

## 「創薬」を目指して

呉羽化学工業株式会社 生物医学研究所長 谷中幹郎

「創薬」を目指して取り組んできた。「コンピュータ化学」との関わりを主題にして考察してみたい。

製薬企業の統合合併が進み、大規模化している。300万ヶ以上の自社化合物ライブラリーを有し、HTSでヒット化合物を見出すという力づくが行われるも、画期的新薬は低減し、大企業でも開発品目の半数は導入品という。ランダムのかづくの研究では新薬は生まれにくいという考え方が定着しつつある。ランダムからの脱却のためには「コンピュータ化学」が威力を発揮する。「コンピュータ化学」を駆使して画期的新薬を生み出すというベンチャーが数多く出現している。力のあるベンチャーが開発候補品を生み、大企業が商品化/全世界販売という流れがある。

経営者の「選択と集中」「グローバル展開」「時間軸」「スピード」を合言葉にして切磋琢磨している。スピードを上げるためには、無駄な実験の排除が肝要になる。やってみなければ分からないことだけを実験で確かめる。実験先導型から予測先導型への転換、等、言及され続けてきた。創薬の場合、薬理活性主体で考えがちだが、活性だけでは新薬にならない。構造活性相関は今やLBDD/SBDD共に定法となり、極めてロジカルに行えるようになってきたが、構造動態相関、構造安全性相関は未だ未だで、予測先導型には程遠い。優れたソリューション開発が期待されるも、感性豊かなメディシナルケミストの活躍の時代が続く。できるだけロジカルな地道な努力の継続によって、偶然の発見に出会いブレークスルーが達成され飛躍に繋がる。

ゲノム解読後の医薬の標的蛋白は1000~2000種と言われている。ヒトゲノムは3万前後とされるが、未だ未解決で数倍増大するとも言われる。遺伝子ノックイン、ノックアウト、ノザンプロット、siRNA等の技術を駆使して、ターゲットバリデーションを行い、疾患関連蛋白の発見に鎬が削られている。SNPs解析により遺伝子多型個体差が判明し、オーダーメイド医療への発展が期待される。全ての解析は「コンピュータ」の進歩に連動している。これら遺伝子/蛋白の解析場面でも「コンピュータ化学」の更なる活躍が期待される。イレッサ、グリベック等の低分子、ハーセプチン、リツキサン、レミケード等の抗体医薬の成功によって、分子標的薬剤の概念が定着化した。「コンピュータ化学」なしに新薬開発はあり得ない。

「何を」「どうやって」創るかが30年前筆者の命題だった。事務計算用メインフレームを休日使用させてもらい、構造活性相関把握のために、土日2晩徹夜して紙テープを糊でつなぎ併せて入力データとしCND0/2計算を行った。今思うとあまり意味のない計算だが懐かしい。モノができないと発明に至らないので「有機合成経路設計システム(strategy)開発」に携わった。反応検索システム(tactics)を駆使することで創薬/合成は遂行可能になったように思われる。しかし、天然物全合成問題(企業では扱う機会が少ない)や、有機合成天才偉人の頭脳を後世に伝えるためには、より体系化したstrategyシステムが必要と思う。

福井謙一先生のお言葉、「生物の現象を化学の言葉で、化学の現象を物理の言葉で、物理

の現象を数学の言葉で理解する。境界領域の学問が重要」が強く印象に残っている。「コンピュータ化学」に基づく発想がアイデアを生む。アイデアを出せる人材を何人育てられるかを考え、実験に従事してきた研究者には「コンピュータ化学」入門を勧めている。若い研究者が、筋のよい研究課題を見出し（出会い）「コンピュータ化学」に精通／活用し、感性を大いに磨いて創薬研究開発に成功して欲しい。

## 会告

### 目次

1. 会員継続のお願い	A-71
2. 新会員募集のお願い	A-72
3. 日本コンピュータ化学会 2005 春季年会発表論文および参加募集	A-72
4. 日本コンピュータ化学会 2005 秋季年会参加者募集	A-73
5. 日本コンピュータ化学会 2004 年 10 月度役員会報告	A-74
6. 日本コンピュータ化学会 2004 秋季年会収支報告	A-75
7. 平成 17 年度研究奨励金対象研究計画の募集について	A-76
8. 情報化学講習会	A-78
9. 書評：『コンピュータ化学 インターネット時代の化学情報工学』	A-79
投稿規定（抜粋）・投稿カード	A-81

