],C_nH_m、$C_nH_mO_l$ 化合物の質量スペクトルデータベース－全 m/z ピークの統計的処理(その 2),（電総研）○小山保二・前田浩五郎

150 [30],核酸 RNA のコンホメーション変化への統計解析法の応用,（阪大薬）○北村一泰・水野洋・網崎孝志・富田研一・（統数研）馬場康維

155 [31],MOST-3SR 命名法のスピロ炭化水素への応用,（群馬大教育）飯塚健・（学習院大計セ）田中伸英・今井賢・（学習院大理）菅忠義・三浦均

<u>第 7 回情報化学討論会</u>(1984,11,19-20)大阪科学技術センター

1 [特別講演],化学情報サービスの最近の情勢,（阪大理）千原秀昭

5 [1],化合物総合データベースシステムの構築,（千葉大理）藤原鎮男

9 [2],化合物辞書データベース検索システムの開発,（筑波大電子情報）○藤原譲・（日科技情セ）長谷川昇・小室信三・鈴木一明・相馬融・日夏健一・（ファコムハイタック）西山宏

13 [3],化合物体系名から立体化学的に正確な分子構造の自動作成－化合物辞書システムと登録辞書(Stereochemically Accurate Registry of Substances: STARS)－,（筑波大電子情報）○藤原譲・（日科技情セ）梶原康敬・荒木啓介・南波通宏・梶正憲・前田知子・（新技術情報）永井由美子・（NBC）高橋啓一・唐沢喜雄・小原百合・（日科技情セ）金子英昭・三嶋進・河原陽子・原裕子

17 [4],CAS レジストリーファイルの加工,（化情協）○時実象一・門條司・（山形大工）工藤喜弘

21 [5],スペクトルデータバンクシステム SDBS の現状,（化技研）○平石次郎・山本修

23 [6],熱物性データベースシステムの開発,（生産開発科研）大杉治郎・（JICST）内田尚子・小野寺夏生・○愛宕隆治・（日本総合技研）長田孝治

27 [7],安全性データベースの設計,（日本化学物質安全情報セ）○大島輝夫・立花肇・森崎謙一・長田孝治・（故）三村博亮

31 [8],バイオロジカル・データベース作成・検索システム,（国立衛試）○中館正弘・林真・田中悟・前川昭彦・橘場茂子・（三共）和田忠男・（日本総技研）長田孝治・（国立衛試）竹中祐典

35 [9],農薬データベースの作成・検索システムの開発に関する研究,（農薬工業会）○関根文三・（JICST）長田孝治

39 [10],農学関連物質のバイオケミカル特性データベースの作成,（食総研）○田島真・石間紀男・松永隆司・（環境研）大塚雍雄・玉木佳男

43 [11],化合物環境データベースシステムの構築について,（国立公害研）○溝口次夫・伊藤裕康・安原昭夫・新藤純子・（愛知県公害調査セ）児玉剛則

47 [12],医薬品データベース作成・検索システム,（日本医薬情報セ）○長山泰介・松山さやみ・（紀伊国屋書店）笹本光雄・（日本総技研）長田孝治

51 [13],急性中毒データベース作成・検索システム,（日本医薬情報セ）○長山泰介・太田福子・（筑波大）内藤裕史・（日本総技研）長田孝治

55 [14],IR、^{13}C NMR、MS スペクトルの複合検索,（化技研）○田辺和俊・平石次郎・田村禎夫・山本修・柳沢勝・和佐田宣英

59 [15],^{1}H NMR スペクトルの同定検索・推定法,（化技研）○山本修・柳沢勝・早水紀久子

63 [16],官能基により分類したマススペクトルデータの特性について,（国立公害研）溝口次夫・（大阪府公害監視セ）○葉山幸雄・今村清・奥村為男

67 [17],C_nH_m、$C_nH_mO_l$ 化合物の質量スペクトルデータベース－m/z ピークの統計的処理(その 4),（電総研）○小山保二・前田浩五郎

71 [18],スペクトル画像情報の高速検索－光ディスクとマイクロコンピュータの結合,（職訓大）○加治屋力・大川時夫・（電総研）前田浩五郎

73 [19], 大次元格子の特性量の計算,（お茶大理）○細矢治夫・鷹野景子・内山厚子・木下美子

77 [20],16 ビットマイクロプロセッサー応用基本関数(1)－記憶管理関数,（東工大資源研）内野正弘

81 [21],大型機用 MT 版 NBS/NIH/EPA/MSDC MSDB のマイクロコンピューターシステムへの移譲,（電総研）矢尾板昭・前田浩五郎・（北九工試）○田上真人

85 [22],マイクロコンピューターによる化合物名読み取り－II.炭化水素における環状化合物の取り扱い,（東京高専）○佐藤真一・（電総研）六車裕孝・前田浩五郎

87 [23],実験用 BASIC コンパイラ,（大阪電通大）藤田岩男

90 [24],数値計算ライブラリ NUMPAC のベクトル計算機への適合性,（名大大計セ）○秦野やす世・（名大工）二宮市三

94 [25],いくつかの多環化合物の慣用名表現をより構造化する提案,（群馬大教育）飯塚健

98 [26],化学研究支援ツールの統合化の試み,（都臨床医総研）○鈴木勇・（フジミック）栗原章浩・（都臨床医総研）神沼二真

102 [27],ADAPT の移植及びその改良,（富士通）○高久隆・河村伴子・湯田浩太郎・松浦幸男・小倉誠

106 [28],有機化合物の自動構造推定システム(CHEMICS)の開発－立体を含んだ部分構造式のグラフィック入力－,（豊橋技科大）佐々木慎一・阿部英次・船津公人・○吉富一之・堀内真

110 [29],コンピュータグラフィックスによる会話型分子構造表示システム"MOLEC"の開発,（豊橋技科大）○高橋由雅・鈴木一仁・堀内真・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一

114 [30],分子設計支援システム MODEST の構築,（武田薬品）○高本正幸・山本善雄・神谷和秀・水田栄治・

岡良和
118 [31],分子設計のためのコンピュータ・システム-ACACS-,（住友化学）吉田元二・高山千代蔵・諸岡茂昭・本木隆夫・上田明・菊園康雄・金岡昌治・下重孝・（日本電気）〇横田彰男
122 [32],移植性を考慮した分子構造模型表示プログラムの開発,（姫路工大）〇中野英彦・三軒斉
126 [33],高分子設計システム DT/CAP－高分子用グラフィックエディタ,（国際科学振興）〇中山堯・（筑波大）藤原譲
130 [34],3 次元ラスターグラフィックスによるタンパク質立体構造の対話処理,（システム）〇伊賀祐一・（阪大蛋白研）楠木正巳・安岡則武
134 [35],示性式入力方式による分子構造処理システム I.－結合マトリックス、原子座標、分子内座標リスト,（京大薬）〇三輪嘉尚・町田勝之輔
138 [36],分子構造図表示パッケージ ORTEP の改良,（都臨床医総研）鈴木勇・（川崎製鉄）〇井上佐智子・（日本電気）藤巻緑・（日女大家政）浜中裕子・高橋征三・（都臨床医総研）神沼二真
142 [37],平面分子図からの 3 次元座標の導出,（学習院大計セ）〇田中伸英・今井賢・（学習院大理）菅忠義・（群馬大教）飯塚健
145 [38],分子設計のための人工知能システムの設計(I),（東京農工大工）目黒正憲・〇安川民男
149 [39],反応設計支援システム GRACE の現状,（東海大開発技研）米田幸夫
153 [40],反応機構を基幹とする合成経路の設計・評価プログラムの構築,（東薬大）〇内丸忠文・佐藤浩・原昭二
157 [41],Prolog を利用した Carter 型ソリトンバルブのシミュレーション,（電電公社茨城通研）〇森祐平・海老沢文博・田部井久男
161 [42],クラスター分析を用いた港湾環境における重金属元素分布の検討,（化技研・カナエ塗料・東京光電）〇西川利男・小笠原一郎・高橋一暢・大八木義彦
165 [43],β-Turn の内部回転角変化の予測とそのモレキュラーグラフィックス,（大正製薬）〇北村一泰・（阪大蛋白研）楠木正巳・伊賀祐一・安岡則武・（阪大薬）富田研一
169 [44],インターカレーション計算におけるサイトプレファレンス,（お茶大理）〇伊藤由美子・（都臨床医総研）鈴木勇・（フジミック）栗原章浩・（群馬大教養）中田吉郎・（お茶大理）細矢治夫・（都臨床医総研）神沼二真
173 [45],分子グラフィックスを用いた Tumor Promoter の研究,（フジミック）〇栗原章浩・（都臨床医総研）鈴木勇・神沼二真
177 [46],非電解質希薄水溶液における動的水和構造,（分子研）田中秀樹・（京大工）東原秀和・〇中西浩一郎
181 [47],学術雑誌の著者付与キイワードの検討「Clinical Chemistry (Winston-Salem)」,（電通大）〇山崎昶・（北里大薬）村瀬伊月・山崎直美・平賀やよい・木下俊夫
185 [48],Chemical Abstracts における本邦発行の書籍類の採録の状況について,（電通大）山崎昶

<u>第 8 回情報化学討論会</u>(1985,10,6-7)石川県社会福祉会館
6 [特別講演],数え上げ多項式とトポロジカルインデックス,（お茶大理）細矢治夫
12 [特別講演],計算機化学研究の開花を求めて,（豊橋技科大）佐々木慎一
16 [3F101],スーパー・コンピュータ版 NUMPAC,（名大大計セ）〇秦野やす世・（中部大経営情報）二宮市三
20 [3F102],高速符号化方式の最適化,（東工大資源研）内野正弘
24 [3F103],三次元符号化理論と立体化学,（東工大資源研）内野正弘
28 [3F104],分子科学計算のためのパソコンによるグラフィックインターフェース,（東大教養）〇小川桂一郎・鈴木弘・（東大理）吉田弘・（姫路工大）中野英彦・三軒齊
32 [3F105],パーソナルコンピュータによる分子構造表示プログラム MODRAST の機能拡張,（姫路工大）〇中野英彦・三軒斉
36 [3F106],パソコンによる本格的分子計算,（北大理）〇望月祐志・大沢映二
40 [3F107],有機化学の教育においてマイクロコンピューターはどのように役立つか(3)－立体充填模型の高速表示,（埼玉大工）〇時田澄男・杉山孝雄
44 [3F108],グラフ構造の入力について:分子図と 3 次元座標,（学習院大理）〇田中伸英・蒲生義明・管忠義・（群馬大教育）飯塚健
48 [3F109],パーソナルコンピュータによるダイヤモンド格子探索法,（学習院大計セ）〇今井賢・（学習院大理）管忠義・（群馬大教育）飯塚健
52 [3F110],コンピュータグラフィックスによる KCl 結晶のらせん転位の構造表示,（東工大総理工）山崎陽太郎
56 [3F111],新らしい分子構造の発見法"デシンメトリゼーション",（群馬大教育）飯塚健
60 [3F112],帰納型反応設計支援システムの構築,（中外製薬）松浦育敏
64 [3F113],分子情報の新しい記述フォーマット(FLEXS)の開発,（東工大）〇山崎俊夫・中村春木
68 [3F114],原子軌道データベースの開発－分子軌道計算の知識ベースとして,（北大理）冨樫雅文・（北大触媒研）館脇洋・（慶大理工）岩田末廣・（東大理）小杉信博・（阪市大理）北浦和夫・（分子研）山本茂義・〇柏木浩
72 [3F115],自動構造推定システム、CHEMICS における最近のスペクトル解析,（豊橋技科大）佐々木慎一・〇阿部英次・船津公人・ Carlos A. Del Carpio ・太田好人・江口晃史
76 [3F116],固体表面吸着種による IR スペクトルの対話型波形解析,（阪府大工）〇乾哲・宮田寿・籠川裕
80 [3F117],C_nH_m、$C_nH_mO_l$ 化合物の質量スペクトルデータベース－m/z ピークの統計的処理(その 6),（電総研）小山保二・前田浩五郎
84 [3F118],ストカスチック・シュミレーションによる高分子のコンフォーメイション転移,（阪工試）福見俊夫
88 [3F119],数式微分を含んだ非線形最小二乗計算システム,（大阪電通大）〇藤田岩男・対馬勝英
90 [3F120],大次元格子の特性量の解析 II,（お茶大理）〇細矢治夫・内山厚子・木下美子
94 [3F121],スーパーコンピュータ(FACOM VP-200)による GAUSSIAN-80 プログラムの実行,（三菱化成総合研）八尾徹・川北栄継・（富士通）〇湯田浩太郎・大久保顕・戸村伸男
98 [3F122],高分子の C-13NMR リレーショナルデータベース,（福井工大）〇西岡篤夫・（阪大基礎工）畑田耕一・（筑波大）藤原譲・（京大工）末広祥二
102 [4F101],特許に現われる生体化学物質用データベースの開発,（化情協）〇門條司・時実象一・（阪大理）千原秀昭
106 [4F102],IBM5080 グラフィック・システムのモレキュラーグラフィクスへの応用,（エーザイ筑波研）藤田忠男・（日本アイ・ビー・エム）〇沢恒雄・保谷克典
110 [4F103],3 次元ラスターグラフィックスによる分子モデリングシステム,（システム）伊賀祐一・（阪大蛋白研）楠木正巳・安岡則武
114 [4F104],分子設計のためのコンピュータソフトウェアシステム"TUTORS"の開発(1)－化学構造式のグラフィック入力,（ケイ・アイ研）〇尾崎正美・（豊橋技科大）高橋由雅・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一
118 [4F105],分子設計のためのコンピュータソフトウェアシステム"TUTORS"の開発(2)－3 次元分子モデリン

グ,（ケイ・アイ研）○吉田文隆・（豊橋技科大）高橋由雅・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一
122 [4F106],分子設計のためのコンピュータソフトウェアシステム"TUTORS"の開発(3)－全体システムと構造検索,（豊橋技科大）○高橋由雅・細川和好・宮下芳勝・阿部英次・佐々木慎一・（ケイアイ研）尾崎正美・吉田文隆・流石正・田丸雅敏・（日本農薬）吉田正徳
126 [4F107],最大共通部分構造の自動認識－MAXFIT プログラムの開発,（豊橋技科大）高橋由雅・○佐藤譲・前田重徳・阿部英次・佐々木慎一
130 [4F108],分子設計のためのコンピュータ・システム-ACACS-(2),（住友化学）吉田元二・高山千代蔵・本木隆夫・上田明・菊園康雄・金岡昌治 ・（住友製薬）諸岡茂昭・（日本電気）横田彰男・○曽根田雄一
134 [4F109],分子設計支援総合システムの開発について,（呉羽化学）○朝永惇・笠井健二・面川浩身・（富士通）松浦幸男
138 [4F110],Organic Synthesis Design Program(SECS) and its Knowledge Base Building.,（呉羽化学）○谷中幹郎・朝永惇・（UCSC）W. Todd Wipke
142 [4F111],不均一系触媒設計支援データベース(CATDB)の形成(第2報)－構成・構築・検索と評価,（東海大開発技研）○米田幸夫・（東大大計セ）小沢宏
146 [4F112],タブレット・デジタイザーによるプロトンNMR スペクトル・データベースの作製,（国立衛試）叶多謙蔵・（三菱レイヨン）片桐禅
150 [4F113],マイクロコンピューターによる化合物名読み取り－III $C_mH_nO_l$ 化合物の取り扱い,（東京高専）○佐藤真一・（電総研）六車裕孝・前田浩五郎
152 [4F114],マイクロコンピューター中の全 NBS MSDB の任意ピークによる高速検索,（電総研）六車裕孝・前田浩五郎
154 [4F115],化学情報処理システム,（山形大工）工藤喜弘
158 [4F116],分子設計のための人工知能の設計(第 3 報)－不確実情報による推測,（東京農工大工）川原淳次・藤井良彦・○安川民男・（東大理）岡崎廉治
162 [4F117],COMPAR-ADAPT による化合物重ね合わせ実験,（富士通）○湯田浩太郎・（富士通京葉システム）河村伴子
166 [4F118],4 結合 3 次元ネットワーク上の置換分配(2)－2 次ネットワーク上の分配問題,（群馬大工）佐藤満雄
170 [4F119],遊歩道と距離行列を用いた自己同型分割と結合スタック法との併用による化学構造式の規範化とその応用,（豊橋技科大）○奥山徹・阿部英次・佐々木慎一
176 [4F121],分子力場パラメータの最適化－最小二乗法によるパラメータの決定,（化技研）○田辺和俊・都築誠二・（北大理）大沢映二・（化技研）山本修
178 [4F122],Full Digitized DB による赤外スペクトル検索システム,（日本電子）○森井正夫・落合周吉

第 9 回情報化学討論会(1986,10,17-19)名古屋工業大学

8 [特別講演 I],人工知能(AI)とその動向－エキスパート・システムを中心に－,（東京電機大）上野晴樹
12 [2 連 J01],三次元分子構造間の共通幾何パターンの自動認識に関する研究,（豊橋技科大）○高橋由雅・前田重徳・佐々木慎一
16 [2 連 J02],モンテカルロ法による分子容積，分子表面積の計算,（藤沢薬品）加藤一孝・大前敏宏・（富士通）○湯田浩太郎
20 [2 連 J03],オクタノール/水分配係数自動推算システム(CPAC)の開発,（富士写真フイルム足柄研）○宮川正美・花井荘輔
24 [2 連 J04],薬物-受容体間の疎水相関等の評価－均一性素面モデル,（キッセイ薬品）赤羽健司・（キッセイコムテック）○永野泰夫・（北里大薬）梅山秀明
28 [2 連 J05],蛋白質モデリングプログラム-ALPHA-の構築,（旭化成）戸澗一孔
32 [2 連 J06],ペプチド、蛋白質のエキスパートシステムPREX の開発,（蛋白質研究奨励会・ペプチド研）○瀬戸保彦・野崎佳子・榊原俊平
36 [2 連 J07],Laboratory Computer Network System の試み(I),（福井大工）古村徹・市橋直樹・早水満喜雄・寺川佳代子・大海康弘・滝ヶ浦良成・水野和子・○神藤洋爾
40 [2 連 K01],分子力場パラメーターの最適化(第 5 報)－アミド用パラメータの決定,（化技研）○田辺和俊・都築誠二・（北大理）大沢映二
44 [2 連 K02],コバルト-59NMR スペクトルデータのパーソナルコンピューターによるデータベース化,（電通大）國分信英○山崎昶・白木洋也・原嶋信明
48 [2 連 K03],触媒データベースの検討,（化技研）○桑原靖・浜田秀昭・金田一嘉昭・若林勝彦・伊藤建彦
52 [2 連 K04],データファイルの変換を容易にするための一工夫,（東大理）○大崎健次・武田弘・（姫路工大）安岡則武
56 [2 連 K05],タンパク質解析システムの開発－BIOCES を用いた t-PA の構築－,（住友製薬）○諸岡茂昭・（住友化学）上田明・金岡昌治・（日本電気）曽根田雄一・滝中徹・（北里大薬）梅山秀明
60 [2 連 K06],薬物-受容体理論に基づく薬物設計システムの開発－BIOCES を利用した医農薬設計－,（キッセイ薬品）○赤羽健司・飯塚欣二・（キッセイコムテック）永野泰夫・（日本電気）横田彰男・（日本電気ソフト）柴田浄児・（北里大薬）梅山秀明
64 [2 連 K07],構造活性相関の為の部分構造記述子の自動生成,（豊橋技科大）○中西弘幸・高橋由雅・佐々木慎一
68 [2 逗 K08],分子構造の概念的クラスタリングシステム CLUSMOL,（U. C. Santa Cruz）○岡田孝・ W. Todd Wipke
72 [2 連 K09],グラフィック作画入力構造図に基づく三次元座標の自動生成,（ケイ・アイ研）○吉田文隆・(豊橋技科大)高橋由雅・佐々木慎一
76 [2 連 K10],パーソナルコンピューターによる Protein Data Bank の図示システムの開発,（姫路工大）○中野英彦・三軒齊
80 [2 連 K11],マイクロコンピューターシステム上での大容量 MSDB 操作の高速化－MSDOS 上での BASIC 言語による場合－,（電総研）六車裕孝・前田浩五郎
84 [2 連 K12],拡張 SPIRES の開発(II)－データ入力の実際と化学構造式データベースへの登録,（豊橋技科大）○奥山徹・山浦一友・阿部英次・佐々木慎一
88 [2 連 K13],自動構造推定システム、CHEMICS の最近のスペクトル解析,（豊橋技科大）○船津公人・太田好人・江口晃史・須々田寛・ Carlos A. Del Carpio ・佐々木慎一
92 [2 連 K14],分子軌道、電子密度の図形表示システム,（中京大）○秦野やす世・（愛知工大）秦野和郎・（分子研）柏木浩
96 [2 連 K15],水分子集団による非電解質溶質の分子認識,（京大工、分子研）○中西浩一郎・（分子研）田中秀樹・長嶋雲兵
100 [2 連 K16],格子空間における最小規模分子構造設計の応用,（学習院大計セ）○今井實・（学習院大理）菅忠義・（群馬大教育）飯塚健
104 [2 連 K17],四結合三次元ネットワーク上の置換分配(3)実在三次元フレームワーク上での置換分配,（群馬大工）○佐藤満雄・山口慶和
108 [2 連 K18],プロダクションルールによる触媒設計のための知識表現,（愛知工大）○鬼頭繁治・（名大工）服部忠・村上雄一
112 [2 連 K19],コンピュータグラフィックスによる塩化ナトリウム構造結晶のエッチピットの構造表示,（東工大総理工）山崎陽太郎
116 [2 連 K20],Laboratory Computer Network System の試み(II),（福井大工）古村徹・市橋直樹・早

水満喜雄・寺川佳代子・○大海康弘・滝ヶ浦良成・水野和子・神藤洋爾
120 [2 連 K21],TASMAC システムにおける NMR の機能及び特長,（阪大産研）○高井嘉雄・山田等・福田房子・田中高紀・沢田正実・花房昭静
124 [3 連 J01],マイクロコンピューターによる分子設計用システム MMHS の開発,（群馬大教養）中田吉郎
128 [3 連 J02],分子設計システム拡張のためのインターフェースプログラムの開発－第 1 報 MM2'の TRIBBLE への組み込みを例として,（味の素中研）○石島知恵子・渡辺信弘・（日本 DEC）笠原由美子・（大鵬薬品）多田幸雄・（臨床研）鈴木勇・（北大理）大沢映二・（臨床研）神沼二真
132 [3 連 J03],分子設計支援用データベース管理システムの開発と適用－3 次元構造データの管理－,（三井東圧化学）岡野清久・○三戸邦郎・小田研悟
136 [3 連 J04],分子設計のための人工知能システム ANALOGS の試作(第 3 報),（東農工大工）藤井良彦・川原淳次○安川民男・（東大理）岡崎廉治
140 [3連J05],化合物設計システムにおける要求解析,（国際科学振興財団）○中山堯・（筑波大）藤原譲
144 [3 連 J06],赤外分光データ解析エキスパートシステムの開発,（愛知工大）○鬼頭繁治・（日本分光）金内芙美子・（名大工）服部忠・村上雄一
148 [3 連 J07],パターン認識を用いた ^{13}C-NMR スペクトルデータベースによる定性分析の試み,（日立計測）○田中保子・橋本正雄・（日立那珂）服部忠鉄
152 [3 連 J08],液晶分子設計支援システム－システム概要と知識の表現方法,（東芝）○前田真理子・宮村雅隆
156 [3 連 J09],パーソナルコンピュータ制御による金属錯化合物の合成の試み,（電通大）國分信英・山崎昶・○白木洋也
160 [3 連 J10],遮遷移構造の三節および四節部分グラフ－有機反応の新しい記述子,（富士写真フイルム足柄研）藤田眞作
164 [3 連 J11],C3 植物における光呼吸のシミュレーション,（阪府大農）和田野晃・富永光則・三浦一夫・横田明穂・北岡正三郎
168 [3 連 J12],阪大産研材料解析総合スーパーミニコンピュータシステム"TASMAC"の構築,（阪大産研）○沢田正実・高井嘉雄・山田等・福田房子・田中高紀・石丸寿保・三角荘一・花房昭静
172 [3連J13],化合物名から構造式の自動発生の試み,（東理大）鈴木隆弘・○増子和典・下井田宏雄・（電総研）前田浩五郎
176 [4 連 J01],計算機立体化学(3)－Axial Chirality 及び Planer Chirality の処理,（東工大資源研）内野正弘
180 [4 連 J02],Generic 化学グラフ間の意味関係とネットワーク化,（U. C. SantaCruz）○岡田孝・W. Todd Wipke
184 [4 連 J03],セコドデカヘドランからドデカヘドランが生成する可能性の検討,（群馬大教育・北大理・学習院大計セ・学習院大理）○飯塚健・大沢映二・今井賢・田中伸英
188 [4 連 J04],化技研スペクトル・データベース(SDBS)のトータルシステム,（化技研）○山本修・染野和雄・和佐田宣英・早水紀久子・田辺和俊・田村禎夫・柳沢勝・平石次郎
192 [4 連 J05],マイクロコンピュータによるプロトン NMR データの蓄積と検索,（国立衛生試）○叶多謙蔵・（三菱レイヨン）片桐禅
194 [4 連 J06],スペクトルデータベース作製用チャートリーダーの開発,（住友化学）吉田元二・近石一弘・重永均・○増井秀行・（日本電気）横田彰男
198 [4 連 J07],パソコンによる情報化学教育用ネットワークシステム,（都立大教養）○生田茂・石川甲子男・（東芝）長谷川孝行・下谷誠
202 [4 連 J08],「化審法既存化学物質ハンドブック」の高分子表現の解析,（山形大工）工藤喜弘
206 [4 連 J09],モレキュラーメカニクスのパラメータ最適化プログラムの作成,（東大工）○宮島隆・平野恒夫・（北大理）大沢映二
210 [4 連 J10],分子軌道大規模計算の現状,（分子研）○柏木浩・長嶋雲兵・山本茂義・（名大理）斎藤稔
216 [特別講演 II],タンパク質の立体構造と分子設計,（姫路工大）安岡則武

<u>第 10 回情報化学討論会</u>(1987,11,6-8)北里大学薬学部
1 [特別講演 I],ドラッグデザインとコンピュータ,（三共農薬研）松井孝司
5 [特別講演 II],脳の機能を実現する機械,（東大工）中野馨
14 [6I01],分子設計のための人工知能システム ANALOGS の試作(第 5 報)－帰納的およびファジイ推論によるレセプターマッピング,（東京農工大工）川原淳次・藤井良彦・後藤教彰・○安川民男・（東大理）岡崎廉治
18 [6I02],受容サイトの分子認識機構(第 2 報)－パパイン-オリゴペプチド系,（東京農工大工）樋口俊章・尾崎一男・山本康哲・片岡良一・○安川民男
22 [6I03],エキスパートシステムによるケミカルヒートポンプサイクルの探索,（化技研）○藤原一郎・佐藤眞士・（阪大基礎工）擧田榮一・（FHL）鷲尾敦・藤間明美・有賀妙子
26 [6I04],触媒設計支援エキスパートシステムの試作,（愛知工大）○鬼頭繁治・（名大工）服部忠・村上雄一
30 [6I05],合成経路選定における動的仮説設定について,（国際科学振興財団）○中山堯・（筑波大）大保信夫・鈴木功・藤原譲
36 [6I06],ヒト発癌物質の分子知識データベース,（都臨床医総研）○大上徳子・（国立ガンセンター研）相田美砂子・（都臨床医総研）灘岡陽子・倉科周介・鈴木勇・神沼二真
40 [6I07],CA からの知識ベースの生成,（図書館情報大）○山本毅雄・藤野かおる・（電電公社武蔵野通研）斎藤宗昭・（図書館情報大）石塚英弘
44 [6I08],結合関係表と CHEMOGRAM STERIC1 との統合,（東海大開発研）米田幸夫
48 [6I09],文献、数値、及び図形の 3 種の情報を利用する高分子の Carbon-13NMR データベースシステムの構築,（幾徳工大）○西岡篤夫・（阪大基礎工）畑田耕一・（筑波大）藤原譲・（京大工）末広祥二・（名大工）渡辺豊英・（京大計セ）村尾義和・堀池博巳・小澤義明
52 [6I10],スペクトル情報管理システム-SPECTRA-の開発,（住友化学）吉田元二・森口宏一・重永均・○増井秀行・（日本電気）横田彰男・溝部吉己
56 [6I11],イオンクロマトグラフィーデータベースの設計、構築、及びその利用,（安部商事）○伊澤克巳・岡田幸治・野村哲夫・（電総研）前田浩五郎
60 [6I12],TOOL-IR 化学文献データベース検索システム(第 3 版)の開発,（東大大計セ）小澤宏
64 [6I13],薬学関連学術雑誌の著者付与キイワードと二次情報のキイワードとの比較,（北里大薬）木下俊夫・○平賀やよい・（電通大）山崎昶
68 [6I14],化学ドライラボ教育における学習記録と管理,（豊橋技科大・テクノシステム）○吉村忠与志・山口定邦
72 [7I15],アミノ酸対の出現頻度によるタンパク質分類の方法,（図書館情報大）○中山伸一・吉田政幸
76 [7I16],蛋白質立体構造要素データベースとコンピューターグラフィクスとの接続,（旭化成）○戸澗一孔・田頭瑞加・渡辺博明
80 [7I17],コンピューターグラフィクスによる蛋白質分子間および分子内相互作用の検討,（旭化成）戸澗一孔
84 [7I18],タンパク質二次構造予測の一例－プロテインデータバンクからの経験則－,（オリンパス光学）○永田宏・宮川厚夫
88 [7I19],タンパク質立体構造データのホモロジー解析,（蛋白工学研）○佐藤章一・八尾徹

92 [7I20],分子軌道、電子密度の図形表示システム(その2),(中京大教養) ○秦野やす世・(分子研) 柏木浩
96 [7I21],分子軌道法計算結果の三次元表示システム,(ダイキン) ○蜂須賀仁治・石割和夫
98 [7I22],電子構造を映像化するプログラム KORIN の開発,(分子研) ○柏木浩・伊奈論・長嶋雲兵・(中部システムズ) 田中清二・玉谷祐・岡本政久
102 [7I23],材料解析のための"TASMAC"システムにおける IR 及び MCPD-UV の機能と特徴,(阪大産研) ○田中高紀・澤田正實・高井嘉雄・山田等・福田房子・石丸寿保・三角荘一・花房昭静
106 [7I24],分子力学計算による飽和炭化水素の赤外、ラマンスペクトルのシミュレーション,(京大薬) 三輪嘉尚・野間裕之・○町田勝之輔
110 [7P01],分子力場パラメータの最適化(第 12 報)−ハロエチレン,(化技研) ○田辺和俊・都築誠二
114 [7P02],有機合成設計システム CASINO の開発(第 4 報)−反応パターンデータベースによる合成経路の探索,(化技研) 田辺和俊・○内丸忠文・林輝幸・大内秋比古・(富士通) 湯田浩太郎・有賀妙子・永井利枝子
118 [7P03],14 員環マクロリドとそのポリケチドラクトンのコンホメーション解析,(慶大理工) 竜田邦明・(キリンビール) ○秋元功司・曽我博・三輪篤史・榊原和征・(都臨床研) 鈴木勇・神沼二真
122 [7P04],分子図の手書き入力システム,(学習院大理) ○田中伸英・菅忠義・(群馬大教育) 飯塚健
126 [7P05],分子内動的歪みのパソコンによる表示,(北大理) 島内啓行・大沢映二
130 [7P06],三次元座標簡易発生法,(帝人システム) 村上武・尾崎茂・(北大理) 大澤映二
134 [7P07],4MB RAM DISK による 4 万化合物質量スペクトルデータベース操作の高効率化・高速化,(電総研) 六車裕孝・前田浩五郎
138 [7P08],dBASE-III による質量スペクトルデータベース操作の試み,(長野県情報技術試験場) 但馬文昭・(日本アシュトンテイト) 大園到・(電総研) ○前田浩五郎
142 [7P09],コンピュータ・グラフィックスによる結晶面の表示,(東工大総理工) 山崎陽太郎
146 [7P10],パーソナルコンピュータによる分子グラフィックスの最近の進歩,(姫路工大) ○中野英彦・山名一成・三軒齊
150 [7P11],マイクロコンピューターによる分子設計用システム MMHS.II−MS-DOS 版の開発,(群馬大教養) ○中田吉郎・(都臨床研) 鈴木勇
154 [7P12],有機合成設計・反応予測システム"AIPHOS"における反応データベース管理システムの開発,(豊橋技科大) ○遠藤智朗・船津公人・小寺範生・佐々木慎一
158 [7P13],有機合成設計・反応予測システム"AIPHOS"における自動構造特徴認識,(豊橋技科大) ○C. A. Del Carpio・船津公人・佐々木慎一
162 [7P14],拡張 SPIRES の開発(V)−データ構造と検索システム,(豊橋技科大) ○奥山徹・西村竜一・阿部英次・佐々木慎一
166 [7P15],本邦刊行書籍類の CA への採録状況の変化,(電通大) 山崎昶
170 [7P16],1-オクタノール/水系分配係数の自動推算に適した新しい推算方法の開発,(山形大工) ○鈴木孝弘・工藤喜弘
174 [7P17],オブジェクトモデルによる CLUSMOL2 の構築,(関西学院大) ○河井俊一・増居隆・岡田孝
178 [7P18],複数半導体ガスセンサーとパターン認識法による化学物質の「匂い」識別の試み,(豊橋技科大) ○阿部英次・金谷重彦・高橋由雅・吉村忠与志・佐々木慎一
182 [7P19],パーソナルコンピュータを用いた合成設計システム PC-SYNTREX の開発とデータベース,(中外製薬富士御殿場研) 松浦育敏
186 [7P20],構造活性相関のための部分構造記述子の自動生成(2)−部分構造ファイルの自動生成−,(豊橋技科大) ○中西弘幸・高橋由雅・佐々木慎一
190 [8I25],化学における類推の基礎としての弁別ネット,(関西学院大) ○岡田孝・河井俊一
194 [8I26],ACACS における高活性化合物デザイン機能について,(住友化学) 吉田元二・高山千代蔵・○山崎道雄・(日本電気) 高久美子・鈴木民子・(日本電気ソフトウェア) 柴田浄児
198 [8I27],分子設計支援システム TUTORS における候補構造の創出,(豊橋技科大) ○高橋由雅・細川和好・吉田文隆・佐々木慎一
202 [8I28],有機合成設計・反応予測システム""AIPHOS"の開発,(豊橋技科大) ○船津公人・遠藤智明・ C. A. Del Carpio ・佐々木慎一
206 [8I29],立体化学的節点照明関数について,(東工大資源研) 内野正弘
210 [8I30],飽和炭化水素の熱力学的性質と種々のトポロジカルインデックスの間の相関関係の解析,(お茶大理) ○高願多・細矢治夫
214 [8I31],最大隣接マトリックス法による 4 結合 Concentric Cluster のナンバリングとそれらの系統的誘導,(群馬大工) ○佐藤満雄・(Brandeis Univ.) J. B. Hendrickson
218 [8I32],DV-X α 法による原子分子特性解析手法の開発,(日立エネ研) ○田子一農・熊洞宏樹・定岡紀行・布施元正
220 [8I33],数式処理を利用した非線形最小二乗計算の自動化,(大阪電通大) 藤田岩男
224 [8I34],^{1}H-NMR スペクトルデータベースによる定性分析の試み−その 1.アルゴリズム,(日立計測) 田中保子・○橋本正雄・(日立那珂) 服部忠鐵

<u>第 11 回情報化学討論会</u>(1988,12,5-7)京都大学薬学部・京都教育文化センター

1 [特別講演 I],QSAR パラメーターσs0 及びμ2/αの設定とその有効性,(阪大) 佐々木喜男
5 [特別講演 II],タンパク質・核酸の生理機能データベースと分子設計,(京大化研) 金久實
8 [5I01],膜タンパクのモデリング法の開発,(北里大薬) ○春日順一・梅山秀明
12 [5I02],アミノ酸対空間における確率距離を用いた類似タンパク質検索システム,(図書館情報大) ○中山伸一・吉田政幸
16 [5I03],蛋白質立体構造要素データベースとエキスパートシステム構築用ツールによる立体構造予測へのアプローチ,(旭化成) ○田頭瑞加・戸澗一孔・渡辺博明
20 [5I04],受容サイトにおける分子認識機構(第 3 報)パパインの光学異性体認識機構,(東京農工大工) 樋口俊章・佐藤克則・○安川民男
24 [5I05],水中の有機化合物の pKa 差の計算,(蛋白工学研) ○田中康正・中川節子・白鳥康彦
28 [5I06],溶液中における Li+とクラウンエーテルとの錯形成反応に関する計算化学的研究,(阪大薬) ○前崎博信・高木達也・永井伸二・谷美香・藤原英明・佐々木喜男
32 [5I07],分子力場パラメータの最適化(第 21 報)−ab initio 法で計算したアルカン分子の分子間、分子内ポテンシャルの MM2 との比較,(化技研) ○都築誠二・田辺和俊・内丸忠文・(北大理) 大沢映二
36 [5I08],分子力場パラメータの最適化(第 22 報)−ab initio 法を使ったアミド、エステル、エーテルのパラメータの最適化,(化技研) ○田辺和俊・都築誠二・内丸忠文・(北大理) 大沢映二
40 [5I09],分子軌道法プログラム活用のためのエキスパートシステムの開発,(三井東圧) ○前田重徳・三戸邦郎・小田研悟・岡野清久
44 [5I10],分子設計におけるエキスパートシステムに関する研究(I)−"LEAD EVOLUTION"への適用の試み−,(富士通) 菅谷昭雄・塩原紀行・馬場雅浩・○湯田浩太郎・(京大農) 藤田稔夫
48 [5I11],化学構造式についての種類の数え上げ多項式

の間の数学的関係の解析，（お茶大理）細矢治夫
52 [5I12],静電ポテンシャルの図形表現，（中京大教養）秦野やす世
56 [5I13],スーパーコンピュータによる分子グラフィックス，（分子研）伊奈諭・長嶋雲兵・○柏木浩・（中部システムズ）玉谷祐・岡本政久
60 [5I14],パーソナルコンピュータでの分子構造表示，（電総研）○川口勝久・守谷哲郎
64 [6I15],機器分析におけるパソコン学習とその効果，（福井高専）吉村忠与志
68 [6I16],複数種半導体ガスセンサーによる混合気体中の特定物質の認識，（豊橋技科大）○金谷重彦・阿部英次・高橋由雅・佐々木慎一
72 [6I17],Automatic knowledge base building for the organic synthesis design program(SECS)，（呉羽化学）○谷中幹郎・栁沢あづさ・（呉羽化学東京研）中村和彦・（UC Santa Cruz）W. Todd Wipke
76 [6I18],EXAPL(APL 言語よるエキスパートシステム)を用いた Chemometrics プログラム ARTHUR の会話的利用，（化技研）○西川利男・小笠原一郎
80 [6I19],有機合成設計支援システム"AIPHOS"の開発，（豊橋技科大）○船津公人・遠藤智明・ C. A. Del Carpio ・佐々木慎一
84 [6I20],母核の幾何の変形と合成－CHEMOGRAM STERIC1 と結合関係表入力，（東海大開発技研）米田幸夫
88 [6I21],化学構造と NMR スペクトルのデータ処理統合システム CIMS の開発(I)－システム設計と統合化環境の概要，（豊橋技科大）○奥山徹・阿部英次・佐々木慎一
92 [6I22],コバルト-59NMR スペクトルデータのパーソナルコンピュータによるデータベース化(続報)，（電通大）山崎昶
96 [7I23],分子の全体構造と部分構造の数値化（分子形状関数から見た一提言），（三共）田村千尋
100 [7I24],一般式を検索キーとした Set Reduction 法による部分構造検索の試み－Tautomer 検索、Markush タイプ検索、-(X)n-タイプ検索及び X1-R-X2 タイプ検索，（富士通）○樋高透・湯田浩太郎
104 [7I25],ヒト発癌物質の分子知識データベース II，（都臨床研）○大上徳子・（日本女子大）大内香・（国立がんセ）相田美砂子・（都臨床研）神沼二真
108 [7I26],赤外・ラマン分光学文献データベース，（筑波大電子情報）鈴木功・（富山県立技術短大）○安宅彰隆・（東大理）田隅三生
112 [7I27],Smalltalk/V による文献検索システムの試作，（日大理工）高瀬精一
116 [7I28],蛍光スペクトルデータベースの構築，（電総研）守谷哲郎・○川口勝久
120 [7I29],質量スペクトルデータベースに於ける知識ベース構築の試み，（ダウケミカル）○渡辺忠一・（DBS）六車裕孝・（筑波研究学園）前田浩五郎
124 [7I30],TASMAC スペクトルデータベース，（阪大産研）澤田正實・○高井嘉雄・山田等・福田房子・田中高紀・石丸寿保・三角荘一・花房昭静
128 [6P01],光ディスクを記録媒体とするパーソナルコンピュータによるタンパク質立体構造データベースの検索・図示システム，（姫路工大工）○中野英彦・（神戸学院女子短大）中野修・（姫路工大工）川嶋剛・山名一成・三軒齊
132 [6P02],CD-ROM と液晶シャッターを利用したパソコン版蛋白質立体構造表示システム，（システム）○伊賀祐一・酒井義博・（姫路工大工学基礎研）樋口芳樹・安岡則武
136 [6P03],タンパク質のアミノ酸配列と局所三次元構造，（豊橋技科大）○唐澤肇・高橋由雅・佐々木慎一
140 [6P04],赤外、ラマンスペクトルのシミュレーションを含めた脂肪族エーテルの分子力学計算，（京大薬）○三輪嘉尚・町田勝之輔
144 [6P05],パソコン用 3 次元分子モデリングシステム 3D-MOL の開発，（東レシステムセ）竹内正道
148 [6P06],パソコンによる分子座標の手書き入力システム，（学習院大理）○田中伸英・菅忠義・（群馬大教育）飯塚健
150 [6P07],デカルト座標をコンホメーション解析に適した内部座標に変換するプログラム，（ゼリア新薬工業中研）○平野弘之・（北里大薬）広野修一・森口郁生
154 [6P08],CONFLEX－環状分子の全配座発生のための新しいアルゴリズム，（北大理）○後藤仁志・大澤映二
158 [6P09],構造差異ベクトルの表現と演算，（関学大）○木下悦子・河井俊一・岡田孝
162 [6P10],有機化合物の自動構造推定システム"CHEMICS"の開発－天然有機化合物の構造推定－，（豊橋技科大）○船津公人・須々田寛・佐々木慎一
166 [6P11],化学構造と NMR スペクトルのデータ処理統合システム CIMS の開発(II)－1H-NMR スペクトル帰属支援システムの開発，（豊橋技科大）○吉田浩二・奥山徹・阿部英次・佐々木慎一
170 [6P12],NMR スペクトル・データベースのパーソナル・コンピュータ化(I)－C-13 スペクトル・データベース，（神田外語大）○山本修・（化技研）早水紀久子・（日本電子）中川恵策・宮林延良
174 [6P13],ワークステーションによる STERIC1/ENCODE システムの実用化，（三井東圧化学）○岡野清久・前田重徳・三戸邦郎・小田研悟
178 [6P14],オーバラップ係数を用いた有機化合物の匂い記述子間の包含関係の検討，（豊橋技科大）○阿部英次・金谷重彦・小向隆夫・高橋由雅・佐々木慎一
182 [6P15],高温超伝導体の結晶構造データと構造表示，（東工大総理工）山崎陽太郎
186 [6P16],有機合成設計システム CASINO の開発 (9)－キラルシントン認識モジュールにおける考え方ならびに方法論について，（化技研）○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林輝幸
190 [6P17],一対比較生物データの QSAR での利用，（豊橋技科大）○赤木俊夫・高橋由雅・佐々木慎一
194 [6P18],人工知能的手法による非線形最小二乗計算の自動化，（大阪電通大）藤田岩男
198 [6P19],分子設計におけるエキスパートシステムに関する研究(II)－『意味有る部分構造選択』への適用の試み－，（富士通）菅谷昭雄・塩原紀行・○馬場雅浩・湯田浩太郎・（京大農）藤田稔夫
202 [6P20],logP データベースを利用した疎水性置換基定数πの算出，（三共活性研）○宮本秀一・脇田桂子・栗原英志

<u>第 12 回情報化学討論会</u>(1989,11,8-10)千里協栄生命ホール・よみうり文化ホール

1 [特別講演 I],企業における情報化学の現状と展望，（住友化学）吉田元二
5 [特別講演 II],構造活性相関と分子設計，（京大農化）藤田稔夫
10 [8I01],DNET/MS システムによる酸性度の類推，（関学大情報セ）○岡田孝・河井俊一
14 [8I02],官能基を中心とした構造縮約表現にもとづく共通構造特徴の自動認識，（豊橋技科大）○助川正之・高橋由雅・佐々木慎一
18 [8I03],高次対称カゴ型炭化水素構造の分子設計，（群馬大教育）○飯塚健・（立正大教養）今井賢
22 [8I04],ゼオライト系三次元フレームワーク上での Si、Al 分配－最近接 Al 対排除条件下での可能な分配の系統的誘導，（群馬大工）○佐藤満雄
26 [8I05],『分析化学』誌のキイワード・キイワードフレーズの変遷状況と CASearch のキイワードフレーズとの比較，（北里大薬）木下俊夫・平賀やよい・岡村里恵・今野恵・（電通大）○山崎昶・梶川博司
30 [8I06],有機化合物の IUPAC 命名支援システムの開発 I，（豊橋技科大）○阿部英次・高橋佐江・佐々木慎一
34 [8I07],電気化学数値データベースとその利用支援シ

ステム,（横国大工）○石田卓也・佐藤寿邦・仁木克己・（名市大計セ）磯本征雄

38 [8I08],^{1}H/^{13}C-NMR スペクトルデータベースによる検索同定システムの開発－データベースの質への依存性の検討,（日立計測）○橋本正雄・ 田中保子・（日立那珂）笹淵仁

42 [8I09],動く組合せ画像－分子モデリングシステム KORIN/IRIS,（分子研）○伊奈諭・（九工大情報工）柏木浩

46 [8I10],知的な分子モデリング・システムの構築,（日本 IBM）小出昭夫

なし [8I11],MMHS(Molecular Model Handling System)Ver.3.1,（群馬大教養）○中田吉郎・（神戸製鋼筑波研）藤沼一信

