

特集号のお知らせ：

船津公人教授 Herman Skolnik Award 受賞記念特集号：

ケモ・マテリアル・インフォマティクスの新展開

船津公人教授（東京大学）が 2019 年 Herman Skolnik Award を受賞することになりました。Herman Skolnik Award は米国化学会において、化学情報科学 (Chemical Information Science) の分野で理論と応用における顕著な貢献があった研究者に贈られる賞であり、その最初の受賞者が 1976 年、Herman Skolnik が受賞したことから始まる、この分野で最も歴史と権威にある賞です。

日本のケモ・マテリアル・インフォマティクスの歴史を鑑みると、1960 年代、スタンフォード大学で研究が始まった機器分析からの自動化学構造決定問題と同時期に、日本では、(故)佐々木慎一先生のグループが、企業との共同研究ですすめられた CHEMICS (1967 年) にさかのぼることができます。そして、その後、岡田孝、人工知能、知識発見そしてデータマイニング 30 年の歩み [JCAC, 18, 3-14, (2017)] によると、1986 年から 5 年間にわたり、科学技術庁のプロジェクト「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」が、米田幸夫先生をリーダーとしてスタートしました。そして、船津教授の合成設計支援システムの開発 (1988 年) がはじまり、さらなる拡張が現在も進んでおります。

2014 年、オバマ米大統領が立ちあげた Materials Genome Initiative Strategy があり、” a multi-agency initiative designed to create a new era of policy, resources, and infrastructure that support U.S. institutions in the effort to discover, manufacture, and deploy advanced materials twice as fast, at a fraction of the cost.” とあります。

データサイエンスというオープンソースの活用、解析法のデータベース技術によるデータと方法論の標準化の必要となり、計算化学と化学情報学の融合による新たな学際的学問分野の創出が望まれているなかで、日本の研究者初で Herman Skolnik Award を受賞されたことは、船津教授のこの分野における先駆的発想と不断の努力の成果と言えます。

そこで、船津教授が Herman Skolnik Award を受賞されたことに敬意を示すとともに、Chemo Material Informatics における特集号を JCAC にて組むことを第 41 回ケモインフォマティクス討論会・幹事会にて承認されました。以下のようにケモ・マテリアル・インフォマティクスに関わる論文を広く募集いたします。

1. ケモ・マテリアル・インフォマティクスに関わる論文であること。
2. On going の研究を含む、オリジナル論文、総説、短報、チュートリアル論文。
3. 必ず、ケモ・マテリアル・インフォマティクスにおける展望の章を独立に設定すること
4. 締切、2019 年 3 月末日（使用言語、英語、日本語、詳細は JCAC 投稿規定に準じる）

なお、本ジャーナルでは、投稿いただいた論文を受理することを目標に審査いたします。

メジャー、マイナー修正をいただくこともあります。よろしくお願いいたします。

JCAC 編集委員会