### 会員継続のお願い

2004 年 12 月 31 日をもって日本コンピュータ化学会 2004 年度会員の期限が満了となります。現在会員の皆様にはぜひ次年度も継続していただきたく思います。継続方法につきましては同封させていただいております振替用紙をご利用の上ご入金ください。ご入金の確認をもちまして会員継続とさせていただきます。

尚、法人・賛助会員の方には請求書を送付させていただいております。学会誌等の送付先に変更のある方はその旨ご連絡ください。連絡先は E-mail [office@sccj.net](mailto:office@sccj.net) または FAX 03-5825-0654 へお願いいたします。

2005 年度年会費は次の通りです。

< 個人会員 > 5,000 円

\* 65 歳以上の方は 2,000 円となります。

< 学生会員 > 3,000 円

< 法人会員 > 20,000 円

< 賛助会員 > 50,000 円

会費振込先：

郵便振替口座 00140-2-89762 加入者 日本コンピュータ化学会

銀行 三井住友銀行浅草橋支店 普通 1073721

名義人 日本コンピュータ化学会 (\* 振込手数料はご負担ください)

## 新会員募集のお願い

日本コンピュータ化学会 (SCCJ) は、日本化学プログラム交換機構 (JCPE) と化学ソフトウェア学会 (CSSJ) とが発展的融合を目指して発足いたしました。すでに会員数が、個人会員 790 人、学生会員 32 人を越えております。すでに会報も本号で 12 号となっており、質の高い論文誌として注目を集めております。一層の会員増強のキャンペーンに会員諸氏のお力添えを強くお願い致します。

新学会の活動は、論文誌 Journal of Computer Chemistry, Japan (JCCJ) の発行 (年 4 回発行予定) 討論会、セミナー、講習会の開催、その他会員間の情報交換等があります。JCCJ は Web でも公開され、世界中の広い読者に読まれております。また、本年 5 月 19

20 日には研究発表中心の日本コンピュータ化学会 2004 春季年会が開催されました。秋には、プログラムのデモを主体とする秋季年会が 10 月 2 日 (土) 3 日 (日) 東京大学で開催されました。特に秋季年会は高校教諭等の参加を可能とするために、休日に開催されます。2005 年 5 月 19 日 (木) 20 日 (金) には、日本コンピュータ化学会 2005 春季年会が東京工業大学にて開催される予定です。

2003 年からは、学生会員に対する割引に加え、65 歳以上の方への割引も開始いたしました。この制度は、学会費のみならず、学会参加費等にも導入され、65 歳以上の方の学会活動を支援いたします。

学会のホームページは、<http://www.sccj.net> です。ここから本学会への入会案内、イベント情報をはじめ多くの情報を得ることができます。本学会の活動にご興味をお持ちの方がおいででしたら、積極的に入会をお勧めください。よろしく願いいたします。

## 日本コンピュータ化学会 2005 春季年会発表論文および参加者募集

日本コンピュータ化学会 2005 春季年会が下記の通り開催されます。積極的な御参加を期待します。詳細は、以下のホームページをご覧ください。

**主催：**日本コンピュータ化学会(SCCJ)

(日本コンピュータ化学会は、日本化学プログラム交換機構 (JCPE) と化学ソフトウェア学会 (CSSJ) の発展的合意により 2002 年 1 月に発足した学会です)

**共催：**日本化学会、日本薬学会、高分子学会、触媒学会、化学工学会、他

**会期：**2005 年 5 月 19 日 (木) 9 時 30 分 ~ 20 日 (金) 18 時

**会場：**東京工業大学大学院社会理工学研究科棟 大岡山西 9 号館 2 階

東京工業大学大岡山キャンパス：東急目黒線大岡山駅より徒歩 1 分

交通案内地図：<http://www.titech.ac.jp/access-and-campusmap/j/access-j.html>

東京工業大学大岡山キャンパスマップ：西地区

<http://www.titech.ac.jp/access-and-campusmap/j/o-okayama-campusmap-j.html>

大岡山キャンパス西地区マップ：大岡山西 9 号館

<http://www.titech.ac.jp/access-and-campusmap/j/o-okayamaO-j.html>

**研究発表：**

種別：口頭発表 (発表時間 20 分)、ポスター発表 (発表時間 90 分)、  
研究展示 < デモ > (最大 10 件 2 日間! 先着順です)