50 [8I12],有機分子の三次元構造の経験的推算法－STERIC/ENCODE,（東海大開発技研）米田幸夫

54 [9I13],有機反応シミュレーション,（電気化学総研）○折田政寛・増田隆仁・杉本勲・岡本彰夫

56 [9I14],知識ベースシステムによる触媒反応機構創出システムの開発,（愛知工大）○とう至陽・鬼頭繁治・（名工大）服部忠・村上雄一・（東海大開発技研）米田幸夫

60 [9I15],直接キー入力した化学反応式を Parse(識別、解読)するプログラム－EXAPL および APL2 データ構造による取扱い,（化技研）西川利男

64 [9I16],赤外・ラマンスペクトルのシミュレーションを含めたギ酸および酢酸単量体および二量体の分子力学計算,（京大薬）○横山勲・三輪嘉尚・町田勝之輔

68 [9I17],分子軌道計算を用いない静電ポテンシャル図の作成,（筑波大化）○堀越和彦・髙橋央宜・菊池修

72 [9I18],化学相互作用をあらわす軌道対(Paired Interacting Orbitals)の理論に基づく分子間相互作用解析システムの開発,（住友化学）○勝見広幸・菊園康雄・吉田元二・志賀昭信・（京大工）藤本博

76 [9I19],ミセル内反応のモンテカルロ・シミュレイション,（千葉県立衛生短大）林誠人

80 [9P01],情報処理教育としての計算機化学講義・演習における試み,（お茶大理）○藤枝修子・丹波裕子

84 [9P02],線形ギャップ重み関数による多重アライメント,（富士通国際研）田嶋耕治

88 [9P03],NMR スペクトル・データベースのパーソナルコンピュータ化(3)－^{1}H スペクトルの表示,（神田外大）山本修・（化技研）○早水紀久子・（ 日本電子）中川恵策・宮林延良

92 [9P04],農薬安全性情報データベースの構築と利用,（国立衛試）関沢純

96 [9P05],ヒト発癌物質の分子知識データベース III,（都臨床医総研）○大上徳子・（国立衛試）神沼二真

100 [9P06],CONFLEX2 による中ないし大環式分子の配座発生,（北大理）○後藤仁志・大澤映二

104 [9P07],分子力学計算、基準振動解析および振動スペクトルシミュレーションのための自動化プログラム RISE の開発,（京大薬）三輪嘉尚・○町田勝之輔

108 [9P08],立体選択的反応と MM2 計算値の関係-1.アルドール型反応によるアセトフェノンからの 3-ヒドロキシエステルの不斉合成,（山形大工）工藤喜弘

112 [9P09],有機合成設計支援システム"AIPHOS"における知識ベースシステムの開発,（豊橋技科大）船津公人・○渡辺和夫・佐々木慎一

116 [9P10],有機合成設計システム CASINO の開発(11)－キラルシントン認識モジュールにおける考え方、および実行検証例について,（化技研）○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・（富士通）湯田浩太郎・桶高透・矢幡史子

120 [9P11],タンパク質構造表示プログラム MODRAST-P の切断図形表示機能の拡張,（姫路工大工）○中野英彦・（中国南開大）張金碚・（姫路工大工）山名一成・三軒齊

124 [9P12],3D グラフィックス装置を用いた波動関数の簡易表示プログラムの有機化学への応用,（阪大薬）○永井伸二・高木達也・田中明人・野田昭宏・藤原英明・佐々木喜男

128 [9P13],分子内原子の図形表現,（中京大教養）泰野やす世

132 [9P14],分子性結晶の構造表示－分子の断片を除去するアルゴリズムの開発,（東工大総理工）○山崎陽太郎

136 [9P15],アミノ酸性質を考慮した蛋白質一次構造の概念的クラスタリングシスム,（関学大理）○中川博之・小山泰・（関学大情報セ）河井俊一・岡田孝

140 [9P16],パターン認識法によるタンパク質二次構造の二段階識別,（豊橋技科大）○唐沢肇・髙橋由雅・佐々木慎一

144 [9P17],デカルト座標をコンホメーション解析に適した内部座標に変換するプログラム(2),（ゼリア新薬中研）○平野弘之・（北里大薬）広野修一・森口郁生

148 [9P18],分子設計支援システム TUTORS の開発－構造特徴制約下での構造組み立て,（豊橋技科大）○山本和義・髙橋由雅・佐々木慎一

152 [9P19],CLUSMOL2 の拡張と農薬への適用,（関学大情報セ）○河井俊一・岡田孝

156 [9P20],有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS の開発－H-H COSY データ解析および NMR 帰属付き部分構造入力とその処理,（豊橋技科大）船津公人・○須々田寛・佐々木慎一

160 [10I20],ニューラルネットワークを用いたタンパク質の二次構造予測,（図書館情報大）○中山伸一・木村祥子・吉田政幸

164 [10I21],ニューラルネットワークによる類似化合物の分類,（富士通）○湯田浩太郎・井関京子・中山唯男・桶高透

168 [10I22],複合半導体ガスセンサシステムによる匂い認識に関する研究 III,（豊橋技科大）○金谷重彦・小向隆夫・阿部英次・髙橋由雅・佐々木慎一

172 [10I23],受容サイトにおける分子認識機構(第 5 報)－パパイン-オリゴペプチド系での動的過程,（東京農工大工）○樋口俊章・麓雅樹・安川民男・（化技研）田辺和俊

176 [10I24],ANALOGS によるレセプターリガンド間相互作用の解析(第 2 報)－アルドース還元酵素のレセプターマッピング,（東京農工大工）佐藤克則・○安川民男・（大正製薬総研）角谷重幸・北村一泰・（大阪薬大）石田寿昌

180 [10I25],核酸高次構造の構造特性パラメーターの動的挙動と表示,（阪大薬）○藤井敏・冨田研一

184 [10I26],パターンマッチ法を利用した蛋白質 1 次構造マルチ・マッチング法とその応用,（北里大）○菰岡仁志・梅山秀明

188 [10I27],溶液中の分子動力学計算に基づいた LogP の推算法,（東大薬）○富岡伸夫・清水敏之・板井昭子

192 [10I28],分子動力学計算による環状化合物のコンフォメーション解析,（東大薬）○堀江多鶴子・河合隆利・板井昭子

196 [10I29],キモトリプシン-リガンド系の分子動力学計算による解析,（東大薬）○飯野稔・富岡伸夫・板井昭子

<u>第 13 回情報化学討論会</u>(1990,11,28-30)ホリディ・イン豊橋

1 [特別講演 I],大学・化学・コンピュータ,（豊橋技科大）佐々木慎一

3 [特別講演 II],生命体の調和と破綻を探る,（岡崎国立共同研究機構）岡田節人

5 [28I01],二置換ベンゼン類におけるオクタノール-水分配係数の推算,（山形大工）○金谷重彦・工藤喜弘

9 [28I02],有機化合物の水溶解度の値を求めるシステムの開発,（山形大工）○工藤喜弘・鈴木孝弘

13 [28I03],有機合成反応設計支援反応データベースシステム CORES の開発,（図書館情報大・ミドリ十字・三井東圧化学・藤沢薬品・大正製薬・出光石油化学・吉富製薬・三菱化成・クラレ・神奈川大・万有製薬・リ

用 III 超球クラスタリングの開発,（富士通）○湯田浩太郎・井関京子・中山唯男
189 [29P25],EWS による分子動力学計算結果表示システムの開発－水の蒸発現象の表示－,（住友電工情報電子研）○阪田由加・鍛冶幹雄・（東大工）田島暢夫・平野恒夫
193 [29P26],新規香料分子設計のためのデータベース,（花王文理研）山下修・○辰田信章・太田好人・美濃順亮
197 [29P27],シフト検定法の判別分析法への応用,（阪大薬）○髙木達也・北条典子・野田昭宏・松村謙一・藤原英明・佐々木喜男
201 [29P42],ワークステーションによるタンパク質結晶解析の一貫処理システム,（姫路工大工）○藤井功・（阪大工）三木邦夫・（マックサイエンス）片山忠二・（姫路工大理）森本幸生・樋口芳樹・安岡則武
205 [29P28],活性物質の構造設計トータルシステムの開発,（豊橋技科大）○高橋由雅・佐々木慎一
209 [29P29],薬物リード構造展開知識ベースシステム EMIL の構築,（京大農化）藤田稔夫
213 [29P30],分子計算特性予測知識ベースシステムの開発,（花王文理研）○山下修・辰田信章・太田好人・美濃順亮・（豊橋技科大）高橋由雅
217 [29P31],LogP 推算システムの開発,（京大化研）○西岡孝明・（京大農）中川好秋・藤田稔夫
221 [29P32],毒性予測知識ベースシステムの開発,（国立衛試）○中舘正弘・林真・祖父尼俊雄・鎌田栄一・（日本総合技研）長田孝治・石部保・坂村由紀子
225 [29P33],発癌性予測支援システムの開発,（国立衛試）○神沼二真・大上徳子・森本和滋・五十嵐貴子
229 [29P34],生体内動態予測知識ベースシステムの開発,（北里大薬）○森口郁生・広野修一・松下泰雄・中川崇子・吉井文子
233 [29P35],化学物質設計等支援のための知識ベースシステムに関する研究－反応経路選定知識ベースシステム－,（ミドリ十字）井上佳久・（三井東圧）小田研悟・（藤沢薬品）加藤一孝・（大正製薬）川島豊・（出光石油）清水恵次郎・（吉富製薬）白木政巳・（NTT）菅原駿吾・（クラレ）高島浩幸・（萬有製薬）西岡亮・（リクルート）原典行・（中外製薬）松浦育敏・（田辺製薬）宮城島利一・（東芝）可児利佳子・（神奈川大）中山堯・（図書館情報大）石塚英弘・（筑波大）○藤原譲・大保信夫・北川博之・山口和紀
235 [29P36],合成経路探索知識ベースシステムの開発,（化技研）○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林輝幸・（富士通）矢幡史子・橋本敏徳・菅谷昭雄
239 [29P37],共通基盤としての基礎化学知識ベースの開発,（関学大）○岡田孝・河井俊一・木下悦子・（東海大）米田幸夫
243 [29P38],不均一系触媒反応知識ベースシステムの開発,（愛知工大・名大工・東海大開発技研）○鬼頭繁治・服部忠・村上雄一・米田幸夫
247 [29P39],セラミックス系物質合成理論知識ベースシステムの開発,（東大工・無機材研・東大生産研・東工大工・秩父セメント）○牧島亮男・門間英毅・三友護・安井至・水谷惟恭・二上俊朗
251 [29P40],化学物質設計等支援のための知識ベースシステムの開発－知識処理システム KAUS の設計－,（東大先端研）○大須賀節雄・堀浩一・山内平行
255 [29P41],化学物質設計等支援のためのインターフェース技術の開発(1)－JICST 化合物辞書の原子結合表から、米田 STERIC による 3 次元分子座標の自動発生およびパソコン端末での表示と各種変形操作,（JICST）荒木啓介・江里口将夫・（東海大）米田幸夫
255 [29P41],化学物質設計等支援のためのインターフェース技術の開発(2)－JICST 化合物辞書原子結合表からの IUPAC 体系名の自動発生,（JICST）荒木啓介・梶正憲・西尾真佐子・江里口将夫・神田利彦
257 [30I22],有機化合物の融点と化学構造の関係－リードジェネレイション型分子設計の試み,（矢野宮崎研）矢野邦彦
261 [30I23],最大完全部分グラフを用いた化学式のブロック化マッチング,（石原産業中研）赤木俊夫
265 [30I24],決定木を用いた甘味物質の設計支援,（阪大基礎工）山下治雄
269 [30I25],Labile な錯体生成を解析するための多変量解析法の適用－酢酸-マグネシウム系のラマンスペクトルの場合,（兵庫教育大）尾関徹・（Univ. of Waterloo）Jaleh Semmler ・ Donald E. Irish
273 [30I26],シンプレックス最適化法による混合物 GC データの分離・再構成,（キッコーマン）相島鐵郎
277 [30I27],ニューラルネットによる二成分系酸化物の酸強度推算,（愛知工大）○鬼頭繁治・（名大工）服部忠・村上雄一
281 [30I28],蛋白質の立体的疎水性パラメータとしての球内残基数,（旭化成）戸澗一孔
285 [30I29],立体構造ホモロジー検索法,（キリンビール基盤技研）○飯島洋・岩城孝則
289 [30I30],ニューラルネットワークを用いたタンパク質三次構造予測の可能性の検討,（図書館情報大）○中山伸一・吉田政幸
293 [30I31],蛋白質二次構造ヘリックス生成と協同現象,（北里大薬）○菰岡仁志・梅山秀明
297 [30I32],ANALOGS のニューラル・システムによるセプター・マッピング(II),（東京農工大工）○佐藤克則・山野辺進・安川民男・（大正製薬総研）角谷重幸・北村一泰・（阪薬大）石田寿昌
301 [30I33],核酸分子の高次構造特性パラメーターの計算と表示(II)－分子の形状,（阪大薬）藤井敏

__第 14 回情報化学討論会__(1991,11,27-29)川口総合文化センターリリア
特 1 [特別講演 I],Recent Advances in Force Fields、the Development of Class II Force Fields,（BIOSYM Technologies）Arnold T. Hagler
特 3 [特別講演 II],CG における 4 次元モデリング,（東大理）國井利泰
2 [27I01],ANALOGS のニューロネット・システムによるレセプター・マッピング(第 3 報),（東京農工大工）○山野辺進・佐藤克則・安川民男・（大正製薬総研）角谷重幸・北村一泰・（阪薬大）石田寿昌
6 [27I02],アニーリング法によるタンパク質の高次構造予測システムの開発(第 1 報),（東京農工大工）○唐澤琢郷・田淵公士・原田善之・泉沢潤司・安川民男
10 [27I03],ニューラルネットによる物性予測,（愛知工大）○鬼頭繁治・（名大工）服部忠・村上雄一
14 [27I04],ニューラルネットワークにおける入力層ニューロンの独立性に関する検討,（星薬大）○市川紘・（日立 CE）青山智夫
18 [27I05],タンパク質二面角構造予測におけるニューラルネットワークの適用,（図書館情報大）○中山伸一・吉田政幸
22 [27I06],化学名(体系的名称)から平面構造式を生成するシステムの構築,（中外製薬）松浦育敏
26 [27I07],NIST-MSDB における CAS 化合物名の側鎖部分(その 3)－括弧()を含む化合物名の処理,（筑波研究学園専）○仲久保正人・仲久保公子・（DBS）和知孝宣・（東京家政学院筑波短大）前田浩五郎
30 [27I08],分子力場データベースに基づく分子振動計算システム MVIB のユーザーインターフェースの開発,（広島大理）○吉田弘・松浦博厚
34 [27I09],有機合成設計システム AIPHOS の開発(4),（豊橋技科大）○船津公人・佐々木慎一
38 [27I10],有機合成設計システム AIPHOS の開発(5)－知識ベースの構造と機能－,（豊橋技科大・田岡化学・日本合成化学・日本触媒化学・積水化学・関化協）船津公人・白石喜久・○西村拓朗・高橋由幸・是本敏宏・銅金厳・佐々木慎一
42 [27I11],分子構造処理プログラム・ライブラリーの開発と応用のついて(2),（呉羽化学）朝永惇
46 [27I12],化学物質の分解性の予測(2)－カルバメート

などの加水分解速度の予測,（化技研）○田辺和俊・都築誠二

50 [27I13],PLS 法によるノルボルナン類の C-13NMR 化学シフトデータの解析,（東北大工）○石山純一・（豊橋技科大）宮下芳勝・佐々木慎一

54 [27I14],パターン認識を用いた写真用カブリ抑制剤の構造特性相関,（コニカ）○台場信一・飯塚宏之・加藤正・平林茂人・益田功策・（豊橋技科大）宮下芳勝・吉田浩士・佐々木慎一

58 [28I15],自由エネルギー摂動法計算における分子変換の新しい方法－多重変換基底自由エネルギー摂動法計算,（北里大薬）○米田茂隆・梅山秀明

62 [28I16],原子間力顕微鏡によるアスピリン結晶表面分子像の観察とシミュレーション,（京大薬）真崎規夫・○町田勝之輔・（松下中研）加道博行・横山和夫・任田隆夫

66 [28I17],拘束系分子動力学のための拘束条件入力方式,（富士通九州 SE）酒井広太・（富士通）竹内宗孝・（富士通九州 SE）山本優子・（富士通）福田育夫・三上益弘

70 [28I18],タンパク質シークエンス解析のエキスパートシステム,（北里大薬）○菰岡仁志・梅山秀明

74 [28I19],核酸二重らせんおよび三重らせんのモデリング法,（東大薬）○富岡伸夫・板井昭子

78 [28I20],大腸菌とバクテリオファージの転写単位におけるプロモータコンセンサス配列の保存特性の相違,（山形大工）○金谷重彦・工藤喜弘

82 [28I21],レセプターサイト推定のためのタンパク質ポケット領域の探索法(2)－ポケット領域の電子的環境,（豊橋技科大）○Carlos A. Del Carpio ・髙橋由雅・佐々木慎一

86 [28I22],生命科学のための教育研究用ネットワークシステム,（九工大情報工）○柏木浩・岡本正宏・米谷快男児

90 [28P01],フタレイン系呈色指示薬の化学平衡－化学因子分析法および半経験的分子軌道法による吸収スペクトルの解析,（兵庫教育大）森川宏司・尾関徹・○木原寛

94 [28P02],局在化分子軌道を用いた Through-Space、Through-Bond 相互作用による反応性解析,（東大工）○里見昌記・（お茶大理）平野恒夫

98 [28P03],エネルギー計算によるフラーレンの安定構造(4)－C76、C78、C84 などの安定構造の予測,（化技研）田辺和俊・○都築誠二・（豊橋技科大）大澤映二

102 [28P04],Z-インデックスとメリフィールド・シモンズ・インデックスの逆相関の解析,（お茶大理）○細矢治夫・（クラグエヴァッツ大）I. Gutman

106 [28P05],分子動力学シミュレータのためのワークベンチ:COMDEP その 2－解析システムの機能とヒューマンインタフェースー,（富士通）○並木武文・（西肥情報サービス）大谷正尚・（富士通九州 SE）山本優子・（富士通青森 SE）石戸橋真・（富士通）三上益弘

110 [28P06],分子動力学計算システム GROMOS の X-Window による入出力システム,（群馬大教養）中田吉郎・（衛生試）神沼二真・五十嵐貴子・（アドイン研）浜谷和彦・和田暁

114 [28P07],数式処理を利用した化学動力学計算の自動化(2)－数値計算との連携,（大阪電通大）藤田岩男

118 [28P08],ジベンゾモノ、ジアゼピンのメチル化反応の位置選択性,（近畿大理工）○髙橋紘一・藤原宗孝

122 [28P09],化学構造式通信のためのコード化手法の検討,（姫路工大工）○中野英彦・（国際基督教大）吉野輝雄・（姫路工大工）山名一成・三軒齊

126 [28P10],化学構造記述のための意味辞書の構築,（神奈川大理）中山堯

130 [28P11],CHEMICS とスペクトルデータベース SpecInfo との結合,（豊橋技科大・ BASF）○船津公人・佐々木慎一・ W. Fachinger ・ R. Neudert

134 [28P12],トポロジカルインデックスに基づく ^{13}C-NMR 化学シフトの予測,（豊橋技科大）○長田英世・髙橋由雅・佐々木慎一

138 [28P13],ファジィ推論による水温制御アルゴリズム,（お茶大理）○藤枝修子・田中志保

142 [28P14],計算機統計学的手法の化学、薬学への応用(3)シフト検定法の正準判別分析法、回帰判別分析法への応用,（阪大薬）○高木達也・北条典子・和田千佐・藤原英明

146 [28P15],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(9)－赤外スペクトル 1000 件同定用パソコンシステムの開発と総合評価,（化技研）○田辺和俊・田村禎夫・（ファコムハイタック）上坂博享

150 [28P16],有機合成設計システム AIPHOS の開発(6)－立体化学知識ベースの構造と機能－,（豊橋技科大・鐘淵化学・塩野義製薬・ダイキン・関化協）船津公人・上山昇・守川壮一・○渡辺正道・根岸良夫・大橋武久・佐々木慎一

154 [28P17],有機合成設計システム AIPHOS の開発(7)－戦略部位獲得プログラム,（豊橋技科大・大阪市工研・ハリマ化成・山本化成・関化協）船津公人・大野敏信・○磯崎昌史・堀内健一郎・銅金巌・佐々木慎一

158 [28P18],有機合成設計システム AIPHOS の開発(8),（豊橋技科大・オリエント化学・鐘淵化学・住友化学・住友精化）船津公人・○北村覚・千波誠・内田透・大江聡之・木村聡・大橋武久・佐々木慎一

162 [28P19],Learning and Rule Control in the Information Base System for Organic Synthesis Research,（筑波大）○王忠清・（名大）早川直宏・（筑波大）山口和紀・北川博之・大保信夫・藤原譲

166 [28P20],化学構造式の類似性の検討とデータベース検索への応用,（豊橋技科大）○奥山徹・橋詰裕行・阿部英次・佐々木慎一

170 [28P21],^{1}H/^{13}C-NMR スペクトルデータベースによる検索同定システムの開発・実用化の検討(3),（日立計測）橋本正雄・○佐久間晃子・（日立那珂）笹渕仁

174 [28P23],二群データに基づくレセプターコアの抽出,（石原産業中研）赤木俊夫

178 [28P24],受容サイトにおける分子認識機構(VIII)－リゾチームによる糖鎖の識別,（東京農工大工）○野崎義人・安川民男・（神奈川科学技術アカデミー）岡崎秀美・赤池敏宏

182 [28P25],DNA モデリングのエキスパートシステム,（北里大薬）○四宮和子・梅山秀明

186 [28P26],球内残基数を用いた蛋白質立体構造予測の試み,（旭化成）戸澗一孔

190 [29I23],有機構造解析における NMR スペクトル照合結果の利用法の見直し,（山形大工）○工藤喜弘・小林敦志・森正人・山際春樹・長谷川隆・佐藤典子

194 [29I24],ゼオライト三次元フレームワーク上での Si、Al 分配と NMR スペクトル,（群馬大工）佐藤満雄

198 [29I25],虚遷移構造の二節部分グラフ,（富士フィルム足柄研）○竹内雅志・藤田眞作

202 [29I26],反応情報システム FORTUNITS の開発,（富士フィルム足柄研）○藤田眞作・花井荘輔・宮川正美・竹内雅志・中山章子・保田敏雅

206 [29I27],金属イオンの溶媒抽出データベース SEDATA の開発,（東北大理）○塚原聡・斎藤紘一・鈴木信男

210 [29I28],スペクトル情報の知識ベース化における一つの試み－高分子の C-13NMR を例にして－,（神奈川工大情工）○巽久行・（前神奈川工大情工）西岡篤夫

214 [29I29],アスコルビン酸分子内水素結合が存在するときの ab initio 法と PM3 によるコンホメーション解析の比較,（分子）藤田忠男

218 [29I30],電子伝達系蛋白質の電子状態,（関学大理）○中川博之・小山泰・（関学大情報セ）岡田孝

222 [29I31],Some Problems of Large Size Matrix Diagonalization,（分子研）長嶋雲兵

<u>第 15 回情報化学討論会</u>(1992,11,25-27)京都大学薬学部・京都教育文化センター

1 [特別講演],化学反応の一般化,（基礎化学研）福井謙一

2 [25I01],"Partial-heating molecular dynamics"－立体配座解析の効率的な手法の開発,（北里大薬）○辻下英樹・広野修一・森口郁生
6 [25I02],分子動力学シミュレータのためのワークベンチ:MASPHYC－ポテンシャル関数ライブラリ・エディタ,（富士通九州 SE）○酒井広太・山本優子・（富士通青森 SE）三上亨・林広海・（富士通）竹内宗孝・三上益弘
10 [25I03],Ab initio 分子軌道法による不斉フッソ原子をもつ強誘電性液晶のモデリングおよび静電ポテンシャルと物性との関係,（分子）○藤田忠男
14 [25I04],ベクトルプロセッサとパラレル IO を利用したオキシヘムの大規模 CASSCF 計算,（中京大教養）山本茂義・（九工大情報工）○柏木浩
18 [25I05],メリチンの高次構造形成機構,（東京農工大工）○園山正史・安川民男
22 [25I06],球内残基数を用いた蛋白質立体構造予測の試み(2),（旭化成）○鎌田朋子・戸澗一孔
26 [25I07],類縁蛋白質のモデリング法の進展,（北里大薬）○山下憲文・梅山秀明
30 [25I08],タンパク質受容体部位の自動推定:静電解析に基づく候補部位の評価,（豊橋技科大）○Carlos A. Del Carpio・高橋由雅・佐々木慎一
34 [25I09],DNA を基礎にした蛋白質一次シーケンス解析,（北里大薬）○菰岡仁志・梅山秀明
38 [25I10],アンチセンス分子設計のための核酸三重らせんのモデリング法,（東大薬）○富岡伸夫・板井昭子
42 [25I11],DNA モデリングのエキスパートシステムの進展,（北里大薬）○四宮和子・梅山秀明
46 [25I12],大腸菌とバクテリオファージのゲノムコード領域における σ70-プロモータ類似配列の抑制性の相違,（山形大工）○金谷重彦・工藤喜弘
50 [26I13],延伸による結晶性高分子の挙動と弾性率,（呉羽化学）○栗原あづさ・中馬寛・榎本聰
54 [26I14],木構造間の距離と化合物検索への応用,（神戸大工）○田中栄一
58 [26I15],有機構造解析の考え方とその実践,（山形大工）○工藤喜弘
62 [26I16],化学名(体系的名称)から平面構造式を生成するシステムの構築(その 2)－立体化学の認知と表現,（中外製薬）○松浦育敏
66 [26I17],創薬と安全性研究のための分子計算環境 MOSA II の開発,（国立衛試・群馬大・アドイン研）神沼二真・○中野達也・中田琴子・五十嵐貴子・中田吉郎・浜谷和彦
70 [26P01],分子動力学シミュレータのためのワークベンチ:MASPHYC－成膜シミュレーションのためのヒューマンインタフェース,（富士通）○並木武文・竹内宗孝・（西肥情報サービス）大谷正尚・（富士通青森 SE）石戸橋真・（富士通）三上益弘
74 [26P02],長距離相互作用を考慮した 2 段階 cutoff-MD 計算法,（北里大薬）○山乙教之・広野修一・森口郁生
78 [26P03],分子動力学を用いた分子内環化反応の位置選択性に関する検討,（旭化成）○田頭瑞加・戸澗一孔
82 [26P04],MNDO 計算によるコラーゲン関連ペプチドの安定構造とその X 線構造解析および NMR 解析,（近大理工）○髙橋紘一・山口仁宏・茨木雅人
86 [26P05],ANALOGS のニューラルネットワーク・システムによるレセプター・マッピング(第 4 報),（東京農工大工）○山野辺進・安川民男・（大正製薬）角谷重幸・北村一泰・（阪薬大）石田寿昌
90 [26P06],生体高分子の基準振動解析法と酵素反応系への応用,（北里大薬）○神谷健秀・梅山秀明
94 [26P07],キメラ参照蛋白質を利用した蛋白質モデリング法の開発,（北里大）○梶原明朗・菰岡仁志・神谷健秀・梅山秀明
98 [26P08],類縁タンパク質の構造のずれと疎水コア距離の相関,（持田製薬）○鮫嶋理恵・（北里大薬）梅山秀明
102 [26P09],CACTVS:A Chemistry Algorithm Development Environment,（豊橋技科大）○W. D. Ihlenfeldt・髙橋由雅・阿部英次・佐々木慎一
106 [26P10],構造-活性相関を意識した合成支援システム,（富士通）○湯田浩太郎
110 [26P11],合成設計支援システム SPEK の開発,（神奈川大理）○中山尭・伊藤尚樹・川村健史・菅野崇・北原清隆
114 [26P13],パソコン用分子特性推算システムの開発,（豊橋技科大）○水元英韶・髙橋由雅・助川正之・佐々木慎一
118 [26P14],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(第 16 報)－赤外スペクトルからの各種官能基の推定,（化技研）○田辺和俊・田村禎夫・（富士通）上坂博亨
122 [26P15],並列カルマン・フィルターによるスペクトルデータ解析,（豊橋技科大）○吉田浩士・李志良・宮下芳勝・佐々木慎一
126 [26P16],TUTORS:部分構造情報に基づく候補構造精選知識ベースシステムの開発,（豊橋技科大）○石山雄一・髙橋由雅・佐々木慎一
130 [26P17],化学構造と NMR スペクトルデータ処理統合システム CIMS の開発(V)－CIMS のワークステーションへの実装と並列検索機能の実現,（豊橋技科大）○奥山徹・五月女優・豊田学・Joe Lian Min・橋詰裕行・阿部英次・佐々木慎一
134 [26P18],3 次元類似性検索の応用の試み,（石原産業）○赤木俊夫
138 [26P19],パーソナルコンピュータによる学会講演要旨集のデータベース化とその利用－情報化学討論会および構造活性相関シンポジウム要旨集(続報),（電通大）○山崎昶・○梶川博司・岡地優司・（DAKO Japan）平賀やよい・（北里大薬）木下俊夫
142 [27I18],パーソナルコンピュータによる ^{1}H-NMR フルスペクトルデータベース,（豊橋技科大）○阿部英次・石井孝幸・河野英二・佐々木慎一
146 [27I19],電子メールを用いた NMR スペクトルデータ検索システムの開発,（豊橋技科大）○奥山徹・阿部英次・佐々木慎一
150 [27I20],研究室保存各種文献集のデータベース化とその利用,（電通大）梶原博司・尾崎剛・○山崎昶・（明治大理工）渡邊耕司・鈴木康雄
154 [27I21],IARC モノグラフからの発癌物質データベースの作成,（国立衛試）神沼二真・五十嵐貴子・○中野達也
158 [27I22],類推による有機合成研究用情報ベースシステムの構築,（筑波大電子情報）○王忠清・鄭四清・藤原譲
162 [27I23],シフト検定法の開発と化学、薬学への応用(4)－ニューラルネットワークへの適用,（阪大薬）高木達也・○中井宏紀・和田千佐・野田昭宏・小野澤学寿・松村謙一・藤原英明
166 [27I24],反応データベースの構築とその利用システムの開発,（図書館情報大・ミドリ十字・チッソ石化・三井東圧化・藤沢薬品・東芝・大正製薬・出光石油化学・吉富製薬・NTT・クラレ・神奈川大・萬有製薬・筑波大・中外製薬・田辺製薬・三共製薬）石塚英弘・井上佳久・潮田誠・小田研悟・加藤一孝・可児利佳子・川島豊・○清水恵次郎・中洋一白木政巳・菅原駿吾・髙島裕幸・中山尭・西岡亮・藤原譲・松浦育敏・宮城島利一・松井孝司
170 [27I25],NIST-MSDB における CAS 化合物の側鎖部分(その 5)－該当化合物高速抽出の試み,（筑波研究学園専）○仲久保正人・仲久保公子・（DBS）和知孝宜・（東京家政学院筑波短大）前田浩五郎

<u>第 16 回情報化学討論会</u>(1993,11,24-26)徳島大学蔵本キャンパス

1 [特別講演 I],生命現象のシステムダイナミクス,（名大人間情報）吉川研一
9 [特別講演 II],情報化学におけるグラフ理論の役割り,

（お茶大学理）細矢治夫

13 [24I01],タンパク質構造データベースを利用した迅速X線構造解析法の開発,（徳島大工）○藤原慶二・藪内剛・佐藤孝雄・森本幸生・月原冨武

17 [24I02],クリスタログラフィックワークステーションの構築,（姫工大理・徳島大工・東海大開発工）○安岡則武・樋口芳樹・岬真太郎・森本幸生・藤井功

21 [24I03],オブジェクト指向によるタンパク質一次構造の特徴抽出システム,（関西学院大）○辻野孝・岡田孝

25 [24I04],蛋白質分子モデル操作プログラムMOLMAP-P,（阪大蛋白研）○楠木正巳

29 [24I05],放射光施設巨大分子用ワイセンベルグカメラによる回折データの対話型画像処理システムの開発,（東海大開発工・徳島大工・高エネ研・姫工大理）○藤井功・森本幸生・中川敦史・樋口芳樹・安岡則武

33 [24I06],Phage T4 Lysozyme の Thr157 部位の変異体の動的構造の分子動力学計算による解析,（分子）○藤田忠男

37 [24I07],Potentiai-scaled and hot-solute MD による溶液中における効率的な分子モデリング,（鐘紡創薬研）○辻下英樹・（北里大薬）広野修一・森口郁生

41 [24I08],Ab initio 分子計算における電子間反発積分計算のスーパーコンピューター用アルゴリズム,（九工大情報工）○八尋秀一・柏木浩

45 [24I09],VitaminD3 類のコンホメーション、電子状態と活性,（帝人）○小谷野和郎・石塚誠一

49 [24I10],創薬と安全性研究のための分子計算環境,（国立衛試）神沼二眞・○中野達也・中田琴子・五十嵐貴子

53 [24I11],TOPOLOGICAL FRAGMENT スペクトルを用いた構造類似性評価のためのアプローチ,（豊橋技科大）○髙橋由雅・石山雄一

57 [25I12],化学名(体系的名称)から平面構造式を生成するシステムの構築(その 3)－医薬品データベースでの実例,（中外製薬）○松浦育敏

61 [25I13],構造活性相関のための発がん・変異原物質データベース,（国立衛試・東海大・協和発酵・藤沢薬品・アドイン）○中野達也・五十嵐貴子・平山令明・出口隆志・仲西功・上猶稔・向井礼子・神沼二眞

65 [25I14],細胞信号伝達系の知識ベースについて,（東京臨床研・山之内製薬・アドイン・国立衛試）○灘岡陽子・古谷利夫・上猶稔・神沼二眞

69 [25I15],情報化学システム CGS の開発－(1)構造表現と照明関数,（東工大資源研）○内野正弘

73 [25I16],AWK を用いた国際化学物質安全性カードの日本語翻訳支援プログラム,（国立衛試）○中野達也・山本都・横手規子・神沼二眞

77 [25P01],有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS による有機混合物解析,（豊橋技科大）○船津公人・髙橋義明・原藤寛・佐々木慎一

81 [25P02],インデックスファイル支援による ^{13}C-NMR 化学シフト値の予測および候補構造のランキングシステムの開発,（豊橋技科大）○船津公人・江口晃史・佐々木慎一

85 [25P03],^{1}H-NMR シグナル自動帰属システムの開発,（豊橋技科大）○船津公人・ B. P. Acharya ・佐々木慎一

89 [25P04],有機化合物の自動構造推定－部分構造情報をもとにした構造発生プログラムの開発－,（豊橋技科大）○速水健一・船津公人・佐々木慎一

93 [25P05],有機合成設計システム AIPHOS の開発(9)－戦略部位獲得プログラムの開発－,（豊橋技科大・山本化成・ハリマ化成・関化協）船津公人・○堀内健一郎・磯崎昌史・銅金巌・佐々木慎一

97 [25P06],有機合成設計システム AIPHOS の開発(10)－反応知識ベースの構造とその活用－,（豊橋技科大・鐘淵化学・塩野義製薬・積水化学・田岡化学・ダイキン・日本合成化学・日本触媒・関化協）船津公人・村上博・守川壮一・渡辺正道・是本敏宏・○河合喜久・根岸良夫・高原哲也・西村拓朗・髙橋由幸・大橋武久・佐々木慎一

101 [25P07],有機合成設計システム AIPHOS の開発(11)－合成前駆体への脱離基付与のための知識ベースの構造と機能－,（豊橋技科大・オリエント化学・塩野義製薬・ダイキン・日本触媒・山本化成・関化協）船津公人・北村覚・○渡辺正道・根岸良夫・髙橋由幸・堀内健一郎・銅金巌・佐々木慎一

105 [25P08],有機合成設計システム AIPHOS の開発(12)－反応データベースからの知識ベースの自動誘導のためのツール開発－,（豊橋技科大・オリエント化学・鐘淵化学・塩野義製薬・住友化学・住友精化・関化協）船津公人・北村覚・千波誠・渡辺正道・内田透・○田中章夫・大江聡之・銅金巌・佐々木慎一

109 [25P09],球内残基数を用いた蛋白質立体構造予測の試み(3),（旭化成）○島田章・竹原英毅・戸澗一孔

113 [25P10],球内残基数を用いた蛋白質立体構造予測の試み(4),（旭化成）○竹原英毅・島田章・戸澗一孔

117 [25P11],糖鎖構造の柔軟性の解釈,（旭化成）○鎌田朋子・戸澗一孔

121 [25P12],分子軌道計算における非経験法、半経験法、および密度汎関数法の比較(第 2 報)－複素環化合物の原子電荷に及ぼす計算手法間の差異－,（藤沢薬品・塩野義製薬・田辺製薬・富士通・ミドリ十字）○仲西功・斉藤隆・清水良・鮫島圭一郎・井上佳久

125 [25P13],Z-MATRIX 形式による分子軌道計算用入力ファイル作成プログラム Z-MATE の開発,（藤沢薬品）○大前敏宏・仲西功・田中明人・加藤一孝

129 [25P14],水－ニトロベンゼン－水三相液膜におけるカオス的挙動,（近大理工）○髙橋紘一・安川英昭・杉村孝彰

133 [25P15],拡張記憶装置を用いた分子積分のソーティングと積分変換のベクトル化,（中京大教養）○山本茂義・（九工大情報工）柏木浩

137 [25P16],超分子結晶構造解析のための回折強度データ収集システムの開発,（徳島大工）○富崎孝司・日野伸哉・佐藤孝雄・森本幸生・月原冨武

141 [25P17],自由エネルギー摂動法によるタンパク質の熱安定性の解析,（蛋白工学研）○谷村隆次・斎藤稔

145 [25P18],ハチ PhospholipaseA2 のホモロジーモデリング－保存された構造とその一次配列上の配置－,（キリンビール基盤研）○飯島洋

149 [25P19],挿入・欠損を考慮した、アミノ酸配列の高速な類似度測定アルゴリズム,（図書館情報大）○中山伸一・吉田政幸

153 [25P20],部分構造列挙のための効率的アルゴリズム,（豊橋技科大）○石山雄一・髙橋由雅

157 [25P21],パソコン用化合物情報管理システムの開発,（豊橋技科大）○作田誠・髙橋由雅

161 [25P22],有機化合物の IUPAC 命名支援システムの開発－名称－構造変換システム II,（豊橋技科大）曽田健一・阿部英次

165 [25P23],標的受容体との相互作用に基づくリガンド構造の論理的改良法,（東大薬）○髙松善宏・齋藤昭一・富岡伸夫・板井昭子

169 [25P24],拡張遺伝的アルゴリズムによるニューラルネットワーク(ローカルミニマからの脱出),（富士通）○湯田浩太郎

173 [25P25],薬物分子の立体構造情報を用いたニューラルネットワーク解析,（大正製薬）○山野辺進・畝島睦恵・角谷重幸・北村一泰・（東農工大工）安川民男

177 [25P26],NIST-MSDB における CAS 化合物名の側鎖部分(その 7)－SCUCW と SCFUW との相互関連,（筑波研究学園専）○仲久保正人・仲久保公子・（DBS）和知孝宜・（東京家政学筑波短大）前田浩五郎

181 [25P27],合成設計支援システム SPEK の開発－知識ベース構築－,（神奈川大理）○中山尭・野口徹・石川裕隆・伊藤尚樹

185 [25P28],学会講演要旨集のデータベース化、情報化学討論会、錯塩化学討論会、構造活性相関シンポジウムなど,（電通大）○山崎昶・梶川博司・岡地優司・早

野征則・斎藤禎一・(DAKO JAPAN) 平賀やよい・(北里大薬) 木下俊夫
189 [26I17],拡張結合表を用いた構造記述子の自動設定と抽出,(ゼリア新薬) ○平野弘之・(北里大薬) 中込泉・広野修一・森口郁生
193 [26I18],静電場解析に基づく分子の重ね合わせ法の開発と応用,(大正製薬総研) ○小田晃司・角谷重幸・北村一泰
197 [26I19],ニューラルネットワークの最適化とその定量的構造活性相関への応用,(阪大遺伝情報) 高木達也・(阪大薬) ○小野澤学寿・直原高広・坂下和美・中井宏紀・藤原英明
201 [26I20],有機化学反応予測システムの開発－合成設計システム AIPHOS の知識ベースの反応予測システムへの活用－,(豊橋技科大) ○佐藤寛子・宮脇治・船津公人・佐々木慎一
205 [26I21],他核 NMR スペクトルのデータベース作製,(電通大) ○山崎昶・早野征則・斎藤禎一
209 [26I22],クロマトグラフィにおける信号解析と情報量について,(国立衛生試) ○林譲・松田りえ子
213 [26I23],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(第 25 報)－赤外スペクトル分析への応用,(物質研) ○田辺和俊・田村禎夫・(富士通) 上坂博亨
217 [26I24],多摩川水系における環境データの多変量解析,(お茶大理) ○藤枝修子・示森かおり・(豊橋技科大) 宮下芳勝・佐々木慎一
221 [26I25],ニューラルネットワークによる触媒性能予測,(愛知工大) ○鬼頭繁治・(名大工) 服部忠・村上雄一

<u>第 17 回情報化学討論会</u>(1994,11,16-18)全電通ホール・総評会館
3 [招待講演],力場計算最近の話題,(豊橋技科大) 大澤映二
9 [招待講演],The Rational Design and Optimization of Cyclic Ureas as HIV Protease Inhibitors.,(DuPont Merck) ○C. J. Eyermann・P. Y. S. Lam・P. K. Jadhav・C. N. Hodge
18 [16I01],オブジェクト指向言語 C++による分子軌道法プログラムの開発－タンパク質の全電子計算を目指して－,(九工大情報工) ○佐藤文俊・重光保博・岡崎功・八尋秀一・福江昌幸・小鶴慎吾・柏木浩
22 [16I02],密度汎関数法における SCF 計算の高速化アルゴリズム,(九工大情報工) ○重光保博・佐藤文俊・岡崎功・八尋秀一・小鶴慎吾・福江昌幸・柏木浩
26 [16I03],巨大計算プログラムためのオブジェクト指向による実行管理クラスの設計,(九工大情報工) ○岡崎功・佐藤文俊・重光保博・八尋秀一・福江昌幸・小鶴慎吾・柏木浩
30 [16IP01],水和 N-メチルアセトアミドの分子力学計算と振動スペクトルのシミュレーション,(京大薬) ○三輪嘉尚・(京都薬大) 町田勝之輔
34 [16IP02],CAMDAS:分子動力学法を利用した自動配座解析システム,(鐘紡創薬研) ○辻下英樹・池田昇司・坂本文夫・塚本悟郎・(北里大薬) 広野修一
38 [16IP03],活性コンフォメーションと真空中のエネルギー極小構造の比較,(北里大薬) ○中込泉・広野修一
42 [16IP04],挿入・欠損を考慮した、アミノ酸配列の高速な類似度測定アルゴリズム(2)－異種アミノ酸間類似度の導入,(図書館情報大) ○中山伸一・吉田政幸
46 [16IP05],糖蛋白質糖鎖の高温分子動力学シミュレーション,(旭化成) ○鎌田朋子・戸澗一孔
50 [16IP06],蛋白質立体構造中で二次構造を読む,(旭化成) ○竹原英毅・島田章・戸澗一孔
54 [16IP07],蛋白質逆フォールディング問題における偽陽性例,(旭化成) ○島田章・竹原英毅・戸澗一孔
58 [16IP08],正二十面体対称性を利用したウイルス・キャプシドのモデリング法の開発,(北里大薬) ○高山直子・(北里大理) 米田茂隆・(北里大薬) 梅山秀明
62 [16IP09],合成設計支援システム SPEK の開発－知識ベース構造化,(神奈川大理) ○中山尭・伊藤尚樹・木村光徳・小室雅彦
66 [16IP10],有機化学反応予測システム SOPHIA の開発(2)－反応条件の自動識別,(豊橋技科大) ○佐藤寛子・船津公人
70 [16IP11],有機化学反応予測システム SOPHIA の開発(3)－知識ベース支援による生成物構造創出における適切な原子あるいは原子団の自動付与,(豊橋技科大) ○佐藤寛子・佐野智章・船津公人
74 [16I04],ラジカル付加重合の遷移状態における立体障害効果,(三菱レイヨン) ○東秀昌・片桐禅・(奈良教育大教育) 山邊信一
78 [16I05],遺伝アルゴリズムを用いたポテンシャル・パラメータの抽出方法,(富士通計算科学研セ) ○佐藤眞木彦・三上益弘
82 [16I06],ポリペプチドの三次元構造推定に対する並列遺伝的アルゴリズムの応用,(豊橋技科大) ○内田雅生・Carlos Del Carpio・佐々木慎一
86 [16I07],新しい立体配座解析法の探求－配座クラスター分類,(豊橋技科大) ○秦季之・後藤仁志・大澤映二
90 [16I08],MD simulation によるアセチルコリンエステレースの活性部位の動的構造,(分子研) ○藤田忠男
94 [17I09],知識発見法による構造活性相関解析の試み,(関西学院大) ○岡田孝・雄山真弓・(富士通) 湯田浩太郎
98 [17I10],遺伝的アルゴリズムの特徴抽出への応用,(興和東京研・豊橋技科大) ○長谷川清・宮下芳勝・佐々木慎一
102 [17I11],二次元化学構造式の類似検索法の比較検討,(豊橋技科大) ○奥山徹・阿部英次・佐々木慎一・(Univ. Sheffield) Peter Willett
106 [17I12],並列計算機による類似構造の並列検索,(豊橋技科大) ○加藤弘幸・奥山徹・阿部英次・佐々木慎一・(Univ. Sheffied) Peter Willett
110 [17IP12],絶対立体配置認識のためのプログラムの開発,(豊橋技科大) ○小宮太・阿部英次
114 [17IP13],ニューラルネットワークによるハロメタンの物性のモデリング,(豊橋技科大) ○吉田浩士・宮下芳勝・佐々木慎一
118 [17IP14],QSAR パラメータ σs0 と van der Waals 表面積および体積の関係,(近畿大薬) ○川木秀子・(阪大遺伝情報) 高木達也・(藤沢薬品) 田中明人・(阪大薬) 藤原英明・佐々木喜男
122 [17IP15],ロバスト推定法を応用したニューラルネットワーク,(阪大遺伝情報) ○高木達也・(阪大薬) 中井宏紀・坂下和美・直原高広・藤原英明
126 [17IP16], Analysis of the Factors Determining Thee Dimensional Structures of Polypeptides,(豊橋技科大) ○Carlos Del Carpio・内田雅生・佐々木慎一・(名市大) Lajos Baranyi・William Campbell・岡田秀親
130 [17IP17], Design of Antisense Peptides using Evolutionary Algorithm,(名市大) ○Lajos Baranji・(豊橋技科大) Calos Del Carpio・(名市大) William Campbell・(豊橋技科大) 佐々木慎一 (名市大)・岡田秀親
134 [17IP18], WWW(World Wide Web)による NMR スペクトルデータ検索の試み,(豊橋技科大) ○津村孝・真鍋敬士・奥山徹・阿部英次・佐々木慎一
138 [17IP19],化合物スペクトルデータベース(SDBS)の CD-ROM 化,(物質研) ○早水紀久子・田辺和俊・田村禎夫・柳沢勝・小野修一郎・(神田外語大) 山本修・(基盤技術研究促進セ) 和佐田宣英・染野和雄
142 [17IP20],他核 NMR スペクトルのデータベース作成 Pt-195NMR,(電通大) ○山崎昶・尾池正弘・(北里大薬) 菅野拓也・棚倉雄一郎・木下俊夫
146 [17IP21],^{13}C-NMR 化学シフト予測システムの開発,(豊橋技科大) ○大岡弘明・高橋由雅
150 [17IP22],遺伝的アルゴリズムの ^{13}C-NMR スペクトル同定への応用,(近畿大) ○高橋紘一・真野晃

