

## 化学ソフトウェア学会と共に

吉村 忠与志

福井工業高等専門学校 物質工学科  
(〒916-8507 鯖江市下司町)

## 【緒言】

福井高専に勤務し情報教育を始めてから 37 年が経ちました。BASIC でプログラミングができるパソコンが手に入るようになり、あらゆる分野に浸透して無くてはならない道具になることを予感しました。学生と化学 PC 研究会という同好会を作り、プログラミングを身近なものとしていく中で、それを学术交流の場として全国展開しました。さらに、国際的な場に向き合わせるために、化学ソフトウェア学会として日本学術会議の学術登録団体となりました。化学ソフトウェア学会と共に更なる向上を図り、日本コンピュータ化学会を結成するまでの話をまとめます。

## 【化学 PC 研究会】

福井高専内での学生同好会として始めた「化学 PC 研究会」を 1982 年に全国展開としました。当時マイコンクラブの結成が巷で行われていました。そして、マイコンや RAM などの専門雑誌が月刊される中で、その掲示板を利用して、化学 PC 研究会の結成を告示しました。すると、全国から会員入会が約 400 名あり、会員証を手作りしたこともあり、嬉しい悲鳴を上げました。最初から、プログラムリストの公開を目的とした会報 JAPC を発行し季刊することを続けました。

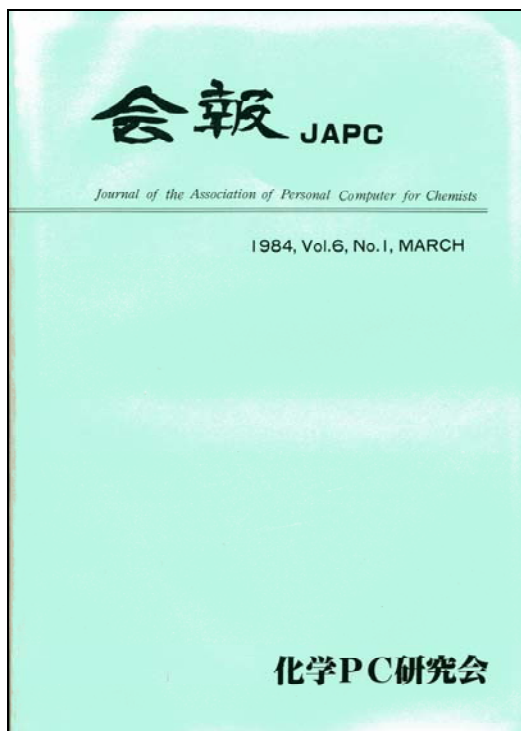


図 1 会報 JAPC, Vol.6, No.1(1984)

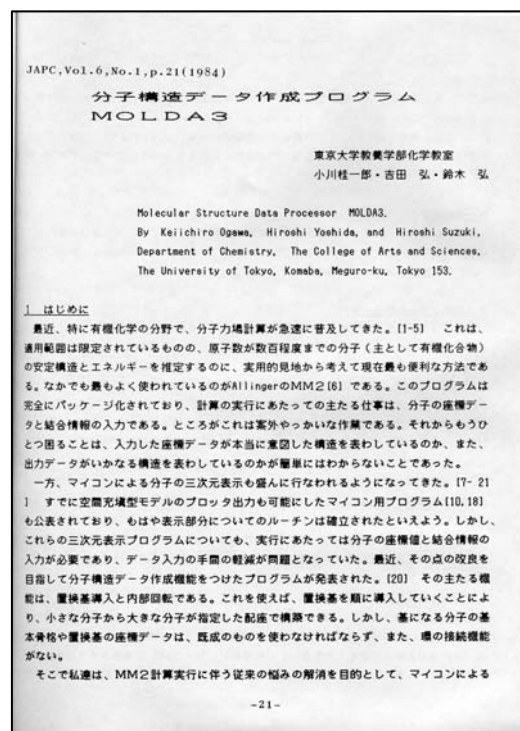


図 2 MOLDA 論文の扉ページ

すばらしい成果では、図 2 に示すように東京大学の学生(吉田弘氏)が作成した分子構造作成プログラム MOLDA3 の論文が投稿されたことでした。投稿されたリストは BASIC で組まれたもので、ラインプリンタ印字されたものをコピー機で縮小し 2 段組に張り合わせて論文原稿を作成しました。手間をかけたもので、これを読んだ読者がそのリストからコンピューターリーダーに打ち込み直して MOLDA 普及を推進した事例があります。