内容：計算化学（分子軌道法、分子力学法、分子動力学法、モンテカルロ法など）、理論化学（電子状態理論など）、情報化学（データベース、ケモメトリックスなど）、数理化学、コンピュータ支援化学教育、その他、コンピュータ化学に関する研究発表  
発表申込締切：2005年2月10日(木)までに、学会ホームページからお申し込みください。

<http://www.sccj.net/event/index.htm>

発表要旨締切：3月31日(木)までに、[office@sccj.net](mailto:office@sccj.net)へお送りください。形式に関しましては、学会HPをご確認ください。

企業展示：3月31日(木)までに、学会ホームページよりお申し込みください。

出展費用は100,000円（1ブース/2日間）となっております。出展していただいた企業広告（A4×1枚、白黒のみ）を講演予稿集に掲載させていただきます。

参加申込締切：3月31日(木)までに、学会ホームページからお申し込み下さい。

（以降は当日登録となります）

参加費：

日本コンピュータ化学会会員 5,000円（当日7,000円）

65歳以上 2,000円（当日3,000円）年齢を証明するものをお持ちください。

共催学会会員 7,000円（当日9,000円）

学生 3,000円（当日5,000円）

非会員 10,000円（当日12,000円）

懇親会：5月19日年会終了後、会場付近にて、会費5,000円

問い合わせ：学会事務局まで電子メールでお問い合わせください。

E-Mail [nenkai@sccj.net](mailto:nenkai@sccj.net)

URL <http://www.sccj.net>

## 日本コンピュータ化学会 2005 秋季年会参加者募集

日本コンピュータ化学会 2005 秋季年会が10月に徳島大学で開催されます。積極的な御参加を期待します。詳細は後日、学会ホームページに掲載いたします。

（学会のホームページ <http://www.sccj.net>）

主催：日本コンピュータ化学会(SCCJ)

（日本コンピュータ化学会は、日本化学プログラム交換機構(JCPE)と化学ソフトウェア学会(CSSJ)の発展的合意により2002年1月に発足した学会です）

会期：2005年10月15日(土)13:00pm 16日(日)5:30pm

会場：徳島大学薬学部長井記念ホールスタジオプラザ

「徳島大学への交通アクセス」

[http://www.tokushima-u.ac.jp/Intro/Intro\\_1/INTRO\\_h/intro-13.html](http://www.tokushima-u.ac.jp/Intro/Intro_1/INTRO_h/intro-13.html)

「キャンパス内建物配置図」

[http://www.tokushima-u.ac.jp/Intro/Intro\\_1/INTRO\\_h/gii.html](http://www.tokushima-u.ac.jp/Intro/Intro_1/INTRO_h/gii.html)

## 日本コンピュータ化学会 2004 年 10 月度役員会報告

日時：平成 16 年 10 月 2 日（土）10:00～12:00

場所：東京大学山上会館 203 会議室

出席役員：細矢治夫、長嶋雲兵、中野英彦、時田澄男、吉村忠与志、中田吉郎、波田雅彦、  
三戸邦夫、唐沢真美

事務局他：後藤和夫、曾々木志穂、和多田裕子

### 1 > 報告事項

会員数について下記のとおり事務局から報告があった。

- ・ 個人会員 793 名（内 153 名未入金）、学生会員 34 名（内 26 名未入金）、法人会員 80 社（内 6 社未入金）賛助会員 19 口
- ・ 賛助会員が 3 社 5 口増加。
- ・ 以前まで法人会員と賛助会員の差がなかったため、賛助会員については HP にリンクを張るという特典を実施。
- ・ 各会員種別ごとのメリット・デメリットを来年の春季年会までに決定。
- ・ 会費の未入金者については請求書再送付。

出席役員より今後、未入金者には学会誌の送付の際に、振替用紙のほかに請求書を送付し、封筒の表に請求書在中の印を押す、法人会員については担当者にメールで連絡をとって確認してみてもどうかというアドバイスがあり、実施することにした。