154 [17IP23],プロトン NMR スペクトルデータベースシステムの作成,（豊橋技科大）○石井孝幸・阿部英次
158 [17IP24],有機化合物の異性体構造辞書の作成と gopher を用いた internet 上でのサービスについて,（豊橋技科大）○奥山徹・真鍋敬士・佐々木慎一
162 [17IP25],Windows 上の発がん・変異原物質データベース,（アドイン・国立衛試・藤沢薬品・東海大）○上猶稔・向井礼子・中野達也・仲西功・平山令明・神沼二眞
166 [17IP26],リン酸化と脱リン酸化酵素のデータベース化,（国立衛試・山之内製薬・都臨床研・日本電気）○五十嵐貴子・古谷利夫・湯川真澄・灘岡陽子・三輪錠司・神沼二眞
170 [17IP27],学会講演要旨集のデータベース化－情報化学討論会要旨集の日本語フルテキストデータベース作成の試み,（電通大）山崎昶・斎藤禎一・梶川博司・（DAKO Japan）平賀やよい
174 [17IP28],NIST-MSDB における CAS 化合物名の側鎖部分(その 9)－側鎖基本構造単位語(SCFUW)による連続多重組み合わせ検索,（筑波研究学園専）○仲久保正人・（東京家政学院筑波短大）前田浩五郎
178 [17IP29],OSF/Motif とグラフィックスツール AVS を用いた密度汎関数法プログラムのグラフィカルユーザーインターフェースの開発,（九工大情報工）○小鶴慎吾・佐藤文俊・重光保博・八尋秀一・岡崎功・福江昌幸・柏木浩
182 [17IP30],密度汎関数法によるタンパク質の電子状態計算における初期電子密度の合成,（九工大情報工）○福江昌幸・佐藤文俊・重光保博・岡崎功・八尋秀一・小鶴慎吾・柏木浩
186 [17IP31],密度汎関数法における電子反発積分計算の高速化について,（九工大情報工）○八尋秀一・佐藤文俊・重光保博・岡崎功・福江昌幸・小鶴慎吾・柏木浩
190 [17I13],日本化学会欧文誌の SGML 方式全文データベース作成手法としての電子投稿,（図書館情報大）○石塚英弘・（横国大工）伊藤卓・（東大教養）竹内敬人・（化情協）千原秀昭・（姫路工大工）中野英彦・（信州大教養）眞野倖一・（福井高専）吉村忠与志・（日本化学会）中西敦男・（凸版印刷）田中洋一
194 [17I14],辞書作成におけるその手順と実例,（電通大）○岡地優司・山崎昶
198 [17I15],細胞情報伝達系の知識データベースについて－2,（都臨床研）○灘岡陽子・（山之内製薬）古谷利夫・（アドイン）上猶稔・（国立衛試）五十嵐貴子・（日本電気）佐野亨・（国立衛試）神沼二眞
202 [17I16],WWW サーバーによる化学物質安全性情報の提供,（国立衛試・富士通エフアイピー）○大竹千代子・油井秀人・中野達也・神沼二眞
206 [18I17],スペクトルの高域抑制によるデータ解析法－科学技術計算パッケージ NUMPAC,（中京大情報科学）○秦野やす世
210 [18I18],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(第 42 報)－赤外スペクトル分析への応用,（物質研）○田辺和俊・田村禎夫・（富士通）上坂博亨
214 [18I19],HPLC 分析支援エキスパートシステムの開発(2),（日立計測）○橋本正雄・吉田慎・浜野吉政
218 [18I20],セイコーエプソン株式会社の化学系 CAE システム,（セイコーエプソン分析セ）○上原正光
222 [18I21],イメージングプレートによる X 線回折データのグラフィックスワークステーションによる処理システム,（東海大開発）○藤井功・（姫路工・理）岬真太郎・樋口芳樹・安岡則武

__第 18 回情報化学討論会__(1995,11,15-17)ホリデイ・イン クラウンプラザ豊橋

1 [特別講演 I],インターネットの現状と動向,（東大大計セ）石田晴久
3 [特別講演 II],Calculation of the Electronic Structure of Proteins,（Stewart Computational Chemistry）James J. P. Stewart
7 [15I01],ポテンシャル関数の課題とデータベース開発,（物質研・JICST）○三上益弘・中島律子・志村和樹・（東大人工物研）岩田修一・田辺和俊
11 [15I02],各種有機溶媒への連続体モデル(COSMO 法)の適用,（三井東圧化学）○飛田純子・K.ムルティ
15 [15I03],回転対称性境界条件とウィルスの計算,（北里大理・北里大薬）○米田茂隆・北沢聖子・梅山秀明
19 [15I04],The Use of Feature- and Shape-Based Database Searching Techniques to Identify New Drug Templates,（BIOSYM/MSI）Scott D. Kahn・Matthew Hahn・○Daniel Parish
20 [15I05],n-アルカン平衡混合物の熱容量の分子力学計算,（京大薬）三輪嘉尚・（京産大）○町田勝之輔
24 [15I06],非経験的分子軌道法および密度汎関数法に基づいたポリアセチレンの振動力場,（東大理）○平田聡・鳥居肇・田隅三生
28 [15I07],分子軌道法による強誘電性液晶のコンホメーション解析,（凸版印刷）○吉田真史・（東大教）鳥海弥和
32 [15I08],チミンダイマーの構造および光回復機構についての非経験的分子軌道法による研究,（国立がんセ研）○相田美砂子・金子元久・（IBM）Michel Dupuis
36 [15I09],オブジェクト指向言語 C++による分子軌道法プログラムの開発とペプチド鎖の全電子計算,（九工大情報工）佐藤文俊・重光保博・岡崎功・（九共大工）八尋秀一・（九工大情報工）○柏木浩
40 [16I10],木構造型データによるスクリーニングシステム,（富士写真）○小沢啓一郎・保田敏雅・藤田真作
44 [16I11],二次元 NMR スペクトルの解析ソフトウェア(1)－二次元 INADEQUATE スペクトル－,（日本電子）○宮林延良・内海博明
48 [16I12],印刷化学構造式の認識理解システム,（神奈川大理）伊藤尚樹・○中山尭・古木健一
52 [16I13],2 成分混合液体の格子パターンの $1/f^n$ 解析,（お茶大理）○米田桂子・細矢治夫・冨樫雅文
56 [16IP01],インターネット上の分散データベースとして WWW と Sybase の統合,（都臨床医総研・国立衛生試・お茶大）○灘岡陽子・石川恵司・五十嵐貴子・福島佐知子・山口明美・細矢治夫・神沼二眞
60 [16IP02],インターネット上に分散データベースとしての WWW と CSNDB の統合,（国立衛生試・都臨床医総研）○五十嵐貴子・灘岡陽子・石川恵司・神沼二眞
64 [16IP03],データベースヒューマンインターフェース技術による支援方策の研究,（JICST）○志村和樹・水野路子・相馬融・岡野弘行・堀江隆
68 [16IP04],化学における Internet の利用に関する一考察,（豊橋技科大）○奥山徹・真鍋敬士
73 [16IP06],高速部分構造検索を意識した化合物構造式の線形表記法試案,（富士通）湯田浩太郎
77 [16IP07],二次元 NMR スペクトルの解析ソフトウェア(2)－^{13}C 観測異種核相関スペクトル－,（日本電子）○宮林延良・内海博明
81 [16IP08],ポテンシャルデータベースシステムの開発,（JICST・物質研）○中島律子・三上益弘・志村和樹・（東大人工物研）岩田修一・（JICST・物質研）田辺和俊
85 [16IP09],継次カテゴリーデータのための双対尺度法の改良と化学、薬学への応用(2),（阪大遺伝情報）○高木達也・（阪大薬）益田隆史・直原高広・（阪大医）藤原英明
89 [16IP10],電極反応のモンテカルロシミュレーションとアニメーション,（中京大情報）○工藤且章・西本匡伸・秦野やす世・（名大理）後藤紀一・吉森明・垣谷俊昭
93 [16IP11],生体分子のまわりの静電ポテンシャル、電場、電気力線の映像化,（中京大情報）○西本匡伸・秦野やす世
97 [16IP12],長距離相互作用を考慮したタンパク質立体

構造予測，（図書館情報大）○中山伸一・須賀井理香・吉田政幸
101 [16IP13],蛋白質配列のギャップが球内残基数評価に与える影響，（旭化成）○竹原英毅・島田章・戸澗一孔
105 [16IP14],既存医薬品中における化学構造パターン(その 1),（東海大開発工・国立衛生試）○菅谷信敬・藤井功・平山令明・長谷川式子・中野達也・山本都・神沼二真
109 [16IP15],分子軌道計算における非経験法、半経験法および密度汎関数法の比較(第 6 報)－ペプチド化合物の配座解析における計算手法間の差異(その 3),（ミドリ十字）○井上佳久・（田辺製薬）清水良・白井宏樹・（藤沢薬品）仲西功・（塩野義製薬）斉藤隆・（富士通）鮫島圭一郎
113 [16IP16],[1]HNMR スペクトルの PC 化－パラメータ DB から任意のスペクトルパターンの発生と、パターン DB における MO の利用－,（物質研・神田外語大）○早水紀久子・柳沢勝・山本修
117 [16IP17],生体高分子に対する新規の半経験的分子軌道計算の適用,（富士通・ Stewart Computational Chemistry）○鮫島圭一郎・James J. P. Stewart
121 [16IP18],MOPAC の PC への移植と GUI の設計:WS 版 MOPAC と PC 版 MOPAC の機能比較,（富士通・Cambridge Soft ・ Stewart Computational Chemistry）○高橋篤也・Stewart D. Rubenstein・James J. P. Stewart
125 [16IP19],有機化合物の IUPAC 命名支援システムの開発－名称-構造式相互変換システム,（豊橋技科大）○西村英則・中村博之・阿部英次
129 [16IP20],GA に基づく薬物配座空間の探索に関する研究,（豊橋技科大）○住谷剛・Carlos A. Del Carpio
133 [16IP21],AN EVOLUTIONARY ALGORITHM FOR POLYPEPTIDE 3D-STRUCTURE PREDICTION,（豊橋技科大）Carlos A. Del Carpio・（名市大）Lajos Baranyi・William Campbell・岡田秀親・（豊橋技科大）佐々木愼一
137 [16IP22],A Program for Superposition of Molecules to Find Pharmacophore Patterns in Organic Compounds. A Graphic Interface,（名市大）○Viorica Derety・（豊橋技科大）Carlos A. Del Carpio・（名市大）Lajos Baranyi・岡田秀親・（豊橋技科大）佐々木愼一
141 [16IP23],ab initio GIAO 計算によるメチルシクロヘキサン類における ^{13}C 化学シフト加成則の再検討,（京大理・北教大教）○今城文雄・小原繁
145 [17I14],Pt-195NMR のデータベース化・続報,（電通大）○山崎昶・尾池正弘・岡地優司・（北里大薬）菅野拓也・棚倉雄一郎・木下俊夫
149 [17I15],蛋白質側鎖コンフォーメーションの予測法,（キリンビール）○飯島洋・（人工生命研）内藤裕介
153 [17I16],ニューラルネットを用いた有機化合物の沸点の推算,（JICST ・東京理科大工）○水野路子・ジヴカマリノバ・大江修造
157 [17I17],高速通信網に対応した分子設計協調研究ツール Proteus,（システム）○伊賀祐一・中田和樹・横田由紀夫・（姫路工大理）樋口芳樹・安岡則武・（阪大工）甲斐泰・（京大理）三木邦夫
161 [17I18],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(第 50 報)－赤外スペクトル分析への応用,（物質研）○田辺和俊・（富士通）上坂博亨・（日本分光）小原祥二

<u>第 19 回情報化学討論会</u>(1996,11,12-14)大阪大学吹田キャンパス

1 [特別講演 I],自然界・生物界における「Complex Dynamics」の役割を探る,（広島大総合科学）奈良重俊
7 [特別講演 II],新しい情報伝達因子を探して－心臓血管ホルモンを中心に,（国循セ）松尾寿之
14 [12I01],主成分分析法による炭酸カルシウムと二酸化チタン混合比の決定,（愛知県警科捜）○三井利幸
18 [13I01],ネットワーク数値情報ライブラリー Ninf を基盤技術とする、サイバースペース内の仮想分子科学計算センター,（お茶大情報科学）○長嶋雲兵
19 [14I01],インターネットとデータベース,（豊橋技科大）○奥山徹
33 [12I02],QPLS 法を用いた非線形 CoMFA,（豊橋技科大）○木村敏郎・船津公人・（興和東京研）長谷川清
37 [12I03],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(第 57 報)－赤外スペクトルによる官能基の推定,（物質研）○田辺和俊・（富士通）上坂博亨・（日本分光）小原祥二
41 [12I04],事例ベース推論に基づく熱分析支援システム,（神奈川大院）○田中浩一・西本右子・中山堯
45 [12I05],有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS の開発－候補構造のクラスター化とその検定－,（豊橋技科大）○船津公人・浦田雅裕・渡辺平賢・蜂谷修
49 [12I06],有機反応予測システム SOPHIA の開発(4)－電子的特性値にもとづいた反応分類の適用の検討,（理研）○佐藤寛子・中田忠・（豊橋技科大）船津公人
53 [12I07],バクテリアの tRNA 遺伝子の共通配列,（山形大工）○工藤喜弘・金谷重彦・佐藤勇一
57 [12I08],側鎖のデータベースを用いたタンパク質の側鎖構造決定法,（北里大薬）○緒方浩二・梅山秀明
61 [12I09],白黒混合パターンの $1/f^n$ 解析,（お茶大理）○米田桂子・細矢治夫・長嶋雲兵・冨樫雅文
65 [13I02],イリジウムおよび白金錯体の光化学反応機構の理論的研究,（京大院工）○林八尋・中井浩巳・中辻博
68 [13I03],密度汎関数法プログラムにおける SCF ルーチンの並列化と小タンパク質の全電子計算,（九工大情報工）○吉廣保・佐藤文俊・上野哲哉・安達秀和・岡崎功・柏木浩
72 [13I04],三次元ゼオライトフレームワークのコンピュータモデリング,（群馬大工）○佐藤満雄・上原啓史
76 [13I05],双頭型糖脂質結晶の分子動力学シミュレーション,（物質研）○三上益弘・（東海大理）松崎智一・（物質研）増田光俊・清水敏美・田辺和俊
80 [13I06],生体高分子のいろいろな環境(気相・結晶・水溶液中)におけるコンホメーションおよびその変化のしやすさについての分子動力学法による研究,（国立がんセ研）○相田美砂子
84 [13IP01],化学物質の安全性データサーチエンジンの開発,（都臨床研）○灘岡陽子・（国立衛生試）中野達也・五十嵐貴子・石川恵司・神沼二真
88 [13IP02],構造情報と相互作用情報を有する医薬品データベースの開発,（国立衛生試・東海大開発工・データインデックス）○中野達也・長谷川式子・山本都・神沼二眞・平山令明・川出達
92 [13IP03],既存医薬品中における化学構造パターン(その 2),（東海大開発工・国立衛生試）○菅谷信敬・藤井功・長谷川式子・中野達也・山本都・神沼二真・平山令明
96 [13IP04],有機化合物命名法 ITS の構築(1)－基本設計と課題化合物の自動生成,（図書館情報大）○中山伸一・杉江美雪・小西夏代・佐藤竜一・吉田政幸
100 [13IP05],有機化合物の名称-構造式相互変換システムの開発－立体化学への拡張,（豊橋技科大）○大石秀昭・阿部英次
104 [13IP06],プロトン NMR スペクトルデータベースの構築とそれによる構造推定システムの開発,（豊橋技科大）○小倉知洋・小森田良・阿部英次
108 [13IP07],WWW による NMR スペクトルデータ検索の試み(2)－データ検索手法の多様化の検討,（豊橋技科大）○西井浩・奥山徹・阿部英次
112 [13IP08],WWW による NMR スペクトルデータ検索の試み(3)－Java によるデータ提供ツールの開発,（豊橋技科大）○上田恭裕・奥山徹・阿部英次
116 [13IP09],スペクトルデータベースシステム(SDBS)

のインターネットでの公開－(1)MS と ^{13}CNMR のスペクトルパターン，（物質研）○早水紀久子・柳沢勝・和佐田宣英・堀内由紀彦・（神田外語大）山本修
118 [13IP10],XELE-タンパク分子モデル作成プログラム(2),（東海大開発工）○藤井功・平山令明・（姫路工大理）安岡則武
122 [13IP11],蛋白質ステレオ図からの C_α3 次元座標の構築,（三共活性物質研）岩田依子・粕谷敦・○宮本秀一
126 [13IP12],球内残基数による蛋白質立体構造と配列の比較法,（旭化成）○竹原英毅・島田章・（旭化成ライフサイエンス基礎研）戸澗一孔
130 [13IP13],多面体グラフの数学的特性量の系統的解析,（お茶大理）○康小慧・細矢治夫
133 [13IP14],仮想現実感を統合した新しい分子動力学システムの構築と材料設計への応用,（東北大工）○三浦隆治・広谷彰康・久保百司・宮本明
137 [13IP15],タンパク質結合水の構造予測,（京大薬）○吉田篤史・多賀徹
141 [13IP16],抗体 CDR-H3 の構造と配列の相関,（生物工研情報）○白井宏樹・（京大理）木寺詔紀・（生物工研情報）中村春木
145 [13IP17],局所的な歪み構造の緩和を考慮に入れた PDB データへの水素付加,（九工大情報工）○安達秀和・佐藤文俊・吉廣保・上野哲哉・岡崎功・柏木浩
149 [13IP18],半経験的分子軌道法による GTPase 活性予測,（東大院農）○木下宏・清水謙多郎
153 [13IP19],量子分子動力学法の開発－予備検討およびいくつかの反応系への適用,（大正製薬創薬研）○高島一・北村一泰
157 [13IP20],残基双極子と多重時間ステップを用いた MD 計算プログラムの開発－回転対称性境界条件による計算にむけて－,（北里大理）○米田茂隆・（北里大薬）澄川弘美・米田照代・梅山秀明
159 [13IP21],局在化軌道を用いた密度汎関数法,（長崎県工業技術セ）○重光保博
162 [13IP22],オブジェクト指向言語 C++と分散並列ライブラリ PVM による大次元対称行列対角化ルーチンの並列化,（九工大情報工）○上野哲哉・佐藤文俊・吉廣保・安達秀和・岡崎功・柏木浩
166 [13IP23],半経験的分子軌道法を用いたメタクリル酸エステルの物性予測,（三菱レイヨン中研）○山本康哲
170 [13IP24],鎖状共役化合物に対する PPP 分子軌道法計算(3),（埼玉大工）時田澄男・○大黒義裕・蛭田公広・古後義也・（基礎化学研）西本吉助
174 [13IP25],非イオン界面活性剤の水溶液中における構造的挙動に関する計算化学・情報化学的研究,（広島大理）○吉田弘・鍋坂圭司・松浦博厚
177 [13IP26],Kohonen ネットワークを用いた反応部位構造変化の分類－その手法と活用について,（豊橋技科大）○西口大介・木村敏郎・船津公人・（理研）佐藤寛子
181 [13IP27],Sense and Antisense Homology Relationships in Proteins and their Implications in Folding Processes,（豊橋技科大）○Del Carpio, Carlos A.・（名古屋市大医）William Campbell・岡田秀親
185 [13IP28],ニューロジェネティック学習機械のタンパク質の高次構造予測への応用,（豊橋技科大知識情報）○川村勇司・（名古屋市大医）William Campbell・岡田秀親・（豊橋技科大エコロジー）Del Carpio, Carlos A.
189 [13IP29],進化的非決定的パターンマッチング機械による大腸菌中のコドン利用頻度の決定,（豊橋技科大）○山口勝久・William Campbell・Del Carpio, Carlos A.
193 [13IP30],有機反応の分類－反応部位原子の電子的特性の変化の類似性と反応タイプとの相関,（理研）○佐藤寛子・中田忠・（豊橋技科大）西口大介・木村俊郎・船津公人
197 [13IP31],MLR・PCR・PLS 回帰分析法の多成分分光分析への適用,（横浜国大工）○清木義夫・佐藤寿邦
201 [13IP32],大域的スペクトル法を用いる画像の特徴抽出－形態による細胞種の判別,（近畿大理工）○吉村紀朗・高橋紘一
205 [13IP33],主成分分析と数量化 I 類による生理活性データの処理,（山形大工）○深沢洋樹・金谷重彦・工藤喜弘
209 [13IP34],ニューラルネットによるタンパク質アミノ酸残基の配座パターン予測,（豊橋技科大）○横田由起子・高橋由雅
213 [14I02],高分子データベースの開発,（JICST）○土屋江里・前田知子・水野路子・斉藤和昭・髙柳弘・（三菱総研）長阪匡介
217 [14I03],多面体グラフの数え上げと双子グラフの検出,（お茶大理）水口京子・（東大農）里見昌記・（お茶大理）長嶋雲兵・○細矢治夫
220 [14I04],データ間の差異に関するデータ集の編集,（山形大工）○工藤喜弘・金谷重彦
224 [14I05],有機合成設計システム AIPHOS の開発(13)－反応知識ベースを利用した戦略部位獲得プログラムの開発,（第一製薬生産技研）○佐藤耕司・行本裕介・（豊橋技科大）船津公人
228 [14I06],有機合成設計システム AIPHOS の開発(14),（豊橋技科大）○船津公人・長内志保・赤羽和彦・吉野宏明・（第一製薬）佐藤耕司
<u>第 20 回情報化学討論会</u>(1997,10,20-22)熊本市産業文化会館
1 [T1],計算幾何学と立体構造解析－ボロノイ図とその応用,（東大工）杉原厚吉
5 [T2],高分子医薬の現状と展望,（熊本大医）前田浩
15 [20I01],組合せ論的数え上げ－情報化学の基礎理論として,（京都工繊大）○藤田眞作
17 [21I01],遷移金属錯体による有機合成反応と大規模分子軌道計算,（熊本大工）榊茂好
21 [22I01],種固有のコドン利用多様性,（山形大工、国立遺伝研）○金谷重彦
25 [20I02],分子構造処理プログラム・ライブラリーの開発と応用について(3)－ de novo structure diagram generation －,（呉羽化学）○朝永惇・（富士通京葉システムエンジニアリング）上田明彦
29 [20I03],化学名(体系的名称)から平面構造式を生成するシステムの構築(その 4),（中外製薬）○松浦育敏
33 [20I04],情報化学システム CGS の開発(2)－高速構造生成符号化エンジン GM97 及びその周辺オブジェクトの開発,（東工大資源研）○内野正弘
37 [20I05],化学の諸問題に出現するパスカルの三角形の数学的意味についての考察,（お茶大理）○細矢治夫
41 [20I06],ベンゼン系トーラスグラフの種々の特性量,（お茶大理）○髙野彩子・長嶋雲兵・細矢治夫
45 [20I07],キラル化合物に関するデータベース構築とインターネット上での運用,（東北大反応研）○後藤仁志・原田宣之
49 [20I08],プロトン NMR スペクトルデータベースの構築,（豊橋技科大）○阿部英次・奥山徹・望月誠也・渋谷隆司
51 [20I09],^{1}H および ^{13}CNMR データベースのインターネットにおける全面公開,（物質研）○早水紀久子・柳沢勝
55 [20I10],グローバルに分散している化合物データベースの検索エンジンの開発,（国立衛試）○石川恵司・中野達也・五十嵐貴子・（都臨床研）灘岡陽子・（国立衛試）神沼二眞
59 [20I11],ファクトデータベースシステム「ChemSource」の開発と公開,（科学技術振興事業団）○矢口学・小野寺夏生・水野路子・中島律子・陳迎・（三井情報開発）杉山江理子
63 [21I02],$Si_2Cl_6 \rightarrow SiCl_4+SiCl_2$、$Si_2Cl_6 \rightarrow SiCl_3+SiCl_3$ 熱分解反応に関する RRKM 理論による速度定数の理論

的予測,(早稲田大理工)○齋藤永宏・谷口徹・不破章雄
67 [21I03],アームを有するアザクラウンエーテルのカチオン選択性に関する理論的研究－異なった配座への溶媒効果がイオン選択性に及ぼす影響の評価－,(山口大工)○堀憲次・(大阪市大理)築部浩
71 [21I04],オブジェクト指向言語による密度汎関数法プログラムの並列化－タンパク質全電子計算に向けた超並列計算機への実装－,(九工大情報工)○佐藤文俊・吉廣保・岡崎功・上野哲哉・安達秀和・柏木浩
75 [21I05],遺伝情報の担い手としての核酸塩基についての理論的研究,(国立がんセ研)○相田美砂子
79 [21IP01],FAB マススペクトルデータベース構築の試み,(豊橋技科大)○阿部英次・渋谷ますみ・(奈良女大)山本正夫
81 [21IP02],インターネット反応データベース検索システムの試作,(神奈川大理)中山尭・○増田隆一・山田剛・横堀博幸・林雄一郎
85 [21IP03],有機合成設計システム AIPHOS の開発(16)－医薬品中間体への適用－,(第一製薬)○佐藤耕司・(豊橋技科大)船津公人
89 [21IP04],Logic and performance of LiqCryst -a database system for liquid crystalline compounds,(Univ. of Hamburg)○Volkmar Vill
93 [21IP05],生化学情報システムの開発－その 1 代謝経路情報検索システム－,(呉羽化学)○白神俊美・篠原寛明・佐藤玲子・田村文男・笠井健二・朝永惇
97 [21IP06],医薬品・化学物質情報の統合検索環境の作成,(都臨床研)○灘岡陽子・(石川電気)石川恵司・(国立衛試)中野達也・神沼二真
101 [21IP07],構造活性相関による化学物質安全性予測システム CAESAR の開発(第 4 報)－データベースの構築,(物質研)田辺和俊・○松本高利
103 [21IP08],パターン認識手法を用いた Kohonen マップの自動クラスター分類,(豊橋技科大)○葛西哲郎・船津公人
107 [21IP09],5 層砂時計型ニューラルネットワークによる化学・生物学データの分析,(大阪大遺伝情報)○高木達也・笠松正昭・安永照雄・(大阪大薬)後淳也・米田該典・(大阪大医)藤原英明
111 [21IP10],多変量解析によるダイオキシンの毒性評価,(滋賀大教育)○水上善博
113 [21IP11],マルチフラクタル解析の画像判別への適用,(近畿大理工)○吉村紀朗・高橋紘一
117 [21IP12],整数グラフ創出のアルゴリズム,(お茶大理)○岩田清香・細矢治夫
121 [21IP13],小型パーソナルコンピュータにおける OS 共存への一提案－新時代到来下の既開発ソフトシステムの活用を目指して－,(日興通信)大金弘典・(筑波研究学園専)仲久保正人・(東京家政学院筑波女子大)○前田浩五郎
125 [21IP14],インターネット環境下での学術論文の公表システム－特に査読制度の役割と方式について,(創価大工)○伊藤眞人
127 [21IP15],WWW ブラウザ上での数式、化学式、構造式の表現,(中京大情報科)○小倉隆司・西本匡伸・秦野やす世
131 [21IP16],WWW ブラウザにおけるインタラクティブな分子グラフィックス－分子軌道計算入力のために－,(九工大情報工)○佐藤洋子・佐藤文俊・柏木浩
135 [21IP17],3D グラフィックスによる原子・分子の電子雲の表示,(中京大情報科)○吉岡弘幸・濱本光二・金田悟・西本匡伸・宮崎慎也・秦野やす世・(中京大教養)山本茂義・(名大理)垣谷俊昭
137 [21IP18],MD エンジンのための AMBER4.1 自由エネルギー計算プログラム GIBBS の並列化,(北里大薬)○山乙教之・広野修一
141 [21IP19],超並列計算機における大次元対称行列の対角化および逆行列計算ルーチンの開発,(九工大情報工)○上野哲哉・吉廣保・佐藤文俊・岡崎功・安達秀和・柏木浩
143 [21IP20],局在化軌道を用いた密度汎関数法(2),(長崎県工技セ)○重光保博
145 [21IP21],白金ヒドリドシリル錯体のシス-トランス異性化を含むオレフィンの触媒的ヒドロシリル化反応に関する理論的研究,(熊本大工)○溝江信輝・杉本学・榊茂好
147 [21IP22],白金(0)シリレン及びスタニレン錯体の生成過程に関する理論的研究,(熊本大工)○角尚樹・杉本学・榊茂好
149 [21IP23],ルテニウム(II)錯体によるアリル-アルデヒド間 C-C 結合形成反応の理論的研究－反応性と錯体構造及び配位子との関連,(熊本大工)○大城鉄男・杉本学・榊茂好
151 [21IP24],ルテニウム(II)－ヒドリド結合への二酸化炭素挿入反応の理論的研究,(熊本大総情セ)○武蔵泰雄
153 [21IP25],フェニルカチオンの構造と安定性に及ぼす置換基効果の計算化学的考察,(九大総理工)○細田健一郎・(九州大機能研)園田高明・森章
157 [21IP26],[3n]シクロファン類の非経験的分子軌道法による構造解析、およびトリメチレン鎖反転機構,(九大有基研、九大理)○仙頭若菜・新名主輝男・(山口大工)堀憲次
159 [21IP27],フルオラン色素の構造とスペクトルの関係,(埼玉大工)○柳田光広・神田哲・時田澄男
163 [21IP28],遺伝的アルゴリズムと MO 法を用いた Boc-L-Pro-L-Pro-Gly の安定構造の探索,(近畿大理工)○高尾久夫・高橋紘一
167 [21IP29],グリコーゲンフォスフォリラーゼ結晶のディスオーダーと熱運動,(北里大理)○米田茂隆
169 [21IP30],ペプチド配列決定結果の検討,(山形大工)○工藤喜弘・金谷重彦
173 [21IP31],遺伝子塩基配列上のタンパク質コーディング領域の同定,(豊橋技科大)○山本篤英・高橋由雅
177 [21IP32],超分子構造プロテアソームの立体構造－その 1.酵母 20S プロテアソームのホモロジーモデリング,(科技団、住友電工 BM 研)○有國尚・山崎直子・新原直樹・丹羽真一郎・(東海大開発工)平山令明・(都臨床研、科技団)田中啓三
181 [21IP33],ファミリータンパク質内における側鎖構造の保存性とそのホモロジーモデリングへの応用,(北里大薬)○緒方浩二・梅山秀明
185 [21IP34],ベンチサイドコンピューティングを目指した材料設計支援システム Solutions Utilities for Molecular Integrated Evaluator:WebSumie の開発,(地球環境産業技術研究機構)山本博志・(お茶大理)○加藤澄恵・(Molecular Simulations Inc.)後藤成志・長嶋雲兵
187 [22I02],有機化合物の水への溶解度の推定,(山形大工)○岩田博之・金谷重彦・工藤喜弘
191 [22I03],有機化合物の論理的合理的構造解析法の確立のための事例分析,(山形大工)○坂井孝光・金谷重彦・工藤喜弘
195 [22I04],振幅と周期が時間とともに変化する時系列データのニューラルネットワークによる予測,(お茶大理)○小野寺光永・長嶋雲兵・吉田裕亮・細矢治夫・(宮崎大工)青山智夫
199 [22I05],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(第 65 報)赤外スペクトルからの構造決定,(物質研)○田辺和俊・上坂博亨
203 [22I06],遺伝的アルゴリズムを用いた変数選択－CoMFA モデリングにおける領域選択手法の開発,(豊橋技科大)○木村敏郎・船津公人
207 [22I07],遺伝的アルゴリズムによる QPLS 法の内部関係式の最適化,(豊橋技科大)○吉田浩士・船津公人

<u>第 21 回情報化学討論会</u>(1998,11,10-11)こまばエミナース(東京)

1 [特別講演],構造ダイナミックスにもとづいて蛋白質機能を理解する,(京大院理)郷信広

6 [I1],種々の反応性指数の数学的安定性について,(お茶大理) ○細矢治夫・岩田清香
18 [10I01],ニューラルネットワークシステムを使った質量スペクトルによる分子構造解析の試み II,(アイエヌジェイ) ○前田浩五郎・(筑波研究学園専) 仲久保正人・(物質研) 松本高利・田辺和俊・(富士通) 上坂博亨
20 [10I02],ニューラルネットワークによる赤外スペクトルからのプラスチックの判別,(物質研) ○田辺和俊・松本高利・(富山工技セ) 佐伯和光・(富士通) 上坂博亨・(オプト技研) 天野敏男
24 [10I03],NiOOH/$Ni(OH)_2$ 電極のモデル化と遺伝的アルゴリズムを用いた特性解析,(松下中研) ○中尾武寿・森川幸治・宇賀治正弥・竹山健一
26 [10I04],多変量解析手法を用いた質量スペクトルデータの構造推定への応用,(豊橋技科大) ○吉田浩士・梅尾裕美・船津公人
28 [10I05],Graphminer: グラフ構造からのデータマイニングシステム,(関学大情報セ) ○岡田孝・雄山真弓
32 [10IP01],有機合成設計システム AIPHOS の開発(17)－官能基戦略および官能基変換ファイル構築のための知識エディタの開発－,(三井化学計算科学室) ○塚本幸治・(豊橋技科大) 赤羽和彦・吉岡三善・船津公人
36 [10IP02],反応データベースより自動誘導した知識ベース指向の有機合成設計システム AIPHOS-KOSP の開発,(第一製薬製薬技研) ○佐藤耕司・金井和昭・(豊橋技科大) 船津公人
40 [10IP03], Transform を利用した多段階逆合成ルート提案機能(AIPHOS-TOSP)の開発,(豊橋技科大) ○吉岡三善・船津公人・(第一製薬生産技研) 佐藤耕司
44 [10IP04],ネットワークを利用した分子構造推定システム(SEoN)の構築,(豊橋技科大) ○浦田雅裕・梅尾裕美・赤松博之・船津公人
48 [10IP05],インターネット上の反応データベースシステム-2-,(神奈川大理) ○中山堯・上野山敦史・仲吉俊夫・池谷成広
50 [10IP06],プロトン NMR スペクトルデータベースの構築－イントラネットサービスシステムの開発,(豊橋技科大) ○望月誠也・渋谷隆司・奥山徹・阿部英次
52 [10IP07],FAB マススペクトルデータベース構築の試み-2,(豊橋技科大) ○渋谷ますみ・阿部英次・(奈良女大) 山本正夫・(浜松医大) 藤瀬裕
54 [10IP08],金属錯体関連の双極子モーメントのパーソナルコンピュータによるデータベース化,(電通大) ○山崎昶・(青学大) 古橋昭子
58 [10IP09],内分泌撹乱物質に関する生体作用データベース,(国立衛研) ○高井貴子・長谷川式子・神沼二眞
62 [10IP10],内分泌撹乱物質と生体との相互作用を記述するためのインターフェイスの開発,(国立衛研) ○中野達也・高井貴子・中田琴子・神沼二眞
64 [10IP11],生化学情報システムの開発－(その 2 代謝経路情報検索システム),(呉羽化学) ○白神俊美・篠原寛明・佐藤玲子・田村文男・笠井健二・朝永惇
68 [10IP12],生化学情報システムの開発－(その 3 代謝経路情報検索システム),(呉羽化学) ○篠原寛明・白神俊美・佐藤玲子・笠井健二・田村文男・朝永惇
72 [10IP13],タンパク質三次元モチーフ検索システム SS3D-P2 の開発,(豊橋技科大) ○加藤博明・吉岡敏夫・高橋由雅・阿部英次
76 [10IP14],相互作用情報および３次元構造情報を含む医薬品情報提供システムの構築,(熊本大薬) ○松岡俊和・(済生会熊本病院) 飛野幸子・田上治美
78 [10I06],蒸気圧データベースの構築,(東理大院工業化学) ○大江修造
82 [10I07],JST における高分子データベースの開発－高分子辞書の構築を中心として－,(科技団研究基盤情報部) ○前田知子・土屋江里・高柳弘・(三菱総研) 長阪匡介・鷲弘樹・吉成泰彦
86 [10I08],反応データベースからの『反応しなかった情報』の誘導と活用,(理研、科技団さきがけ研究２１) ○佐藤寛子・(豊橋技科大) 船津公人・(理研) 中田忠
90 [10I09],内分泌撹乱物質(環境ホルモン) 研究を支援する情報計算基盤の概念について,(国立衛研) ○神沼二眞・中田琴子・中野達也・高井貴子
94 [10I10],内分泌撹乱物質の構造データベースの開発,(国立衛研) ○中野達也・小谷野和郎・大竹千代子・山本都・長谷川式子・瀧明子・山本美智子・神沼二眞
98 [10I11],情報化学システム CGS の開発(4)－新しい組み合わせ論的数え上げ理論とその応用,(東工大資源化学研) ○内野正弘
102 [10I12],情報化学システム CGS の開発(5)－環認識と軌道グラフの方法による部分構造認識について,(東工大資源化学研) ○内野正弘
106 [11I01],ab initio MD 法の開発と加水分解反応への応用,(国立がんセ研) ○相田美砂子・(阪大産研) 山高博・(PNNL) Michel Dupuis
110 [11I02],マルチカノニカル分子動力学法によるプロリン含有環状ペプチドの構造探索,(田辺製薬創薬研) ○白井宏樹・黒田正孝・中尾和也・清水良・山下豊春・沼波憲一
112 [11I03],セリアベース固体電解質の分子動力学計算,(千葉大教育) ○林英子・佐川理恵・稲場秀明・(東工大理) 河村雄行
114 [11I04],置換トルエンにおけるメチル基内部回転運動のメカニズム,(早大理工) ○河合正暁・中井浩巳
118 [11IP01],リッジ回帰分析の最適化とその医薬学への応用,(阪大院薬) ○高木達也・宮田幸治・横川由美子・渡里智恵子・(阪大医) 藤原英明
120 [11IP02],有機化合物の構造式－名称変換システムの開発、パーソナルコピュータへの移植,(豊橋技科大) ○寺田圭助・阿部英次
122 [11IP03],ベンチサイドコンピューティングを目指した材料設計支援システム Summy の開発(Ⅳ),(RITE) ○山本博志・(お茶大) 田島澄恵・高橋梨紗・(物質研) 長嶋雲兵
126 [11IP04],ニューラルネットワークを用いた ACAT 阻害薬の定量的構造活性相関,(立教大理) ○須永理恵・常盤広明
128 [11IP05],3D-QSAR における Kohonen map の応用と 3way PLS による解析,(豊橋技科大) ○松岡成郎・荒川正幹・船津公人
132 [11IP06],構造活性相関による化学物質安全性予測システム CAESAR の開発(9)－毒性予測システムの評価,(物質研) 田辺和俊・○松本高利・(ゼリア新薬) 平野弘之・(北里大) 森口郁生
136 [11IP07],球内残基数に基づくタンパク質立体構造比較,(図書館情報大) ○中山伸一・佐々木敦・(Sheffield 大) Peter Willett・(図書館情報大) 吉田政幸
140 [11IP08],2D ステレオ図から 3D モデル化における refinement 法,(味の素医薬研) ○高橋三雄・田中泰弘
142 [11IP09],Tsar および ADAPT を用いた環境ホルモン化合物の分子多様性による基礎的考察(1),(富士通) ○湯田浩太郎・(ソニー・テクトロニクス) 小松晴信
146 [11IP10],Multiple Structural Alignment プログラムの開発,(生物分子工学研、ヘキストマリオンルセル) ○柳川政美・(生物分子工学研) 藤博幸
150 [11IP11],ケモメトリックス・ソフトウェア Chemish の開発およびその Web チュートリアルの作成,(豊橋技科大) ○荒川正幹・木村敏郎・船津公人・(アイセロ化学) 神村基和・(三井化学) 西村竜一
154 [11IP12],低エネルギー放射線による遺伝子の損傷に関する理論的研究,(科技団原研) ○望月祐志
156 [11IP13],光合成細菌における電子移動反応についての理論的研究,(物質研) ○三浦信明・北尾修
158 [11IP14],ミクロシスチンの構造と毒性,(滋賀大教育) ○水上善博
160 [11IP15],無電解めっきにおける還元剤の酸化反応機構の理論的解明 (1),(早大理工) ○大西正明・小松

功・本間敬之・逢坂哲彌・中井浩巳
162 [11IP16],無電解めっきにおける還元剤の酸化反応機構の理論的解明 (2),（早大理工）○小松功・大西正明・本間敬之・逢坂哲彌・中井浩巳
164 [11IP17],アンモニアクラスターイオンの成長過程に関する理論的研究,（早大理工）○後藤東一郎・（理研）岡田芳樹・折井孝彰・武内一夫・（豊田工大）市橋正彦・近藤保・（早大理工）中井浩巳
168 [11IP18],密度汎関数法によるペプチド鎖の擬カノニカル局在化分子軌道計算,（九工大情報工）○岩井裕美・佐藤文俊・岡崎功・吉廣保・柏木浩
170 [11IP19],巨大分子のための密度汎関数法における non-local 交換相関ポテンシャルの高速計算,（九工大情報工）○守田陽一郎・佐藤文俊・岡崎功・吉廣保・柏木浩
174 [11IP20],2, 2'-ビピリジンを含むテトラアザマクロサイクル及びそのリチウム錯体の半経験的分子軌道計算,（お茶大理）○古濱彩子・鷹野景子・（お茶大院人間文化）小川昭二郎・（東大生産研）土屋伸次
176 [11IP21],コンフォメーションの溶液平衡を考慮した Karplus 式による NMR 結合定数の予測,（徳島大薬）○後藤了・寺田弘
178 [11IP22],SCO/He 及び SCO/HCl の構造及び安定性,（静岡理工科大）○鈴木康生・関山秀雄
180 [11IP23],2, 11-ジアザ[3.3]シクロファン類の立体配座解析,（九大有機化学基礎研究セ）新名主輝男・關尚・○仙頭若菜・林哲澤・（富士通）鮫島圭一郎
184 [11I05],計算化学による振動スペクトルの予測－非経験的分子軌道法による塩素化メタン分子の気相赤外スペクトルの計算,（物質研）○田辺和俊・松本高利
186 [11I06],多環式芳香族炭化水素(PAH)の質量スペクトルの理論的解釈,（静岡大理）○川合周子・相原惇一
188 [11I07],CdS 超微粒子の電子状態に対する表面構造の影響,（三井化学）○岡野清久・林豊治・（東北大院工）宮本明
192 [11I08],速度論安定性の目安としての HOMO-LUMO エネルギー間隔の再評価,（静岡大理）○相原惇一
194 [11I09],密度汎関数法における制限付き開殻コーン・シャム方程式の導出とそのプログラム構造,（九工大情報工）○岡崎功・佐藤文俊・吉廣保・柏木浩
198 [11I10],量子論に基づくタンパク質内電子移動シミュレーションシステム－密度汎関数法によるタンパク質全電子計算と経路積分法による電子移動経路計算－,（九工大情報工）○佐藤文俊・吉廣保・岡崎功・上田尚学・佐藤洋子・守田陽一郎・上田雄三・岩井裕美・柏木浩
202 [11I11],フロン代替物の大気寿命の予測,（物質研）○杉江正昭・内丸忠文・（分子研）青柳睦
204 [11I12],OH ラジカルによるメタン及びフルオロメタンの水素引き抜き反応の反応座標の解析,（物質研）○内丸忠文・J. Korchowiec・杉江正昭・関屋章
<u>第 22 回情報化学討論会</u>(1999,11,10-12)グランドホクヨウ米沢
2 [特別講演 KJ],生物活性物質の探索－化学で探る生物の世界,（秋田県立大学）○鈴木昭憲
4 [特別講演 JK],高分子材料設計の最近の動向,（名大院工）○土井正男
7 [J01],Computer-based Materials Science Education, is this a Lesson for all of us?,（Univ. of Stellenbosch）○Ron D. Sanderson
8 [J11],第一原理計算による原子レベルデバイス設計の現状と将来展望,（東北大金研）○川添良幸
10 [J20],ケモメトリックスが拓く設計・予測の世界,（豊橋技科大）○船津公人
16 [J02],tDNA の系統的検出,（山形大工）工藤喜弘・金谷重彦・○木ノ内誠
18 [J03],ヒトゲノムのエキソンとイントロンの識別,（山形大工）工藤喜弘・金谷重彦・木ノ内誠・○坂井孝光
20 [J04],情報化学システム CGS の開発(7)化学反応速度論的微分方程式系の符号化と速度論的シミュレータ,（日本情報化学システム）○内野正弘
22 [J05],JCICS の分析を中心とした情報化学の計量文献学的研究,（図書館情報大）○小野寺夏生
24 [J06],JST における高分子データベースの開発－IUPAC 構造基礎名の自動発生 Phase1－,（科技団研究基盤情報部）飯室茂・○前田知子・（三菱総研システム科）高枝佳男・長阪匡介
26 [J07],マイクロソフト ACCESS 上の質量スペクトルデータベース II,（日本アステック・筑波研究学園専・アイエヌジェイ）六車裕孝・仲久保正人・○前田浩五郎
28 [J08],化学物質のリスクアセスメントシステムの開発,（日本化学工業協会）○花井荘輔
30 [J09],インターネット上の反応データベースシステム-3-,（神奈川大理）○中山尭・上野山敦史・兼子崇・柳沢和博
32 [J10],インターネットにおける SDBS-NMR,（物質研）○早水紀久子・矢部篤子・柳沢勝
34 [J12],光合成反応中心における電子移動に関する理論的研究,（物質研）○北尾修・青木孝造・（電総研）建部修見・関口智嗣
36 [J13],TS-1/H_2O_2/PhOH 酸化反応活性種生成におよぼす溶媒構造の効果,（宇部興産）○後口隆・八尾滋
38 [J14],ケミカル・ハードネスを用いた電荷移動を伴う分子シミュレーション手法の検討,（旭硝子中研）○高田章
40 [J15],QM/MM-vib 法に基づいた ab initio MD 法の開発と水溶液内反応への応用,（広島大院理）○相田美砂子・（阪大産研）山高博・(PNNL) Michel Dupuis
42 [J16],ナフタレン陽イオンを触媒とする水素分子生成反応,（静岡大理）○徃住貴顕・萩原紀子・寺田典弘・（静岡大工）石田俊正・（静岡大理）相原惇一
44 [J17],リチウム含有遷移金属酸化物の構造特性と電子状態に関する計算化学的検討,（東北大院工）○鈴木研・小野津崇之・近江靖則・高見誠一・久保百司・宮本明・（日本化学工業）菊池政博・山崎信幸・三田宗雄
46 [J18],ダイヤモンド膜の表面反応に関する計算化学的検討,（東北大院工）○田村宏之・周慧・高見誠一・久保百司・宮本明・（無機材研）蒲生西谷美香・安藤寿浩
48 [J19],量子分子動力学プログラム'colors'の開殻系への拡張,（東北大院工）○高見誠一・山田有場・田村宏之・久保百司・宮本明・（広島国際学院大工）今村詮
50 [J21],3 次元的分子数値化法 FRAU の特性値を識別子とした試薬の自動分類と機能予測,（科技団さきがけ研究 21、理研）○佐藤寛子・（豊橋技科大）船津公人・（お茶大）鷹野景子・（理研）中田忠
52 [J22],ニューラルネットワークによる化学物質の安全性の予測,（物質研）松本高利・○田辺和俊
54 [J23],X 線回折を用いた地下岩石情報の可視化,（一関高専）○貝原巳樹雄・大岡靖典・（帝国石油）金田英伯
56 [J24],有機電子論の数学的裏付けとその限界,（お茶大理）○細矢治夫
58 [J25],シュウィンガー・ダイソン形式による超重原子の理論,（政策研究大学院大）○松浦弘幸・（産業医科大）中野正博
60 [J26],分子力学法と分子動力学法による長鎖脂肪酸単分子膜の研究,（大阪電通大）○橋口聡・藤田岩男
62 [J27],ProteinDF によるタンパク質全電子計算と電子トンネリング過程,（九工大情報工）○佐藤文俊・吉廣保・岡崎功・上田尚学・保田慎一郎・恵良信・時枝浩司・佐藤洋子・柏木浩
64 [J28],酸化物エレクトロニクス材料のハイオーダーエピタキシー機構の解明,（東北大院工）○久保百司・稲葉祐策・小野津崇之・高見誠一・宮本明・（東工大院総合理工）川崎雅司・（東工大応セラ研）吉本護・（科技団戦略研、東工大応セラ研）鯉沼秀臣
66 [J29],シリコン酸化膜における応力特性の計算化学的