1986 年から開発されたプログラムを無償で配布するために「最新化学 PC 用ソフトウェア集」を年刊し、プログラムは 5 インチフロッピーデスクで希望者に無償配布を開始しました。

1987 年 7 月に山田武先生(京都工繊大)が主催して研究討論会を開催しました。これも当時画期的な出来事で、プログラムが機能的に稼動することを証明することを目的にデモンストレーション発表討論を中心としました。この後、埼玉大(1988 年 11 月)、姫路工大(1989 年 11 月)、福井高専(1990 年 11 月)、長岡高専(1991 年 11 月)と続けました。

1988 年から中野英彦先生(姫路工大、現在兵庫県立大)が主催して、インターネットの前身 PC-VAN 内で、パソコン通信 SIG「化学とコンピュータ」を開始しました。

### 【化学ソフトウェア学会】

下沢隆先生(埼玉大)の指導の下、1991 年にロンドン大(英)、モンクトン大(加)、ウィスコンシン大(米)、テキサス大(米)の 4 つの大学で在外研究する機会を与えられ、ムーア先生(ウィスコンシン大)主催のプロジェクト SERAPHIM から無償利用ソフト 83 件の譲渡を受けて、会員に配布しました。国際交流に貢献しました。

在外研究から帰国して 1992 年に「化学ソフトウェア学会」を結成しました(図 3)。これは化学 PC 研究会の活動を 100%継承したものです。新しいことでは、図 4 に示す論文誌(J. Chemical Software)を 1998 年 Vol.4 から電子出版を開始しました。編集は時田澄男先生(埼玉大)が担当しました。1996 年から森川鐵朗先生(上越教育大)主催でインターネット上に「化学の学校」を開催しました。この学校ではインターネットを介して、教員が開発した化学教育ソフトを配布しました。

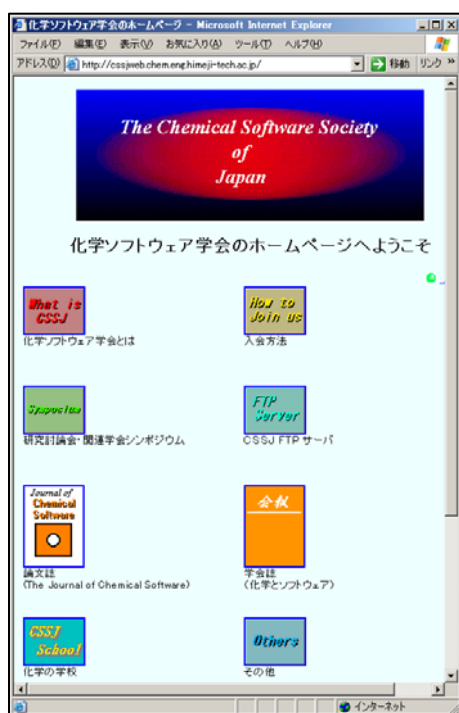


図 3 化学ソフトウェア学会の HP

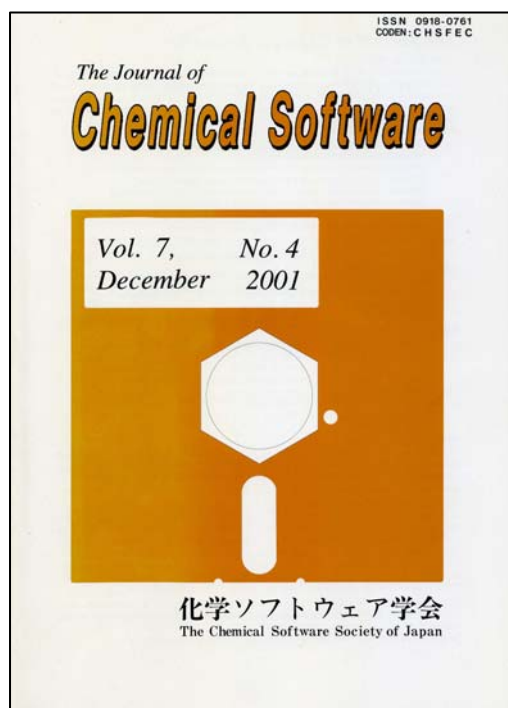


図 4 論文誌(J. Chemical Software)