### 2 > 審議事項

JCCJ への投稿について

投稿規程にアカウント（個人の業績を中心とした総合論文）の項目を追加することとした。

大学学部向けの教科書の作成について

伊藤真人氏にリーダーとなっていただく事とした。編集委員と監修者については今後検討していくこととした。

「J-STAGE の投稿・審査システム導入について」

電子投稿・査読システムの導入については J-STAGE に申請してシステムを作成してみることとした。当面の間は従来の方法と併用する。

2005 年度春季年会について（報告）

2005 年度秋季年会について

徳島大学（実行委員長中馬寛氏）で 10/15 - 10/16 に開催することとした。

JCCJ Vol. 4 の巻頭言担当者について。

No. 1 竹内敬人（神奈川大学）、No. 2 中田吉郎（群馬大学）、No. 3 長嶋雲兵（産総研）、  
No. 4 中馬寛（徳島大学）の諸氏に依頼することとした。

## 日本コンピュータ化学会 2004 秋季年会収支報告

- ・ 参加人数・・・正会員 37 名，シニア会員 1 名，学生会員 17 名，共催会員 2 名，非会員 2 名，総計 59 名
- ・ 発表件数・・・特別講演 3 件，ポスター発表 29 件、研究展示 3 件
- ・ 展示企業・・・5 社
- ・ 懇親会参加者・・・47 名
- ・ 会計報告・・・収入 801,500 円，支出 606,526 円

収入の部			支出の部		
名目	金額(円)	人数(人)	計	名目	金額(円)
<b>事前登録</b>				<b>会場設営費</b>	167,940
正会員	3,000	22	66,000	<b>印刷費</b>	96,166
シニア会員	2,000	0	0	<b>講師謝金・交通費</b>	69,000
学生会員	1,500	10	15,000	<b>人件費</b>	100,000
共催会員	4,000	1	4,000	<b>懇親会経費</b>	173,000
非会員	5,000	1	5,000	<b>振込み手数料</b>	420
懇親会	5,000	24	120,000	<b>小計</b>	606,526
企業展示	50,000	5	250,000	<b>繰越金</b>	194,974
<b>小計</b>			<b>460,000</b>	<b>合計</b>	<b>801,500</b>
<b>当日登録</b>					
会員	4,000	15	60,000		
シニア会員	3,000	1	3,000		
学生会員	2,500	7	17,500		
共催会員	5,000	1	5,000		
非会員	6,000	1	6,000		
懇親会	5,000	10	50,000		
<b>小計</b>			<b>141,500</b>		
<b>学会からの補助</b>			<b>200,000</b>		
<b>合計</b>			<b>801,500</b>		

## 平成17年度研究奨励金対象研究計画の募集について

社団法人 新化学発展協会

(社)新化学発展協会では、基礎研究の推進と研究者の育成を通じて新化学の発展を図ることを目的に、新化学の発展に資する若手研究者の研究に対して、下記に従って研究奨励金を贈呈いたします。応募される方は、下記の研究課題の中から1つを選び、研究計画を作成し協会事務局まで提出して下さい。課題の説明、応募要項、応募書式は、下記協会ホームページからも入手できます。ご不明の場合は協会事務局までお問い合わせ下さい。

### 記

#### 1. 平成17年度研究奨励金研究課題

特殊反応場を活用した高選択化学プロセスの構築  
有機材料の劣化機構解明への理論的・計算科学的アプローチ  
ナノ複合材料設計への計算科学的アプローチ  
環境・エネルギー分野における新素材創製と新機能創出に関する研究  
電子情報分野において、自己組織化や特殊な場を利用して構造を構築し、新たなデバイス機能発現を目指した研究  
MEMS 分野において、構造体ならびにプロセス材料として、新たなデバイス機能発現に必要な材料研究  
生体高分子を新規な機能性材料として実用化することを目指した研究  
遺伝子工学による蛋白質生産における目的蛋白質の「品質」向上に関する新規な手法の開発

#### 2. 応募資格

大学またはこれに準ずる研究機関において研究活動に従事する者で、39歳以下(昭和40年4月1日以降に出生)の者。ここでいう「大学」とは、学校教育法に定める大学(大学院、大学に付置される研究所その他の研究施設も当然含まれる)をいう。「これに準ずる研究機関」とは、大学共同利用機関、高等専門学校をいう。上述以外の独立行政法人研究機関、公立試験研究機関、特殊法人試験研究機関、公益法人(財団法人、社団法人)試験研究機関は含まない。