検討,（東北大院工）○山田有場・黒川仁・遠藤明・高見誠一・久保百司・宮本明

68 [J30],サファイア基板上における GaN 薄膜初期成長の計算化学的検討,（東北大院工）○小野津崇之・稲葉祐策・高見誠一・久保百司・宮本明・（住友化学）家近泰・前田尚良

70 [JP01],情報化学システム CGS の開発(8)－正規 4 次グラフの生成、符号化、対称性認識およびデータベースの構築について,（日本情報化学システム）○内野正弘

72 [JP02],二節部分グラフによる IUPAC 名の生成,（京都工繊大工芸）○安代容子・藤田眞作

74 [JP03],XyMML (XyM Markup Language)－構造式のコミュニケーションのためのマークアップ言語,（京都工繊大工芸）○藤田眞作

76 [JP04],有機合成設計システム AIPHOS における戦略部位の優先順位付け手法の開発,（住友化学）○田中章夫・（豊橋技科大）船津公人

78 [JP05],有機合成設計システム AIPHOS-KOSP の開発(2),（第一製薬製薬技研）○佐藤耕司・（豊橋技科大）船津公人

80 [JP06],化学物質生体影響データベース,（科技団）○志村和樹

82 [JP07],化学物質生分解性予測システムの開発,（化学品検査協、阪大院薬）○廣松康一・（FQS）増本茂和・（化学品検査協）矢可部芳州・（阪大院薬）西原力

84 [JP08],生物情報統合データベースシステムの構築－新しい発想に基づいた生物情報管理法－,（医薬分子設計研）○福田美紀・瀧川有紀・豊田哲郎・板井昭子

86 [JP09],錯体・有機金属化合物の双極子モーメントのデータベース作成(続報),（日赤看護大）○山崎昶

88 [JP10],立体化学の規範的コード化法の開発とコンホマーの識別,（理研）○越野広雪・（理研、科技団さきがけ研究 21）佐藤寛子・（豊橋技科大）船津公人・（理研）鵜澤洵・中田忠

90 [JP11],Circular permutation を取り扱うことのできる構造局所アラインメント法,（生物分子工学研）○廣池隆明・藤博幸

92 [JP12],二次元相関分光法による昇温脱離分析データの解析,（豊橋技科大）○杉田記男・阿部英次・（電子科学）宮林延良

94 [JP13],量子化学計算によるリチウムイオン電池材料の設計,（物質研・融合研）松本高利・長嶋雲兵・○田辺和俊

96 [JP14],ライノウィルス外殻蛋白質の 700 ピコ秒の分子動力学計算,（北里大理）○米田茂隆・（北里大薬）米田照代・梅山秀明

98 [JP15],トライボロジーに関する計算化学的研究,（東北大院工）○周慧・平野喜久・田村宏之・高見誠一・久保百司・宮本明

100 [JP16],Dual Ensemble Molecular Dynamics (DEMD) 手法の開発とゼオライト膜による気体分離への応用,（東北大院工）○小林泰則・森戸英明・水上浩一・久保百司・高見誠一・宮本明

102 [JP17],タンパク質内電子移動グラフィックス,（九工大情報工）佐藤洋子・上田尚学・佐藤文俊・柏木浩

104 [JP18],タンパク質全電子計算プログラム ProteinDF におけるオブジェクト指向技術と分散並列処理,（九工大情報工）○吉廣保・佐藤文俊・柏木浩

106 [JP19],III-V 族窒化物系半導体の結晶成長過程に関する計算化学的検討,（東北大院工）○稲葉祐策・小野津崇之・高見誠一・久保百司・宮本明

108 [JP20],ヘプタフルバレンにおける擬 Jahn-Teller 効果の MCSCF 法による解析,（山形大教育）○豊田東雄・（三重大工）小関史朗

110 [JP21],第一原理計算による新規メタノール合成触媒の理論設計,（東北大院工）○坂原悟・遠藤明・高見誠一・Belosludov Rodion・久保百司・宮本明

112 [JP22],遺伝的アルゴリズムを用いる 1 本鎖コラゲンモデルの安定構造探索,（近大理工）○髙橋紘一・田中克裕

114 [JP23],超高速分子軌道計算専用機 MOEngine の開発,（大正製薬創薬研）○高島一・北村一泰・（北教大教育）小原繁・（島根大総合理工）網崎孝志・（九大院システム情報）村上和彰・（電総研）早川潔・（富士ゼロックス）山田想・稲畑深二郎・宮川宣明・（物質研）田辺和俊・（融合研）長嶋雲兵

116 [JP24],分子の電子特性計算プログラム HAM/3 の修正,（信州大繊維）○藤本徳之・成田進・渋谷泰一

118 [JP25],Ab initio ペア近似法による巨大分子計算プログラムの開発,（国立衛研・生工研・富士総研・RWCP・阪府大）○中野達也・神沼二眞・上林正巳・佐藤智之・秋山泰・北浦和夫

120 [JP26],ウレタン化反応のアミン触媒機構の解析,（花王）○山下修・小澤忠広

122 [JP27],C-13 化学シフトテンソルを利用したβ-ジケトンエノールの分子構造解析,（京大院理）○今城文雄

124 [JP28],フラーレン分子の局所的反応性と HOMO-LUMO エネルギー間隔の関係,（静岡大理）○相原惇一

126 [JP29],分子動力学法によるスチレン-エチレン共重合体のガラス転移温度計算,（電気化学工業中研）○戸木田裕一・鈴木茂・岡本彰夫・（ナノシミュレーションアソシエーツ）桑島聖

128 [JP30],ケモメトリックスによるプラスチック廃棄物の判別,（物質研・富山県工技セ・オプト技研・富士通・島津製作所・日産自動車）○田辺和俊・松本高利・佐伯和光・天野敏男・上坂博亨・鈴木康志・岡田行雄

130 [JP31],ニューラルネットワークを用いたフロン代替化合物の物性推算、および、新規化合物の逆設計,（旭硝子）○山本博志・（RITE）浦田新吾

132 [JP32],ニューラルネットワークによる高分子の物性の予測,（物質研）○田辺和俊・松本高利

134 [JP33],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(3) －カウンタープロパゲーションを用いた候補のクラスタリング－,（豊橋技科大）○棚田東作・荒川正幹・船津公人・（三井化学）西村竜一

136 [JP34],Multiway 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,（豊橋技科大）○荒川正幹・船津公人

138 [JP35],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,（図書館情報大）○中山伸一・（Sheffield 大）Peter Willett・（図書館情報大）吉田政幸

140 [JP36],低分解能質量スペクトルにおける部分構造識別関数構築のための変数選択手法の検討,（豊橋技科大）○吉田浩士・船津公人・（Tech. Univ. of Vienna) K. Varmuza・（Univ. of Genoa) R. Leardi

142 [JP37],カスケードモデルによる定性的構造活性相関,（関学大情報センター）○岡田孝

144 [JP38],コンピュータ集約型検定法の一般化加法モデルへの適用と応用,（阪大院薬）○高木達也・（阪大薬）渡里智恵子・（阪大院薬）宮田幸治・（阪大薬）黒川絵美子・（阪大医）藤原英明・（阪大遺伝情報実験施設）黒川顕・長谷川義高・安永照雄

146 [JP39],学習順序に依存しない自己組織化法の開発,（山形大工）○阿部貴志・金谷重彦・工藤喜弘・木ノ内誠・大平賢

148 [JP40],SALS による数値計算曲線のカーブィッティング－多段階プロトン解離平衡の精密解析－,（山形大理）○加藤良清・（長岡技科大工）山田明文・（山形大工）小野寺準一・（山形大理）鵜浦啓

150 [JP41],インターネットを活用する「立体化学」独習システムの試作,（神奈川大理）竹内敬人・（広島大理）吉田弘・（創価大）守谷崇・○伊藤眞人

<u>第 23 回情報化学討論会</u>(2000,10,26-27)京都リサーチパーク

1 [特別講演 KJ],Chemo-Bioinformatics and Comparative QSAR,（Pomona College）Corwin

Hansch
2 [特別講演 JK],化学情報システムの現状と将来ーインターネット時代を迎えて,(化情協) ○千原秀昭
4 [J01],The Use of Crystallographic Data to solve Real Problems in Drug Design and Other Applications.,(Cambridge Crystallographic Data Centre) Stephen J. Maginn
6 [J08],化学構造からのデータマイニング,(関学大情報メディア教育セ) ○岡田孝
8 [J18],計算機化学による有機反応経路の追跡,(奈良教育大) ○山辺信一・山崎祥子
32 [J02],情報化学システム CGS の開発(10)-CVReF グラフ符号巨大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
34 [J03],情報化学システム CGS の開発(11)-計算機言語 Language Л の開発状況,(日本情報化学システムズ) 内野正弘
36 [J04], Multi-Layered Cyclic Fence Graph(MLCFG)群の同相関係の解析,(お茶大人間文化) ○夏蒂彦、(お茶大理) 細矢治夫
38 [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・(TACC) 塚本啓一・小島功
40 [J06],JST 高分子データベース PoLyInfo-高分子のデータモデルー,(JST) ○塩野圭介・前田知子・飯室茂・間下健太郎・(MRI) 長阪匡介・高枝佳男・吉成泰彦・関田大吾・松田和宏
42 [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ー,(JST) ○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
44 [J09],化学物質の毒性の予測,(物質研) ○田辺和俊・松本高利
46 [J10],分子の構造活性相関解析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)の開発ーペリラルチンの疎水性パラメータ LogP の予測ー,(お茶大院人間文化) ○高橋梨紗・(お茶大理) 細矢治夫・(融合研) 長嶋雲兵
48 [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
なし [J12],情報化学と佐々木愼一先生,(豊橋技科大) 阿部英次
50 [J13],ヒトの mDNA 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
52 [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
54 [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
56 [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
58 [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
60 [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
62 [J20],色素増感太陽電池に関する理論的研究,(物質研、東大院工) ○北尾修・(物質研) 小川哲司・青木孝造・荒川裕則
64 [J21],水溶液における有機化学反応への ab initio MD 法の適用,(広大院理) ○相田美砂子・(阪大産研) 山高博・(PNNL) Michel Dupuis
66 [J22],シリカガラスの圧密化と無定形他形(polyamorph),(旭硝子中研) 高田章
68 [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
70 [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・(東大院工) 中野晴之・平尾公彦
72 [J25],大規模系のための汎用分子動力学統合システム TACPACK2000 の開発ーその 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・(名工研) 小川浩・(大工研) 田中真悟・香山正憲・(融合研) 寺倉清之・(富士通) 南多善・(富士通九州 SE) 吉嶋秀明・(富士通) 紙谷希・三井崇志・立川勉
74 [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
76 [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
78 [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
80 [J29],計算振動分光学ー密度汎関数法に基づいた約 500 種の化合物の振動解析,(広島大院理) ○吉田弘・武田久美・岡村潤子・江原明人・松浦博厚
82 [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
84 [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
86 [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
88 [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
90 [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
92 [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
94 [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
96 [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
98 [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
100 [JP10],XyM Java-XyM Notation の Java による実装,(京都工繊大工芸) ○田中伸也・藤田眞作
102 [JP11],反応知識 DB を用いた副反応評価システムの開発,(三井化学計算科学室) ○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
104 [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
106 [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,(国立衛研) ○中野達也・神沼二眞・(生工研) 上林正巳・(富士総研) 佐藤智之・(筑波大) 稲富雄一・(電総研) 秋山泰・古明地勇人・(融合研) 長嶋雲兵・(阪府大) 北浦和夫
108 [JP14],水クラスター$(H_3O^+(H_2O)_n$、n=1-5)におけるプロトン移動についての理論的研究,(広島大院理) ○三宅敏子・山根庸平・相田美砂子・(阪大産研) 山高博・(Pacific Northwest National Lab.) Michel Dupuis
110 [JP15],水クラスターイオン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
112 [JP16],CH…π相互作用を考慮した結晶力場の開発,

（豊橋技科大工）福井正和・後藤仁志・小貫慶昭・大澤映二

114 [JP17],2、2'-架橋ビスジメドン類における大環状水素結合,（京大院理）○今城文雄・（島根大総合理工）藤原隆二

116 [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

118 [JP19],mannose-binding protein の糖鎖選択性に関する理論的研究,（東海大電算セ）○合田-日向寺祥子・井上靖・（東海大工）水落次男・（NEC 基礎研）高田俊和・（お茶大理）細矢治夫

120 [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,（広島大院理）○吉田智喜・西村友宏・相田美砂子・（理研）M. Gromiha ・ F. Pichierri ・皿井明倫

122 [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

124 [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

126 [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

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

130 [JP25],炭素材料の振動構造に関する理論的研究,（京大工）○加来賢一・張彰鉉・佐藤徹

132 [JP26],大環状ムスクの多配座解析,（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

134 [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

136 [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

138 [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 σ 電子のみで形成できるか?,（明薬大）溝口則幸

140 [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

142 [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－,（名大人間情報）○吉田俊介・（中京大情報）安田浩司・鬼頭良彦・鈴木孝彰・秦野やす世・宮崎慎也

144 [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 SE）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・（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・（名工研）小川浩・（大工研）田中真悟・香山正憲・（融合研）寺倉清之

146 [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,（阪大院薬）○宮田幸治・（阪大薬）西村枝里子・（阪大院薬）岡本晃典・黒川絵美子・田中優子・（阪大遺伝情報実験施設）黒川顕・安永照雄・（阪大医）藤原英明・（阪大院薬）高木達也

148 [JP34],有機化合物の蒸気圧推算,（旭硝子）山本博志

150 [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

152 [JP36],Kohonen ネットワークと Multiway PLS 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

154 [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・船津公人・（三井化学）西村竜一・（アイセロ化学）神村基和

156 [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,（RITE）○浦田新吾・（旭硝子中研）入澤潤・（RITE）玉井良一・黒河勇治・（物質研）関屋章

158 [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・江間義則・（豊橋技科大）船津公人

160 [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

162 [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

164 [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

166 [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の試み,（サイファージェン鎌倉研）○有國尚・斉藤賢治

情報化学討論会講演要旨集 著者索引

記載形式　著者名,巻-ページ

排列：JIS コード順（第二水準の一部は分かりやすい位置に再配置してあります。）

A-Z

ア

イ

◆部会記事

部会役員会・委員会報告

平成１３年度第２回拡大編集委員会議事録

日　時：平成１３年４月２３日（月）１６時～１８時半
場　所：化学会館　３階　図書情報センター内
出席者：時田澄男，高田　章，船津公人，大和田智彦，坂本直紀，高畠哲彦，中山伸一，清水弘一

議事に先立って，情報化学討論会総目次のチェック作業を行った。

議事内容

（１）第２４回情報化学討論会について

高田委員より，今後のスケジュールについて説明があった。要旨集の体裁についてはA4版で２ページとした。討論主題は、「化学教育・学習システム」の区分を追加し、合同セッションは「学際的な広がりの中の情報化学と構造活性のクロスオーバー」というタイトルとした。

船津委員より，講演要旨集のJ-STAGE収録について説明があった。冊子体と電子体の要旨が同一のものになるよう，船津委員と矢野委員で要旨の集め方を検討することとした。

時田委員長より，第２５回の予定について，東京地区で行う方向で構造活性相関と協議中である旨説明があった。

第２４回情報化学討論会の予算案が提出された。

（２）CICSJ Bulletin Vol.19について

高田委員より，CICSJ Bulletinの今後の予定について説明があった。No.3は予定していた「(仮) 黎明期の日本の情報化学」が間に合わないため，No.4に予定していた情報化学討論会の総目次と著者索引の特集とし，６月初旬の発行予定とした。巻頭言は中山委員，編集後記は高田委員が担当する。No.4の「(仮) 黎明期の日本の情報化学」については，高田委員が工藤元委員から担当を引き継ぎ，現在１４名から執筆受諾の返事が来ているという説明があった。７月中旬の発行予定とし，巻頭言を高田委員，編集後記を坂本委員が担当する。「(仮) 黎明期の日本の情報化学」がNo.4にシフトしたため，「第２４回情報化学討論会特集号」はNo.5とし，９月中旬に発行予定とした。なお講演概要・プログラムを８月末までに取り揃える様，矢野委員に依頼することとした。編集後記は高畠委員が担当する。No.6以降の企画については，今後の検討課題とした。

（3）その他

清水部会担当よりJSTからのJCACのChem Portへのリンク契約承諾依頼について説明があり，承認された。なお，JCACのChemcal Abstractsへの採録について確認することとした。

過去数年分のCICSJの電子化について，坂本・高畠両委員が次回委員会まで検討することとした。

（4）次回委員会の開催について

次回の拡大編集委員会は７月２３日（月）１５時から開催することとした。

（※　その後、７月２５日（水）１５時から開催に変更した）

以上

第２４回情報化学討論会

主催　日本化学会情報化学部会

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

協賛　教育システム情報学会

会　期：平成１３年１１月７日（水）～９日（金）

会　場：徳島大学蔵本キャンパス〔徳島市蔵本３-庄町１〕

交　通：JR 徳島駅前バスターミナル１番乗り場より市バス 1,4,17,19 系統，「医学部前」下車後すぐ

特別講演

1）西本　吉助（大阪市大名誉教授）「IT 時代の量子化学」

2）細矢　治夫（お茶の水女子大）「私の構造活性相関」

討論主題

(1) 化学情報学(化学論理学，情報検索，DB コンピュータネットワーク，CG，グラフ理論，反応設計など)

(2) 理論化学・計算化学(MO，MM，MD，MC，各種シミュレーションなど)

(3) ケモメトリックス及びそのソフトウェア(ニューラルネットワーク，ファジィ，カオス，遺伝的アルゴリズム，構造物性相関，データマイニングなど)

(4) 化学教育・学習システム

(5) その他情報化学に関するもの(コンビナトリアル・ケミストリー，遺伝情報，環境ホルモン情報など)

(6) 学際的な広がりの中の情報化学と構造活性相関のクロスオーバー(構造活性相関シンポジウムとの合同セッション)

発表形式　口頭(25 分または 15 分，討論 5 分を含む)またはポスター

発表申込　7 月 18 日(水)締切〔必着〕。WWW にて行う。詳細については文末の URL をご覧下さい。

講演要旨　9 月 28 日(金)締切〔必着〕。A4 判用紙で和文または英文 2 ページ，英文半ページ。執筆要項は発表申込受理後にお知らせします。

参加登録予約申込　9 月 28 日(金)締切〔必着〕。WWW にて行う。参加登録および送金方法などの詳細については文末の URL をご覧下さい。

参加登録費　(構造活性相関シンポジウムと共通，要旨集合本 1 冊を含む)〔一般〕予約 8,000 円，当日 9,000 円　〔学生〕予約 3,000 円，当日 4,000 円。要旨集前送希望の場合は郵送料 1,000 円を別途申し受けます。

懇親会　(構造活性相関シンポジウムと合同)　11 月 8 日(木)ホテルグランドパレス徳島にて。会費：〔一般〕予約 6,000 円，当日 8,000 円　〔学生〕予約 4,000 円，当日 6,000 円

連絡先　770-8506 徳島市南常三島町 2-1 徳島大学工学部知能情報工学科　矢野 米雄

TEL: 088-656-7495，FAX: 088-623-2761　E-mail: cics24-desk@is.tokushima-u.ac.jp

URL: http://www-chemist.is.tokushima-u.ac.jp/cicsj24/

（ご都合により WWWをご利用になれない方は，上記連絡先までお問い合わせ下さい）

◆部会行事

第13回ケモメトリックスワークショップ

商品開発力と消費者満足度向上への最新感覚計量学手法とケモメトリックス手法

(Institute of Food Research, Reading, England) Dr. H.J.H. MacFie

主催　日本化学会情報化学部会

会　期　2001年11月2日（金）10〜17時、懇親会 17〜19時

会　場　日本化学会会館会議室　（定員80名）

（101-0062 東京都千代田区神田駿河台1-5、Tel: 03-3292-6161）

プログラム

1.マーケットにおける商品テスト

消費者が選んだ品質表現用語および多国語表現

官能評価施設での予測性が高く正確な評価

2.商品機能の最大化

細分化したマーケットにおける商品官能特性の最適化

商品の機能を最大化する官能特性と嗜好の関係づけ

3.成功へ導く商品機能とマーケティングの統合

消費動機チェイン分析によるマーケティングと官能評価の関係づけ

消費者の期待:パッケージと商品の共同開発コンセプト

4.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、10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

編集後記

本号では情報化学討論会の総索引をお届けします。総索引の校正作業に参加しましたが、諸先輩方の発表タイトルを読み合わせしている時、つい内容にも目が行ってしまいました。

最近の討論会の発表内容も23年間にわたる歴史の流れの中でルーツを辿ってみると、今まで見落としていた視点が見つけられるかもしれません。討論会予稿集は化学会館3階の化学図書・情報センターに保管されています。索引を見て興味を持たれた予稿論文はぜひお手に取られて読んでみられることをお勧めいたします。

初期の頃の手書き原稿からは著者の個性あるいは思いが強く感じられます。最近コミュニケーション面でのEメールの功罪が世間では議論されていますが、客観的な論理展開が重要である研究論文においても、著者の気持ちあるいは微妙なニュアンスという情報が読み手に伝わることで相互理解が一層進むように思われます。「情報」という観点で捉えてみると、人類の長い歴史の中で培われた、芸術作品に代表されるアナログ情報をIT技術と融合させてもっと発展できないものかと思います。国際化が進むなかで、アメリカに代表されるlow context文化と日本に代表されるhigh context文化をどのようにうまく融合させていくのかという文化的側面も関連してくるように思えます。

世の中では「ＩＴ」が時代のキーワードとなっていますが、CICSJ総索引及び討論会総索引を眺めてみると、時代に先駆けて「情報」の名を関する学会として精力的に活動されてきた諸先輩方の力強い足跡が残されていることがわかります。今後も化学の分野において有用な情報量を増やす時代の先端を走る工夫と、独創的な手法開発による情報の質向上を一層進めていくことで、社会に大きなインパクトを与えていく情報化学でありたいと思います。

ところで、CICSJでは特集とは別に、部会員の皆様からのご意見等を「部会員の声コーナー」として随時掲載させていただけるようにしました。情報化学に関するご意見等は部会事務局までお寄せください。

(A.T.)

CICSJ Bulletin Vol.19, No.4, August 2001

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：黎明期の日本の情報化学─新しい世紀に繋ぐこと─

「黎明期の日本の情報化学―新しい世紀に繋ぐこと―」を特集するに当たって

旭硝子（株）中央研究所　　高田 章

akira@agc.co.jp

情報化学部会では新しいミレニアムの節目に当たり、20 世紀の黎明期における先達の優れた遺産を継承していきたいと考え、日本の情報化学をリードして来られた諸先輩方にご寄稿いただく特集を企画いたしました。21 世紀における新たな道標を考えるシリーズ企画として、(1)部会活動及び討論会に対する部会員の皆様からのご意見、(2)企業の研究開発トップの方々からの情報化学に対するご要望、(3)関連する学協会の皆様からのご意見、(4)CICSJ 総目次・討論会講演要旨集総目次、を特集してきました。今回の特集はシリーズ企画を締めくくるものとなります。

企画するに当たって編集会議で議論された狙いはいくつかありました。もっと過去の研究成果を踏まえた上で今後の研究・議論が積み重ねられていくようにできないかということです。また情報化学の歴史の中で、研究の進め方として成功し教訓となること、あるいは失敗として反面教師と残すべきこと等、今後部会員にとって貴重な糧を発掘できないかということです。

今回の特集はいろいろな角度から示唆に富む内容となっています。まず、今までに積み残こされ今後も解決を待っている問題は何か、あるいは今後新たに挑戦すべき課題は何かという視点で考える鍵を提供してくれます。次にコンピュータの能力が不十分だった時代にご苦労された諸先輩方の姿が蘇ってきます。今後のコンピュータの能力、情報技術の更なる進展を考えるとこの分野における研究の進め方も現在とは大幅に異なったものに変っていくと考えていく必要があるでしょう。さらにこの部会のもっとも大きな財産と言っても過言ではありませんが、研究者の広がりと切磋琢磨してきた良き伝統を再認識させられます。

今回ご寄稿いただいた以外にもたくさん情報化学に関する知的財宝が眠っているのではないかと思います。特集をお読みになられてぜひ追加でご寄稿いただける方がいらっしゃいましたらぜひ原稿を事務局までお寄せください。続編は「会員の声」のコーナーに随時掲載させていただく予定です。

最後になりましたが、ご多忙な中、大変貴重な思い出を執筆していただいた方々にこの場をお借りして厚くお礼を申し上げたいと思います。本特集は昨年度まで部会役員を務められました山形大学工藤喜弘先生のご発案による「温故知新」のアイデアがもとになっています。発案・企画・執筆候補者への打診まで進めてくださいました工藤喜弘先生のご熱意無くしてはこの企画は実現しませんでした。厚くお礼を申し上げたいと思います。

JICST日本語化合物辞書の開発

科学技術振興事業団、荒木啓介（工学博士）
araki@jst.go.jp

開発当初から15年にわたって携わった標題のテーマにつき総括し、諸氏の参考に供したい。

1．開発の背景

科学技術のほぼ全分野を対象とするJICST科学技術文献データベースは、主としてシソーラスにより索引されてきたが、化学では化合物構造に基づく索引が必須であり、そのための基本辞書を検討してきた。1981年度から始まった科学技術庁の振興調製費による、化学の専門データベースをつなぐ情報ネットワークシステムの構築では、中央のオソリティー辞書として当初予定されていたCASのRegistry Fileが1年間のテストにしか貸与されないことになり、日本独自の辞書開発が急遽浮上した。

2．目標設定

分子構造を画面入力し名称情報を別途追加したり、新たな学習が必要なWLNコード法(Wiswesser Line Notation)などに頼ることなく、一種の人工言語であり、化学者なら基本的な素養があるはずの有機化合物体系名のみを入力し、計算言語学的に解析し構造を組立てる。この方法は省力化が見込まれ、人事異動にも対応できる可能性が高い。英語名と並んで日本語の名称もサポートする。当時のCAS Registryには欠けていた、分子構造の立体化学的表現を正しく反映し、質的には優位に立つ。

3．開発結果

4年の歳月と、辞書作成側および検索システム側で5億円以上の経費をかけ、当初の目標、あるいはそれ以上の成果が得られた。例えば、IUPACに基づくほぼ全ての有機化合物名を解析し、R/Sまたはα/βの立体符号を解釈して、立体特異的な結合表を作る。この中には、例えば4,4'-オキシビス(4,1-フェニレン)ビス酢酸　のような同一要素集合型の名称、スピロ環系や橋架け環系の組立、ステロイドやテルペンに対するノルやホモなどによる変形、3文字のアミノ酸記号列の記述によるほぼ全てのタイプのペプチド構造の組立などを含む。検索システムも立体特異的な構造サーチや表示が可能で、当時JICSTを訪問したCASのWikington所長は、じっと黙って腕組みして見ていた。人手で用意したシステム内部の解析辞書は約4万で、解析・組み立てし登録した化合物は今では１４０万を越える。命名法の解析・組立アルゴリズムとプログラムは、２０年経た今でも基本的に不変であり、新しい骨格系に対してはその部分のみを解析辞書に追加すれば済む。また、人が理解し命名することを前提とするIUPAC命名法には、プログラム処理によると不備あるいは曖昧な点も見つかっており、命名法の見直し・厳密化にも寄与している。

4．反省点など

意志疎通の不備などから、検索システムがJOISの文献検索システムと繋がらず、文献に索引された化合物情報が、なお名称ないしそのフラグメントでしかサーチできない。特殊法人特有の組織・人・予算的な制約やCASに対するコンプレックスなどが事態の改善を阻害している。そうこうしているうちに、JOIS自体が消滅し、JICSTファイルをCAS Messengerに搭載する状況に追い込まれてしまった。なお、本開発はJ. Chem. Inf. Comput. Sciに投稿し、Vol.31,No.3に掲載されたが、化学が専門の米国人に英文チェックを依頼するなど万全を期したにも拘わらず、受理の１７ヶ月後に、受理日程が7ヶ月以上も後のＣＡＳによる立体化学的改良についての報文の次号に、やっと掲載された。グローバルな情報流通の進展に際しても、単に米国にすり寄るのではなく、情報システム、データベースや専門雑誌なども日本独自のものを保持しておくことが必須である、というのが筆者の変わらぬ見解である。また、敢えて誤解を恐れずに言うと、情報システムは全分野を対象とするのではなく、今後は欧米のように専門分化すべきであると考える。化学以外の人は化合物情報の重要性の理解が少なく、そこに多くの人と予算を注ぎ込むことを肯定しない。さらに言うと、情報システムはもはや国の組織ではなく、専門的な理解の深い学協会主導で構築・運営することが重要と考える。この点においても、２１世紀の日本化学会の役割は大きいと思う。

コンピュータの化学への利用と情報化学の推移

ビクトリア大学（カナダ）社会学部非常勤教授　工学博士　飯坂譲二
jiisaka@office.geog.uvic.ca

はじめに：化学を専攻しなかった私が化学との関わり合いを持つようになったのは、１９６０年代の終りごろであった。大学院で原子物理学を専攻した後、当時のコンピュータ会社に就職してからである。その頃は、現在のパソコン程度のコンピュータが大型コンピュータであり、天気予報、原子力関係を中心に科学に必要な大型コンピュータは世界中に何台もいらないのだとさえ言う人がいた時代である。化学への利用も、他の科学分野での利用と同様、まさに、コンピュータは「計算機」であり、数値計算に強い人が、コンピュータのエキスパートとして君臨していたものである。私はコンピュータの科学分野での新しい利用法の開発と同時にその推進をはかるという課題を背負わされていた。高エネルギー素粒子反応の泡箱写真の解析に始り、それがきっかけで、今もってコンピュータによる画像解析の研究を続けることになってしまった。

分析化学の自動化―ラボラトリー・オートメーションの始り：　１９６０年代の後半から１９７０年代前半にわたってコンビナートを中心とする重化学工業の急激な発展に伴い、いろいろな分析化学の自動化に携わることになり、これが化学との接点となった。分析化学用機器とコンピュータとを結合したシステムで化学物質の同定を効率的に行おうというわけである。X 線結晶構造解析、質量分析計、なかでも大きな需要があったのは、ガスクロマトグラフであった。今でこそ、分析化学の機器自体がインテリジェント化され、マイクロ・チップなどのディジタル回路が組み込まれるようになっているが、当時は化学計測機器の出力信号を AD 変換し、直接科学用計算機に取り込むシステムであった。当時のメモリー容量も３２KB、６２KB といった容量であり、データを保存する記憶媒体であるディスク容量も昨今の PC のように１０GB のオーダーではなく、１MB がやっとの時代であった。時間経過とともに、刻々と入るデータを保存するためには、それなりにデータ形式の簡潔化や、データ転送の効率化が要求された。信号の解析処理とは異なる情報技術特有の課題があることを認識したのもこの頃である。また、コンピュータ・メーカーが製造していない分析化学用の機器をコンピュータに接続すること自体、一つのチャンレジであった。私は、メモリーないのビットの位置を右から数えるか、左から数えるか、各機器メーカーによって異なることを知らなかったので、機器とコンピュータを接続する時に、私はｘビットの出力が低いと思い、機器側にｘ番目のビットの電圧を上げるように指示したら、相手側は別のビットに電圧を上げ、とうとうシステムを壊してしまったという苦い思い出がある。　また、パンチ・カードとプリンターのみがコンピュータへの入出力であったときに化学記号の入出力も問題であった。特に有機化学の亀の子記号を開発されたばかりのグラフィック・ディスプレーで表示しようと試み、未完のままになってしまった。データ収集を中心とした分析機器のオンライン化が一息ついた後で、諸分析機器からの情報を総合し、分子構造の自動決定、今でいう分析化学のエキスパートシステムを目指したが、アイディアはよかったものの当時使えるコンピュータ言語のレベル、使えるコンピュータの制約から陽の目を見ることなく、私は、画像処理を中心課題にした課題から人工衛星画像を用いた地球環境の分野に移っていってしまい、今日に至っている。

これからの情報化学に期待するもの：　１９００年代では、化学工業はいろいろな有益な物質の生産とその生産性の向上を目的として化学情報を扱ってきた。そのお陰で人間社会の生活が豊かになってきたことは確かである。一方、気がついてみると、人間社会によかれと思ってつくったいろいろな化学物質が、直接的にも間接的にも地球の複雑な循環システムを通じて、人間を含む生物全体に影響していることが明らかになっていることも事実である。揮発性有機化学物質が住宅環境に、また環境ホルモンの世代を超えた人類への影響も懸念されている。化学物質が地球上の生物にどのように関わりがあり、特に食物連鎖など地球の生態系や循環系を通して、化学物質が、どこに、どのような形態で存在しうるのか、個々の特性に関する情報に加えて、それらの存在を追跡しうる情報ベースが必要になろう。分子医学など周辺分野を総合した化学情報のプール、例えばバイオインフォマチックなどの分野との整合など、これからの時代に向けての整備が望まれる。

データベース・紙から計算機への経験

大貝　明

1．データベースの構築

情報検索の仕事にコンピュータの利用がごく普通のこととなったのは、1960年代から1970年代のはじめにかけて、二次資料のコンピュータの編集の技術が確立し、その結果、機械可読ファイルとして情報検索に利用できるようになってからである。当時は利用者が磁気テープの形で購入し、自前のコンピュータにかけるバッチ検索の時期である。当然、流通していない社内限りの資料のテープは無かった。

1960年代のこの時代に、地方の小さい火工品の研究所で研究報告書のデータベースを作った[1]。

地方の研究所から東京の電子計算機室に通っては、プログラムを作り、データの入力をパンチ室に頼んで帰り、数週間後に再び上京するということをしていた。パンチ室では、インプットシートの文字（もちろん漢字はなく、英数カナであるが）を紙テープに打ってから磁気テープに直していた。

コンピュータの能力も現在とは比較にならないほど脆弱でデータ量も検索時間も満足できるものではなかったが、むしろ、このシステムから生まれたＫＷＩＣインデックスとか、著者索引類の利用価値が高かったことを覚えている。

2．社内用二次資料の発行

では、この時期になぜ小さい研究所でこのような当時としては大きいシステムを作ることが出来たのだろうか、そのベースになったのはこの地方の研究所から社内の同部門の技術者あてに出していた社内用二次資料の発行である。文献上に出てくる担当の領域の情報を収集し整理して二次資料の形にまとめて定期的に発行していた[2]。

情報源としては、勿論多くの学協会誌，雑誌等の一次情報ではあるけれど、カバーする範囲と信頼性で最も重要であったものは、Chemical Abstractsである。Chemical Abstractsの書誌事項の表記方法、二次資料の編集など、小さいけれど一応印刷物としての形を取る上での見本となった。また、索引語の体系は、文献情報の検索シテテムを新しく設計構築したとき、そのまま参考にした。この時の知識と経験が後々情報管理の仕事に長く役に立っていたと思う。

3．パンチカードの設計

この社内用二次資料を発行するために用意した道具がハンドソートパンチカードである。このパンチカードは一般の文献情報と研究所発行の社内情報の両方作っていたが、データベース化したのは後者のみである。

ハンドソートパンチカードを使っているところは今ではおそらく無いと思うが、このパンチカードを使うきっかけとなったのは“化学の領域”の紹介記事だったとおもう。普通のパンチカードであれば一孔一意のへり孔カードであるが、文献情報のような索引項目の多い場合は対応できないので、２列の孔の上にマトリックスの枡の目をおいて多次元的に索引語を割り付けてその組み合わせで検索できるようにした当時としては複雑なパンチカードを作った[3]。データベースの設計にあたってこのカード上の索引語がそのままキーワードとして登録できた。

4．情報技術のプロジェクトへの発展

やがて、地方の研究所から本社の技術管理部に籍を移して、分野の違う部門の研究所の技術情報管理にも係わるようになっていた。そこでは、1970年代後半に公衆回線を使ったテータベースのオンライン検索の利用は勿論、他の部門のデータベースの構築、例えば医薬品の営業サービスにも供される単体のインデックスの作成、主に染料・中間体を対象とした化学物質登録検索システム、化学物質の危険性評価と一体化した物質安全データシートなどを手掛けた。

これらのプロジェクトは技術情報をとりまく環境（使う道具の進歩と情報を利用する技術者とか経営環境）の変化の両方が相まって大きく様相は変化しているが、いずれのシステムの場合も情報の蓄積と検索・利用のための加工という原点では共通していて、これを目に見える紙の形から経験したことがその後の仕事の基礎となり影響を受けたと思っている。

1)　大貝　明，ドクメンテーション研究21(2)41-51(1971)
2)　大貝　明，ドクメンテーション研究12(1/2)15-23,34 (1962)
3)　木下，石川，大貝，第15回全国能率大会（全日本能率連盟）ｐ284-289(1963.6.)