また、「研究に従事する者であって、39歳以下の者」には学部生、大学院生は含まない。

#### 3. 件数および金額

原則として各課題につき1件とし、1件につき100万円を贈呈する。

#### 4. 条件

研究奨励金の贈呈後1~2年以内に協会の研究会で研究成果を報告することなど。詳細は応募要項(協会ホームページに掲載)をご覧ください。

#### 5. 応募締切

平成17年1月31日(月)必着のこと。

#### 6. 選考・贈呈

有識者を含む協会の審査委員会にて選考し、平成17年6月(予定)に贈呈する。  
(選にもれた方には特に通知しませんので、ご了承ください。)

7. 問い合わせ先・応募申請書掲載先

社団法人 新化学発展協会 研究奨励金係  
〒101-0041 東京都千代田区神田須田町1-12 (山萬ビル4階)  
TEL 03-5297-8820 FAX 03-5297-8821  
E-mail [aspronc@aspronc.org](mailto:aspronc@aspronc.org)  
URL <http://www.aspronc.org>

## 情報化学入門講座（第3回）

主催：日本化学会情報化学部会

共催：CACフォーラム

協賛：日本コンピュータ化学会

会期：2005年2月7日（月）～8日（火）両日とも10時30分～18時00分

会場：大阪大学中之島センター（大阪市北区中之島4-3-53）

参加申込締切：2005年1月31日（月）ただし定員（50名）になり次第締切

### プログラム：

「第1日目 ケモメトリックス+構造活性相関」

1. 生物統計学入門（大阪大学 高木達也）
2. 数理解析技術のポストゲノムデータ解析への応用（奈良先端大学院大学 金谷重彦）
3. 製薬企業における構造活性と構造物性相関研究の現状（大日本製薬 富永幸雄）
4. ケモメトリックスソフトウェア Chemish を用いた演習（東京大学 船津公人）

「第2日目 ケモメトリックス+構造物性相関」

1. 推測統計学の基礎（大阪大学 高木達也）
2. 生化学データにおける線形・非線形モデリング（奈良先端大学院大学 金谷重彦）
3. 材料・製品開発におけるデータ解析技術の有用性（三菱化学 藤井宏行）
4. 分子設計システム ToMoCo を用いた演習（東京大学 船津公人）

**参加費：** 主催・共催学会会員(10,000円) 協賛学会会員(13,000円)、非会員(15,000円) 学生(2,000円) いずれもテキスト代含む。1日だけでも参加費は同額。

**参加申込方法：** 「情報化学入門講座参加申込書」と標記し、下記8項目を明記のうえ、葉書、FAX、電子メールにてお申し込み下さい。折り返しFAXにて受講票をお送りします。

1. 参加者氏名、2. 年齢、3. 勤務先名、4. 連絡先（郵便番号・住所・電話番号・FAX番号・E-mailアドレス）5. 会員種別、6. 参加費、7. 支払方法、8. 参加日

**支払方法：** 当日持参/現金書留/郵便振替（00170-0-6058）/  
銀行振込（みずほ銀行神田小川町支店 普通 1073505  
名義：社団法人日本化学会、送金予定日）

**備考：** 演習に用いるソフトウェアをあらかじめインストールしたPCを各自ご持参下さい。申込者には後日CACフォーラム事務局よりソフトウェア（有効期限付き）ダウンロード先を電子メールにてご連絡いたします。

**申込・問合せ先：** 〒101-8307 東京都千代田区神田駿河台1-5（社）日本化学会情報化学部会  
電話：03-3292-6163 FAX:03-3292-6318 E-mail: cicsj@chemistry.or.jp

## 書評 『コンピュータ化学 インターネット時代の化学情報工学』

吉村 忠与志 (著), 上嶋 晃智 (著)

価格: ¥2,940 (税込) 単行本: 264 p ; サイズ(cm): 26 x 19

出版社: サイエンスハウス ; ISBN: 491557296X ; (2003/11)

### 目次

第1章 コンピュータ化学とは	第6章 化学グラフィックス
第2章 ネットワーク社会のルールと倫理	第7章 分子モデリング
第3章 インターネットによる情報学	第8章 化学計測
第4章 Excel による化学問題解決	第9章 インターネット教育工学
第5章 化学統計学	

産業技術総合研究所グリッド研究センター 長嶋雲兵

本書は「コンピュータ化学」というタイトルであり、インターネット時代の情報化学を学習するための教科書を目指したと前書きにある。が、その実はインターネット上に蓄えられた化学技術を題材にした技術情報の取得とその応用の指南書であり、インターネットと手元にあるPCを用いた広範囲な問題解決手法の紹介ともなっている。本書は化学系大学における初年度の化学情報学の教科書として使いたい。