おおがい　あきら（元日本化薬株式会社）〒808-0113 北九州市若松区大字払川696

Cyclometalation 反応は、何故反応が速く進行し、何故生成物が安定なのか？

東京工業専門学校　大前　巌
vyq02326@nifty.ne.jp

計算機化学において重金属元素を含む有機金属化合物の計算は、パラメーターが不足して計算が困難であると聞いている。1964 年に合成研究を開始した有機金属化合物は有機スズであった。有機金属化合物は、有機カリウム化合物や有機ナトリウム化合物のように不安定な化合物で、空気中で発火する物質と理解していた。

しかし、実際に合成した。有機スズ化合物は無色透明の極めて安定な立方体の結晶であった。赤外吸収スペクトルから、５員環の環状構造形成による安定化の仮説を研究室で発表した。すると類似の研究をしていた他の３人の研究員から、一斉に激しい反論を浴びせられ驚いた。幸い、反論は１週間で次第に弱くなり消えた。その後、この仮説は分別結晶で単離に成功した２種の立体異性体の X 線結晶解析で証明できた。

このような５員環構造（C-C-C-Y-M(M = metal; Y=N,P, As, O, S, etc.))の有機金属化合物は、合成反応が異常に進行し易く合成が容易であり、異常に安定である。このために５員環を形成できる可能性のある化合物は次々と合成に成功した。魔法のように威力のあるこの特性を研究室の中では５員環構造論（Five-membered Ring Structure Theory）と呼んでいた。

この性質は有機スズ化合物だけでなく、広範囲の金属元素（約５０種）の有機金属化合物についても同じである。各種の配位子原子について論文を纏め、Chem. Rev., Angew. Chem. Int. Ed., Coord. Chem. Rev. などに総説として発表した。1986 年には Elsevier 社からの依頼で、有機スズ化合物を発端とし有機金属化合物の５員環構造を中心にした分子内配位化合物、Organometallic Intramolecular-coordination Compounds として発表した。この本は、Cyclometalation や Orthometalation に関する本として理解されていたようであったが、実質的には５員環構造形成反応の異常性を紹介したものである。その後、ごく一部の紹介として、1989 年の Organotin Chemistry（Elsevier 社）および 1998 年の Applications of Organometallic Compounds（John Wiley & Sons 社）でも付記した。

５員環構造論は、当時、研究室内だけで呼んでいた単なる経験則であるが、なんとか理論的にも証明したいと、その後の会社で計算化学者に共同研究をお願いした。その結果、有機スズ化合物に関する５員環化合物については 1995 年春季年会で発表でき、論文として 1998 年の化学工業 6 月号で纏めることができた。

証明したいのは、何故安定であるのか、どの程度安定であるのか、５員環構造（C-C-C-Y-M(M = metal; Y=N,P, As, O, S, etc.)を有する化合物は、何故、環状を形成し易いのか、４員環や６員環に比べ、どの程度の違いがあるのか、何故、広範囲の金属元素に共通なのか等の理論的証明である。この構造は基本構造なので、実際に広範囲の反応や構造に関連した内容である。したがって、明確に証明できれば、何百何千もの反応や構造についても明らかにしたことになる。

しかし、その後、全く進展が無いまま今日に至っている。この５員環構造論の証明に向けて論文を作成したいと願っているが､実質的には30年以上経過した現在に於いてもそのままになっている。この機会に、本稿で共同研究の賛同者を呼びかけたい。

おおまえ　いわお　OMAE　Iwao
連絡先　〒350-1317　埼玉県狭山市水野335-23、TEL/FAX　042-598-1932

我が国のStandard Reference Data Programを夢見た頃

図書館情報大学　小野寺夏生
onodera@ulis.ac.jp

ここに記すのは、昭和40年代後半から50年代にかけて科学技術庁が行った物性データ集積に関する調査研究事業のことである。筆者は、この中ほどの時期に同庁に出向したときその担当であった。その頃の記録はもう役所には残っていないし、役所側からそれを語れる人間も筆者以外に考えられないので、これを伝えるのも義務のように思え、この機会を利用させていただくことにした。なお、ここではすべて当時の組織名称を用い、現組織名を一々書き添えることはしない。

1　事業の起こりと進展

それまでにも、スペクトルデータ（赤外データ委員会、東工試)、高圧流体データ（京大、神戸大等)、化学工学データ（化学工学協会）等、いくつかのデータ集積活動が個別的になされていた。 科学技術庁では、これらの活動を総合的に推進するため、昭和47年度の庁内予算に各種物性データの収集・整理・分析・評価に関する調査研究費を設けた。この予算の獲得には、米国のNational Bureau of Standards (NBS)によるStandard Reference Data活動が刺激剤となり、故島内武彦博士、故大杉次郎博士等、学界からの強い働きかけがあったようである。それにしても、庁費として年千数百万円の予算獲得に成功した同庁担当者の努力は並大抵のものではなかったろうと、後に自分が担当者になったとき当時の予算説明資料を目にして思ったことを覚えている。

この予算により、その後10年以上にわたって各種の物性データを集積するための調査と実際の集積活動が行われた。対象となったデータは、NMR（代表者藤原鎮男博士)、高圧流体物性（代表者故大杉治郎博士、後に故蒔田董博士)、相平衡物性（代表者平田光穂博士)、質量スペクトル（代表者故佐々木慎一博士)、NQR（代表者千原秀昭博士）等10以上があったと記憶する。

2　研究者と科学技術庁の意識

この予算がデータ活動に関心を持つ研究者にある程度歓迎され、科学技術庁の担当者もその効果的運用に心を砕いたのは事実であるが、実施する研究者の側にはいろいろな不満もあった。その理由は次のようなところにあった。

(1) 各グループに渡される予算の形式は委託費であり、形式上にせよ成果は科学技術庁に帰属するものとされた。

(2) 1グループあたりの予算は年150万円程度の少額で、期間も最長5年に限られた。

(3) 建前は調査研究費であって事業費ではないので、実際のデータ収集、蓄積はテストデータのような名目でしかできなかった。

科学技術庁側もこのような問題指摘を理解はしていたが、庁費として継続的事業費を獲得することは絶望に近い状況であった。科研費のような補助金であれば上記(1)の問題点は回避されるが、当時から補助金削減の財政方針は厳しく、これも絶望的であった。

3　その後の展開と若干の所感

科学技術庁では、その後日本科学技術情報センター(JICST)に物性データベースの事業予算を付け、JICSTから学協会等への委託によってデータ集積を図る方針を採る。データセンターに経費を直接交付する案よりこの方がはるかに予算がとり易いという、役所にすれば当然の判断であった。確かに、これによってJICSTといろいろな研究者・学術団体との協力関係が生まれ、いくつかのデータベースがある程度の規模で作成され、公開された。筆者はJICSTでこの事業にかなり長く携わり（残念ながら諸々の事情により平成5年度で幕を閉じた)、それに対する感慨と反省もあるが、これは別の機会に譲りたい。

ここで述べた科学技術庁の施策は十分成功したとは言い難いが、そこに参加したグループの活動が、我が国における化学物質データ活動の源流となり、それら研究者間の連帯意識を産んだことは確かであろう。情報化学部会の設立にも少なからぬ影響を与えたと考えられる。

最後に、ここでお名前を挙げた先生方を含め、困難な事業に挑まれた先達の方々のご努力に敬意を表するとともに、筆者個人としてもお世話になったことに感謝の意を捧げたい。また、当時をご存じの方に、筆者の記憶違いや一方的思い込みがあればご指摘をお願いしたい。

おのでら　なつお　ONODERA, Natsuo　　連絡先　〒305-8550 つくば市春日1-2 図書館情報大学

我が国の Standard Reference Data Program を夢見た頃

図書館情報大学　小野寺夏生
onodera@ulis.ac.jp

ここに記すのは、昭和40年代後半から50年代にかけて科学技術庁が行った物性データ集積に関する調査研究事業のことである。筆者は、この中ほどの時期に同庁に出向したときその担当であった。その頃の記録はもう役所には残っていないし、役所側からそれを語れる人間も筆者以外に考えられないので、これを伝えるのも義務のように思え、この機会を利用させていただくことにした。なお、ここではすべて当時の組織名称を用い、現組織名を一々書き添えることはしない。

1　事業の起こりと進展

それまでにも、スペクトルデータ（赤外データ委員会、東工試）、高圧流体データ（京大、神戸大等）、化学工学データ（化学工学協会）等、いくつかのデータ集積活動が個別的になされていた。 科学技術庁では、これらの活動を総合的に推進するため、昭和 47 年度の庁内予算に各種物性データの収集・整理・分析・評価に関する調査研究費を設けた。この予算の獲得には、米国の National Bureau of Standards（NBS）による Standard Reference Data 活動が刺激剤となり、故島内武彦博士、故大杉次郎博士等、学界からの強い働きかけがあったようである。それにしても、庁費として年千数百万円の予算獲得に成功した同庁担当者の努力は並大抵のものではなかったろうと、後に自分が担当者になったとき当時の予算説明資料を目にして思ったことを覚えている。

この予算により、その後 10 年以上にわたって各種の物性データを集積するための調査と実際の集積活動が行われた。対象となったデータは、NMR（代表者藤原鎮男博士）、高圧流体物性（代表者故大杉治郎博士、後に故蒔田董博士）、相平衡物性（代表者平田光穂博士）、質量スペクトル（代表者故佐々木慎一博士）、NQR（代表者千原秀昭博士）等10以上があったと記憶する。

2　研究者と科学技術庁の意識

この予算がデータ活動に関心を持つ研究者にある程度歓迎され、科学技術庁の担当者もその効果的運用に心を砕いたのは事実であるが、実施する研究者の側にはいろいろな不満もあった。その理由は次のようなところにあった。

(1) 各グループに渡される予算の形式は委託費であり、形式上にせよ成果は科学技術庁に帰属するものとされた。
(2) 1 グループあたりの予算は年 150 万円程度の少額で、期間も最長 5 年に限られた。
(3) 建前は調査研究費であって事業費ではないので、実際のデータ収集、蓄積はテストデータのような名目でしかできなかった。

科学技術庁側もこのような問題指摘を理解はしていたが、庁費として継続的事業費を獲得することは絶望に近い状況であった。科研費のような補助金であれば上記(1)の問題点は回避されるが、当時から補助金削減の財政方針は厳しく、これも絶望的であった。

3　その後の展開と若干の所感

科学技術庁では、その後日本科学技術情報センター（JICST）に物性データベースの事業予算を付け、JICST から学協会等への委託によってデータ集積を図る方針を採る。データセンターに経費を直接交付する案よりこの方がはるかに予算がとり易いという、役所にすれば当然の判断であった。確かに、これによって JICST といろいろな研究者・学術団体との協力関係が生まれ、いくつかのデータベースがある程度の規模で作成され、公開された。筆者は JICST でこの事業にかなり長く携わり（残念ながら諸々の事情により平成5年度で幕を閉じた）、それに対する感慨と反省もあるが、これは別の機会に譲りたい。

ここで述べた科学技術庁の施策は十分成功したとは言い難いが、そこに参加したグループの活動が、我が国における化学物質データ活動の源流となり、それら研究者間の連帯意識を産んだことは確かであろう。情報化学部会の設立にも少なからぬ影響を与えたと考えられる。

最後に、ここでお名前を挙げた先生方を含め、困難な事業に挑まれた先達の方々のご努力に敬意を表するとともに、筆者個人としてもお世話になったことに感謝の意を捧げたい。また、当時をご存じの方に、筆者の記憶違いや一方的思い込みがあればご指摘をお願いしたい。

おのでら　なつお　ONODERA, Natsuo　　連絡先　〒305-8550 つくば市春日 1-2 図書館情報大学

Kollmanの遺したもの

産業技術総合研究所　古明地勇人

http://staff.aist.go.jp/y-komeiji/

今年の5月25日、カリフォルニア大学サンフランシスコ校のPeter Kollman教授が、癌で亡くなられた。享年57歳。

Kollmanグループは、ソフトウェアAMBERの開発と応用を通じて、世界の生体分子シミュレーションをリードして来た。筆者は1990年より分子動力学シミュレーション（MD）によるタンパク質・核酸の研究を始めたのだが、'95年頃まではAMBERを使っていた。現在は自前のソフトを使っているが、力場はAMBERのお世話になっている。

さて、'80年代の後半から'90年代の前半までの生体分子のMDの分野では、図1に示すような、「変異型タンパク質の基質結合活性を予測する」ための自由エネルギー計算が盛んであった。計算機上でタンパク質にアミノ酸置換を入れて、その自由エネルギーを計算し、変異型の結合活性を予測するわけである。筆者もAMBERと格闘しながら、トリプトファンリプレッサーというタンパク質とトリプトファン分子の結合活性を対象に自由エネルギー計算を行っていた。図1の計算がある程度できるようになったところで、頭をかすめた問題意識：

「結合自由エネルギー変化の差$\Delta\Delta G$ではなく、結合自由エネルギー変化ΔG_{bind}そのものを計算できないだろうか？」

トリプトファンリプレッサーの場合は、ΔGの実験値は約-6 kcal/molである。計算方法は、有名なBeveridge & DiCapua (1989)の自由エネルギー計算の総説に載っていた。その内容を図示すると図2になる。要は、タンパク質内と水中のそれぞれで、基質消滅の自由エネルギー変化を求め、その差を取ればよい。そして、筆者も、図2のようにトリプトファン分子を消滅させて、リプレッサータンパク質との結合自由エネルギー変化を実際に計算してみたわけである。

図1　変異型(M)と野生型(W)結合自由エネルギーの差

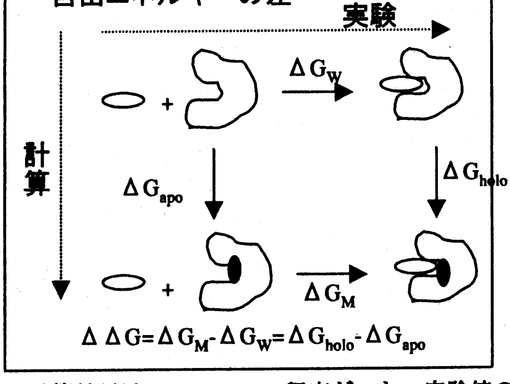
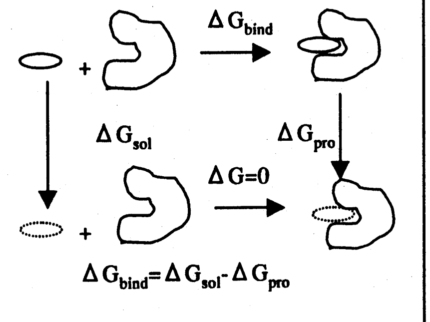


図2　結合自由エネルギー変化



計算結果は-10 kcal/mol程度だった。実験値の-6 kcal/molより大きいものの、まあ良しとすべきだったろう。だが、ここで立ち止まる。統計力学によれば、分子と分子が会合する場合には、並進と回転のエントロピーが効いてくる。つまり、トリプトファン分子が、タンパク質に結合す

る前はかなり自由に並進回転運動ができるのに、結合するとその自由が大幅に減少する。これが図1と図2の決定的な違いなのだが、その場合の自由エネルギーのロスを簡単なモデルでざっと見積もると、無視できない値であった。詳しい議論は省くが、他にもいろいろ疑問点が湧いてきて、当時の計算方法で正確に計算できるとはどうしても思えなかった。結局、計算結果は論文にせず、お蔵入りにしてしまった。

ところが、そのすぐあと、Miyamoto & Kollman (1993)により、図2のスキームによるアヴィヂン：ビオチンのΔG_{bind}の計算結果が発表されて、話題を呼んだ。もっとも、
「ビオチンみたいなでかいものを消すなんていう変化、100 ps かなんかで追えるわけない！」という否定的な意見も多かったようだ。筆者が気にしていた、並進・回転のエントロピーに関する疑問も出た。だが、その後、Gilson et al. (1997)により、図2の方法でも、補正項を入れれば、理論的には正確な値が計算できることが示されている。どうせ、今日に至るまで、ΔG_{bind}の決定的な計算法は出ていないのである。筆者の計算結果も、思い切って論文にしてしまえば良かったかな、と、少し後悔している。問題提起ぐらいにはなったかも知れないのだから。

Kollman グループの挑戦的なシミュレーションと言えば、最近の、1マイクロ秒のフォールディングの計算も話題も呼んだ(Duan & Kollman, 1998)。256CPU の CRAY T3D と T3E を合計4ヶ月占有し、36 残基のタンパク質（ヴィリンヘッドピース）の溶液中でのフォールディング初期過程を MD 計算して、αヘリックスの核ができるのが確認した。この計算についても批判がある。8 Åという短い距離でのカットオフ計算、いかにもフォールディングしそうな初期構造から出発した、などなど。だが、誰か一度やってみないことには始まらない。その最初の一歩を躊躇なく踏み出すところが Kollman たちの偉大さだと思う。

賛否両論を巻き起こすような挑戦的な計算を発表する一方で、Kollman グループは、MD の精度と信頼性を上げるための地道な努力も怠っていない。たとえば、1995 年頃より、核酸の MD の結果が爆発的に進歩した。これは、AMBER 4.1 に導入された、クーロン力の高速計算法 Particle Mesh Ewald 法(Darden et al., 1993)と、高精度の分子軌道計算を用いて決めなおされた AMBER95 力場(Cornell et al., 1995)によるところが大きい。

開拓者は、批判を恐れず、思い切ってブルドーザーで道をつける。その無類の楽観性で、生体分子シミュレーションの可能性を広げて来た Kollman 教授の、早すぎる死を悼む。筆者などは、哀しいことに、その後ろから、石ころをどけつつ、とぼとぼと歩いていくのが精一杯である。

【引用文献】

Beveridge, D. L., DiCapua, F. M. (1989), Ann. Rev. Biophys. Biochem. 18, 431.

Cornell, W. D. et al. (1995), J. Am. Chem. Soc. 117, 5179.

Duan, Y., Kollman, P. A. (1998), Science 282, 740.

Gilson, M. K. et al. (1997), Biophys. J. 72, 1047.

Miyamoto, S., Kollman, P. A. (1993), Proteins 16, 226, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 90, 8402.

York, D. M., Darden, T. A., Pedersen, L. G. (1993), J. Chem. Phys. 99, 8345.

創薬地図作成のための「論理的方向感覚」を養う

大鵬薬品〔株〕・創薬センター　多田幸雄

tada@taiho.co.jp

論理的なドッラグデザインを自分なりに始めようと思った１９７５年頃はコンピュータも満足にない、思えば日本における情報化学の黎明期でもあった。それを考えると、インターネットも発達した現在では、あらゆる創薬関連技術を駆使すれば創薬の成功確率を高めることができる筈である。

私の考えでは、創薬とは信頼性の低いデータも含まれている生物活性データを情報として、周りをよく見渡し化合物展開の進むべき方向を決める事である。そして、その創薬地図を作る方法として「情報化〔科〕学」と定量的構造活性相関(QSAR)解析法を学び、論理的な創薬を目指して来た。これまでの経験からドラッグデザイン行う際にQSAR解析を利用することで、常に進んでいる方向を客観的に評価し、間違ったと判断した場合に引き返すポイントを時間的、空間的に意識することができると思っている。そのうちに「創薬ナビゲーター」ができないとも限らないが、標的分子の情報が得られる様になった今でもやはり、創薬における「論理的方向感覚」を養うことが大切と考えている。

１．化合物の物性情報をどれだけ知ってドラッグデザインをしているか？

当たり前のことだが、作用点と作用様式が同じ化合物を一群とし、これに呼応した分子レベルの活性データがあって初めてQSAR解析によるドラッグデザインが真価を発揮する。しかし、作用点もその様式も異なるかも知れない化合物群を対象に、細胞レベル、動物レベルのデータをも解析せざるを得ないのが現実である。そこでまず、化合物の顔と生物活性データを注意深く見比べ、QSAR が適用できそうな群に化合物を分けられる物性を探すことから始める。クラスター解析を使えば多次元空間での群分けも可能であるが、最終的には自らの判断で複数解の中から一番正解に近いと思われる解を選ばなければならない。そこで成否を決めるのは、対象化合物の物性情報をどれだけ知っているかだと思う。化合物情報は単に紙に書いた構造式だけという定性的（主観的）構造活性相関に終止するより、客観的なQSAR解析を実行した方が論理的に意志決定できる。またこの経験は他でも役に立つ。

2. 水に溶けない化合物は反面教師！

化合物が水に溶けない場合、すかさずDMSOを使って溶解させスクリーニングデータを取る。それが創薬のやり方である人もいる。しかし、私はDMSOで出されたデータは頼まれても解析しない事にしている。わざわざ、false positiveデータを抱え込むことはない。溶けない（溶解度10μg/ml以下）化合物は溶ける化合物を作るための反面教師にすれば良いと思っている。ほとんどの場合、活性を上げようとすると必ず疎水性は高くなり溶解度は落ちる。だからこそリード化合物として、できるだけ水に溶けやすい化合物を選ぶことが成功の鍵と考えている。初めから疎水性で活性を稼いでいる化合物は性質が悪い。活性が少しぐらい高いからと云ってそんな化合物に騙されてはいけない。

ただ ゆきお TADA, Yukio　趣味：山歩き(で道に迷うこと) 連絡先：〒357-8527 飯能市美杉台 1-27

化学情報の三大資産

(社) 化学情報協会　千原秀昭
hchihara@jaici.or.jp

20 世紀からの最大の遺産を選ぶとなると，十人十色だろうと思う．結局は今の仕事と関心をもつテーマに関係する事柄を選ぶことになる．私なら 1. データベース　2. 結合表　3. インターネット　の三つを重要な成果として選ぶ．どれが欠けてもいまの化学情報システムは成り立たないからで，21 世紀にもさらに進歩して形が変わることはあっても，その基本概念は受け継がれていくと思う．

化学構造検索が 1980 年に CAS ONLINE の名で公開されたときは興奮を覚えたものだった．いまは STN International の Registry File としてパソコンを端末機として広く使われているが，当初は，STN Express もなく，検索のためには Hewlett-Packard の特定のコンピュータを端末機に指定し（JOIS も最初は特別の漢字端末機を必要とした），検索システムはコマンド方式だけで，CAS はミニコン（PDP11）を多数ならべて力ずくの並列処理をやった．日本からこれを使うために化学情報協会と CAS との間に専用通信回線を引いて，日本のユーザーに提供した．化情協のコンピュータ室にならべたモデムが昼夜を問わず忙しく働いていたのを鮮明に思い出す．いまはインターネット経由で，いとも簡単に検索ができる（STN on the Web）．1980 年には登録物質数 500 万くらいでファイルサイズが 1 GB というので，その大きさは当時は群を抜いていた．ノートパソコンでも 30GB のディスクがふつうに載っている現代の若い方々には想像もできないだろう．

Registry File は構造式を中心とする構造ファイルと物質名を中心とする名称ファイルからできている．前者はもちろん“結合表”が生命だが，これも単に結合状態を表すマトリックスから，ユニークな結合表，さらに立体構造を記述できる結合表へと進歩した．結合表という単純な概念でも，それがなかったら化学情報処理は進まなかったと思う．

データベースの発達も必須であった．単にデータを一次元的に並べた初期のデータベースから，リレーショナルデータベース，オブジェクト指向型といろいろなアイディアが出され実用になった．初期のデータベースでも，CAS は将来を先取りした設計をしたので，その後の検索技法の進歩に応じられる形のものができた．

インターネットについては駄言を費やすまでもないだろう．化学に限らずすべての情報システムで，インターネットのリンク機能を使っていないものはないほどに，情報流通の世界の次元を広げた功績はノーベル賞ものだと思う．

データベース，結合表，インターネットは 20 世紀から 21 世紀へと確実に引き継がれる資産であると思うし，情報化学(この名前はあまり適当でないが)の分野で多くの人が化学情報処理・検索・流通の面に関心を持ってほしいと思う．

―情報化学との出会いの偶然と必然―

徳島大学薬学部　中馬　寛
hchuman@ph.tokushima-u.ac.jp

私は，決して情報化学の黎明期に育ったわけでもないし，情報化学という比較的新しい分野を切り開いたという世代ではない。それはもう一つ前の世代であり，我々の先輩諸先生の方々にあたる。しかしながら，たとえどんなに成熟した分野であっても，そこで新しい方向を模索する情熱をもった研究者の姿を見出すものである。そのような意味では，私も私自身の情報化学の黎明期もあったかもしれない。はじめてこの分野の研究を聴く機会は，今から約20年近く前の情報化学討論会と記憶している。それは構造活性相関シンポジウムに参加したとき，情報化学討論会が同時開催されていたという偶然である。そのころ，私自身は新しい薬物分子設計の新しい試みとして生理活性分子の3次元立体構造に基づいた方法を考えていた頃であった。当時の情報化学の分野で討論されていた分子のトポロジカル表現と物性の関係など，そのような研究分野があることの驚きと，それらが薬物分子設計におぼろげながらも応用できるのではないかなどと考えたりしていたことが思い出される。当時のことが少しずつ浮かんできたが，それは今の私なりの表現では分子構造間の類似性の問題となる。類似構造をもつ分子は類似の性質を示し，その性質の大小は，類似性の尺度のようなものに比例しているという訓練された化学者が持っている一種の感性がある。それを分子構造からどのように表現するかは情報化学分野の問題となり，それがそのとき以来情報化学に私が想いを寄せている大きな理由の一つである。自由エネルギー変化の線形則の世界もまさにこの感性の洗練された知識体系であり，構造活性相関の基盤もここにあると理解している。類似性概念の探求とその定量化表現は構造活性相関分野での新たな体系化と発展に有用であり，その行きつく先にはまだ誰も見たことのない景色が広がっているのではという見果てぬ夢をその出会い以来見つづけてきた。

情報化学との出会いからしばらくの間はその分野に想いを持ちながらも，言わばアウトサイダーであった。そんなわけで情報化学部会のお世話させていただくことになろうとは考えもしかった。私が情報化学部会の副部会長の任を仰せつかった時期（1995～1997）の情報化学を思い出しいてみると幾つかの事柄が浮かんでくる。一つは情報化学討論会への理論・計算化学分野の研究者のそれまで以上の積極的参加であった。その当時でも「情報化学」という言葉のかもし出す独特のニュアンスのせいか，他の分野から見るとそれが若干の障壁になっていたのではないかと思える。そして，そのころに出会った情報化学分野の方々から情報化学は化学の重要な基礎学問分野の一つであり，化学構造情報に関する幅広い研究分野であることを教えていただいたことに感謝している。二つ目は時代の流れである。従来までのバイオ～創薬に加えて物性予測，機能性材料設計等の分野での応用研究の展開である。情報化学が研究室から飛び出て，産業基盤技術の一つになっていくことに，情報化学がそこまでの実力を備えてきたという喜びと同時に多少の驚きの感を持ったものである。故吉田部会長らの強い指導力で開始された高分子材料設計の産官学協同プロジェクトもその一つである。一方，そのときも現在も分子構造の類似性の問題を含めた黎明期以来の種々の中心課題が形や姿を変えながら，情熱をもった研究者の挑戦を待ちつづけている。

私自身は定量的構造活性相関の研究領域を基盤としているが，最初に記した情報化学との出会いは実は必然であった。日本の情報化学の黎明期に，情報化学討論会と構造活性相関シンポジウムの二つの学術集会が同時開催されて以来現在もその形をとっている。それにはそれなりの歴史的意味と若干の偶然があったのではなどとぼんやりと考えていたが，今年度の構造活性相関シンポジウムをお世話させていただくこととなって，実は二つの分野が学際的関係によって強く結びついていたことを実感として理解しつつある。それは悩みつづけていたクロスワードパズルの最後のところが解けたときのような感じに例えられるかもしれない。そして，二つの研究分野の相互関係の将来までを見とおしていた両分野の先輩諸先生方の慧眼に気づき，先輩諸先生方に対する感謝と尊敬の想いがますます強くなっていることを記して終わりとしたい。

ちゅうまん　ひろし　CHUMAN Hiroshi　（〒770-8505 徳島市庄町 1-78　徳島大学薬学部）

黎明期の日本の情報化学 －新しい世紀に繋ぐこと－

日本新薬 創薬研究所 丹羽 朋子
t.niwa@po.nippon-shinyaku.co.jp

始めに

古い記憶を辿っていくと、未完成に終わったテーマ、論文にまとめずに放置したため陽の目を見る事のなかったテーマ、長い間考え続けているにもかかわらず、なかなか良いアルゴリズムを見出せないテーマ等が頭の中を過ぎる。しかしながら、これまでの自分の仕事を振り返った時に最も心残りなのは、独創的な仕事が上手く出来なかった事である。本企画からは少し外れるが、どうして出来なかったか、あるいはどうすれば出来る可能性があるかを考えてみた。

過去からの教訓

分子グラフィックスが殆ど無縁であった時代から、始めて分子グラフィックスでレセプターとリガンドの複合体を回転しながら見た時、あるいはMD計算による蛋白の動きを見た時の感激は大きいものであった。ただ、分子グラフィックスを見ているだけでは、なかなか細かいところまでは解りにくく、分子グラフィックスと定量的構造活性相関（QSAR）を組み合わせたようなものがあれば、非常に便利と考えた人は少なくなかったと思う。私自身もそう考えたにもかかわらず、難しそうなので何の努力もせずにいた。その後、3D-QSARであるCoMFAが発表された時に、驚きと共に一種の挫折感を味わった。なぜCoMFAにたどり着けなかったかを考えると、グリッド・データを統計処理することを思い付かなかったことがある。しかしそれ以上に、統計処理が出来ると思わなかったことがあり、その裏にはPLSを含めての統計処理に関する知識の欠如があった。大学時代に、『自分の考えをモデル化するための数学的な力がなければ、仕事に限界が来る』と言う話を聞いた記憶があるが、残念ながらまさにその典型例となっていた。

解析データの変化

過去と比較したときに真先に気付くのは、コンピュータ・パワーの飛躍的な進歩に加えて、データの量と質の大きな変化である。Bioinformatics の分野でも膨大な遺伝子データの処理に格闘中であるが、Chemoinformatics の分野、特に分子設計においても、コンビ合成とHTSの進展により、データ量が急増しており、荒い膨大な量のデータから、迅速に意味のある情報を引き出すための、新たなブレーク・スルーが強く求められている。

新しい世紀に繋ぐこと

CoMFA以後の独創的な研究においても、それまで適応されていない数学的処理がなされている場合が多いが、新たなブレーク・スルーにも、適確なモデル化のための数学的な素養が必要なのは言うまでもない。大学の教育でも、統計解析、人工知能、情報理論、グラフ理論等を取り入れて頂ければ、新しい道が開ける可能性が高い。遅れ馳せながらも、新たに学び始める事も大切である。本特集の主旨とは必ずしも合致しないが、過去を振り帰り、新しい世紀に繋ぐこととして、もう一度数学的な素養の強化を見直す時期に来ていると考える。

また、コンピュータを多用したセレーラのゲノム解析を挙げるまでもなく、新しい分野の研究の多くは、異なる分野の境界領域から生まれている。今後もChemoinformaticsやBioinformaticsの独創的な仕事の裏には、新しい発想と異種分野の融合が必須であり、自分の専門分野以外にも広く目を向け、新たな潮流を常に捕らえておく事を心がけたい。

化学情報をめぐる断章

日本化学工業協会　　花井 荘輔
hanai@pc.highway.ne.jp

まとまったものを書ける立場でもないので，身辺雑話をメモしておきましょう．

私とこの分野(化学における情報の有効利用システム化)との関係は，1976年11月から当時仙台の宮城教育大におられた佐々木愼一先生のところで6か月勉強したことに始まります．その3か月前，富士写真フイルムの足柄研究所で開発研究に限界を感じ図書室に逃げ込んだ私に「アナログ情報のデジタル処理」というテーマで研究を始めるよう指示された平山健三さんの「佐々木研究室は日本の第一人者だから」というのは事実だと思います．

あの年の仙台は30年ぶりの寒さで震え上がりましたが，自動構造解析における構造のcanonical表現の必要性やCHEMICSの構造組立て論理BLDが理解できたこと，4月に多くの花々が一斉に咲き出すのを楽しめたこと，足柄に帰って「ソフトボールは上達したね」と誉められたことなど多くの成果がありました．何回か往復した東北本線で，雪に埋まる車窓風景を堪能しながら「さて帰ったら(平山さんは早期定年で退職され，梯子を外された状態で)なにをしようか，この状況でスペクトルからの自動構造決定に取組むのは無理だ，社内化合物の構造式と物性のデータベースかな」と考えたことを，昨日のように思い出します．

平山さんには，情報管理のありかたについて短い時間ながら多くを学びました．「知識の整理」という著作にその一端が紹介されていますが，その神髄の具体的成果は「ＵＶスペクトルデータ集」の部分構造表現と数値索引にあるでしょう．カードの時代の仕事です．

当時化学構造の処理は，WLNから入るのが常道でしたが，結合表とグラフィックス表示を選択するのに迷いはありませんでした．宮川正美さんという有能な共同研究者とシステム管理部の支援を得て，富士通のグラフィックソフトT-GSPの勉強から始めました．当時の我々のシステム環境では，汎用大型システムのTSSでCOBOLで書くという選択肢しかなかったのですが，これは多くの人をびっくりさせたようです．数年でSPHINCSというシステムに結実しましたが，私は「こういうことやろうよ」と言っただけで，構造処理の化学的内容の実際はすべて宮川さんの仕事です．かなりの部分構造検索機能を実現し，その後オクタノール/水分配係数の予測システムCPACに発展させました．グラフィックスと結んだ部分構造検索という意味では本邦初演というところでしょうか．

それを合成化学の立場で見ていて興味を持ったのが藤田眞作さんです．グラフィックディスプレイ上の化学構造組立てを見てひらめきを得た氏は，あっという間にITS(Imaginary Transition Structure)という化学反応を記述する方式を生み出し，JCICS等への大量論文の生産となりました．その群論への応用は数々の新しい概念の発明となり，その著書がJACSの書評(*114*, 4018(1992))で「次世代への贈り物」と絶賛されたことは本誌で紹介しました．その少し前からcoset表現など私には理解できない領域にまで飛んでいっていましたが．「合成化学がわかっている藤田さんをこの分野に引き込んだ」ということで佐々木先生にお誉めいただいたのもその頃です．藤田さんは，なぜか化学合成だけでなく数学にも英語にも強いのです．

一民間企業の研究所で，平山，宮川，藤田という異才3人と身近に接することができたのは幸せだったと思います．

昔話はこのくらいにして，感じていることを書いてみます．

①自分のために必要なシステムを自分で作って使って楽しもう

データベースより更に研究的要素の強い構造活性相関解析システムなどでは尚更のこと，自分の研究に必要なシステムは自分で作るのが原則だと思います．他人が作った相関式では，「相関係数は？ へー，そんなに小さくていいの？」ということになります．自分の仕事に必要だけど他にはないから自分で作ったという相関式なら，相関係数が大きくなくても使います．経験を積んで改良すればよいのです．米国EPAのECOSARがその例でしょう．

自分でプログラムを作る楽しみもあります．私のささやかな経験でも，さてこれはどう処理してやろうかと白紙に処理フローを書き始める時，あるいは，最初のテストで「リーチ一発」で完勝するのを期待して待つ時の気持ちはいいものです．私の場合 fatal errors の山が出力されるのが常でしたが．システムが大規模になると，仕様を決めるだけのユーザーと指示された仕様通り作るプログラマーの間の溝が大きくなり，自分の思い通りの処理を試行錯誤しながら実現できる折角の楽しみを誰も味わえなくなる．つまらないことです．これだけコンピューター利用環境が整備・開放されながら，下手すると研究現場でもワープロや表計算ソフトのバージョンアップに追随することに追われて自作自演の楽しみを味わうチャンスを逃しているのではないかと危惧します．

②化学情報処理とは構造処理のことなり

数年前に情報化学という部会の名称で議論がありました．ここでは繰返しません．ただ，化学が物理や生物とちがうのは，原子・分子というグラフ論的構成要素を扱うことによる物質の認識・情報の伝達が基本にあることだと思います．今の教育もグラフ論的表現(２次元構造式)による知識あるいは知恵の伝達が中心です．例えば，特許では物質を「容易に加水分解する基を有する」といった自然言語を用いて表現できるわけですから，その融通無碍な物質表現を検索できるように，部分構造と自然言語，さらには図形情報とを結びつけて処理する機能は依然として重要な問題でしょう．特許なんてダサイという向きには「知的記号処理論」とでも名づければいいかも知れませんね．昨今盛んな(輸入大規模)分子軌道計算システムで分子の挙動を議論するのもいいでしょうが，どちらかといえばそれは理論化学の分野の仕事だと思います．ITとは言わずとも，知識ベース・人工知能というなら，研究対象に，人間に関係する要素がもう少し入ってもいいのではないでしょうか？

参考資料

・Kenzo Hirayama, "Handbook of Ultraviolet and Visible Absorption Spectra of Organic Compounds", Plenum Press (1967)
・構造自動決定の総説：花井，佐々木　化学と生物 *16*, 130-136, 194-204 (1978)
・SPHINCS：S.Hanai, M.Miyakawa, Anal.Chim.Acta, *194*, 37-48(1987)
・構造処理：花井，「化学構造処理」小野編「コンピュータ・ケミストリ」第４章 丸善(1988)
・S.Fujita, "Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry", Springer-Verlag(1991)

はない　そうすけ　　HANAI，Sosuke

昨年７月に富士写真フイルムを定年で退職し，日化協で化学物質のリスクアセスメントのためのシステム作りで残業しています．化学における情報の利用という意味で広くかつ奥の深い分野です．

連絡先：〒100-0013 東京都千代田区霞が関三丁目２番４号 霞山ビル

電話 03-3580-1381　　FAX 03-3580-1383

計算化学との出会いの頃の思い出

神奈川高度技術支援財団顧問，横浜国立大学名誉教授　廣田　穰　hirota@ktf.or.jp

当時京急沿線の弘明寺にあった横浜国大に助教授として赴任し間もない１９７０年代の初め頃から、私は分子軌道法の計算をやってみようと言う気になりました。私が横浜国大で与えられた最初の授業科目が「理論有機化学」であったことも一つのきっかけをつくったことは確かですが、東大の大学院生時代に長倉三郎先生の講義から受けた感銘と、その当時分子軌道計算から有機化合物の物性や反応性を予測する研究が数多く発表され、有機研究室のコロキウムなどでも盛んに取り上げられていたことが、主な動機だったと思っています。当時のことですぐ思い出すのは、少し後輩の大学院生のひとりが分子軌道法の文献紹介をしたとき、１つの数値がどうにも合点がいかないので質問したところ、「この計算はself *content* fieldによる精密な計算だから絶対間違いはない。」と頑張ったことです。「それなら仕方がない」と言ってもその意味にも気づかなかったようでしたが、後にその文献をみて確かめたら数字の写し違いでした。当時は複写機がなく図書館に行って文献を読み、重要部分を手書きで写していた時代でしたからやむをえません。とにかく、誰も彼もが、闇雲に新しい分子計算の分野を追いかけて、その華麗な成果に感動していた時代だったと言えます。

私が移った当時の横浜国大には、ＮＥＡＣ２２３０という「大型」計算機がありました。その頃東大の物理学科にはパラメトロン式の電子計算機がありましたが、国大の計算機は真空管式ということで、メモリーだけで１５０㎡ぐらいの部屋を占めていて、現在のプレハブ物置のような外観のメモリーが広い部屋に所狭しと林立している様子は壮観でした。部屋は良く冷房されていましたが、装置に近づくとムッとする暑さを感じました。この計算機でできる計算は、永年行列式の対角化ですと最大で２２行ｘ２２列がやっとでしたが、手回しのタイガー計算器を用いて行列の計算をした経験がある私は「計算機の進歩は目覚ましい」と感激し、いろいろな計算をして喜んでいました。Pariser-Parr-Pople計算は、炭素７－８個の分子でも１度に全部できないのでプログラムを３分割して計算しました。この計算機では、入力に紙テープを使っていて、これに穿孔機（パンチャー）を使ってプログラムとデータを打ち込んでいくのですが、大きなプログラムの一カ所でも誤りがあると全部つくり直さなければならず泣かされたことが思い出されます。その後、テープがカードになって部分的な修正が効くようになって喜んだのですが、今度は大きなプログラムを箱に入れて運んでいる途中で落としてバラバラにしてしまって元通りに並べるのに苦労して、紙テープのときの方が良かったと負け惜しみをいったことがありますので､私はどうも計算化学には向かなかったのかもしれません。

この計算機室は電気工学科の先生が管理しておられましたが、昭和５０年頃大学の学舎統合の際に電気工学科が先に横浜国大の現キャンパスがある常盤台地区に移り、この計算機もなくなりました。新しいキャンパスの情報処理センターでこの計算機のお目にかかったことはありませんので、多分学舎移転の際に廃棄処分になったのだと思います。化学系学科の新キャンパスへの移転は年次計画で最後になっていましたので、計算機室の方は移転までの２年余りの間私の講座の研究室として使わせて頂くことになりました。計算機のプロセッサ部分と穿孔機があった小さい方の部屋を私の教授室に使い、メモリーや電源部分があった大きい方の部屋は学生が卓球をやるのに使っていましたが、卓球台は部屋の片隅を占めているに過ぎず、面積の半分も使っていない感じでした。現在に比べると、ここでまたコンピュータの性能の向上と小型化に隔世の感を味わうことになりました。

今、私がこの原稿を書くのに使っている自宅のパソコンで大概の有機分子のＭＯＰＡＣ計算やMM計算ができ、私が計算機と出会ったときには凡そ想像もしなかった大きくて精密な計算がこんなにコンパクトなコンピュータでできるものだと感心しながら、時々企業の方などの相談にのったり計算のお手伝いをしたりしていますが、他方で先端の計算化学は私の到底手が届かないような精密化の極致に突き進んでいるようであります。

User-friendly Software の 罠

京都大学 名誉教授　藤田 稔夫

最近は 三次元 QSAR 法をはじめ QSAR 法にもいろいろな変法が考案され 医薬・農薬の分子設計にむけての活用が試みられるようになっている．また 新規の医薬開発の分野では，とくにポストゲノム時代にむけ バイオインフォーマチックスという名称で包括される新しい分野において 激しい競争が広げられている．たとえば，蛋白質,ペプチドや核酸など 遺伝子や酵素を構成する高分子の三次元モデルのための，さらに 蛋白質と 新規の医薬の候補となり得る低分子とのドッキング機構のモデルを構築するための ソフトウェアパッケージなど 新しい分野に対応する種々のプログラムの開発が非常に盛んである．また医薬の候補が 開発研究に持ち込まれてから 吸収・分布・毒性における好ましくないデータのために検討を中止せざるを得ないような無駄を省くため 開発前のスクリーニングの段階で生体内動態を予測するための，さらに農薬を含む“環境汚染物質”の内分泌撹乱作用を予測するための エキスパートシステムなど，新規の生理活性物質の構造設計法だけでなく 新しい予測技術を支援するために 様々の特色を具えたソフトウェアが User-friendly のキャッチフレーズとともに 多くのベンチャー企業から発売され，予算さえ許せば 使用の目的に応じて 自分の望むままに使い勝手のよい(User-friendly)ものを 選択することができるという 極めて恵まれた環境のようである．

果たしてこのような現状は好ましいものなのだろうか？ 深慮すべき問題を含んでいるのではないだろうか？ 筆者は 必ずしも 好ましいとは考えられないと思うのである．それは，どのような 化学的・物理化学的背景の上に立ってシステムが構築されているのか，そのシステムによって得られる結果には どのような適用範囲があるのかなどについて 充分に理解することなくソフトウェアを導入し，そのあとはマニュアルに従ってコンピューターを動かすだけで，充分に吟味をしないままの(実験的)データあるいは記述子をインプットし，それで事足れりとしてしまって，アウトプットされてきた 結果を 無批判的に受け入れてしまうという傾向がありはしないかということである．構造設計・活性強度予測にしても 動態予測にしても，システムの化学的背景およびソフトウェアとしての仕組について 予め 充分に理解することは 必ずしも易しいことではない．しかし だからといってそのままにしておくのでは さらに好ましくない結果をもたらすことがあることに留意せねばなるまい．文字どおりの User-friendly では 困るのである．User には “勉強” をしてもらいたいのである．勉強をしたうえでならば 真の意味での使い勝手のよい User-friendly ということができるであろう．

たとえば 吸収・分布・毒性・環境毒性の予測にも 活性分子の構造設計においても， log P はきわめて重要なパラメーターであり その推算法には 多くのソフトウェアが出回っている．それらのなかには log P 値を単に統計処理の対象としか考えていないようなもの， 数合わせだけに終わっていて 有機物理化学的な考え方の全く欠如しているものがある．さらに 解離性の化合物では log P ではなくて log D (D は ある pH における みかけの分配係数)を用いる方がよいとの立場から, log D 予測システムも市販されている． D の値は緩衝液中のイオン強度 および 対イオンの種類に応じて変化するので 測定条件の揃っている場合には 分子間で比較・検討することが許されるが それ自身で定数として定義され得るものではない．また log P の値には 分子内の部分構造間の相互作用に基づく成分が含まれているので 単に分子内の各原子に振り分けるようなことは意味のないことになる． 以上のような基準については 使用前に少なくとも勉強しておく必要があるのではあるまいか？

User-friendly のまま マニュアルに従ってコンピューターを動かすというようなことでは，合成化学の立場の研究者から“コンピューター解析によって 新規化合物の分子設計の道を歩き始めると極端な話が理論的には皆が同じ道を同じ歩調で歩くことになりかねない”と言った批判を受けることにもなるのである．新規化合物を分子設計するのも 動態予測を行なうのも あくまでも人間であって コンピューターではない．コンピューターは人間の作業に対する すばらしい“お手伝いさん”ではあっても，無人格物にすぎないのである．おなじソフトウェアをもちいても 解析すべきデータの取捨，記述子の選択の仕方や 例外点の処理, geometry の修飾などに対する考え方に応じて 異なった個性のある答えが返って来ることが当然なのである．さらに大切なことは，“コンピューター解析”から求められた結果をそのままの形で使用するのではなく 自分自身の あるいは 合成化学的立場の研究者の広い経験・知識に基づいて，求められた結果を修飾・改良する人間主体の積極性ではないであろうか？

わが国における情報化学の始まり

東大名誉教授　藤原鎮男

１ 始まり

情報化学の対象をＡ化学計算、Ｂ文献情報処理、Ｃ反応支援（化合物、反応設計）の三とすると、筆者はこの中のＡとＢの始まりに関わった。

Ａ：１９５３年から２年イリノイ大学のグトウスキー教授の高分解能ＮＭＲ装置の製作に参加させてもらい、５５年１月エチルアルコールのエチル基の９本の分岐線が測定出来た。世界最初の高分解能ＮＭＲである。帰国してこの装置を再現し、１９５８年に１－フッ化ベンゼンの多重線を得た。これを清水博さんが東大のＰＣ－１を借りて６－スピン系として計算した。これは分子内のオルト、メタ、パラ位電子の偏在の最初の実証例である。つまり、マリケンの分子軌道論の実験根拠を与えるものだった。残念ながら極東のこの結果は発表が遅れ(1)、世界の本流には乗らなかった。ただし、この経験は強大な計算機による実験支援の必要性を痛感させるものであり、直後に東大に転任し大型計算機センターとの接続をはかったがなかなか受け入れてもらえなかった。Ａは反応設計、化合物設計に展開して研究良好で順調である。筆者は本稿その１で今の希望を述べさせてもらった。

Ｂ：電子計算機処理による化学論文抄録のアウトプットを小生がはじめて見たのは１９６８年夏、北欧のコペンハーゲン大学の大学院生の机上だった。その時はどこの仕事か分からず（後年、米国のＮＳＦの資金によるノッティンガム大学のものと知った）、日本でも誰かやって欲しいと思った。１９６９年秋、同じことを見てきたらしい国井利泰氏が誘いに来、その誘いに一緒に関係論文の輪講を始めた。国井氏のほか、山本毅雄、少し遅れて山本穣子、小沢宏氏ら４～５名で、東大理学部の化学教室で週１回くらいの頻度で論文を読んだ。山本（毅）氏は小生のところでＮＭＲの学位論文をまとめ、ノースカロライナ大にＮＭＲのポストドクで行き帰国したところだった。彼も向こうで情報検索を見て来、これに惚れ込んでいた。小谷正雄先生もＣＯＤＡＴＡに御熱心で、時々論文を持って来て下さった。お弟子の計算屋は皆、狂乱心と言っていた。根岸正光さんは当時、経済の学生で、すでに通産省かどこかの調査団について外国を廻って来ておられ、少し遅れて参加した。その内、実際のテープでやろうということになり、文部省の手嶋晃研究助成課長の応援でＣＡＳのテープを輸入した。東大の計算機では埒があかず、郵便輸送ではテープが損傷すると心配し、山本氏が京大までテープをかついで行った。これが始まりである。

２ 情報化学（ＩＣ）か化学情報（ＣＩ）か

これの論議は日本だけではない。１９７２年にＩＵＰＡＣは仏のデュボア教授を委員長、ＣＡＳのテイト博士を副にして分科を超えた「化学情報委員会」をつくった。小生はデュボアさんに誘われてこの委員になった。委員会では正副委員長が計算機システムの在りようについて、毎日激烈に議論した。要は文献ＤＢ主体か実験データ主体かであり、デュボアは実験支援主義であり、小生もそうであった。実際の研究者にはそうだと思う。当時、日本でもＩＣかＣＩか論議された。ただし、議論は名称の抽象論で、自分の仕事に計算機をどう位置づけるかの意識は希薄に見えた。上記の分類で言えば、Ｃにあたる所で今もやることはあろう。

我々の文献ＤＢのオンライン検索は非常に早く米国も感心した。小生は、ＩＣの（Ａ）、（Ｂ）のＣＩの両方が大事だと思い、その線で努力した。とくに実験装置（ＮＭＲ、ＥＳＲ）と大型計算機のオンライン直結の研究様式の実現を期し、東大計算機センターの大型計算機と研究室のＮＭＲ装置をつないでスペクトル解析を実行した。これは研究の新方向で海外のどこより早いことだった。しかし、当時の計算屋にとっては邪魔であったろう。その反発は強く、専門の化学者も計算側なので孤立だった。しかし外国の評価は非常に高かった。とくにパリ第７大学のデュボア教授は自国にこの考えでシステムを作り、また、米国もＮＳＦが支持してくれ、シンシナチ大のハリー　マーク教授が日米セミナーを提案してきた。島内武彦氏も理解者だった。その後、展開は、大型計算機に依存しないで装置附属、内蔵の計算機でやる方向になり、小生もＰＤＰ－１１でそうした。しかし、実験支援の一発大型の計算ということは今後もあるだろうと思う。そういう場合に日本ではやはり苦労するだろう。そういうことがあってか、ともかくその後は、人々はソフトの競争やＤＢ作成の列挙になっていった。(1)S.Fujiwara & M.Shimizu, J.Chem.Phys., 32, 1636 (1962)

温故知新資料　その１：
０．１ＭＮａＣｌ水溶液における水和の計算

藤原鎭男（東京大学名誉教授）

表記のことを、どなたかやって下さらないかというのが小生の願いである。

（背景）分子空間：何故、人の血液の塩濃度は０．１Ｍ（＝生理食塩水の塩濃度）、海水は０．５Ｍで一定なのか。これは筆者の少年時代からの疑問だった。後年、これは水溶液中の水和イオンの運動のことだとし、塩分希薄時はイオンは等方性の自由運動で、濃度が増すと対イオンとの相互作用で運動が窮屈になる。この境界が問題の鍵だろうと推察した。そして、この境界でのイオンの自由運動空間を分子空間（molecular space）、Ｖc、と命名し、その実測を企図した(1)。そして、０．１Ｍと０．５ＭはＶcの上限と下限に相当することを証明した。海水の方は、米国のＮＢＳの塩水溶液の無限希釈熱の測定データを見つけ出し、０．５Ｍが、イオンの分散エントロピーと結合エネルギーが拮抗する境界であると知った(2)。データ集積／情報化学の意義！　ついで、ＮＭＲやＥＳＲでイオン運動を調べ、０．１Ｍが異方性のイオンのＶｃであると知った(3)。さらにより直接的にＶｃの大きさを実測すべく、放射線照射で架橋空間をコントロールしたポリビニルアルコールゲルを使い、Ｖｃが径１２±３Åの球と分かった(4)(5)。実にこの値の上限の１５Åが０．１Ｍに相当し、下限の～１０Åが０．５Ｍに相当する。そうなれば理論論証が欲しい。これに幸いインスブルック大学のローデ教授が協力してくれ、イオンの水和エネルギーが計算された。実際は、当時の東大、分子研では計算時間がとれず、ドイツのクレイ機を借りての仕事で、塩濃度０．５Ｍが濃厚域の分子空間であることを証明し得た(6)。この計算機料金６００万円はドイツ政府が出してくれた。文化国家だなとを思ったものである。

しかし、０．１Ｍの方は２０年前の当時では手に負えず残された。ともかく、少年の疑問は解けた。ところが、近年、ことは生合成の根幹に触れる展開になった。それで頭記の願いである。

展開／生合成反応との関連：上記の研究を続ける内、筆者らは、０．１ＭＮａＣｌ水溶液が、水と食塩の共晶化合物（ＮａＣｌ・２Ｈ2Ｏ）を形成するｏｐｔｉｍｕｍ濃度であり、さらに、この共晶体が酸素と錯体をつくり、この錯体がアミノ酸および糖のＤ、Ｌ鏡像異性体を１００％完全に分別することを発見した(7)(8)。

以上のことは、塩濃度が約０．１Ｍである生体内のタンパク質、多糖類合成反応の機作の根本に関ろう。残念ながらすでに当方はすでに足弱車で、肝心の共晶体の構造を決めることも、酸素錯体の場を計ることもおぼつかない。計算機化学の方でこれらを取り上げてくださらないかと願う次第なのである。

(1)藤原鎭男、「分子空間反応」、日化誌　８３，１１５９（１９６２）；(2)S.Fujiwara, Geochem.J., １３，２２５（１９７９）；(3)S.Fujiwara,K.Nagashima,H.Morita, & Y.Kanaoka, BCSJ,５０，２８５１（１９７７）；(4)S.Fujiwara,S.Katsumata,&T.Seki, J.Phys.Chem.,７１，１１５（１９６７）(5)T.Watanabe,T.Yahagi,&S.Fujiwara,J.A.C.S.,１０２，５１８７（１９８０）；(6)S.Fujiwara & B.M. Rode,BCSJ,５２，３２２１（１９７９）；(7)S.Fujiwara & Y.Nishimoto,
Anal.Sc.,６，７７１，９０７（１９９０）；７，６８７（１９９１）；
(8)S.Fujiwara & Nishimoto ibid.,１４，５０７（１９９８）

温故知新資料　その２：
極限条件下の電子状態の考察

藤原鎭男（東京大学名誉教授）

次のような問題をどなたか取り上げて下さらないでしょうか。

（１）背景：ＰＶＡ（ﾎﾟﾘﾋﾞﾆﾙｱﾙｺｰﾙ）水溶液を放射線照射して、架橋空間の大きさ、Ｖc，を調節できたとき、筆者は分子空間反応として、この架橋空間に極限微小の金属ないし磁石を作ることを考えた。金属性はどの程度の微粒子まで維持されるか。磁石は極限どれくらいまで小さく出来るかである（問題(1)）。大学の教官食堂でこのことを話題にしたら、即座に面白いと言われたのは物理の山之内恭彦先生で、金属電子がフエルミ統計とボーズ統計のどちらになるか見ることが出来るだろう（問題(2)）と言われ、久保亮五さんが同調した。筆者は藤原譲氏と架橋ＰＶＡゲル中にマグネタイトの合成を試みて速報（文献(1)）した。驚いたのは発表の後、国内の反響は皆無だったのに、すぐ加州大から人が聞きに来たことだった。間もなく久保さんが関連した理論考察をし、また、水銀の磁気共鳴で約１００Ａが金属の限界だとイスラエルで報告があったと聞いた。当方はその後格別の展開をなし得ず、ただし、この線に沿っての考えは続け、以下の実験をした。

（２）最少電子交換エネルギーの見積り 次のような実験結果があります（文献(2)）。架橋ＰＶＡの分子空間のCu^{2+}イオンのＥＳＲは電子交換と、核・電子相関の限界を示唆した。（問題(1)に関連）：Ｖcに希薄濃度の銅イオンを閉じこめてＥＳＲを見ると、Ｖcが大きい間は単一線でイオンが等方性運動状態にあることを示唆し、Ｖcが数Ａ（４～５Ａ）辺で$g_\perp$と$g_{//}$の異方性が発現し、また、このときｈｆｓが見られるようになる。この実験は条件をより精密に定量化して行えば、問題(1)の金属の限界の定量化が出来たであろうが、定性的な興味の範囲に終わってしまった。ついで、一次元金属モデルの作成を意図し、緑柱石（ｂｅｒｙｌ）の結晶中の中空空洞に金属をつくれば一次元の金属モデルが作れないかと考えたがこれも結局、金属作りまで行けず結晶水の解析にとどまったのであった（文献(3)）。

（３）Ｆ一統計、Ｂ一統計の検討実験：クラスレートベンゼンのＴ1解析（問題(2)関連）

ベンゼンのクラスレート化合物を作って、そのＴ1を測ったら途方もなく長い値が出た（文献(4)）。この時は束縛のない孤立ベンゼン分子の実現と感激した。このＴ1の詳細を解析したら上記の問題(2)が解決出来ると思ったのである。難しいことは分からないが、スピンがフエルミ統計によるかボーズ統計によるかの違いは、スピンが束縛条件下にある（Ｆ統計）か、ない（Ｂ統計）かのこととすると、山之内先生は孤立スピンならＢ統計だろうとされたのではないか。そう考えて筆者は、クラスレートベンゼンの陽子スピンはπ電子の影響下で一体化されたものだから孤立スピン系であり、Ｂ一統計モデルになろうと考えたのであった。ただし、当時の実験力ではＮＭＲ信号の減衰形の追跡は出来ず、そのまま了ってしまった。しかし、これはかなり、本丸に近い試料の実現だったと今も思い、頭記のことを提案するのである。

今ならスピンＦ一、Ｂ一統計のシミュレーション下のＴ1曲線を描き、より正確な実験をして、この両統計のモデルを確立することが出来るのではないだろうか。

文献(1)S.Fujiwara & Y.Fujiwara,J.Phys.Soc.Japan,17,405(1962);
(2)S.Fujiwara,S.Katsumata,& T.Seki,J.P.C.,71,115(1967);(3)Y.Sugitani,K.Nagashima,& S.Fujiwara,B.C.S.J.,39,672(1966);(4)T.Miyamoto,T.Iwamoto,Y.Sasaki,S.Fujiwara,J.Chem.Phys.,45,752(1966)

温故知新資料　その３：
ホットイオンの電子状態の計算

藤原鎭男（東京大学名誉教授）

ホットイオン：

励起原子核はホットアトムと呼ばれて定着している。化合物内に励起された電子はラジカルとこれまた定着した呼称が与えられている。クラスレート無機化合物にγ線のような電離性の放射線をあてると、生じた電子シャワーが安定成分イオンに飛び込んで低原子価原子をつくることを筆者は発見した。生成した低原子価イオンは、正常のイオン価状態の席にある異常低原子価イオンなのである。例えばＣｄＺｎ（ＣＮ）4化合物であると、カドミウムがＣｄ（Ⅱ）の代わりにＣｄ（Ｉ）になっている。これを筆者はホットイオンと命名してＥＳＲで詳細な研究をした（(1)～())。これらの系の利点は、単結晶であるので空間的には正確なパラメーターが分かっていて、励起電子スピンの特性がＥＳＲのｇ値とｈｆｓ値で分かっていることである。かつ、クラスレート格子であるので、電子スピンは孤立電子として、ポーリング以降の電子計算の格好な演習問題であると思われるのである。

筆者は大学に入って初めてポーリングが量子力学でイオン半径の計算をしたことを知り、驚き感心した。常態にないイオンの半径があるということに驚き、そういうことが計算出来ると知って感心したのである。

さてちかごろ思うのは、この異常原子価イオンは、水俣の水銀や、カドミウム問題のように、文字通りホットなことに関わることかもしれないということである。生体内の無機イオンの作用のことである。これまではこの作用の論議は正常の原子価の化学性に終始していて、化学的には踏み込んだ研究が少ないように見える。しかし、少なくも化学内で異常原子の化学知識の蓄積に努力することは望ましいことでありろうと思う。そういう意味で表記のことを挙げさせてもらった。

文献

(1)　Pd(Ｉ)：M.Nakamura,S.Fujiwara,J.Coord.Chem.,1,221(1971);
S.Fujiwara,M.Nakamura,J.Chem.Phys.,54,3378(1971);
J.Phys.Chem.,78,2136(1974),;
Pd(Ⅲ)：J.Isoya,H.Ishizuka,A.Yamasaki & S.Fujiwara,Chem.Lett.,397(1972)

(2)　Zn(Ｉ),Cd(Ｉ),Hg(Ｉ)：Y.isoya & S.Fujiwara,B.C.S.J.,45,2183(1972)

(3)　Cd(Ｉ),Hg(Ｉ)：J.Isoya,S.Fujiwara,J.Magn.Resonance.,34,377(1979)

(4)　Ni(Ｉ)：C.Amano,& S.Fujiwara, B.C.S.J.,46,1379(1973);
49,1817(1976)

(5)　Pt(Ⅲ)：C.Amano,& S.Fujiwara, B.C.S.J.,50,1437(1977)

(6)　Ir(Ⅱ)、Ir(Ⅳ)：S.Fujiwara, T.Watanabe & T.Inoue,Chem.Lett.,755(1974)

温故知新資料　その４：

藤原鎭男（東京大学名誉教授）

１検索支援化学用語クラスター作成を

情報化学が科学さらには社会に貢献し得ることのもう一つは科学用語の研究であろう。この仕事はわが国の科学史の決算であって、現代の情報科学への基本的寄与となる問題である。その意義の第一は、古くは蘭書解禁による宇田川榕菴の舎密開宗（1837)の用語つくり、明治以降の諸学会の用語造語の努力、文部省主導による学術用語の標準化の成果、こういう先人の骨折りの総まとめになることである。わが国が蘭書解禁をし、西欧の科学技術の導入を果たして今日を得た今の我々は、データーベースに蓄積された知識の検索利用を思うがままに享受し得る状況にある。そこで問題なのは用語の標準化である。分野による不揃いがあって検索洩れを避けることが出来ない。このことを非常に憂慮し解決に努力されたのは故大塚明朗先生であった。ＣＡＳのＤＢの機械処理が可能になったとき、筆者は直ちに２５セクション、１千万篇の化学論文のキーワードについて、分野間の相関を解析をした(1)。この経験は、用語の相関でクラスター作りの可能性を示唆するものだった。それで、藤原譲さんと２０部門の学術用語を統合し、その共通語５０００語の英仏独西語翻訳をした(2)。これで分かったのは、日本だけでなくて、世界各国が用語の中身の理解が異なるということだった。

化学はもっとも文献の組織化が進んだ分野である。しかも細分化された分科間の用語不統一の弊も大きい。それ故にこそ、文献資源を活用し、化学内の分野の用語のクラスターを作り、不統一には目をつむり、このクラスターで文献検索を支援する用語検索システムを作ったら、現代社会に大いに貢献するのではないかと思う。

２文化論基盤の化学情報表現媒体解析を

筆者は、国文学者の協力で連歌の語彙の解析をした(3)。連歌の語彙を、文字性（Ｌ）と記号性（Ｆ）と画像性（Ｇ）の三分類に振り分けた。実は同様な分類を国文学は江戸時代からすでにやっているのである。小生がもっとも驚いたのは、同一語の分類の振り分けが、ＬとＧに関して、国文学者と小生では正反対であったことであった。西欧科学育ちと日本育ちの違いだろうかと思った。

化学情報はこのＬ，Ｆ，Ｇの三要素をもっとも見事に活用した世界である。連歌で得られた結果を基に置き、今度は化学用語で作業して見たら、壮大な東西の文化論を化学主体で展開出来るのではないだろうかと思っている。

(1)S.Fujiwara,M.Yokoyama,&S.Ueda,J.Information & Comp.Sciences,21,66(1981)

(2)S.Fujiwara,P.Canisius,E.Curras,J.E-Dubois,Y.Fujiwara,M.Thomasa,'The List of Multilingual Basic Terms in Science & Technology'、The Research Institute for Information & Knowledge, Kanagawa University 1992

(3)藤原鎭男、立川美彦　国文学研究資料館　第２２号、２１３（平成３）

CICSJ Bulletin 特集号「黎明期の日本の情報化学—新しい世紀に繋ぐこと—」
"量的進歩から質的展開へ"

独立行政法人 工業所有権 総合情報館 藤原 譲

せっかくの機会であるので先ず計算機の歴史を簡単に振り返ってみることにする。現在の計算機の基礎理論が確立されたのは1936年に英国の A. M. Turing によって発表されたプログラム内蔵方式の計算機の論文によるのであり、米英仏独などでの開発競争を経て、1951年に最初の汎用コンピュータ UNIVAC I が世に出された。わが国では1952年から59年の7年かけて東大と東芝が共同研究で真空管式の計算機を作成した。 その間の1954年にIBMは汎用計算機650を発表し、1957年にFORTRANコンパイラーを開発し、1964年には現在の大型計算機と同じようなタイムシェアリング方式の360シリーズが発表された。翌年にDECがミニコンピュータ PDP-8 を発表し、計算機が事務用や数値計算のみでなく、実験室や生産現場で装置の制御や計算に比較的手軽に使えるようになった。

これから以後大型はより大きく、より早くなり、一方ミニコンは多くのメーカーが参入し徐々に性能が上がり、価格は低下した。このような状態が化学会の情報化学討論会が始まった1978年（昭和53年）を含めてしばらく続き、1984年にアップルコンピュータがマッキントッシュを発表してから、利用者が計算機に性能のみでなく使いやすさを求めるようになってきた。

さらにハード、ソフト、通信の大幅な進歩とUNIXの普及とあいまって、1993年にIntel とMicrosoftがWindowsと通信を結合する開発を始め、1995年の8月（日本では11月）Windows95
が発売され地球規模のコンピュータネットワークの時代に突入することになった。これ以後は旺盛な需要に支えられて、パーソナルコンピュータと通信ネットワークの普及はめを見張るばかりで、計算速度、記憶容量、回路集積度がほぼ毎年2倍の割合で急激に向上し、価格は逆に半分ずつに低下が続いている。

さて情報化学討論会が始まった頃の研究環境をもう少し具体的に具体的に見ると、大型計算機で統計解析や量子力学、X線、質量分析、赤外、NMR，ＥＳＲ、その他の物性など数値計算をおこなったり、ミニコンピュータで実験・分析装置の制御・測定を行うとともに、分子・結晶構造処理を中心に分子設計、反応設計、材料設計などのシステムも研究開発されたことは、CoreyやWipkeなどの例のみならず、わが国でも多くの努力がそのために尽くされてきた。

このように多くの仕事がなされたのは 4KB ないし 16KB の主記憶容量で、補助メモリーは無いことも多く、あっても 4KB ないし 512KB くらいで、プログラムの媒体は紙テープで、フォートランで動かすときにはプログラムの作成はコンパイラーを読み込むのに 30 分かかり、エラーがあればテープの穴から記号を読み取り、誤りを修正したテープを穴開け機で作り、元のテープの間違っていた部分を切り取り、修正部分をつないでできたテープで再度コンパイルすることを繰り返してプログラムが修正される。次に実行ソフトをまた 30 分かけて入力し、完成されたテープを読み込んで実行させてみると、今度は実行時エラーが見つかり、またプログラムを見直し、修正し、テープを繋ぎ込みコンパイル、実行を繰り返す。これは記憶容量が小さいためコンパイラーや実行ソフトを記憶装置に置いておけなかったためである。そもそもテープを読み込むためのソフトも現在のようにROMなどで入ってなかったので毎回初期プグラムローダをキーインしなければコンパイラーを読ませることもできない時代だったということです。

もちろん大型汎用機が普及してからはでは紙テープでなく、一枚８０バイトのカードを使えるので、修正、コピーははるかに楽になりシステムソフトやコンパイラーも内蔵されているのでソフトの開発は格段に便利になりました。しかしその頃でも、使える文字はアルファベットの大文字のみで、漢字はもちろん仮名も使えませんでした。英語でも大文字だけなので随分読みにくく、苦労しましたがそれでもそのころからデータベースを作っていましたので、後で修正にまた手がかかりました。

とくに図形はグラフィックスシステムが無い時代でしたので、線を引く事しかできないプロッターを用いて描くわけですが、名前や日付を入れるだけでもペンを下げ少し動かしペンを上げ、しかるべき方向に少し移動させて、またペンを下げ少し方向と距離を変えて動かすことを繰り返して曲線や文字を書くのですから、プログラム作成も実行時間も大変なものでした。その分だけ出来上がったときの達成感も大きかったことが懐かしく思い出されます。

結局昔話が長くなりすぎましたが、コンピュータの記憶容量、速度、高集積化などは驚くほど進みましたが計算機の原理と使い方は基本的に変わってないので、数値計算とネットワーク以外の、設計、発想、評価など研究・開発の直接支援はまだこれからの課題として残されたままである。

日本の情報化学の夜明け前

お茶の水女子大学理学部　細矢治夫

hosoya@is.ocha.ac.jp

情報化学部会のこの企画を機会に、自分自身がどのようにしてこの情報化学の世界に関わるようになったかを、過去の記録を繙きながら綴って行こうと思う。自分個人の備忘録の整理だけでなく、色々な人達、特に先輩諸氏との関わりに重きを置くことにする。

私の手元にもこの関係の何冊かの本が残っている。その中で重要なのが、日本化学会化学情報特別委員会編の「化学情報—問題点の現状と将来—」である [1]。これは、1969年10月に発足した同委員会の諸委員が、米国化学会のCAS の電算機化に対する日本化学会への協力要請を機として、情報化学の諸問題について委員会が調査したことの報告書である。委員長は小寺明教育大学教授(当時) で、委員は、笠井利彦 (野村総研) 、国井利泰 (東大) 、小林胖 (日本科学技術情報センター) 、千原秀昭 (大阪大学) 、平山健三 (富士写真フィルム) 、湯川泰秀 (大阪大学) 、及び神森大彦 (日本化学会) 幹事という面々である。

各委員が分担して、一次情報、二次情報、特許、学術データ、構造式、計算機などの紹介と問題点の提起がなされており、当時としてはかなり進んだ報告集となっている。この委員の中の最年少の国井氏は、後に会津大学の初代学長を務められた情報科学界の重鎮であるが、東大の理学部化学科の赤松秀雄先生のところで学位を取られてから、当時できたての東大大型計算機センターの助手(当時は専任の教授も助教授ポストもなかった) をされていたが、初代のセンター長の高橋秀俊先生だけでなく、文部省のお役人などにもおまじないをかけるのが得意という、その頃から既に異才を発揮されていた。なお、この報告書が刊行された時には助教授に昇進されている。

私がお茶大の助教授として赴任したのが1969年で、トポロジカル・インデックス (Z) の論文が、紆余曲折の後に BCSJ に掲載されたのが1971年である [2]。私の Z は、情報化学的な応用もあるが、どちらかと言えば構造活性相関的な色合いを強くもっている。そういう訳で、この30年間に約400回近く引用されている。この最近数年間にも毎年20報以上引用されているので、BCSJ のインパクトファクターの向上にも現在も寄与させていただいている。キチンとした統計は知らないが、この総引用数は BCSJ に発表された論文の中で、かなりの上位に入るのではないかとひそかに思っているのだが、どうだろうか。米国化学会の雑誌 Journal of Chemical Information and Computer Sciences (JCICS) は、当時は Journal of Chemical Documentation という名前で、細々としたものだったが、そこに、Z の情報化学的な応用の可能性という論文を出した [3]。

さて丁度その頃国井氏は、1970年の１年間だけお茶大の大学院の非常勤講師として化学と物理の学生に情報科学の講義を丁寧にしてくれた。そういう御縁で、東大の藤原鎮男先生の部屋で毎週一晩だけ開かれている「情報化学ゼミ」に参加するように強く要請された。これは、国井氏の同級生で、当時米国から帰国して藤原研の助手をしていた山本毅雄氏とつるんで、藤原先生を情報化学の世界に引きずり込もうという画策であったが、私には先生のお相手を務めよということだった。お陰さまで少しずつ情報化学の世界のことを勉強することができた。このゼミが何年続いたかは覚えていないが、後には、現在国立情報学研究所の教授の根岸正光氏や図書館情報大の石塚英弘氏も参加するようになった。

ケモメトリックスと分析化学

愛知県警察本部科学捜査研究所　三井利幸
tmit@ma3.justnet.ne.jp

分析化学の分野でコンピュータを利用してデータ処理を始めて約 15 年が経過したが、まだまだ分からないことが多く試行錯誤のくり返しの毎日を過ごしている。分析化学の分野では、発表件数も少なく、ケモメトリックスが広く普及してきたとは言い難い現状を見ると、まだ利用方法の研究努力が不足しているのかなと痛感している。分析化学に携わっている方々のケモメトリックスに対するご意見を学会などで伺うと、「必要とは思うが取付き難い。」、「なぜ、そのような面倒なことをするのか。」という判じが返ってくる。

学会での発表終了後、ケモメトリックスに興味を示した方々とお話をする機会があって、多変量解析法について説明する場合、積極的な方々は別にして、一般の方々には数式を羅列しないことが重要で、概念的に内容を把握していただけるような説明方法が最も有効なように思える。しかし、説明はしなくても、数式は化学的に何を求めるためのものか、何を説明しているかが明確に分かっていなくてならない。概念的に計算結果が説明できるためには、分析データの処理方法について数え切れないくらいの試行錯誤が必要であり、失敗が貴重な知識の蓄積となる。したがって、他人から教授され最短距離で結果を得ようとすると、結果的にとんでもない遠回りをし、新しい知見や的確な適用ができなくなる。いつも、「自分の頭で考え、試行してみることが最も重要な事です。」と、多変量解析法を定量分析に応用しかけた最初の頃の重回帰分析による定量分析試行錯誤を例にしての説明している。

内容は、重回帰分析は分析化学で慣れ親しんだ検量線法の延長線上にある方法で、カテゴリィー数の少ないデータを用いて定量したところ、非常に精度の良い定量結果が得られ感嘆したが、カテゴリィー数が増加するにつれて全く役に立たなくなり呆然としてしまった。カテゴリィー数が少なければ従来からの検量線法と大差はなくなり、１つの試料から得られる複数の測定値中から濃度や含有量と高い相関関係にありそうな測定値を経験的に１個を抽出して定量している従来からの方法の矛盾点を克服できない。何とか解決しなければと、その理由を熟慮した結果、検量線作成用の測定値間の相関関係は考慮しているのに、未知試料の測定値は検量線作成用の測定値との相関関係を全く考慮していないことに思い至たり、未知試料の測定値も検量線作成用の試料の測定値と同一土俵で取扱う方法を考えればよいと考えた。このことから、PCR の発想が生まれ、問題点が解決された。この頃、初めて文献でケモメトリックスという分野の存在を知り PLS の知識を得た。文献に注意を払わなかったことは、大変恥ずべきことではあるが、PCR に至るまでの誰にも頼らなかった試行錯誤の経験は、それ以後の研究に大きなプラスとなった。多変量解析法の各手法が、数学的にではなく化学的に何を意味し、どのようにデータを処理しているかを何とか理解できたし、定性分析に使用可能な多変量解析法、定量分析に使用可能な多変量解析法、定性分析と定量分析に使用可能な多変量解析法の区別が容易にできた。さらに、主成分分析法に見られるように、全く相関のない第一主成分、第二主成分、第三主成分を用いる PCR を、定量目的成分の濃度や含有量と高い相関関係にある主成分だけを用いる定量分析法を考えつくことも可能となった。その時、定量目的成分の濃度や含有量と全く相関関係にない主成分の寄与率が高くなる原因として、試料のコンタミネーションや測定機器の選択ミスやノイズが影響することが分かり、試料の状態や測定機器の整備状況、測定者の個人間変動の表れるポイントなどが明らかとなり、測定者の測定データの信頼性や測定機器の保守管理方法を決めるのに役立っている。したがって、過去の経験に捕らわれることなく自分で思考することが最も重要ですと説明している。

ケモメトリックスの考え方は、もともとが人文科学分野で応用されていたことを考えれば、測定機器から得られたデータの処理だけではなく、実験回数の大幅な減少、研究テーマの発展性の予測、研究者の適材適所な配置、研究費や消費機材を含めた研究室の効率的な運営などにも利用できる方法で、この方面で発展していくことを期待している。

タンパク質構造解析と分子設計---グラフィックスとの格闘

姫路工業大学理学部　安岡　則武　yasuoka@sci.himeji-tech.ac.jp
（株）システム　伊賀　祐一　iga@kk-system.co.jp

タンパク質のX線による結晶構造解析が最初に成功したのは、1950 年代のことである。それから半世紀、構造解析の全過程においてそれぞれ大きい進歩があった。たとえばX線源をとると、封入型のX線管が回転陽極型に代わり、さらに放射光へと移ってX線強度は約 10^4 倍になった。さらに測定装置の制御やデータ処理、構造解析計算の過程にコンピュータが大いに活用され進歩を加速した。1980 年前後に当時所属していた大阪大学蛋白質研究所において構造解析のための計算機システムを導入し、応用プログラムの開発にあたった。そのとき以来コンピュターグラフィックスと向き合うこととなった。

タンパク質結晶構造解析の最終段階において、得られた電子密度分布に適合する分子モデルを組上げる過程がある。70 年代までは　半鏡を利用して電子密度図と構造モデルを重ねて目視しながら立体構造を実体モデルで組上げる手法がとられた。コンピュータの発達は当然これをグラフィックスで取って代わるアイディアを生み出す。そのころのマシンは1秒に数千本の線分を描くくらいの能力しかなかったが　タンパク質分子をワイヤーモデルで表現してかご型に表示した電子密度分布に重ねるというプログラムを開発した。1000 個くらいの原子からなるタンパク質ならばワイヤーモデルの回転操作をするくらいのことはスムースにできた。コンピュータの導入から1年以上かけて MOLFITG, MOLDISP と命名したモデルの図示とフィッティングのシステムを作り上げたが、何といっても限界はハードウェアの能力不足であった。また Vector General 社製のベクトル型のグラフィックスマシンを日本製のコンピュータに接続したシステムであったため、移植が困難であった。そうこうしているうちに海外ではさらに上級の機種が登場しそれを利用した同様なグラフィックスプログラムの作成が論文誌に掲載されるなどして、結局われわれのシステムは自家用として用いられるにとどまり、世界へ発信するには至らなかった。

1980 年代、グラフィックスのハードウェアの動向はベクトルスキャン型からラスタースキャン型へと移っていく。われわれは VENUS と名づけたシステムを開発した。大型計算機センターのタンパク質データベースを検索し、その構造をカラーで図示するシステムであった。アメリカではつぎつぎと能力の高いハードウェアが製造され、市販されるや否やそれを活用したグラフィックスプログラムが発表されるといった具合でわれわれがちょっと古いモデルで開発したプログラムが世界水準になることは困難であった。それでも、ここで開発したタンパク質立体構造図示のための基礎的な技法はつぎのステップで活用される。すなわち、分子設計、タンパク質設計支援システムの MOLGRAPH の開発である。1987 年の開発当初は、DS300 という端末型であったが、ホストコンピュータとの接続を問わず、メーカーの垣根を越えて利用することができた。基本的なモデリングとともにエネルギー解析なども網羅した使いやすいシステムであった。その後、1988 年には Graphics Workstation 版 (SGI, シリコングラフィックス社)にタイミング良く移行でき、国内の分子グラフィックスではかなりのシェアを取ることができた。しかし時代の推移とともに、自前の分子力場を持たないことなどが大きなハンディとなり、海外製品の進出と競合して次第にシェアを下げることになった。1990 年代になると、CPU 能力も 20MIPS、10MFLOPS と性能が向上し、グラフィックスの表示能力も 100 万ベクトル、100 万ポリゴンと高機能化した。分子表示に留まらず、モデリングや MM 計算や MO 計算、あるいは MD 計算までを組み合わせた統合型の分子設計システムが普及した。これもすべてアメリカ製のグラフィックスであるから、われわれがマシンを手に入れるのはワンテンポもツーテンポも遅れることになり、プログラムパッケージの開発で世界へ発信することは困難となった。このような状況はパーソナルコンピュータが普及してきた現在も同様であり、とくにグラフィックスのようにハードウェアへの依存度が高いコンピュータ化学の分野ではアメリカに凌駕するシステムの開発は困難であり、もっぱら輸入に頼っているのは歯がゆい。もちろん、われわれアカデミックの側の努力不足を棚に上げる気はないのであるが。

タンパク質構造解析と分子設計---グラフィックスとの格闘

姫路工業大学理学部　安岡　則武　yasuoka@sci.himeji-tech.ac.jp
（株）システム　伊賀　祐一　iga@kk-system.co.jp

タンパク質のX線による結晶構造解析が最初に成功したのは、1950 年代のことである。それから半世紀、構造解析の全過程においてそれぞれ大きい進歩があった。たとえばX線源をとると、封入型のX線管が回転陽極型に代わり、さらに放射光へと移ってX線強度は約 10^4 倍になった。さらに測定装置の制御やデータ処理、構造解析計算の過程にコンピュータが大いに活用され進歩を加速した。1980 年前後に当時所属していた大阪大学蛋白質研究所において構造解析のための計算機システムを導入し、応用プログラムの開発にあたった。そのとき以来コンピュターグラフィックスと向き合うこととなった。

タンパク質結晶構造解析の最終段階において、得られた電子密度分布に適合する分子モデルを組上げる過程がある。70 年代までは　半鏡を利用して電子密度図と構造モデルを重ねて目視しながら立体構造を実体モデルで組上げる手法がとられた。コンピュータの発達は当然これをグラフィックスで取って代わるアイディアを生み出す。そのころのマシンは1秒に数千本の線分を描くくらいの能力しかなかったが　タンパク質分子をワイヤーモデルで表現してかご型に表示した電子密度分布に重ねるというプログラムを開発した。1000 個くらいの原子からなるタンパク質ならばワイヤーモデルの回転操作をするくらいのことはスムースにできた。コンピュータの導入から1年以上かけて MOLFITG, MOLDISP と命名したモデルの図示とフィッティングのシステムを作り上げたが、何といっても限界はハードウェアの能力不足であった。また Vector General 社製のベクトル型のグラフィックスマシンを日本製のコンピュータに接続したシステムであったため、移植が困難であった。そうこうしているうちに海外ではさらに上級の機種が登場しそれを利用した同様なグラフィックスプログラムの作成が論文誌に掲載されるなどして、結局われわれのシステムは自家用として用いられるにとどまり、世界へ発信するには至らなかった。

1980 年代、グラフィックスのハードウェアの動向はベクトルスキャン型からラスタースキャン型へと移っていく。われわれは VENUS と名づけたシステムを開発した。大型計算機センターのタンパク質データベースを検索し、その構造をカラーで図示するシステムであった。アメリカではつぎつぎと能力の高いハードウェアが製造され、市販されるや否やそれを活用したグラフィックスプログラムが発表されるといった具合でわれわれがちょっと古いモデルで開発したプログラムが世界水準になることは困難であった。それでも、ここで開発したタンパク質立体構造図示のための基礎的な技法はつぎのステップで活用される。すなわち、分子設計、タンパク質設計支援システムの MOLGRAPH の開発である。1987 年の開発当初は、DS300 という端末型であったが、ホストコンピュータとの接続を問わず、メーカーの垣根を越えて利用することができた。基本的なモデリングとともにエネルギー解析なども網羅した使いやすいシステムであった。その後、1988 年には Graphics Workstation 版 (SGI, シリコングラフィックス社)にタイミング良く移行でき、国内の分子グラフィックスではかなりのシェアを取ることができた。しかし時代の推移とともに、自前の分子力場を持たないことなどが大きなハンディとなり、海外製品の進出と競合して次第にシェアを下げることになった。1990 年代になると、CPU 能力も 20MIPS、10MFLOPS と性能が向上し、グラフィックスの表示能力も 100 万ベクトル、100 万ポリゴンと高機能化した。分子表示に留まらず、モデリングや MM 計算や MO 計算、あるいは MD 計算までを組み合わせた統合型の分子設計システムが普及した。これもすべてアメリカ製のグラフィックスであるから、われわれがマシンを手に入れるのはワンテンポもツーテンポも遅れることになり、プログラムパッケージの開発で世界へ発信することは困難となった。このような状況はパーソナルコンピュータが普及してきた現在も同様であり、とくにグラフィックスのようにハードウェアへの依存度が高いコンピュータ化学の分野ではアメリカに凌駕するシステムの開発は困難であり、もっぱら輸入に頼っているのは歯がゆい。もちろん、われわれアカデミックの側の努力不足を棚に上げる気はないのであるが。

タンパク質構造解析と分子設計---グラフィックスとの格闘

姫路工業大学理学部　安岡　則武　yasuoka@sci.himeji-tech.ac.jp
（株）システム　伊賀　祐一　iga@kk-system.co.jp

タンパク質のX線による結晶構造解析が最初に成功したのは、1950 年代のことである。それから半世紀、構造解析の全過程においてそれぞれ大きい進歩があった。たとえばX線源をとると、封入型のX線管が回転陽極型に代わり、さらに放射光へと移ってX線強度は約 10^4 倍になった。さらに測定装置の制御やデータ処理、構造解析計算の過程にコンピュータが大いに活用され進歩を加速した。1980 年前後に当時所属していた大阪大学蛋白質研究所において構造解析のための計算機システムを導入し、応用プログラムの開発にあたった。そのとき以来コンピュターグラフィックスと向き合うこととなった。

タンパク質結晶構造解析の最終段階において、得られた電子密度分布に適合する分子モデルを組上げる過程がある。70 年代までは　半鏡を利用して電子密度図と構造モデルを重ねて目視しながら立体構造を実体モデルで組上げる手法がとられた。コンピュータの発達は当然これをグラフィックスで取って代わるアイディアを生み出す。そのころのマシンは1秒に数千本の線分を描くくらいの能力しかなかったが　タンパク質分子をワイヤーモデルで表現してかご型に表示した電子密度分布に重ねるというプログラムを開発した。1000 個くらいの原子からなるタンパク質ならばワイヤーモデルの回転操作をするくらいのことはスムースにできた。コンピュータの導入から1年以上かけて MOLFITG, MOLDISP と命名したモデルの図示とフィッティングのシステムを作り上げたが、何といっても限界はハードウェアの能力不足であった。また Vector General 社製のベクトル型のグラフィックスマシンを日本製のコンピュータに接続したシステムであったため、移植が困難であった。そうこうしているうちに海外ではさらに上級の機種が登場しそれを利用した同様なグラフィックスプログラムの作成が論文誌に掲載されるなどして、結局われわれのシステムは自家用として用いられるにとどまり、世界へ発信するには至らなかった。

1980 年代、グラフィックスのハードウェアの動向はベクトルスキャン型からラスタースキャン型へと移っていく。われわれは VENUS と名づけたシステムを開発した。大型計算機センターのタンパク質データベースを検索し、その構造をカラーで図示するシステムであった。アメリカではつぎつぎと能力の高いハードウェアが製造され、市販されるや否やそれを活用したグラフィックスプログラムが発表されるといった具合でわれわれがちょっと古いモデルで開発したプログラムが世界水準になることは困難であった。それでも、ここで開発したタンパク質立体構造図示のための基礎的な技法はつぎのステップで活用される。すなわち、分子設計、タンパク質設計支援システムの MOLGRAPH の開発である。1987 年の開発当初は、DS300 という端末型であったが、ホストコンピュータとの接続を問わず、メーカーの垣根を越えて利用することができた。基本的なモデリングとともにエネルギー解析なども網羅した使いやすいシステムであった。その後、1988 年には Graphics Workstation 版 (SGI, シリコングラフィックス社)にタイミング良く移行でき、国内の分子グラフィックスではかなりのシェアを取ることができた。しかし時代の推移とともに、自前の分子力場を持たないことなどが大きなハンディとなり、海外製品の進出と競合して次第にシェアを下げることになった。1990 年代になると、CPU 能力も 20MIPS、10MFLOPS と性能が向上し、グラフィックスの表示能力も 100 万ベクトル、100 万ポリゴンと高機能化した。分子表示に留まらず、モデリングや MM 計算や MO 計算、あるいは MD 計算までを組み合わせた統合型の分子設計システムが普及した。これもすべてアメリカ製のグラフィックスであるから、われわれがマシンを手に入れるのはワンテンポもツーテンポも遅れることになり、プログラムパッケージの開発で世界へ発信することは困難となった。このような状況はパーソナルコンピュータが普及してきた現在も同様であり、とくにグラフィックスのようにハードウェアへの依存度が高いコンピュータ化学の分野ではアメリカに凌駕するシステムの開発は困難であり、もっぱら輸入に頼っているのは歯がゆい。もちろん、われわれアカデミックの側の努力不足を棚に上げる気はないのであるが。

化學的人工知能　事始め

（株）三井化学分析センター　　山崎 徹
tohru.yamasaki@mitsui-chem.co.jp

情報化学の草分け期の１９７０年代に、有機質量分析の権威であった故佐々木慎一豊橋科学技術大学名誉教授率いるプロジェクトが化学における人工知能のターゲットとして有機化合物の構造推定を取り上げ、本格的に立ち上がった。システムの名前は CHEMICS と呼ばれる。相前後して同一の課題に取り組んだのが、Lederberg 教授および Djerassi 教授の米国スタンフォード大学チームであり、脂肪族ケトン、エーテル、アミンなど、直鎖状有機物に適用できる Heuristic DENDRAL システムを完成させ、一歩先んじていた。７０年代後半にかけ、全有機物を対象とする構造推定問題プロジェクトの熾烈な開発競争が繰り広げられることになる。この小文は化学分野で本邦において初めて興された先鋭的かつ独創的な人工知能プロジェクト研究に立ち会うことができた著者の回顧抄である。

仙台は青葉山の北面に立地した宮城教育大学の理科施設の一室で３０から４０歳代の男たちが４人、７２年の秋の夜も更け、いつ終えるともしれない議論に熱中していた。NMR,IR など機器分析で得られた情報を元に有機化合物の構造推定問題を、分析者がするようにコンピュータで解こうというのである。この議論の中で開発システムの基本設計コンセプトが決められていった。たとえば、入力情報に対して得られる解（有機構造）に 重複も漏れもなくす という考え方がそれである。

プロジェクトチームは宮城教育大学と日本電子（株） 応用研究所からの派遣メンバーで構成され、構造組立、スペクトル解析およびシステム化のサブチームから成っていた。CHEMICS プロジェクトが先進性を獲得できたのは工藤喜弘(現 山形大学教授)が開発した独創的な構造組立アルゴリズム(結合スタック法）に依るところが多く、出力構造に“漏れなし、重複なし”が実現した。このアルゴリズムは基本的に exhaustive enumeration 手法であり、単純にして、簡潔なグラフの数え上げ算法として画期的である。当時の計算機の能力では“虱潰し”算法は少なからぬ演算時間を必要としたため、７６年の総説ではスタンフォード大チームの演繹的手法のほうが見通し良く、有利であるとの紹介をしたが、現在の目眩く処理速度を以てすれば、(当時の誰が、スーパコンピュータ以外の計算機、なかんずく、個人利用計算機：ＰＣのＣＰＵにパイプラインが使われることを予想できたであろう！）結合スタック法の単純かつ簡潔さに軍配を上げることになる。

CHEMICS プロジェクト成功の第１の要因は（当時は意識していなかったが）劣悪なコンピュータ環境にも拘わらず（主力開発機であった FACOM230-15 は主記憶が磁芯、内蔵記憶装置が 131KB のドラムと記憶する）未知の分野に果敢に挑む前述した４人の逸材の働きに尽きる。また、第２に目標の高邁さとでも表現すべき、主宰した故佐々木慎一名誉教授が掲げた、日本で初めて化学の領域で人工知能システムを完成させるという執念であった。

CHEMICS はその後、船津公人（豊橋科学技術大学 助教授）によって、二次元 NMR などの新しい情報を取り入れた解析の深化と結合スタック法を結合分解に用いた有機合成反応システム (AIPHOS)の２つの方向に進化していったことは、ご高承の通りである。

やまさき　とおる　YAMASAKI,Tohru
連絡先：〒299-0265 千葉県袖ケ浦市長浦 580-32　（株）三井化学分析センター 構造解析研究部
TEL:0438-64-2403,Fax:0438-64-2404

人にやさしい情報化時代を！

長岡技術科学大学　山田明文

学生時代、母校の大学祭で東北地区最初の電子計算機（パラメトロン式計算機、SENAC-1）が公開されているのをみて、カルチャーショックを受けたのを覚えている。それまでの計算尺やタイガーの手廻し計算機にかわり、紙テープにパンチするだけで短時間に結果が得られるからだ。爾来ほどなく大型計算機センターが設立され、計算機も大型計算機からスーパーコンピュータへと移り、今や世界的なネットワークの時代を迎えつつある。

筆者は昭和５６年に現在の長岡技術科学大学に移ったが、情報技術の利用環境がいままでとあまりにも違うことにとまどいを覚えた。いわば、種子島の鉄砲を相手に石斧で立ち向かうほどの落差を味わうこととなった。また、コンピューターに没頭していると、言葉も忘れ易くなり、思考も単純化してくるような気がして、しばらくコンピューターから離れる（仕事の内容が）ようになった。その後１０年もしないうちに情報技術はめまぐるしく発展し、今となっては戸惑うばかりである。

学内でも、いわく、文書のペーパーレス化が必要、情報伝達は全てメールに切り換える、書類は添付ファイルを推奨と・・・。とんでもない話である。確かにメールは便利で速い。しかし、発信が容易なだけうっかりミスも増える。なかにはメールを送ったが「早く返事をくれ」と催促される。あるときは一方的にたくさんのジャンクメールが届けられ、問合せなども送られてくる。メールは便利ではあるが、処理能力を越えると動きがとれなくなる。特にパソコンがダウンした後など立ち上げが大変である。

優れた科学者に贈られる「京都賞」を受賞されたドナルド・クヌー教授（米スタンフォード大、コンピュータ科学）も、電子メールを毎日何通ぐらい読み書きするか、との問いに「ゼロだ、９０年１月以来電子メールは使っていない。それまで１５年間利用したが、メールの数が多くなりやめた」と。

「祇園精舎の鐘の声、諸行無常の響あり・・・」。すべてのものは移り変わっていく。人間歳には勝てない。年を取っていつまでも電子ブックを見ていられるだろうか。朝食がすんだら新聞を広げて読みたいし、忙しいときは読みかけの書類をかばんに入れて動きたい。ひとの心情として少しでも速く、多くの情報を送りたいと思うのは世の常である。確かに、調べ物をするにはインターネットは大変便利である。また、ホームページを開設すれば、予想もしない人達がそれを見てくれるであろう。その結果情報インフラはもっと便利に、もっと速くと、ますます整備されるであろう。しかし、しょせんは人間が判断すること、科学技術の進歩普及が人の追いつける速度を越えると、必ず心の問題が生じてくる。単に便利だからといってやみくもにＩＴを進めるばかりでなく、必要で、重要な情報を、人の感覚を込めながら発信したいものである。「我と来て遊べや親のない雀」。小林一茶が生きていたら、この情報化時代をどのように感じるであろうか。

情報化学教育に携わった学術活動

福井工業高等専門学校　物質工学科　　吉村　忠与志

tadayosi@fukui-nct.ac.jp

1　化学PC研究会時代　(1982～1991)

幸いにして1982年1月に京都大学の藤永太一郎先生から理学博士を頂いた折、「田舎教師にだけはなるなよ」と言われ、いまだに教訓にしている。福井の一教師が福井に居ても田舎教師にはならない方法を考えた結果、好きだったパソコン(PC)と化学の研究会を全国的に立ち上げて学術活動することであった。当時のパソコン雑誌に掲示板があり、「この指とまれ」という研究会結成の告示に対して全国から約400名の方々の会員賛同が得られた。それに気を良くして、「会報JAPC」を発行し、BASICプログラムのリストを掲載した学術論文を掲載した。吉田弘氏のMOLDAは1984年に掲載されて以来、日本発のオリジナルソフトとしていまだに利用されており、世界に誇れるものである。

2　化学ソフトウェア学会時代　(1992～2001)

1991年の在外研究では、下沢隆先生から世界のコンピュータ化学教育の視察と研究を仰せつかり、ロンドン大学のM. Cox先生、ウイスコンシン大学のJ. Moore先生、モンクトン大学のB. Newbold先生と渡り歩き、意義ある年を経験させて頂いた。化学ソフトウェア(chemical software)という言葉を提案･発信したのは、ウイスコンシン大学のマディソン校の一室からであった。下沢先生が初代会長を引き受けてくださり、1992年に化学ソフトウェア学会を設立した。情報化学教育の活動の一つとして、日本学術会議「科学教育研究連絡委員会」委員を第16、17期と務め、微力ながら日本の化学教育に貢献できたと自負している。第18期は細矢治夫会長にお願いし、更なる実績を上げておられる。

3　21世紀のコンピュータケミストリー　(2002～)

21世紀となり、本誌(vol.9, No.1)の特集「21世紀に臨む情報化学」で原稿依頼があり、「21世紀に向けた情報化学系の学協会のあり方」と題して寄稿させて頂いた。この特集号の記事を拝読すると、情報化学に期待するものや、学界を横断するように組織作りを提案したものがあり、私は情報化学系の学協会のあり方を論じた。私の造語の化学ソフトウェア(chemical software)には拘りを捨て、コンピュータケミストリーの名の元に一堂に集いたいと思う。我々が築き上げてきた「The Journal of Chemical Software」は2001年で第7巻を数え、無料閲読のWeb電子出版も軌道に乗り、投稿原稿も順調に集まるようになったが、学界横断的な組織を結成するために、この雑誌に代わるメジャーな学術論文誌を目指そうと模索している。化学PC研究会の初心に戻り更なる発展のために、コンピュータケミストリーの元に結集しよう。そして、日本化学会の細目に、コンピュータケミストリー、もしくは情報化学を認知させましょう。日本における情報化学教育の発展のために。