本書の構成は9章からなっており、各章にはその章で学習する事柄とその発展に関する演習問題が与えられている。演習問題の解答は巻末にあり含蓄が深い。以下各章を簡単に紹介する。

第1章「コンピュータ化学とは」では、コンピュータ化学手法の紹介を通じて、コンピュータ化学の学術的位置づけと総合的学問分野としてのコンピュータ化学の重要性が説かれている。評者の知る現在の大学における化学教育におけるコンピュータ教育の多くは、残念ながら著者らの言う化学をキーワードとする総合的な学ではなく、化学とは関係のない情報学・統計学ときわめて専門性の高い理論化学とが相互の関連無く行われている。本章は、コンピュータ化学教育を長年進めてきた著者らの思いがあふれているものとなっている。本章はコンピュータ化学の全貌を知る上で重要な章である。

第2章「ネットワーク社会のルールと倫理」では、インターネット上の化学情報に限らずあらゆる情報の取得・提供に関する権利と義務を紹介してある。本章の主題はそれだけで1冊の本の上梓ができるほど広範囲で深い内容であるが、本書では大事なところをコンパクトにまとめてある。ただ、読んだ印象は堅く、本章の主題に注目している評者が読んでもつらかったため、学生が自習で読むのは相当の努力が必要である。もう2ページ程度を加えて、自己のプライバシーの公開の制限から著作権の侵害等まで、ネットワーク上でやってはならないことを列挙されてあれば本章の有用性が増すに違いない。

第3章「インターネットによる情報学」は、インターネットを用いた化学情報検索の方法と実際を紹介している。評者は、学部に進学して最初の週の有機化学と分析化学の講義で図書館に Chem. Ab.他を用いて化学情報を収集するという講義を受けた古手であるが、それ以降30年間で体験的に身につけてきたインターネットを用いた情報検索の方法が具体的に紹介されている。本章は、学生のみならず古参の研究者にも是非読んでいただきたい。検索エンジンの表3-2のように、いくつかの化学情報サイトがまとめてあればより有用性が增大する。

第4章「Excelによる化学問題解決」はExcelをもとに、アルゴリズムの記述と行列と連

立方程式の計算や単純な統計処理および方程式のニュートン法による解法を例に取り、具体的な Excel プログラミングを紹介している。学生の Excel 利用には十分利用価値の高い手法が紹介されているが、本章と次章の内容は1回の講義で取り扱うと言うより、半期一科目の講義と実習を組み合わせた化学プログラミングの講義として取り扱うべきである。本章を読むと20年前 Fortran や Basic で暗号のようなプログラムを作っていた古手の経験が、直接役立つわけではないが、アルゴリズムや式の記述の知識などまんざら捨てたものではないことを再確認させられる。

第5章「化学統計学」では、化学情報解析によく利用される多変量解析手法である、主成分分析と重回帰分析が紹介され、さらにパターン認識技法のうちクラスタ分析法とポテンシャル関数法が簡潔に紹介されている。それらの応用技法である定量的構造活性相関技法の紹介では、主成分分析法の利用に加えパターン認識技法のポテンシャル関数法が具体的に紹介してある。これらは著者らが最も得意とする技法であり、コンパクトにまとめられているが、それぞれの技法がどういうときにどのように有効であるのかを再度まとめてほしかった。章末の VBA マクロの利用法は前章で紹介された Excel の機能拡張のために有用であり、応用性が高いが、本章でなく第4章で取り扱うべき項目であろう。

第6章「化学グラフィックス」では、Visio と ChemDraw を用いた作図法が紹介され、さらに VBA を用いた簡単な作図プログラミングが紹介されている。また、これらによって作成された図を用いて、プレゼンテーションの作成例が PowerPoint を用いて紹介されている。本章に書かれたプレゼンテーション作成ノウハウの多くは4年生の卒業研究のプレゼンテーション作成の時などに経験的に学習されるが、有用性が高いものである。

第7章「分子モデリング」は分子軌道法、分子力学法、分子動力学法の手法とプログラムが紹介されており、MOLDA を例に取り分子モデリング・設計の具体例の紹介がある。著者らの長年の教育経験から見て、化学系大学の講義内容としては良いのかもしれないが、評者としてはこのままで化学技術取得を認めては、無免許運転の車をみるようで薄ら寒い。天才は事故らないかもしれないが、一般人では事故の可能性が大きい。分子軌道法、分子力学法、分子動力学法の手法それぞれについて、近似の本質的な意味、適用限界等を教育する講義が別に必要であろう。