よしむら　ただよし、　〒916-8507 鯖江市下司町16-1 福井高専物質工学科

情報化学討論会・構造活性相関シンポジウム要旨集電子化の試行について

昨年末に日本化学会情報化学部会会員を対象に行ったアンケート調査結果によると、情報化学討論会・構造活性相関シンポジウム講演要旨集の発行形態について、回答者の約半数が現在の冊子体とは別にWWWによる事前配信の実現を希望している事が分かりました。このことについて情報化学部会役員会では、私たちの討論会で発表された研究成果の積極的で広範な情報発信のためにこの声に前向きに対応することにしました。

一方、今年１１月に徳島大学で共同開催される第２４回情報化学討論会・第２９回構造活性相関シンポジウム両実行委員会も同様の視点から講演要旨集の電子化に取り組む意義と必要性に同意し、今年を本討論会・シンポジウム講演要旨集の電子化元年としてこの試行に共同で取り組むことになりました。皆様のご理解とご協力をお願い致します。

（日本化学会情報化学部会部会長　時田澄男）
（日本薬学会医薬化学部会構造活性相関研究会代表幹事　寺田　弘）

講演要旨集電子化のメリットには、

1. 討論会以前にWWWで公開することにより発表内容を十分にチェックでき、討論などを有効に行える
2. 参加者自身により必要な部分のみを印刷するなどして計画的に討論会に参加できる
3. インターネットに接続されたコンピュータがあればいつでもどこでもこれにアクセスできる
4. 今後の電子版講演要旨集の蓄積によって著者、キーワード、および全文検索などを利用した目的情報の取り出しが容易になる
5. カラーの図表の掲載が手軽に行えることに加え、今後動画および高解像度図の添付ができるなどマルチメディア要旨の作成が可能となる

などが挙げられます。いまや電子ジャーナルは学術誌発行形態の世界的な流れとなってきましたが、情報化学部会ではかねてよりOn-line only journal、Journal of Computer Aided Chemistry (JCAC) を発行しており、講演要旨集電子化に伴いJCAC も含めた各電子ジャーナルへの投稿が一層身近なものになるという利点も挙げられます。

さて、講演要旨集の電子化には当然ながら電子体の原稿が必要となります。本討論会・シンポジウムの場合、たとえば要旨集目次作成にあたっては、発表申し込み時にこのホームページから入力される情報がそのまま用いられます。さらに、講演要旨本体原稿としては、発表者が作成する電子体ワープロ原稿が使われます。これを印刷したものは冊子体要旨集用原稿として従来どお

り討論会・シンポジウム事務局への郵送をお願いしますが、電子体ワープロ原稿そのものは原則として PDF 化されたものをメールによる添付ファイルの形式で徳島大学の討論会・シンポジウム事務局宛にお送り戴くことになります。

引き続きこれらは電子ジャーナル JCAC 編集事務局へ自動的に転送されますが、電子版講演要旨集はここでの編集作業の完了を待って討論会・シンポジウム開催日の２週間前を目処に WWW 上で公開される予定です。この際個々の要旨に公開日設定が可能ですので、特許との関係で事前公開日を特に指定されたい場合にはお申し出により配慮させていただきます。

なお、PDF 化の環境が整わないなどの事情で PDF 原稿をご自分で用意できない場合は電子体ワープロ原稿のままでも受け付け、編集事務局にて PDF 化などの対応を行います。ただし、電子体ワープロ原稿でお送り戴く場合、ワープロの種類は編集事務局の都合により Word のみに限らせて戴くことにしました。この他電子版講演要旨集編集に必要な電子情報として、図表を抜いた本文のみのテキストファイル(全文検索用)、英文概要があります。

これらの情報の送付方法は、本討論会・シンポジウムホームページ上にフローチャート形式でわかりやすく記載されていますのでそれに沿ってお送りください。

なお、WWW による電子版講演要旨集の提供にあたっては、文献情報としての安定供給性、メンテナンスおよびセキュリティー、管理体制の中立性などを勘案し、J-STAGE（科学技術振興事業団が開発し提供している電子ジャーナル編集公開システム）を利用することとし、このアドレスへは日本化学会（情報化学部会）ホームページおよび日本薬学会（医薬化学部会）ホームページのそれぞれからアクセスできる形を採る予定です。これに加え、WWW 版と同じ内容を持った CD-ROM も作成し会場受付にて冊子体講演要旨集とともにお渡しする計画です。

今回の試行に際し、不行き届きの点も出てくるかと思いますが、今回の試行で得た経験を次年度以降に反映させることで時代に即応したより良い電子版講演要旨集へと発展させて行きたいと考えています。今回の電子化試行は発表者を始めとする皆様のご理解とご協力なしには成し得ません。何卒宜しくお願い申し上げます。

（第２４回情報化学討論会実行委員会　矢野米雄）
（第２９回構造活性相関シンポジウム実行委員会　中馬　寛）

部会役員会・委員会報告

平成１３年度第３回拡大編集委員会議事録

日　時：平成１３年７月２５日（水）１５時～１８時
場　所：化学会館　2階　２０２会議室
出席者：時田澄男，高田章，船津公人，有國尚，大和田智彦，坂本直紀，高畠哲彦，
　　　　中山伸一，矢野米雄，清水弘一

議事に先立って，CICSJ Bulletin 総目次のチェック作業を行った。

議事内容

（１）第２４回情報化学討論会について

矢野委員より，７月２３日の時点で口頭発表６２件，ポスター発表３７件の発表申し込みがあり，締め切りを今日（２５日）まで延ばしたため，さらに増える可能性があるという報告があった。また，いくつか訂正の依頼が来ており，現在訂正のページを作成中であるという報告があった。さらに，すべての申し込みがWebによるものであった旨補足説明があった。

プログラム編成および座長についてはあらかじめ担当委員が原案を作成し，８月１５日の合同幹事会で決定することとした。なお，完了しなかったときのために，１６日の午前中を予備日とした。講演要旨集の原稿依頼は，８月２０日から発表者に電子発送することとした。

矢野委員より要旨を１５０文字にした経緯が説明され，了承された。また，協賛企業の返事の確認と再要請を行うこととした。

船津委員より講演要旨集のJ-STAGE収録についての説明があった。

（２）CICSJ Bulletin について

高田委員より，No.4の「黎明期の日本の情報化学（仮称）」の進捗状況の説明があった。１件を残して２０件の原稿がすでに集まっており，お盆前の発送を目指して編集を進めることとした。No.5の第２４回情報化学討論会特集号は，150字の要旨を９月中旬の発送を目指して編集を進めることとした。No.6以降の企画について検討した結果，No.6はケモインフォマティクスについて有國委員が主査で，大和田，高畠，中山委員が中心となり検討する，Vol.20 No.1は化学教育と学習システムについて矢野委員が主査で，時田，中山委員が中心となり検討することとした。

バックナンバーのWeb公開について，坂本委員より報告があり，Vol.17 No.1から順次行

っていくという方針が示された。

（3）JCACについて

船津委員より，今年に入って１０報の投稿があり，現在１報が公開中で近日中にさらに２報公開される旨報告があった。また，J-STAGEの閲覧回数のカウントはまだ実現していないという報告があったが，論文賞は実施する方向で検討することとした。

さらに，部会員以外からの投稿を呼びかけるため、情報化学討論会講演要旨集に，投稿募集の案内を載せることとした。

（4）その他

情報学シンポジウムから実行委員推薦の依頼があり，中山委員を推薦することとした。

清水部会担当から会員情報の調査用紙の原案が示され，一部修正の上了承された。

清水部会担当から構造活性相関講習会の協賛を了承した旨報告があった。

時田委員長から，支部長・部会長会に於いて固定費負担の減額と科研費細目新設の要望を出した旨報告があった。また，当該会合で化学会の部会化の提案がなされたという報告があった。

来年度の部会予算の一次案が９月７日締切であり，ひとまず例年通りで提出することとした。これに関係して，CICSJ Bulletin電子出版化の議論を進めていくこととした。

高田委員および清水部会担当から，第８１春季年会（早稲田大 3/26～29）の検討状況について説明があった。プログラム編成は高田・有國委員で行うこととした。

中山委員より，CICSJ Bulletin総目次および情報化学討論会総目次の電子体を部会のホームページからダウンロードできるようにしたいという提案があり，了承された。

（5）次回委員会の開催について

次回の拡大編集委員会は10月2日（火）１５時から開催することとした。

以上

第２４回情報化学討論会
参加申込受付中

主催　日本化学会情報化学部会

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

協賛　教育システム情報学会

会　期：平成１３年１１月７日（水）～９日（金）

会　場：徳島大学蔵本キャンパス〔徳島市蔵本３-庄町１〕

交　通：JR 徳島駅前バスターミナル１番乗り場より市バス 1,4,17,19 系統，「医学部前」下車後すぐ

特別講演

１）西本　吉助（大阪市大名誉教授）「IT 時代の量子化学」

２）細矢　治夫（お茶の水女子大）「私の構造活性相関」

討論主題

(1) 化学情報学(化学論理学，情報検索，DB コンピュータネットワーク，CG，グラフ理論，反応設計など)

(2) 理論化学・計算化学(MO，MM，MD，MC，各種シミュレーションなど)

(3) ケモメトリックス及びそのソフトウェア(ニューラルネットワーク，ファジィ，カオス，遺伝的アルゴリズム，構造物性相関，データマイニングなど)

(4) 化学教育・学習システム

(5) その他情報化学に関するもの(コンビナトリアル・ケミストリー，遺伝情報，環境ホルモン情報など)

(6) 学際的な広がりの中の情報化学と構造活性相関のクロスオーバー(構造活性相関シンポジウムとの合同セッション)

（発表の申込は締め切りました）

参加登録予約申込　10 月 20 日締切〔必着〕。WWW にて行う。参加登録および送金方法などの詳細については文末の URL をご覧下さい。

参加登録費　（構造活性相関シンポジウムと共通，要旨集合本１冊を含む）〔一般〕予約 8,000 円，当日 9,000 円　〔学生〕予約 3,000 円，当日 4,000 円。要旨集前送希望の場合は郵送料 1,000 円を別途申し受けます。

懇親会　（構造活性相関シンポジウムと合同）　11 月 8 日(木)ホテルグランドパレス徳島にて。会費：〔一般〕予約 6,000 円，当日 8,000 円　〔学生〕予約 4,000 円，当日 6,000 円

連絡先　770-8506 徳島市南常三島町 2-1 徳島大学工学部知能情報工学科　矢野 米雄

TEL: 088-656-7495，FAX: 088-623-2761　E-mail: cics24-desk@is.tokushima-u.ac.jp

URL: http://www-chemist.is.tokushima-u.ac.jp/cicsj24/

（ご都合により WWWをご利用になれない方は，上記連絡先までお問い合わせ下さい）

◆関連行事

化学ソフトウェア学会年会「２００１研究討論会」プログラム

主催　化学ソフトウェア学会
共催　日本化学会，日本化学会情報化学部会，日本化学プログラム交換機構，日本分析化学会
会期　9月29日（土）12時～19時50分・30日（日）9時10分～17時50分
会場　埼玉大学理工学研究科棟ほか（埼玉県さいたま市下大久保255，電話048-858-3536，JR京浜東北線北浦和駅下車　西口　埼玉大学行きバス約20分　または　JR埼京線南与野駅下車　北へ5分　埼玉大学行きバス約10分，地図は下記ホームページをご覧下さい）

第１日　９月２９日（土）
年会開会の辞 野口文雄　（１２：００～１２：０５）

＜議長＞ 細矢治夫
総会　表彰式　（１２：０５～１２：３５）

＜座長＞ 久保百司
一般講演　５分間概要説明　（１２：３５～１３：４５）
デモンストレーション　（１４：００～１４：４５）

101　absolute hardnessを用いたPPP分子軌道法における二中心電子反発積分に対する置換基効果の見積もり（埼玉大工，*日清紡，**岡山理科大）〇太刀川達也，時田澄男，蛭田公広*，西本吉助**
102　４次元のf原子軌道の可視化（埼玉大工，*お茶大理）時田澄男，〇木戸冬子，細矢治夫*
103　鎖状分子溶液の構造と挙動（姫路工大工）〇中島孝憲，林 治尚，山名一成，中野英彦
104　分子動力学計算のSMPシステムでの利用とその展開（姫路工大工）〇林 治尚，山名一成，中野英彦
105　孤立高分子鎖のMDシミュレーションーVoronoi解析による検討－（放送大学埼玉学習センター，*放送大学世田谷学習センター）〇時田那珂子，平林めぐみ，堂寺知成，東 千秋*
106　近赤外スペクトルからの高分子の密度決定（産総研，*富山工業技術センター，**オプト技研）〇田辺和俊，松本高利，佐伯和光*，天野敏男**
107　表計算ソフトによるクロマトグラフィーのシミュレーション（共立薬大）〇菅田節朗
108　数理化学教育ツールMatChemの開発（豊橋技科大）〇藤島悟志，髙橋由雅
109　インターネットを利用した講義関連の「アカデミックＱ＆Ａサイト」の構築と運用－パーソナルＱ＆Ａを手始めとして－（埼玉大工）〇斉藤由明，上條 寛，時田澄男，西垣功一
110　主成分分析法とニューラルネットワークを用いた河川の上流・中流・下流を示す水質パラメータの抽出－東京多摩川の水質データを用いて－（大東文化大，*日本女大，*ベストシステムズ，**産総研，***宮崎大）神部順子，福田朋子*，〇長嶋雲兵**，青山智夫***
111　結晶構造の３Ｄによるビジュアル化（ラティオインターナショナル，*駿台予備学校）〇大橋憲三，大川 忠*
112　分子模型及び分子軌道のガラス内３次元彫刻について（函館高専）〇長尾輝夫
113　ネットワークを利用したＮＭＲ予約管理システム（鳥取大工）〇榊原正明，福井裕暁，太田裕市，淺原雅浩

114 膜振動の波動方程式を用いた定常波の動的表示（埼玉大工）○矢野雅彦，野口文雄，時田澄男

<座長> 吉田 弘
技術賞講演 インターネットでの国際的な化学教育情報の流通
伊藤真人 氏（創価大学 工学部 助教授） （１５：００～１５：３０）

<座長> 田辺和俊
一般講演 ５分間概要説明 （１５：３５～１６：４５）
デモンストレーション （１７：００～１７：４５）
201 原子の国のトムキンス（仮想現実立体動画による表現）（埼玉大工，*お茶大理）○杉山孝雄，時田澄男，細矢治夫*，井門俊治
202 糖質研究支援データベース・”Glycosylation”の作成（その3）（国際基督教大理）○吉野輝雄
203 画像解析によるカテーテルチューブの変位測定（名市工研，*東海メディカルプロダクツ）○粟生雅人，筒井宣政*，荒井 崇*
204 JAVAによる分子構造表示プログラムの開発（姫路工大工）○藤本裕文，林 治尚，山名一成，中野英彦
205 分子構造表示プログラムModrastのGUIの改良（姫路工大工）○村田一紀，佐々和洋，林 治尚，山名一成，中野英彦
206 分子構造表示プログラムModrast-Pの改良（姫路工大工）○佐々和洋，宇野 健，林 治尚，山名一成，中野英彦
207 CIFデータから計算される結晶電子密度の可視化（埼玉大工）○野口文雄，海老原朋介，小林秀彦
208 分子表示プラグインによる英語版分子データ集の作成（県立新潟女短大）○本間善夫
209 K Virtual Machine (KVM)を用いたウェアラブル・ケミストリー：携帯JavaによるiモルダのPの開発（広島大院理）○吉田 弘
210 iモルダによる携帯電話で見る動く分子事典（広島大院理，*県立新潟女短大）○吉田 弘，本間善夫*
211 固体大規模系の励起状態計算用高速化量子分子動力学プログラムColors-excitedの開発とその応用（東北大院工，*広島国際学院大工）○鈴木 研，伊藤正寛，伊藤優基，王 小晶，高見誠一，久保百司，宮本 明，今村 詮*
212 高速化量子分子動力学法プログラムCOLORSの超精密化（東北大院工，*広島国際学院大工）○安藤美奈子，鈴木 研，高見誠一，久保百司，宮本 明，今村 詮*
213 高速化量子分子動力学プログラムcolorsの希土類系への展開（東北大院工，*広島国際学院大工）○伊藤優基，羅 一，高見誠一，久保百司，宮本 明，今村 詮*
214 溶解度の単位系と表示（駿台予備学校，*ラティオインターナショナル）○大川 忠，大橋憲三*

懇親会 埼玉大学大学会館きゃら亭 （１７：５０～１９：５０）

第２日　９月３０日（日）
＜座長＞ 吉村忠与志
学会賞受賞講演　WWW上の化学教育活動と「化学教育ジャーナル(CEJ)」のめざすもの
　　森川鐵朗　氏　　（上越教育大学 自然系 教授）
　　山田洋一　氏　　（宇都宮大学 教育学部 助教授）　　（９：１０～９：５０）

＜座長＞ 中野英彦
一般講演 ５分間概要説明　　（９：５０～１１：００）
デモンストレーション　　（１１：１５～１２：００）

301 二層系光化学電池の仮想デバイスシミュレーターの作成（茨城大理，*埼玉大工）○城石英伸，鏑木悠城，瀬尾美智子，星 尚志，野村知生，時田澄男*，金子正夫

302 重なり積分を利用した分子点群の既約表現の計算（信州大繊維，*上越教育大自然）○成田 進，渋谷泰一，森川鐵朗*

303 金属表面処理関連ホームページの運用経過（芝浦工大，*日本テクノ）○今井理裕，佐藤敏彦，大政龍晋*

304 携帯電話によるメッキ厚さの計算（芝浦工大，*日本テクノ）○福地伸介，佐藤敏彦，大政龍晋*

305 分子表示プラグインを利用した分子振動アニメーション（県立新潟女短大，*広島大院理）○本間善夫，吉田 弘*，松浦博厚*

306 分子軌道計算による赤外スペクトルのシミュレーション（産総研）○田辺和俊，都築誠二，松本高利

307 改良new-gamma式を用いた有機化合物の極大吸収波長の計算（ベストシステムズ，*産総研）○中山尚史，長嶋雲兵*

308 量子分子動力学法における新規高速化理論の開発（東北大院工，*広島国際学院大工）○久保百司，黒川 仁，草谷友規，鈴木 研，高見誠一，宮本 明，今村 詮*

309 量子分子動力学計算のためのパラメータ自動決定プログラムの開発（東北大院工）○鄭 昌鎬，黒川 仁，草谷友規，鈴木 研，高見誠一，久保百司，宮本 明

310 量子分子動力学計算のための電子状態可視化プログラムNew-RYUGAの開発（東北大院工）○草谷友規，黒川 仁，高見誠一，久保百司，宮本 明

311 ニューラルネットワーク手法を用いた量子分子動力学計算のためのパラメータ予測（東北大院工）○鈴木 愛，草谷友規，鈴木 研，高見誠一，久保百司，宮本 明

312 ハイブリッド量子分子動力学プログラムの開発と化学機械研磨過程への応用（東北大院工，*広島国際学院大工）○横須賀俊之，篠田克己，黒川 仁，高見誠一，久保百司，宮本 明，今村 詮*

313 VRMLおよびOpenGL用の描画多面体データ生成（埼玉大工）○野口文雄，梅下友則，鈴木達郎，小林秀彦

314 VRMLを用いた双晶形態の可視化（埼玉大工）○奥 清高，伊東正文，野口文雄，小林秀彦

＜座長＞ 時田澄男
記念講演　化学ソフトウェア大国への戦略と展望
　　宮本 明　氏　　（東北大学大学院 工学研究科 教授）（１３：００～１３：５０）

＜座長＞ 本間善夫

一般講演 5分間概要説明 （14：00～15：15）

デモンストレーション （15：30～16：15）

401 Excelをプラットフォームとするn88BASICプログラムのリユース法（福井高専）○吉村忠与志

402 Windows版PEACHとそのシミュレーション表示（群馬大工）○中田吉郎，滝沢俊治

403 Java^{TM}を使用した化学研究支援ソフトMolWorks^{TM}の開発（ベストシステムズ，*お茶大院，**産総研）○中山尚史，後藤成志，Andy Stubbings，田島澄恵*，長嶋雲兵**

404 分子モデリングのための分子データの相互変換とXMLの可能性（広島大院理）○吉田 弘

405 化学物質安全性データベースの開発（産総研）○田辺和俊，松本高利

406 トライボロジー現象解析のための新規プログラムTRIBOSIMの開発（東北大院工）○亀井大輔，横須賀俊之，周 慧，今野聖絵，高見誠一，久保百司，宮本 明

407 新規プログラムTRIBOSIMによる潤滑特性予測（東北大院工）○今野聖絵，亀井大輔，横須賀俊之，周 慧，高見誠一，久保百司，宮本 明

408 キネティックモンテカルロプログラムの開発と水素分離膜への応用（東北大院工）○黒川 仁，中山 拓，小林泰則，鈴木 研，高見誠一，久保百司，宮本 明

409 モンテカルロ計算プログラムとその解析プログラムの開発（東北大院工）○高橋 睦，佐々木朋子，瀬田秀行，小林泰則，高見誠一，久保百司，宮本 明

410 ネットワーク分散型分子動力学計算手法の提案（東北大院工）○高見誠一，横須賀俊之，鈴木 研，久保百司，宮本 明

411 オンラインジャーナル（Journal of Chemical Software）のアクセスログの解析（姫路工大工）○中野英彦，林 治尚，山名一成

412 クライアントサーバシステムを利用した分子の立体模型表示（広島県立大経営，*姫路工大工）○宇野 健，林 治尚*，中野英彦*

413 固溶体結晶のXRDパターンシミュレーション（その2）（埼玉大工）○内堀可奈子，梅下友則，野口文雄，小林秀彦

414 フェーズフィールドモデルによる樹枝晶成長シミュレーション（その2）（埼玉大工）○野宮秋美，岡本洋和，野口文雄，小林秀彦

415 インターネットを利用した現職教員教育（埼玉大教育）○小森雅子，清水 諭，高橋巧也，芦田 実，吉田俊久

見学会 埼玉大学総合情報処理センター （16：20～17：50）

バーチャルリアリティシステム（CAVE）による原子または分子のデモンストレーション
－3m×3mの大きさのスクリーン4枚（正面，左右面，床面）に立体プロジェクタで1つの連続した映像を投影して体験者の全身が仮想世界の中に覆い包まれるディスプレイの体験－

参加予約	9月21日（金）締切（必着）．住所，所属，氏名，電話・FAX番号，所属学会，懇親会出席の有無を明記して，下記連絡先に郵便，FAXまたはe-mailでお申し込みください．
参加登録費	予約：本学会会員 3,000円，共催学会会員 4,000円，一般 5,000円，学生 1,500円，当日参加登録（予約なしの場合）：予約参加登録費に1,000円を加算します．
懇親会	9月29日(土)17時50分～19時50分 会場：大学会館2階 きゃら亭 参加費：4,000円
連絡先	338-8570埼玉県さいたま市下大久保255 埼玉大学工学部応用化学科 野口文雄 TEL/FAX：048-858-3536 e-mail：chemsoft@apc.saitama-u.ac.jp ホームページ：http://www.apc.saitama-u.ac.jp/~chemsoft/

■編集後記

「井戸の水を飲むとき、最初にその井戸を掘った人の苦労を忘れてはいけない。」と言われます。今回は情報化学、計算化学という井戸を最初に掘ってくださった先生方に黎明期のエピソードを書いていただきました。

本特集で語られている時代というのはちょうど私が生まれる前後の話が中心になっております。私にとっては「生まれたときには情報化学、計算化学があった」ということになります。それだけに、普段情報化学、計算化学の生い立ちについてあまり考えることが無かったのですが、本特集の記事からは、「新しいものを自分達のものにしよう」という当時の熱意がひしひしと感じられました。

情報化学、計算化学はまだまだ発展途上の学問であると思います。まだ、現在の井戸の下には大きな水脈が眠っているはずです。この井戸を掘り進んだ後、数十年後、あるいは２２世紀の特集では、「２１世紀のはじめ頃にはメモリも数 GB ぐらいしか使えなくて、、、」といった記事が載るのかな、と想像してみると、何かわくわくした気分になってきます。

(N.S.)

CICSJ Bulletin Vol.19, No.5, September 2001

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24回情報化学討論会

・部会行事

第 24 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

協賛　教育システム情報学会

会期　2001 年 11 月 7 日(水)～9 日(金)

会場　徳島大学蔵本キャンパス［徳島市蔵本 3・庄町 1］

交通　JR 徳島駅前バスターミナル 1 番乗り場より市バス 1,4,17,19 系統，「医学部前」下車後すぐ。

講演時間　特別講演 50 分(第 1 日)または 60 分(第 2 日)，招待講演 40 分，一般講演 15 分です。座長は交渉中の方を含みます。詳細については URL: http://www-chemist.is.tokushima-u.ac.jp/cicsj24/もご覧下さい。

プログラム

［長井記念ホール］特別講演，招待講演，一般講演

第 1 日（11 月 7 日）

座長　藤田稔夫（13:00～13:50）

JK01［特別講演］構造活性相関と SF 物語（徳島大薬）寺田 弘

座長　相田美砂子（13:50～14:40）

JK02［特別講演］私の構造活性相関（お茶の水女子大理）細矢 治夫

座長　藤原 巌（14:50～15:20）

JK03　ニューラルネットワークを用いた構造活性相関（産業技術総研）長嶋 雲兵

JK04　有向グラフを用いた水クラスターの安定構造の数え上げ(広大院理)○三宅 敏子，相田 美砂子

座長　高木達也（15:20～15:50）

JK05　Hopfield ニューラルネットワークを用いた分子構造重ね合わせ手法（豊橋技科大）○荒川 正幹，船津 公人

JK06　Challenge における化学物質による発ガン性の予測（関西学院大）岡田 孝

座長　篠原康雄（15:50～16:20）

JK07　成長型薬物催奇形性情報コミュニティの構築（徳島大薬）○山内 あい子，石井 真吾，木原 勝，中馬 寛，寺田 弘

JK08　セファランチンの立体構造と非フェノール型ラジカル消去活性（徳島大薬，徳島大工，化研生薬）○後藤 了，小暮 健太朗，安部 一豊，堀 均，中馬 寛，赤須 通範，寺田 弘

座長　石黒正路（16:20～17:00）

JK09［招待講演］「タンパク質・阻害剤の会合過程 ＆ 脂質 2 重層膜の動的物性の解析」－創薬手法の開発に向けて（大正製薬）北村 一泰

［大塚講堂］特別講演

第２日（11 月８日）

座長　寺田 弘（16:30～17:30）

JK10［特別講演］ 直線自由エネルギー関係則はどこまで成立するか（九大名誉）都野 雄甫

座長　時田澄男（17:30～18:30）

JK11［特別講演］ IT 時代の量子化学（大阪市大名誉）西本 吉助

［歯学部４Ｆ大講義室］招待講演，一般講演

第２日（11 月８日）

座長　船津公人（8:30～9:10）

J01［招待講演］ 教育・学習システムの動向（徳島大工）矢野 米雄

座長　中山伸一（9:25～10:10）

J02　多次元的な分子構造の理解を支援する協調型仮想環境（徳島大工，徳島大薬）○矢野 謙典，馮 誠，中馬 寛，矢野 米雄

J03　生物系学科での情報化学教育（創価大工）伊藤 眞人

J04　Excel による BASIC プログラムのリユース法と創発によるものつくり教育（福井工業高専）吉村 忠与志

J05　サラウンドスクリーン投影型仮想現実感表示装置を利用した原子軌道の複数等値曲面表示（埼玉大工，お茶の水女子大理）○杉山 孝雄，時田 澄男，細矢 治夫

座長　大和田智彦（10:20～11:20）

J06　ICSD を利用する結晶構造可視化ソフトウェアの開発（埼玉大工）○野口 文雄，小林 秀彦

J07　化学反応アニメーション - コンピュータ顕微鏡 -（東京学芸大院教育，東京学芸大教育）○田村 俊介，生尾 光，寺谷 敞介

J08　遠隔カンファレンスを実現した画像チャットシステムの構築（徳島大歯）○森川 富昭，西野 瑞穂，有田 憲司

J09　ノンパラメトリック回帰による化学プロセスの非線形モデリング（三菱化学科学技術研究セ）○藤井 宏行，大北 和弘

座長　高田 章（11:20～12:00）

J10［招待講演］企業の研究開発における情報化学活用の課題（三井化学）三戸 邦郎

第３日（11 月９日）

座長　相馬 融（8:30～10:00）

J11　ＪＳＴ高分子データベース PoLyInfo　- データベースの機能 -（科技団データベース開発部，三菱総研）塩野 圭介，前田 知子，○川島 潤，飯室 茂，間下 健太郎，長阪 匡介，高枝 佳男，吉成 泰彦，松田 和宏

J12 パソコンで稼動するNMRスペクトルデータベースシステム（エヌエムアールデービテック）早水 紀久子

J13 情報化学討論会講演要旨集発表記事の計量情報学的分（図書館情報大）小野寺 夏生

J14 化学反応の類似性を識別するReactionSimilarity (ReacSim) Vectorの提案と反応分類（国立情報研 科技団さきがけ 21，豊橋技科大工，理化学研）○佐藤 寛子，船津 公人，中田 忠

J15 トポロジカルフラグメントスペクトル（TFS）ピーク同定システムの開発（豊橋技科大）○藤島 悟志，高橋 由雅

J16 高分子材料の分光スペクトルの解釈方法の検討（一関高専）○貝原 巳樹雄，秋山 尚希，伊藤 理，小野寺 智

座長　中野英彦（10:10～11:40）

J17 分子ミュージックに関する研究：DNA ミュージック（豊橋技科大）○川添 康司，高橋 由雅

J18 XyMML(XyM Markup language)のブラウザー表示（京都工繊大院材料科学）田中 伸也，石丸 勉，○藤田 眞作

J19 DNA塩基配列からのイントロンを持ったtRNA遺伝子の検出（山形大工）○木ノ内 誠，工藤 喜弘

J20 ヒトmRNA遺伝子のイントロンの塩基配列（山形大工）○工藤 喜弘，木ノ内 誠

J21 13C-NMR 化学シフト精密予測システム CAST/CNMR の開発（理化学研，国立情報学研，科技団さきがけ 21）○越野 広雪，佐藤 寛子，中田 忠

J22 アミノ酸残基の三次元的配置の類似性に基づくタンパク質機能発現部位の発見法（図書館情報大）○中山 伸一，川崎 義裕，松田 志帆，神矢 安希子，吉田 政幸

座長　高畠哲彦（11:40～12:20）

J23［招待講演］ 遷移状態構造ライブラリーの構築（山口大工）堀 憲次

座長　重光保博（13:30～14:30）

J24 大規模系のための汎用分子動力学シミュレータの開発（産業技術総合研）○三上 益弘，篠田 渉，劉 子敬，川田 正晃

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　その三 システム化技術（富士通，セイラシステム，産業技術総合研）○南 多善，増田 裕寿，三井 崇志，佐々木 幹夫，三上 益弘，篠田 渉，劉 子敬，川田 正晃，池庄司 民夫，森川 良忠，小川 浩，田中 真悟

J26 カノニカル・モンテカルロシミュレーションによる Kr の LJ パラメータの推定と気液界面の構造（広島県立大）盛岡 良雄

J27 アミノ酸側鎖をプローブとした核酸塩基まわりの相互作用自由エネルギーマップの計算（広島大院理，理化学研）○吉田 智喜，相田 美砂子，皿井 明倫，マイケル・グロミハ

座長　坂本直紀（14:40～15:40）

J28　シリカガラス圧密化のトポロジー的研究（旭硝子中央研）高田 章

J29　配座異性体の気相および水溶液中における相対的安定性の違いについての理論的研究（広大院理）○相田 美砂子，山崎 美加，大野 啓一

J30　ab initio 法を用いたエンジインモデル化合物の分子設計（徳島大薬）○鈴木 一郎，土屋 優子，重永 章，根本 尚夫，中馬 寛，渋谷 雅之

J31　2-ピリドン体の選択的光付加環化反応の MO による遷移状態解析（鹿児島大工）○染川 賢一，Huda I. Omar，大戸 朋子，下茂 徹朗

座長　相田美砂子（15:50～16:35）

J32　芳香族性に関する理論的解析（大阪産業大）酒井 章吾

J33　タンパク質全電子波動関数自動計算へ向けた ProteinDF の統合環境の開発（九州工業大情報工学，富士総研）○佐藤 文俊，吉廣 保，住田 豊州，柏木 浩，溝内秀男，加藤 昭史，西川 宜孝，小池 秀耀

J34　タンパク質全電子計算プログラム ProteinDF の並列化　－オブジェクト指向技術による分散並列処理とその実行性能－（九州工業大情報工学）○吉廣 保，佐藤 文俊，柏木 浩

［蔵本会館 2F］ポスターセッション

第 2 日（11 月 8 日）

（13:00～14:20）

JP01　遺伝的アルゴリズムを用いた反応モデル自動解析システムの開発と評価（静岡大工，豊橋技科大知識情報工学）○高橋 崇宏，船津 公人，江間 義則

JP02　生体高分子配列データに関する討論用のデータベース（山形大工，奈良先端大）○林 稔久，木ノ内 誠，工藤 喜弘，金谷 重彦

JP03　バクテリア tRNA 遺伝子の新しい共通配列（山形大工，奈良先端大）○高田 直志，木ノ内 誠，工藤 喜弘，金谷 重彦

JP04　Java™ 言語を使用した化学研究支援ソフトウェア MolWorks™（ベストシステムズ，お茶の水女子大院人間文化，産業技術総研）○中山 尚史，後藤 成志，アンディ・スタビングス，田島 澄江，長嶋 雲兵

JP05　アンサンブル学習法の回帰分析への応用（地球環境産業技術研究機構，旭硝子中央研，産業技術総研）○浦田 新吾，高田 章，関屋 章

JP06　回帰・判別型統計解析手法におけるクロスバリデーションおよび関連手法の精度の比較検討（阪大院薬）黒川 絵美子，岡本 晃典，田中 優子，岡本 美代，宮田 幸治，黒川 顕，安永 照雄，○高木 達也

JP07　溶解パラメータの新しい推算法（花王構造解析セ）山下 修

JP08　原子の国のトムキンス（サラウンドスクリーン仮想現実感による原子軌道の表現（埼玉大工，お茶の水女子大理）○杉山 孝雄，時田 澄男，細矢 治夫，井門 俊治

JP09 ４次元の混成軌道の可視化（埼玉大工，お茶の水女子大理）○木戸 冬子，細矢 治夫，時田 澄男

JP10 構造活性相関研究のためのニューラルネットワークツール NNQSAR の開発（豊橋技科大）○安藤 秀一，高橋 由雅

JP11 反応形式を列挙するアルゴリズムの研究（京都工繊大院工芸科学）○大島 史寛，藤田 眞作

JP12 ITSProducer --- 虚遷移構造 (ITS) をキーとする有機反応データベース検索エンジン（京都工繊大院工芸科学）○田中 伸也，藤田 眞作

JP13 プロトン NMR スペクトルデータベース管理システムの開発（豊橋技科大知識情報工学）○林 良行，加藤 博明，阿部 英次

JP14 タンパク質三次元構造モチーフデータベースの作成（２）（豊橋技科大工）○加藤 博明，田所 哲男，宮田 博之，高橋 由雅，阿部 英次

JP15 有機化合物の匂いとトポロジカルインデックスとの相関解析（豊橋技科大工）○芦塚 雄介，阿部 英次，加藤 博明

JP16 有機構造の論理的に合理的な解析（山形大工）○原野 貴博，木ノ内 誠，工藤 喜弘

JP17 水素分子間相互作用の計算（富士総研，産業技術総研，核燃料サイクル開発機構）○松原　聖，福澤 薫，三上 益弘，高田 孝，岡野 靖，山口 彰

JP18 副反応評価システムによる合成経路設計システム AIPHOS の合成経路評価（三井化学，国立情報学研・科技団さきがけ 21，豊橋技科大）○塚本 幸治，佐藤 寛子，船津 公人

JP19 薬物催奇形性試用データベースシステムの構築（徳島大薬）○石井 真吾，山内 あい子，木原 勝，中馬 寛，寺田 弘

JP20 化学物質安全性データベースの開発（産業技術総研）○田辺 和俊，松本 高利

JP21 ドラグインフォマティクスのための、化合物、蛋白、薬理活性統合データベースの構築　（Ｉ）（富士ファコムシステム，富士通，味の素）佐藤 英俊，佐藤 利幸，○湯田 浩太郎，塩原 紀行，野々村 辰彦，高原 義之

(14:55～16:15)

JP22 リアルタイム操作を伴う分子軌道の電子雲表示 - 結合の回転に対する HOMO,LUMO 軌道の形状変化 -（中京大情報科学）○中 貴俊，秦野 やす世，山本 茂義，山田 雅之，宮崎 慎也

JP23 希ガスーアンモニアクラスターの構造と安定性（静岡理工科大理工）中山 勇馬，鈴木 啓允，渡辺 武彦，○関山 秀雄

JP24 蛋白質の α 炭素座標から主鎖構造の構築（三共創薬化学研）○岩田 依子，粕谷 敦，宮本 秀一

JP25 湯川－都野式における反応定数の理論的研究（法政大第一教養，九大有機化学基礎研究セ，岡山理科大）○中田 和秀，藤尾 瑞枝，太田 九二，西本 吉助，都

野 雄甫

JP26 マレイミド環を有する新規メロシアニン色素の電子スペクトルに関する分子軌道計算（長崎県工業技術セ，長崎大機器分析セ）○重光 保博，富永 義則

JP27 GCMC 法を用いた溶解度シミュレーション（地球環境産業技研機構，産業技術総研，旭硝子中央研，産業技術総研）○浦田 新吾，三上 益弘，高田 章，都築 誠二，内丸 忠史，関屋 章

JP28 Tsallis エントロピーによるミュレーテットアニーリング法を用いたコラーゲン様ペプチドの安定コンフォメーション探索（近畿大理工）○高橋 紘一，渡辺 理

JP29 フラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP における２電子積分ルーチンの高速化ならびに並列化と性能評価（富士総研，国立医薬品食品衛生研，産業技術総研）○稲富 雄一，中野 達也，北浦 和夫，長嶋 雲兵

JP30 非断熱遷移と見なされる 2 分子間励起エネルギー移動の速度定数の理論的定式化（通信総合研）○奥野 好成，益子 信郎

JP31 オピエート分子の構造に関する理論的研究（滋賀大教育）○水上 善博，清水 英里佳

JP32 ベックマン転位反応における無機酸共存効果の検討（宇部興産高分子研）○後口 隆，八尾 滋

JP33 PPP 分子軌道法計算における二中心電子反発積分の absolute hardness による見積もり（埼玉大工，日清紡，岡山理科大）○太刀川 達也，時田 澄男，蛭田 公広，西本 吉助

JP34 タンパク質全電子計算における擬カノニカル局在軌道計算の高速化（九州工業大情報工学，富士総研）○住田 豊州，吉廣 保，佐藤 文俊，柏木 浩，知久 季倫

JP35 ボラン及びボランカチオンのルイス酸性に関する計算化学的研究（高知大理）○藤山 亮治，清岡 俊一

JP36 リチウムクラスターの構造と安定性の量子化学的研究（明治薬大）溝口 則幸

JP37 2,2'-架橋ビスジメドン類における大環状水素結合(2) DFT 計算を用いた解析（京大院理）今城 文雄

JP38 ガングリオシドの高次構造の解析（お茶の水女子大理，東京医科歯科大歯）○能登 香，木村 梨香，鷹野 景子，横山 三紀

JP39 ヨウ化水素酸によるダイオキシン開裂反応の理論的研究（京大院工）○加藤 豪樹，笛野 博之，田中 一義

JP40 環状ヘキサペプチドとアルキルアミンからなる分子間会合体の分子力学法による検討（名大院工，創価大工）富永 昌英，○山木 政義，伊藤 眞人，井上 博愛

JP41 β-ヘアピンペプチドのフォールディング、アンフォールディング分子動力学シミュレーション（生物分子工学研，東京薬大，三菱東京製薬，阪大蛋白研）○神谷 成敏，肥後 順一，小野 聡，中村 春木

参加登録

参加登録費(当日)［一般］9,000 円；［学生］4,000 円 。(構造活性相関シンポジウムと共通)

ミキサー　11 月 7 日（水）19:00 より　ホテルグランドパレス徳島にて。
会費:［一般･学生］2,000 円(予定；当日受付)。

懇親会　11 月 8 日（木）19:00 より，ホテルグランドパレス徳島にて。
会費(当日)：［一般］8,000 円　［学生］6,000 円

連絡先　770-8506　徳島市南常三島町 2-1　徳島大学工学部知能情報工学科　矢野 米雄 Tel: 088-656-7495；Fax：088-623-2761
E-mail: cicsj24-desk@is.tokushima-u.ac.jp
URL: http://www-chemist.is.tokushima-u.ac.jp/cicsj24/

(御都合により WWW を御利用になれない方は，上記連絡先までお問い合わせ下さい)

第 29 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）

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，日本化学プログラム交換機構，構造活性相関研究会

会期　2001 年 11 月 7 日(水)～9 日(金)

会場　徳島大学蔵本キャンパス［徳島市蔵本 3・庄町 1］

交通　JR 徳島駅前バスターミナル 1 番乗り場より市バス 1,4,17,19 系統，「医学部前」下車後すぐ。

講演時間　特別講演 50 分(第 1 日)または 60 分(第 2 日)，招待講演 40 分，一般講演 15 分または 25 分(講演番号の末尾に*印)です。座長は交渉中の方を含みます。詳細についてはURL: http://www-chemist.is.tokushima-u.ac.jp/qsar29/もご覧下さい。

プログラム

［長井記念ホール］特別講演，招待講演，一般講演

第 1 日（11 月 7 日）

座長　藤田稔夫（13:00～13:50）

JK01［特別講演］構造活性相関と SF 物語（徳島大薬）寺田 弘

座長　相田美砂子（13:50～14:40）

JK02［特別講演］私の構造活性相関（お茶の水女子大理）細矢 治夫

座長　藤原 巌（14:50～15:20）

JK03　ニューラルネットワークを用いた構造活性相関（産業技術総研）長嶋 雲兵

JK04　有向グラフを用いた水クラスターの安定構造の数え上げ（広島大院理）○三宅 敏子，相田 美砂子

座長　高木達也（15:20～15:50）

JK05　Hopfield ニューラルネットワークを用いた分子構造重ね合わせ手法（豊橋技科大）○荒川 正幹，船津 公人

JK06　Challenge における化学物質による発ガン性の予測（関西学院大）岡田 孝

座長　篠原康雄（15:50～16:20）

JK07　成長型薬物催奇形性情報コミュニティの構築（徳島大薬）○山内 あい子，石井 真吾，木原 勝，中馬 寛，寺田 弘

JK08　セファランチンの立体構造と非フェノール型ラジカル消去活性（徳島大薬，徳島大工，化研生薬）○後藤 了，小暮 健太朗，安部 一豊，堀 均，中馬 寛，赤須 通範，寺田 弘

座長　石黒正路（16:20～17:00）

JK09［招待講演］「タンパク質・阻害剤の会合過程 ＆ 脂質 2 重層膜の動的物性の解析」－創薬手法の開発に向けて（大正製薬）北村 一泰

第2日（11月8日）

座長　赤松美紀（8:50～～9:20）

K01　連続フロー分析法(流量比法)に基づく分配係数の測定（徳島大薬）○橘 貴寛，山本 優子，田中 秀治，中馬 寛

K02　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(2)　- HIV-プロテアーゼ阻害剤の解析への応用(I)（富士総研，日本たばこ，産業技術総研，九大，徳島大薬）○稲垣 祐一郎，馮 誠，大谷 泰昭，岡島 伸之，長島 雲兵，村上 和彰，中馬 寛

座長　宮本秀一（9:20～10:00）

K03　ピラジン類縁体の構造・電子状態とにおいとの関係（日本たばこ中央研，横浜国大工）○島崎 和子，井上 貴詞，志方 比呂基，榊原 和久

K04*　二次元，及び三次元分子記述子を用いた7種類のQSAR法をドーパミンD1アンタゴニストに適用した結果の比較研究（サイビジョン社，東ナザレ大，バージニア州立大）○ジョセフ・ボタノ，ローウェル・ホール，レモント・キール

座長　淀 光昭（10:15～11:20）

K05　NMRと分子動力学計算による構造解析に基づいたminiANPのアナログデザイン（サントリー生物有機科学研，サントリー生物医学研，阪大タンパク質研）○菅瀬 謙治，小山 嘉晃，北野 勝彦，岩下 孝，藤原 敏道，阿久津 秀雄，石黒 正路

K06*　アセチルコリンエステレースの負電荷をもつ部位であるASP 72およびTRP 84とその阻害剤であるリバスティグミンの4級アンモニウム部位との間の結合のエネルギー解析（分子研）藤田 忠男

K07*　分子動力学法による立体配座集団のサンプリングと3次元データベース検索法を用いたヒト血清アルブミンに対するキラルな薬物の結合様式の決定（北里大薬）○山乙 教之，松下 泰雄，広野 修一

座長　藤原英明（11:20～12:00）

K08［招待講演］ポストゲノムシークエンスにおけるNMRの役割（東大院薬）嶋田 一夫

第3日（11月9日）

座長　清水 良（8:30～9:35）

K09　抗変異原性を有するベンザルアセトン誘導体の定量的構造活性相関（神戸薬大，京大院農）○山上 知佐子，本橋 範子，赤松 美紀

K10*　昆虫培養細胞系を用いた脱皮ホルモンアゴニストの定量的構造活性相関（京大院農）○水口 智江可，岸川 英敏，髙橋 かおる，中川 好秋

K11*　受容体P450構造に基づいたアゾール系殺菌剤の構造活性相関　～受容体の3Dモデリングとメトコナゾールとの相互作用～（呉羽化学，徳島大薬）○菊池 真

美，須藤 敬一，伊藤 篤史，熊沢 智，中馬 寛

座長　中馬 寛（9:35～10:15）

K12［招待講演］分子認識糖鎖リガンドミミックとその応用（塩野義製薬）近藤 裕郷

座長　中山 章（10:25～10:55）

K13　ニューラルネットワークを用いた薬効の自動識別（日本新薬創薬研）丹羽 朋子

K14　構造類似性を基礎とした化学物質の毒性予測のシステム化に関する研究（豊橋技科大）○石原 由一朗，高橋 由雅

座長　岡島伸之（10:55～11:35）

K15*　オリゴペプチドおよび関連化合物の構造と細胞透過性の関係（京大院農）○阿野 理恵子，木村 幸敬，島 元啓，松野 隆一，赤松 美紀

K16　計算化学パラメータを用いた情報化学的手法による反応性予測の試み（第一製薬製薬技術研，山口大工，豊橋技科大工）○岡野 克彦，佐藤 耕司，宮寺 彰彦，堀 憲次，船津 公人