第8章「化学計測」では実験では欠かせない計測装置のメカニカルセンシング技術が紹介してある。従来の RS232C ポートにかわり USB ポートが一般化してきているのを受けて USB インターフェイスの作成例が示してある。

第9章「インターネット教育工学」では、コンピュータ支援の化学教育の実際としてインターネット上の化学教材や「化学の学校」などの教育活動を紹介してある。本章の位置づけは、他の8章とは趣が違ふ。本書を読む学生の立場からは第3章で紹介してある方が親しみ易いであろう。

以上各章について簡単に紹介した。

本書の前書きにある「インターネット時代の情報技術を駆使し、社会の養成する科学技術による問題解決のためのデザイン能力を培うこと」のための指導書としては、必要十分な項目が正しく簡潔に述べられている。本書は、携帯電話による利用も含めたインターネット利用による(化学)情報学の学習には最適である。本書は、著者らの広範囲な化学情報学の知識と経験が濃密に詰まっており、またそのレベルにばらつきがある。そのため本書を講義に使うためには取り扱うトピックスの再構成が必要であり、各章のより深い学習が必要である。

## 学会誌 (*Journal of Computer Chemistry, Japan; JCCJ*) 投稿の手引き (抜粋)

### 1. 論文の投稿

#### 論文の種類

- (1) 研究論文 (General Paper): コンピュータ化学に関連する研究および教育に関するもので、独創性のある未発表のもの。
- (2) ノート (Note): コンピュータ化学に関する断片的ではあるが、創造的な内容を持つ論文。刷り上がり4ページ以内。
- (3) 技術論文 (Technical Paper): コンピュータ化学に関するアイデア・提言や、教材・教具の開発、事例研究などを内容とし独創性のある未発表のもの。
- (4) 総説 (Review): ある特定の分野の関連論文を網羅的に紹介し、啓発的な示唆に富んだ内容の論文。
- (5) 総合論文 (Account): 著者の研究を中心として、その分野の研究について総合的観点から新しい論評を加えた論文。

**使用用語** 原稿は、英語か日本語を用いて専門外の人にもわかるように執筆する。特に、カタカナによる表現はなるべく避け、文献や注なども活用してわかり易い文章で記述する。

**投稿手続き・投稿カード・著作権** 投稿原稿は、3部(1部はオリジナル、2部はコピー)を下記宛てに送付する。

〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255 埼玉大学工学部 時田澄男研究室気付  
日本コンピュータ化学会 学会誌編集室

TEL 048-858-3511; FAX 048-858-3511 または 857-9653; e-mail: [tokita@apc.saitama-u.ac.jp](mailto:tokita@apc.saitama-u.ac.jp)

投稿原稿に添えて、投稿/著作権譲渡カードを提出する。

編集委員会では、論文原稿の受理を著者宛てに連絡する。審査終了後、再提出が必要なときは、1カ月以内に提出し直さなければならない。再提出原稿も3部提出する。この際、審査意見の各々に対して回答書を作成して添付する。受理や、再提出に関する問い合わせ先も、上記と同じである。

**出版形態・ページチャージ** 学会誌 (JCCJ) に掲載可となった論文は、まず電子出版し、つぎに、通常の印刷による出版を行う。電子出版のために、著者は、フロッピーディスクまたは電子メールによるコンピュータ可読原稿を提出することを原則とする。コンピュータ可読原稿作成方法等は、受理通知(上記の編集室から送付)の後で各個に連絡(下記の電子出版室から送付)する作成要領で示す。電子出版に関連する問い合わせ等には、下記が対応する。

〒671-2201 姫路市書写 2167 兵庫県立大学大学院 工学研究科 中野英彦研究室気付  
日本コンピュータ化学会 電子出版室

TEL 0792-67-4894; FAX 0792-66-8868; e-mail: [nakano@eng.u-hyogo.ac.jp](mailto:nakano@eng.u-hyogo.ac.jp)

論文投稿者は、受理論文が印刷された時点で、表1に示すページチャージを支払わなければならない。別刷りは100部送付される。本学会では、これ以上の別刷りは印刷しない。