座長　高橋由雅（11:35～12:25）

K17*　FUGUEによる微生物ゲノム由来仮説蛋白質のアノテーション（ケンブリッジ大，田辺製薬創薬研）○白井 宏樹，トム・ブランデル，水口 賢司

K18*　Gタンパク質結合受容体(GPCR)のモデリングデータベース（北里大薬）○岩舘 満雄，川北 栄継，梅山 秀明

座長　梅山秀明（13:30～14:10）

K19［招待講演］細胞のコンピュータシミュレーション（慶応大）冨田 勝

座長　広野修一（14:10～14:50）

K20［招待講演］マイクロ・ナノチップテクノロジー　－ポスト・ゲノムシークエンス時代の次世代ゲノム・プロテオーム解析技術－（徳島大薬）馬場 嘉信

座長　有国 尚（15:00～16:30）

特別企画：インシリコバイオロジーセッション

［大塚講堂］特別講演

第2日（11月8日）

座長　寺田 弘（16:30～17:30）

JK10［特別講演］直線自由エネルギー関係則はどこまで成立するか（九大名誉）都野雄甫

座長　時田澄男（17:30～18:30）

JK11［特別講演］IT時代の量子化学（大阪市大名誉）西本 吉助

［蔵本会館2F］ポスターセッション

第2日（11月8日）

（13:00～14:20）

KP01　分配係数 log P の非経験的予測（徳島大薬）○森 充史，田中 秀治，中馬 寛

KP02　体積比変化を利用したフラスコ振とう法による分配係数の測定（徳島大薬）○山本 優子，有塚 桐子，田中 秀治，中馬 寛

KP03　連続フロー分析法によるフェノール置換体の分配係数の測定（徳島大薬）○有塚 桐子，橘 貴寛，田中 秀治，中馬 寛

KP04　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(3) - HIV-プロテアーゼ阻害剤の解析への応用(II)（富士総研，日本たばこ，産業技術総研，九大，徳島大薬）○馮 誠，稲垣 祐一郎，大谷 泰昭，岡島 伸之，長島 雲兵，村上 和彰，中馬 寛

KP05　Modal Fingerprint による複数の活性分子からの情報抽出と VirtualScreening への応用（大正製薬）○小田 晃司，山野辺 進，高岡 雄司，北村 一泰

KP06　糖脂質アナログの構造とレクチンとの相互作用（野口研，立命館大理工）○佐藤 玲子，戸澗 一孔，畦布 康朗，民秋 均

KP07　受容体 P450 構造に基づいたアゾール系殺菌剤の構造活性相関　～チトクローム P450 14a-デメチラーゼ（Cyp51）のホモロジー検索～（呉羽化学，徳島大薬）○須藤 敬一，菊池 真美，伊藤 篤史，熊沢 智，中馬 寛

KP08　ステロイド受容体リガンド結合ドメインにおいて高度に保存されているアミノ酸残基（農業生物資源研）前田 美紀

KP09　TFS 法を用いた価電子分布特性スペクトルと構造類似性評価（豊橋技科大）○及部 健一，高橋 由雅

KP10　環境ホルモン；エストロジェン様化合物の構造活性相関に関する理論的研究（立教大理，国立医薬品食品衛生研，産業技術総研）○山岸 賢司，常盤 広明，中野 達也，長嶋 雲兵

KP11　ＱＴ延長作用を有する Dofetilide 類縁化合物の CoMFA 解析（北里大薬）○中込 泉，広野 修一

(14:55～16:15)

KP12　ニューラルネットワーク法による脂肪族ハロゲン化物の変異原性の予測（産業医学総研，日本バイオアッセイ研究セ）○猿渡 雄彦，中西 良文，松島 泰次郎

KP13　立体配座解析および分子重ね合わせ法によるトランスポーター "cMOAT/MRP2" に対するリガンド化合物の共通三次元構造特徴の抽出（北里大院薬）○今井 梨恵，広野 修一

KP14　植物性プランクトンの生長に対するアニリン類の生態毒性（東北薬大）○遠藤 勝也，青田 祐子

KP15　CASP4 における北里大グループによるモデリング結果（北里大薬）○海老沢 計慶，岩舘 満雄，森 理江，栗原 庸次，竹田-志鷹 真由子，梅山 秀明

KP16　細胞溶解毒素インターメディリシンのヒト細胞認識機構解析：膜結合領域によるヒト細胞の特異的認識（徳島大工、名大院生命農学，徳島文理大）○大倉 一

人，大和 美紀，佐藤 康隆，小川 太郎，津下 英明，勝沼 信彦，髙麗 寛紀，長宗 秀明

KP17 ヒト血清アルブミンに対する Warfarin の結合配座決定と複合体モデルの構築（北里大薬）○松下 泰雄，道券 孝子，広野 修一

KP18 ヒト血清アルブミンに対する tamoxifene の結合配座決定と複合体モデルの構築（北里大薬）○道券 孝子，松下 泰雄，広野 修一

KP19 分子重ね合わせ法の開発（医薬分子設計研）○野中 はるみ，富岡 伸夫，板井 昭子

KP20 アレルギー活性糖鎖の溶液中におけるコンフォメーション解析（東和大工，福山大工，日本電子データム，日本電子，広島大工）加藤 祐子，太田 雅也，○宗像 達夫，藤原 正子，藤井 直之，重田 征子，松浦 史登

KP21 フラグメント MO 法を用いた核内受容体とリガンドとの結合エネルギーの理論予測（富士総研，国立医薬品食品衛生研）○福澤 薫，中野 達也，中田 琴子，神沼 二眞，宮田 直樹

参加登録

参加登録費(当日)［一般］9,000 円；［学生］4,000 円。(情報化学討論会と共通)

ミキサー 11 月 7 日（水）19:00 より　ホテルグランドパレス徳島にて。会費:［一般・学生］2,000 円(予定；当日受付)。

懇親会 11 月 8 日（木）19:00 より　ホテルグランドパレス徳島にて。会費(当日)：［一般］8,000 円　［学生］6,000 円

連絡先 〒770-8505　徳島市庄町 1-78-1 徳島大学薬学部薬品分析学教室　中馬 寛
Tel: 088-633-7257,　Fax: 088-633-9508
E-mail: qsar29-desk@is.tokushima-u.ac.jp
URL: http://www-chemist.is.tokushima-u.ac.jp/qsar29/

(御都合により WWW を御利用になれない方は，上記連絡先までお問い合わせ下さい)

第24回情報化学討論会　発表の概要

J01

教育・学習システムの動向

（徳島大工）矢野 米雄

インターネットの出現により，個々の教育・学習が collaboration を伴ったネットワーク型学習へ変わりつつある。本稿では，教育・学習システムの歴史的変遷と，最近の CSCW（協調作業），CSCL(協調学習)の動向について概観する。そして，情報化学分野における化学教育・学習への適応について考察する。

J02

多次元的な分子構造の理解を支援する協調型仮想環境

（徳島大工，徳島大薬）○矢野 謙典，馮 誠，中馬 寛，矢野 米雄

近年コンピュータの処理能力向上に伴い，化学教育において，配座表現などの多次元的な構造特徴を視覚的に理解させるための研究が進められている。本稿では，分子の多次元的な構造特徴を可視化しユーザ間の協調的な直接操作により，これまで実現が困難であった構造特徴の理解を支援するシステムについて述べる。

J03

生物系学科での情報化学教育

（創価大工）伊藤 眞人

生物系学科での情報化学の基礎教育の一例として，本学の 3,4 年生を対象とする，Chemcal Abstracts や Internet による文献検索と，分子力学法およびヒュッケル分子軌道法についての基礎的な講義と簡単な演習の概要を紹介する。生物系学科で情報化学教育を行う上での問題点について諸賢のご指導・ご助言を賜りたい。

J04

Excel による BASIC プログラムのリユース法と創発によるものつくり教育

（福井工業高専）吉村 忠与志

（概要非公開）

J05

サラウンドスクリーン投影型仮想現実感表示装置を利用した原子軌道の複数等値曲面表示

（埼玉大工，お茶の水女子大理）○杉山 孝雄，時田 澄男，細矢 治夫

１辺３ｍの立方体の４面に連続立体画像を投影する装置(CAVE(TM))を利用して，原子軌道の表示を行った。原子軌道の等値曲面を，関数値を変えて同時に半透明な面で複数表示した。この装置は，４面スクリーンの内側で自由に視点を動かすことができるため，等値曲面の内部に入っていく感覚が得られた。この結果，平面の単一ディスプレイでは不可能であった軌道形状と関数値変化の同時認識が実現できた。

J06

ICSD を利用する結晶構造可視化ソフトウェアの開発

（埼玉大工）○野口 文雄，小林 秀彦

無機結晶データベース（ICSD）には約６万件の結晶データが収録されている。これらデータは，ICSD からテキスト形式のファイル(CIF)で出力される。CIF の空間群同価点座標の文字列解析を行い，原子座標を自動生成させ，原子球あるいは配位多面体による広範な結晶構造を Web ブラウザ上で可視化できるソフトウェアを開発した。

J07

化学反応アニメーション -コンピュータ顕微鏡-

（東京学芸大院教育，東京学芸大教育）○田村 俊介，生尾 光，寺谷 敞介

学習者の様々な発見を可能とする化学反応アニメーションを開発した。自由な角度から分子構造を確認できる三次元回転アニメーション，反応系のHOMO，LUMO回転表示，反応過程を自由に行き来できるコントローラー操作は化学反応の理解を深める。

J08

遠隔カンファレンスを実現した画像チャットシステムの構築

（徳島大歯）○森川 富昭，西野 瑞穂，有田 憲司

地域の医療機関がネットワークを通じて近隣の中核病院の最新技術，専門的知識を活用し医療を行える情報通信環境が整備されなければならない。そこで，我々はインタネットを利用し，地域の医院や病院と中核となる大学病院との病診連携システムの構築を行ったので報告する。

J09

ノンパラメトリック回帰による化学プロセスの非線形モデリング

（三菱化学科学技術研究セ）○藤井 宏行，大北 和弘

非線型性の強い化学プロセスにおける因果関係モデルを，ニューラルネット，遺伝子プログラミングに加え，統計における代表的な非線型モデリング手法であるノンパラメトリック回帰のACE・MARSを適用，比較した。ACEによりデータから化学反応のメカニズムを反映した式が得られる等，興味深い結果が得られた。

J10

企業の研究開発における情報化学活用の課題

（三井化学）三戸 邦郎

ITの革新に伴い，誰もが容易に最先端の情報を瞬時に入手したり，複雑なデータ処理や理論計算を手軽に実施できる環境が整ってきたが，その活用は，未だ，限定されている。化学企業の研究開発部門に属している演者の立場から，情報化学（計算化学を含む）活用の試みの中で顕在化してきた課題を整理し，有効活用に向けての方策を探る。

J11

JST高分子データベースPoLyInfo －データベースの機能－

（科技団データベース開発部，三菱総研）塩野 圭介，前田 知子，○川島 潤，飯室 茂，間下 健太郎，長阪 匡介，高枝 佳男，吉成 泰彦，松田 和宏

高分子データベース”PoLyInfo”の開発において，オブジェクト指向分析法を適用して得られた高分子のデータモデルに基づいて実装したシステム（http://triton.tokyo.jst.go.jp にて公開中）について，ポリマーおよびモノマー双方からの検索機能，化学構造検索機能，検索結果の表示や画面遷移などについて紹介する。

J12

パソコンで稼動するNMRスペクトルデータベースシステム

（エヌエムアールデービテック）早水 紀久子

（概要非公開）

J13

情報化学討論会講演要旨集発表記事の計量情報学的分析

（図書館情報大）小野寺 夏生

これまでの情報化学討論会講演要旨集に発表された記事を，主題，著者及びその所属機関の

観点から計量的に分析し，その傾向を経時的に把握するとともに，Journal of Chemical Information and Computer Sciences 掲載論文に対して著者が最近行った計量分析の結果と比較した。

J14
化学反応の類似性を識別する Reaction Similarity (ReacSim) Vector の提案と反応分類
（国立情報研 科技団さきがけ 21，豊橋技科大工，理化学研）○佐藤 寛子，船津 公人，中田 忠
化学反応の定量的予測を目指し，反応の数値的表現と分類に基づく反応の体系化・知識化の研究を行っている。今回は反応の類似性を識別するための新しい尺度として Reaction Similarity (ReacSim) vector を提案し，ReacSim vector による反応分類の結果について報告する。

J15
トポロジカルフラグメントスペクトル（TFS）ピーク同定システムの開発
（豊橋技科大）○藤島 悟志，高橋 由雅
当研究室では，化学構造の定量的記述表現の一つとして，TFS (Topological Fragment Spectra) 法を提案している。本研究では，その生成されたスペクトルの，各ピークに対応する生成フラグメントを同定するためのアルゴリズムの考案と，そのシステム化を試みたので報告する。

J16
高分子材料の分光スペクトルの解釈方法の検討
（一関高専）○貝原 巳樹雄，秋山 尚希，伊藤 理，小野寺 智
（概要非公開）

J17
分子ミュージックに関する研究：DNA ミュージック
（豊橋技科大）○川添 康司，高橋 由雅
本研究では，分子情報の表現方法の一つとして，構造情報を音や音楽情報として表現することの可能性を考察することを目的とする。ここでは DNA の塩基配列を対象に，一定のアルゴリズムにしたがって各塩基に音符情報を付与するとともに MIDI ファイルへの変換を行い，音源ユニットを用いて出力するシステムを試作したので報告する。

J18
XyMML(XyM Markup language)のブラウザー表示
（京都工繊大院材料科学）田中 伸也，石丸 勉，○藤田 眞作
演者らは，インターネットコミュニケーションのためのマークアップ言語として，XyMML (XyM Markup Language)を提案している。今回これを XSLT によって解釈して，ブラウザー表示することを検討した。XSLT によりえた XyM Notation を XyMJava にかけることによって，ディスプレイへ表示することができた。

J19
DNA 塩基配列からのイントロンを持った tRNA 遺伝子の検出
（山形大工）○木ノ内 誠，工藤 喜弘
我々はゲノム DNA 塩基配列の中から tRNA 遺伝子を検出する手順を開発してきた。本手順は全 tRNA 遺伝子を明らかにするために，再現率を落さずに高い適合率を獲得することを目標としている。今回，古細菌やヒトを初めとした真核生物に見られるイントロンを持った tRNA 遺伝子を検出できるように手順を改良したので報告する。

J20

ヒト mRNA 遺伝子のイントロンの塩基配列

（山形大工）○工藤 喜弘，木ノ内 誠

ヒトの mRNA のイントロンのスプライシング経路としていままで主と副の二つの経路が知られている。イントロンへの関心が薄い遺伝子探索者によるイントロン解釈の盲信は危険であるが，GT／AG 型，AT／AC 型以外で増大している報告例の一部は明らかに第三の群を形成している。そして第三の経路の存在が浮かび上がる。

J21

13C-NMR 化学シフト精密予測システム CAST/CNMR の開発

（理化学研，国立情報学研，科技団さきがけ 21）○越野 広雪，佐藤 寛子，中田 忠

立体化学の規範的コード化法 CAST により分子の立体配置，配座，任意の原子近傍の立体化学の識別について報告してきた。今回 CAST を用いた NMR データベースを用いて，立体異性体の識別が可能な精度で 13C-NMR 化学シフトを予測するシステム CAST/CNMR を開発したのでその概要について報告する。

J22

アミノ酸残基の三次元的配置の類似性に基づくタンパク質機能発現部位の発見法

（図書館情報大）○中山 伸一，川崎 義裕，松田 志帆，神矢 安希子，吉田 政幸

タンパク質の機能発現部位がどこにあるかを明らかにすることは，タンパク質研究の大きな課題である。我々は類似した機能を持つタンパク質間に共通な三次元的配置を持つアミノ酸残基群を見つけることにより，タンパク質の機能発現部位を発見できると考えた。今回，最大完全部分グラフを用いてその方法論の妥当性を検討したので報告する。

J23

遷移状態構造ライブラリーの構築

（山口大工）堀 憲次

情報化学的手法を用いた合成経路設計システムは，既に一部実用化されている。本研究では，船津らの開発した合成経路設計システム AIPHOS と溶媒効果を取り入れた半または非経験的分子軌道計算の連携により，効率よく新規または既知化合物の新規合成経路創製を可能とする遷移状態データベース開発の概要について述べる。

J24

大規模系のための汎用分子動力学シミュレータの開発

（産業技術総合研）○三上 益弘，篠田 渉，劉 子敬，川田 正晃

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の開発を進めている。本シミュレータは，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の技術やポテンシャル関数を容易に組み込むことができるようにした。本講演では，大規模汎用分子動力学シミュレータの概念設計，データ構造，機能について報告する。

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 その三 システム化技術

（富士通，セイラシステム，産業技術総合研）○南 多善，増田 裕寿，三井 崇志，佐々木 幹夫，三上 益弘，篠田 渉，劉 子敬，川田 正晃，池庄司 民夫，森川 良忠，小川 浩，田中 真悟

TACPACK2000 システムは，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統合化システムからなる。本講演では，分子・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 を採用した新しいデータベース管理技術と複雑物質を効果的に表示するための三次元高速グラフィックスについて報告する。

J26

カノニカル・モンテカルロシミュレーションによる Kr の LJ パラメータの推定と気液界面の構造

（広島県立大）盛岡 良雄

液体表面には，密度の著しく異なる部分が共存するが，特別な工夫によりカノニカル集合によるシミュレーションを可能にした。Kr の密度と蒸気圧の実測値を基に，状態式に適合した LJ パラメータを決定した。液体表面の構造を明らかにするとともに，蒸発熱や表面張力などの物性値を推定し実測値との一致を確かめた。

J27

アミノ酸側鎖をプローブとした核酸塩基まわりの相互作用自由エネルギーマップの計算

（広島大院理，理化学研）○吉田 智喜，相田 美砂子，皿井 明倫，マイケル・グロミハ

アミノ酸側鎖モデル分子と核酸塩基間の相互作用を表す自由エネルギーマップを計算した。自由エネルギーは extensive sampling によりモデル分子の構造を数多く発生させ，力場により得られた各々の相互作用エネルギーの統計平均をとることで求める。これによりタンパク質による DNA 特異的認識の理論的理解を目指す。

J28

シリカガラス圧密化のトポロジー的研究

（旭硝子中央研）高田 章

シリカガラスは加圧により複雑な振る舞いを示す。同じ４配位でありながら圧密化した状態が存在するが，どのような原子構造になっているかまだよくわかっていない。今までに，分子動力学法を用いて Si-O リング数の観点から解析を進めてきたが，本研究ではさらにトポロジカルな観点に重点を置いた解析を行い，圧密化のメカニズムを解釈する。

J29

配座異性体の気相および水溶液中における相対的安定性の違いについての理論的研究

（広大院理）○相田 美砂子，山崎 美加，大野 啓一

1,2-ジメトキシエタンにはいくつかの安定な配座異性体が存在するがその安定性の順番は気相中と水溶液中では異なることが知られている。そこで，気相中および水溶液中における安定性および存在割合を，ab initio MO 法および QM/MM 法を用いた ab initio MD 法によって求め，その違いが何によって引き起こされているのかについて明らかにする。

J30

ab initio 法を用いたエンジインモデル化合物の分子設計

徳島大薬）○鈴木 一郎，土屋 優子，重永 章，根本 尚夫，中馬 寛，渋谷 雅之

デヒドロトルエンビラジカルは基底一重項ビラジカルであり，高いイオン性を有している。この性質は抗腫瘍性抗生物質ネオカルチノスタチンの生体内無毒化機構とも関連することが指摘されており，イオン性の抑制が，抗ガン剤の分子設計において重要と考えられる。本発表では種々のビラジカルの反応性について ab initio 計算を用いて検討した結果を中心に DNA 切断活性との関連について述べる。

J31

２－ピリドン体の選択的光付加環化反応の MO による遷移状態解析

（鹿児島大工）○染川 賢一，Huda I. Omar，大戸 朋子，下茂 徹朗

２－ピリドン体（１）は励起一重項から endo-3,4-付加体（３）と特異な八員環化物（５），三重項から exo-5,6-付加体（４）等を主に与える。本報では MOPAC を用いて遷移状態 (TS) 解析し，三重項でのビラジカル中間体から４が生成する過程，および一重項の協奏反応で３と特異な５が生成するルートを明らかにする。

J32

芳香族性に関する理論的解析

（大阪産業大）酒井 章吾

ベンゼンの芳香族性とケクレ型に対し我々は先に原子軌道様の基底で配置間相互作用の計算 (CiLC)を行うことにより明確に区別することが可能であることを示した。この CiLC 計算の結果をより一般的に広く使用することの可能性について検討を行った。

J33

タンパク質全電子波動関数自動計算へ向けた ProteinDF の統合環境の開発

（九州工業大情報工学，富士総研）〇佐藤 文俊，吉廣 保，住田 豊州，柏木 浩，溝内 秀男，加藤 昭史，西川 宜孝，小池 秀耀

発表者ら（F.S.，T.Y.，H.K.）は密度汎関数法プログラム ProteinDF を開発し，金属タンパク質の全電子計算に成功した。本発表ではタンパク質の全電子計算を達成するために必要な経験や工夫をプログラム化した自動計算法を中心にタンパク質の分子軌道計算を支援するシステムについて報告する。

J34

タンパク質全電子計算プログラム ProteinDF の並列化 －オブジェクト指向技術による分散並列処理とその実行性能－

（九州工業大情報工学）〇吉廣 保，佐藤 文俊，柏木 浩

発表者らは密度汎関数法に基づく分子軌道法プログラム ProteinDF を発展させてきた。タンパク質の全電子計算を実行するためにワークステーションクラスタによる分散並列処理システムへの適用を考え ProteinDF の並列化を行った。本講演ではオブジェクト指向技術を用いた並列化法とその性能について報告する。

JK02

私の構造活性相関

（お茶の水大）細矢 治夫

BCSJ の 1971 年の９月号に出た topological index (Z index)の論文が，情報化学の分野での私の最初の論文である。以後グラフ理論の化学への応用というテーマを追い続けて来たが，これは情報化学の中では亜流だと，自分でも思っている。一方 1964 年の JACS の Hansch-Fujita の論文以来，構造活性相関の分野は大きく発展している。これらの学問的な流れと，私の中での「構造活性相関」の動きを，あわせて追って見たい。

JK03

ニューラルネットワークを用いた構造活性相関

（産業技術総研）長嶋 雲兵

非線形フィッテイング機能を持つ学習付きニューラルネットワークを用いた構造活性相関について，プログラム開発の現状といくつかの研究結果について報告する。

JK04

有向グラフを用いた水クラスターの安定構造の数え上げ

（広島大院理）〇三宅 敏子，相田 美砂子

本研究では水クラスター$(H_2O)n$ の構造を有向グラフに置き換え，水素結合のパターンを全て

数え上げ，n≦5 について ab initio MO 計算によりその水素結合のパターンを満たす水クラスターが存在するかどうか調べた。さらに ab initio MD 計算を実行し安定構造間の構造変化の様子を調べた。

JK05

Hopfield ニューラルネットワークを用いた分子構造重ね合わせ手法

（豊橋技科大）○荒川 正幹，船津 公人

Hopfield ニューラルネットワークを用いた新しい分子構造重ね合わせ手法を提案する。適用例として cyclooxygenase-2 inhibitors 54 種に対し，本手法による重ね合わせ及び CoMFA 法による 3D-QSAR 解析を行った結果を示す。

JK06

Predictive Toxicology Challenge における化学物質による発ガン性の予測

（関西学院大情報メディア教育セ）岡田 孝

本年９月に開催される Predictive Toxicology Challenge では，共通のデータを用いて参加者が化学物質の発ガン性を予測し，その結果を専門家が評価する。本発表では，その概要を報告すると共に，カスケードモデルにより計算した我々の予測内容とその評価について述べる。

JK07

成長型薬物催奇形性情報コミュニティの構築

（徳島大院薬，徳島大薬）○山内 あい子，石井 真吾，木原 勝，中馬 寛，寺田 弘

徳島大学に薬物催奇形性に関する情報提供収集システムを整備し，日本医薬情報センターと NTT 東日本関東病院薬剤部等の協力を得て，妊婦，医療関係者及び創薬研究者等に情報コミュニティの場を提供し，医薬品研究開発，根拠に基づく医療の実践，国民の健康保持に資することを目的とし新しいプロジェクトがスタートしたので報告する。

JK11

IT 時代の量子化学

（大阪市大）西本 吉助

電脳時代を迎え，量子化学は大きく変わった。演者が量子化学の研究を始めた１９５５年頃は，紙と鉛筆の時代で，量子化学計算をやるためには，線形代数と応用数学，量子力学の知識が必要であった。いまは，これらの知識がなくても，大学４年生が、コンピュータと量子化学計算ソフトを駆使して ab initio 計算をやり，分子の理論情報，分子間相互作用情報，化学反応機構情報などを作り出す夢のような時代になった。今回は演者の経験をふまえ，IT 時代の量子化学について，私見を述べる。

JP01

遺伝的アルゴリズムを用いた反応モデル自動解析システムの開発と評価

（静岡大工，豊橋技科大知識情報工学）○高橋 崇宏，船津 公人，江間 義則

反応モデルの構築は材料作製プロセスの研究開発における主要な知的生産活動の一つである。本研究では入力実験データを解析し，反応モデルを自動的に提案するシステムを開発したので報告する。モデリング能力について評価も行ったが，モデリング能力は従来の手法と比較して結果の信頼性が高くロバストであった。

JP02

生体高分子配列データに関する討論用のデータベース

（山形大工，奈良先端大）○林 稔久，木ノ内 誠，工藤 喜弘，金谷 重彦

生体高分子の同じ標題の下のデータの間に生じた差異とそれに関する議論を研究者全体が共有することはきわめて有用であるとの観点から標記データベース構築を提案した。本研究で

はデータベースを設計し，プロトタイプシステムを試作した。これの効用の一つは不注意による入力誤りに入力者が早く気付いて修正することである。

JP03

バクテリア tRNA 遺伝子の新しい共通配列

（山形大工，奈良先端大）〇高田 直志，木ノ内 誠，工藤 喜弘，金谷 重彦

ｔＲＮＡのアンチコドン毎に，運ぶアミノ酸残基の種類を限定していると想定される立体化学関係を補完する形の塩基配列の特徴を調べた。クローバ葉二次構造，Ｌ字型三次構造を調べることでわかる共通配列の他に，ＯＲ論理による組み合わせで記述するべき二次的不変塩基の特徴を探した。未発見のｔＲＮＡ遺伝子の検出を試みた。

JP04

Java™ 言語を使用した化学研究支援ソフトウェア MolWorks™

（ベストシステムズ，お茶の水女子大院人間文化，産業技術総研）〇中山 尚史，後藤 成志，アンディ・スタビングス，田島 澄江，長嶋 雲兵

MolWorks は，Java 言語によって開発された化学研究支援ソフトウェアである。本ソフトウェアでは，量子化学計算プログラムのプリポスト機能に加えて，物性推算機能も有している。本発表では，MolWorks 開発の現状および今後の開発計画を報告する。

JP05

アンサンブル学習法の回帰分析への応用

（地球環境産業技術研究機構，旭硝子中央研，産業技術総研）〇浦田 新吾，高田 章，関屋 章

Adaboost などのアンサンブル学習法を，回帰型 Neural Network を用いた回帰分析へ応用するため，新しいアルゴリズムの開発を行い，モデル関数を用いて相関・予測精度が向上されるか検討した。

JP06

回帰・判別型統計解析手法におけるクロスバリデーションおよび関連手法の精度の比較検討

（阪大院薬）黒川 絵美子，岡本 晃典，田中 優子，岡本 美代，宮田 幸治，黒川 顕，安永 照雄，〇高木 達也

回帰／判別分析型統計解析手法では，その予測性能を最適化する必要がある場合が多い。その場合，予測性を表す指標として，ジャック クナイフ法やクロスバリデーション法がしばしば用いられるが，近年，さらに種々の指標が考案されている。今回は，それらの指標が如何に予測性を表現し得ているか，計算機実験的に検討してみた。

JP07

溶解パラメータの新しい推算法

（花王構造解析セ）山下 修

（概要非公開）

JP08

原子の国のトムキンス（サラウンドスクリーン仮想現実感による原子軌道の表現）

（埼玉大工，お茶の水女子大理）〇杉山 孝雄，時田 澄男，細矢 治夫，井門 俊治

5d(3z2-r2)原子軌道のような複雑な軌道を表示するためには，種々の工夫が必要であった。これに対して，CAVE を利用すると，スクリーンの内側で自由に視点を動かすことができるため，外側から等値曲面全体を観察した後，内側に入っていき中心部分の複雑な構造を観察することが可能になった。これは「原子の国のトムキンス」に記されている人間が小さくなって原子の内部を観察することに相当すると考えられる。

JP09

４次元の混成軌道の可視化

（埼玉大工，お茶の水女子大理）○木戸 冬子，細矢 治夫，時田 澄男

我々は，水素原子の４次元の s，p，d 原子軌道について，AVS を用いて可視化する研究を行ってきた。今回は，４次元の s，p，d 原子軌道から生成される４次元の d2sp3 混成軌道について可視化し，３次元のの d2sp3 混成軌道と比較した。この結果，３次元の d2sp3 混成軌道理解を深める事が出来た。

JP10

構造活性相関研究のためのニューラルネットワークツール NNQSAR の開発

（豊橋技科大）○安藤 秀一，高橋 由雅

本研究では種々の構造活性相関研究に適用可能な汎用のニューラルネットワークツール NNQSAR の開発を進めている。ここではニューラルネットワークの学習・予測，ネットワークモデルの動的表示，多重シグナルの学習等の機能を実装した。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報告する。

JP11

反応形式を列挙するアルゴリズムの研究

（京都工繊大院工芸科学）○大島 史寛，藤田 眞作

6 個の炭素に限定して有機反応を予測する。ITS(虚遷移構造)に正準名(canonical name)を付与し，アルゴリズム的列挙により ITS 結合表を作成し，対応する正準名を網羅的に発生させた。同一の正準名をもつときは除去し，unique な正準名のみを列挙した。さらにこれらを EPS ファイルにし，ITS 構造式を図示した。

JP12

ITSProducer --- **虚遷移構造 (ITS) をキーとする有機反応データベース検索エンジン**

（京都工繊大院工芸科学）○田中 伸也，藤田 眞作

演者らはすでに有機反応の表現として，虚遷移構造(ITS)を提案している。ITS およびその部分構造は反応前後の変化を一度に表現できる。一方，有機化学反応のデータベースの多くが出発物質と生成物質の対応情報として扱っている。そこで，本研究ではオブジェクト指向技術を用い，有機反応として対応情報を持つデータベースから ITS を作り出す ITSProducer を作成した。また，それを用い検索システムを構築したので報告する。

JP13

プロトン NMR スペクトルデータベース管理システムの開発

（豊橋技科大知識情報工学）○林 良行，加藤 博明，阿部 英次

当研究室では 1H-NMR スペクトルデータの集積を継続して行っている。本研究では，今までに蓄積したデータを有効に利用するための新規の DBMS の開発を行っている。この DBMS にはインターネット・イントラネットシステムを採用し，研究室内だけでなく外部への情報の提供をも視野に入れたものの開発を目指している。

JP14

タンパク質三次元構造モチーフデータベースの作成（２）

（豊橋技科大工）○加藤 博明，田所 哲男，宮田 博之，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 中で定義されたパターンに対応する三次元部分構造情報の集積を試みている。今回は，共通配列パターンを持つ一群の三次元部分構造から，構造クラス分類，さらにはそれぞれの代表三次元幾何パターンを選出する方法について報告する。

JP15

有機化合物の匂いとトポロジカルインデックスとの相関解析

（豊橋技科大工）〇芦塚 雄介，阿部 英次，加藤 博明

「匂い」とは揮発性の物質が嗅細胞を刺激したときに起こる感覚であるが，匂い物質の持つ物理的・化学的特性が匂いとどのように関係しているかは未だ解明し尽くされてはいない。本研究では，その一環として構造特徴を示す指標である各種トポロジカルインデックスを生成し，それらと匂いとの相関を調べることを目的とする。

JP16

有機構造の論理的に合理的な解析

（山形大工）〇原野 貴博，木ノ内 誠，工藤 喜弘

有機化合物の論理的構造解析の合理化有機構造解析の誤りは起きれば被害が大きいため，対策を検討した。誤りは，論理演算で済むはずの中間段階でも化学者の直観が使われることによる見落としでおこることが多いという分析結果に基づき，単純操作化を図った。それを実現する一つの工夫として相矛盾する部分もある複数の化学基準の組の比較運用の導入を試みた。

JP17

水素分子間相互作用の計算

（富士総研，産業技術総研，核燃料サイクル開発機構）〇松原 聖，福澤 薫，三上 益弘，高田 孝，岡野 靖，山口 彰

分子配置を考慮した２つの水素分子間の相互作用について，Gaussian94 の CCSD(T)/cc-pVTZ を利用して計算を行なった。計算された水素分子間ポテンシャルは，従来の MP2/6-31G**等の結果と比較してかなり異なり，また，２つの分子の配置に対して大きな異方性を持つことがわかった。

JP18

副反応評価システムによる合成経路設計システム AIPHOS の合成経路評価

（三井化学，国立情報学研・科技団さきがけ 21，豊橋技科大）〇塚本 幸治，佐藤 寛子，船津 公人

反応予測システム SOPHIA の反応部位認識機能と反応 DB の具体的な構造変換情報を利用した新しい副反応評価システムを開発している。本評価システムの考え方と概要については前回報告した。今回は実際に合成経路設計システム AIPHOS から提案された種々の経路について本評価システムを適用し合成経路評価を行った結果を報告する。

JP19

薬物催奇形性試用データベースシステムの構築

（徳島大院薬，徳島大薬）〇石井 真吾，山内 あい子，木原 勝，中馬 寛，寺田 弘

我国には薬物催奇形性に関する適切な情報提供システムがない。我々は，薬物催奇形性情報コミュニティの構築を目指しており，その中核となる DB システムを構築している。今回，化学構造式条件検索上の問題を解決するために DB の基本構造を改善すると共に，Web アプリケーションを作成し，より発展した試用 DB システムを構築した。

JP20

化学物質安全性データベースの開発

（産業技術総研）〇田辺 和俊，松本 高利

化学物質の安全性，危険性に関して信頼性の高い情報を提供する使いやすいデータベースサブシステム，および構造活性相関により化学構造から安全性，危険性を精度よく予測する予測サブシステムから成る化学物質安全性予測システムを開発した。

JP21

ドラグインフォマティクスのための，化合物，蛋白，薬理活性統合データベースの構築　（Ⅰ）

（富士ファコムシステム，富士通，味の素）佐藤 英俊，佐藤 利幸，○湯田 浩太郎，塩原 紀行，野々村 辰彦，高原 義之

蛋白関連データ，および薬物に関する薬理活性関連データと化合物関連データとを相互に結合し，これら３種類のデータの統一した管理と参照を可能とする一体化されたデータベースを構築した。本データベースは遺伝子発現プロフィール解析データベースと化合物をキーを用いて結合され，発現プロフィール解析過程での化合物，蛋白，および薬理活性データの直接的，統合的な参照が可能となる。

JP22

リアルタイム操作を伴う分子軌道の電子雲表示 -結合の回転に対する HOMO，LUMO 軌道の形状変化-

（中京大情報科学）○中 貴俊，秦野 やす世，山本 茂義，山田 雅之，宮崎 慎也

本研究では分子の電子密度の空間分布をボクセルデータとして求め，軌道関数や電子密度関数をリアルタイムＣＧにより雲として（電子雲）表示する。また，分子構造（骨格）を変化させた複数の分布データを用いることにより，骨格の一部を回転させる等の，対話的な操作に対する電子雲の状態変化をリアルタイムで観察できる。

JP23

希ガスーアンモニアクラスターの構造と安定性

（静岡理工科大理工）中山 勇馬，鈴木 啓允，渡辺 武彦，○関山 秀雄

希ガスとアンモニアがつくる二分子ファン・デル・ワールス錯体の構造および安定性について，非経験的計算により研究した。その結果，希ガス原子が，アンモニア分子のＨ－Ｈ結合にブリッジしたような構造(Cs 対称）が再安定構造として得られた。詳細なポテンシャル曲面について議論する。

JP24

蛋白質のα炭素座標から主鎖構造の構築

（三共創薬化学研）○岩田 依子，粕谷 敦，宮本 秀一

我々は，解析的な方法に Ramachandran plot の favored region の情報を加味することにより，蛋白質のα炭素座標から主鎖構造を効率良く構築できることを見出した。その方法を数種類の蛋白質に適用したところ，従来法と比較しても良好な結果を与えることがわかった。

JP25

湯川－都野式における反応定数の理論的研究

（法政大第一教養，九大有機化学基礎研究セ，岡山理科大）○中田 和秀，藤尾 瑞枝，太田 九二，西本 吉助，都野 雄甫

湯川－都野式の置換基定数を非経験的分子軌道法を用いて決定した。$\sigma+$は各種置換基を導入したクミルカチオン系と無置換体のヒドリド移動平衡から求めた。$\sigma 0$は反応中心とベンゼン環を 90°に固定したクミル系から同様に求めた。置換基定数をベンジル位カチオン系に適用し，反応定数（ρ値・ｒ値）の意味を検討した。

JP26

マレイミド環を有する新規メロシアニン色素の電子スペクトルに関する分子軌道計算

（長崎県工業技術セ，長崎大機器分析セ）○重光 保博，富永 義則

メロシアニン発色系の片方の含窒素複素環としてマレイミド環を有する新規メロシアニン色素を合成し，その紫外可視吸収スペクトルを測定した。色素の発色を決定するπ-π*吸収帯

の定量的予測を目的として，半経験的および非経験的分子軌道法を行った。

JP27

GCMC 法を用いた溶解度シミュレーション

（地球環境産業技研機構，産業技術総研，旭硝子中央研，産業技術総研）○浦田 新吾，三上 益弘，高田 章，都築 誠二，内丸 忠史，関屋 章

Grand Canonical Monte Carlo(GCMC)法に Configurational Bias Monte Carlo(CBMC)法を適用した，液液溶解度シミュレーション手法の開発を行った。モデルケースとして，ハイドロカーボンと含フッ素化合物の溶解度シミュレーションを検討した。

JP28

Tsallis エントロピーによるミュレーテットアニーリング法を用いたコラーゲン様ペプチドの安定コンフォメーション探索

（近畿大理工）○高橋 紘一，渡辺 理

コラーゲンペプチドである (Pro-Pro-Gly)n，(Pro-Hyp-Gly)n，n=1～3 について，その安定コンフォメーションを Tsallis のエントロピーを用いるシミュレーテットアニーリング法により探索したところ，コラーゲン中に見られる３本鎖ヘリックスと同じコンフォメーションを得た。

JP29

フラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP における２電子積分ルーチンの高速化ならびに並列化と性能評価

（富士総研，国立医薬品食品衛生研，産業技術総研）○稲富 雄一，中野 達也，北浦 和夫，長嶋 雲兵

並列フラグメント分子軌道計算プログラム ABINIT-MP の２電子積分計算をより高速に行うために，小原らと Head-Gordon らの方法を組み合わせたアルゴリズムを用いて２電子積分計算ルーチンを作成し，その性能評価を行った。その結果，計算速度が従来に比べ 1.6 倍から２倍程度になり，90%を越える並列化効率も達成した。

JP30

非断熱遷移と見なされる２分子間励起エネルギー移動の速度定数の理論的定式化

（通信総合研）○奥野 好成，益子 信郎

２分子間励起エネルギー移動を非断熱遷移とみなした場合の速度定数表式を近似的に求めた。導出した表式は励起エネルギー移動に関して従来から用いられてきたフェルスターの表式と異なり，フェルスター式で説明できない励起エネルギー移動を本表式により合理化し得ることが期待される。

JP31

オピエート分子の構造に関する理論的研究

（滋賀大教育）○水上 善博，清水 英里佳

オピエート分子として，モルヒネ，ヘロイン，コデインなどとその拮抗薬をとりあげ，それらの構造を分子軌道計算を用いて理論的に求める。さらに，オピオイド分子としてメチオニンエンケファリンとロイシンエンケファリンをとりあげ，その分子構造を計算する。フロンティア電子軌道の特徴から，それらの活性を議論する。

JP32

ベックマン転位反応における無機酸共存効果の検討

（宇部興産高分子研）○後口 隆，八尾 滋

シクロヘキサノンオキシムのベックマン転位反応において，硫酸分子が共存することによる反応促進効果の要因を，密度汎関数法プログラム DMol3 を用い検討した。シクロヘキサノン

オキシムと硫酸との相互作用構造および相互作用の結果生じた電子状態の変化等に関し報告する。

JP33

PPP 分子軌道法計算における二中心電子反発積分の absolute hardness による見積もり

（埼玉大工，日清紡，岡山理科大）〇太刀川 達也，時田 澄男，蛭田 公広，西本 吉助

我々は PPP 分子軌道法における新しい二中心電子反発積分 new-γ に含まれる係数を一義的に決める方法を種々考察している。今回，計算で求めた HOMO-LUMO のエネルギー差から求める方法をいくつかの色素化合物に適用したのでその結果について報告する。

JP34

タンパク質全電子計算における擬カノニカル局在軌道計算の高速化

（九州工業大情報工学，富士総研）〇住田 豊州，吉廣 保，佐藤 文俊，柏木 浩，知久 季倫

タンパク質の全電子計算には十分に良い初期値から計算を出発させる必要がある。当研究グループでは擬カノニカル局在軌道を全電子計算の初期値に用いることによって良好な結果を得た。しかし，擬カノニカル局在軌道の計算には基底関数の 3 乗に比例する計算量がかかってしまう。そこで本研究ではこの計算の高速化を行った。

JP35

ボラン及びボランカチオンのルイス酸性に関する計算化学的研究

（高知大理）〇藤山 亮治，清岡 俊一

中性のホウ素化合物のルイス酸性を利用した有機合成は盛んに行われているが，ホウ素のカチオンを利用した合成は報告されていない。ボロンカチオンを用いた新たな有機化学反応を展開するために，ルイス酸として使われているホウ素化合物とそのカチオンの構造を ab initio 計算による最適化構造から検討した。

JP36

リチウムクラスターの構造と安定性の量子化学的研究

（明治薬大）溝口 則幸

Boustani らは Lin (n=2～9)の量子化学計算の結果から，小さい Lin (n=3～6)クラスターは平面構造が安定であるが，これより大きな Lin クラスターは三次元的な構造が安定であると報告している。ここでは大きな Lin クラスターの安定構造を ab initio 分子軌道法及び密度汎関数法により検討した。

JP37

2,2'-架橋ビスジメドン類における大環状水素結合(2) DFT 計算を用いた解析

（京大院理）今城 文雄

標記化合物は固体状態でジケトン部分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。この系における水素移動の存在を X 線結晶構造と固体状態 C-13 NMR スペクトルの結果を DFT 計算による分子構造と化学シフト値との比較から明らかにする。

JP38

ガングリオシドの高次構造の解析

（お茶の水女子大理，東京医科歯科大歯）〇能登 香，木村 梨香，鷹野 景子，横山 三紀

ガングリオシドは NAD+ glycohydrolase に対して阻害効果があり，ガングリオシドの種類によって，阻害効果に違いが見られることが明らかになった。そこで，ガングリオシドの配座解析，量子化学計算を行い，その高次構造を解析し，阻害効果との関係を議論した。

JP39

ヨウ化水素酸によるダイオキシン開裂反応の理論的研究

（京大院工）○加藤 豪樹，笛野 博之，田中 一義

ダイオキシン類は二つのベンゼン環を酸素で架橋する構造を持ち，この結合形式はエーテルの炭素－酸素－炭素結合と類似している。エーテルにおけるこの結合の切断の主な方法は酸による開裂であり，エーテルと比較しながら，ダイオキシンのヨウ化水素酸による開裂反応を非経験的分子軌道法および密度汎関数法により検討した。

JP40

環状ヘキサペプチドとアルキルアミンからなる分子間会合体の分子力学法による検討

（名大院工，創価大工）富永 昌英，○山木 政義，伊藤 眞人，井上 博愛

環状ヘキサペプチド cyclo-(LeuGly2)2 はイソブチルアミンなどの脂肪族第一級アミンと分子間会合体を形成することが知られている。この会合体の構造と，安定化に寄与している相互作用について，分子力学法を用いて検討した結果について報告する。

JP41

β-ヘアピンペプチドのフォールディング，アンフォールディング分子動力学シミュレーション

（生物分子工学研，東京薬大，三菱東京製薬，阪大蛋白研）○神谷 成敏，肥後 順一，小野 聡，中村 春木

（概要非公開）

■部会行事

情報化学部会　総会

期　日：平成１３年１１月９日（金） 12:20～

場　所：徳島大学蔵本キャンパス（徳島市蔵本３・庄町 1）

第 24 回情報化学討論会　３日目　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

◆編集後記

前号の特集「黎明期の情報化学」はお読みになっていかがでしたでしょうか。個人的な感想を少し述べさせていただきます。

目覚しいコンピュータの発展史についてはマスコミでよく取り上げられています。また、その利用については今や「ＩＴ時代」と云われているほどです。この間、情報化学も相当の進歩をしてきたと思いますが、同じコンピュータを使い「情報」処理をしているにもかかわらず、情報化学というのはあまり世間で知られていないようです。

これは、「化学」がついていることの因果でしょうか？いうまでもなく、化学は我々の生活になくてはならない化学物質や素材を対象とする学問ですが、例えば電子工学と比較して一般の関心は薄く地味な分野です。

あるいは、データベース、分子グラフィクス、統計解析、量子化学、といった各要素技術ではそれぞれ認知されているが、これらすべてをカバーした「情報化学」の姿が捕らえにくいことが理由でしょうか?

情報化学(部会)は、今後も新しい要素技術の融合の場として着実に発展していくと思いますが、学生や一般の方への広報も行っていく必要がありそうです。

(T.T.)