表1 ページチャージ(円)

1~2頁	3~4頁	5~6頁	7~8頁	9~10頁	11頁以上
15,000	25,000	35,000	45,000	55,000	10,000/2頁当たり

カラー印刷を希望された場合、上記に10,000円(1頁当たり)加算されます。

日本コンピュータ化学会の会員は、学会誌 (JCCJ) を無料で配布される。入会申込は、学会の事務局(下記)への問い合わせ、あるいは、本学会のホームページ(URL <http://www.sccj.net>) へのインターネット・アクセスによって行うことができる。

〒111-0054 東京都台東区鳥越 2-7-4 ヘブン鳥越 1-2F  
日本コンピュータ化学会事務局  
TEL 03-5825-0599 ; FAX 03-5825-0654 ; e-mail :office@sccj.net

## 2. 原稿のまとめ方

### 2.1 原稿の体裁

- (a)原稿は、A4 版 (21.0×29.6 cm) 上質紙を用い、下記の要領で作成する。
- (b)論文題名は、2 行の空白行の後、左右 3.0 cm の余白、文字サイズ 16 ポイント、中央揃えで (センタリングして)、Times bold (日本語論文では明朝体太字) で印字する。
- (c)論文の概要は、2.5 cm の左右の余白で、9 ポイントの文字サイズで Times font (明朝体) で印字する。行間隔は 1 行とする (約 4.9 cm の中に 10 行)。
- (d)キーワードを書く。例 キーワード：分子軌道法、曲線のあてはめ、マルチメディア
- (e)本文は、2 段組で 2.0 cm の左右の余白、9 ポイントの文字サイズで、Times font (明朝体) で印字する。
- (f)文献および注は、本文中で連続した番号で以下のように引用する。Hosoya *et al.*[1, 2], Yoshimura [3 - 6], Newbold [7], and Hirano [8]。
- (g)本文中で使用したプログラムは、その入手方法を必ず記載する。新規に開発したプログラムは、その配布方法を記載する。(以下省略)

詳しくは、本誌 各巻の第 1 号(たとえば Vol. 3, No. 1)または、学会誌のホームページ、URL <http://www.sccj.net/publications/JCCJ/> をご覧下さい。

お知らせ：上記 1. に示す論文の種類欄に、「総合論文」の項を追加することが、10 月に行われた役員会で決定いたしました。この決定は、今年度の投稿から適用されます。

*Journal of Computer Chemistry, Japan* Submission / Copyright Transfer Form

主著者の

氏名と

連絡先

Print or Type

Principal

Author's Name

and Address

必要なら複製して下さい。

This form may be reproduced.

Telephone: \_\_\_\_\_ Facsimile: \_\_\_\_\_

e-mail: \_\_\_\_\_

I / We submit to *Journal of Computer Chemistry, Japan* the manuscript specified below. I / We certify that the work reported here has not received prior publication and is not under consideration for publication elsewhere in any medium.

Authors (No. of Membership Card of SCCJ in parentheses) and Affiliations:

著者名 (会員番号を括弧内に記載) と所属

Manuscript Title 論文題名 :

Type of Paper: General Paper \_\_\_\_\_ Note \_\_\_\_\_ Technical Paper \_\_\_\_\_ Review \_\_\_\_\_

Number of manuscript pages: \_\_\_\_\_; Page charge \_\_\_\_\_ (Japanese Yen)

Original Source Program File: Enclosed \_\_\_\_\_ Not enclosed \_\_\_\_\_

Do you want to distribute the program appearing in the manuscript by way of *Society of Computer Chemistry, Japan* (SCCJ)? Yes \_\_\_\_\_ No \_\_\_\_\_

\*\*\*\*\*COPYRIGHT TRANSFER\*\*\*\*\*

I / We agree to transfer to *Society of Computer Chemistry, Japan* (SCCJ) the copyright of the above-mentioned manuscript, when the manuscript is accepted for publication in The Journal in any form.

Author's signature \_\_\_\_\_ (only one signature needed)

Author's Name (in print) \_\_\_\_\_ Date \_\_\_\_\_

(日本人の場合は署名捺印して日付を記入)

Currently, whether electronic publication is considered as publication under Japanese Patent Law is uncertain. Accordingly, Article 30-1 of the Patent Law might not apply upon electronic publication.

(以下記入不要)

Manuscript No. :

Date receive

