



## 祝 40 周年— Hansch–Fujita 法

本学会元会長・名誉会員の藤田稔夫先生が、アメリカ・カリフォルニア州 Pomona College の Corwin Hansch 教授とともにアメリカ化学会誌, *JACS*, **86**, 1616–1626 (1964) に “ $\rho$ - $\sigma$ - $\pi$  Analysis. A Method for the Correlation of Biological Activity and Chemical Structure” という論文を発表され、2004 年で 40 年を迎えました。これを Hansch–Fujita 法の誕生 40 年とし、11 月 30 日つくば国際会議場で開催された第 32 回構造活性相関シンポジウム（日本薬学会構造活性相関部会主催、本学会共催）において、その祝賀式典が行われました。式典では、構造活性相関部会代表である藤原英明大阪大学教授から、先生の業績が簡単に紹介され、続いて賞状と記念品が贈呈されました。藤田先生からは仕事に対し衰えることのない情熱のこもった感謝のスピーチがございました。構造活性相関部会は、藤田先生が約 30 年前に立ち上げられた構造活性相関懇話会が始まりですが、2002 年 4 月に日本薬学会の部会として新たに発足したものです。

構造活性相関を定量的・論理的な立場から取り扱おうとする研究方法において、Hansch–Fujita 法は“さきがけ”の位置をしめますが、そののち、種々の新しい手法が創案・展開され、現在では“定量的構造活性相関 (Quantitative Structure-Activity Relationship, QSAR) と Modeling”という一つの学際領域が形成されてきたという状況です。Hansch–Fujita 法は、有機物理化学的に明確で、今でも構造最適化や分子レベルでの作用機構の解明に用いられます。本来は、1963 年に *JACS* 誌上に発表された Hansch 教授と共著の “The Correlation of Biological Activity of Plant Growth Regulators and Chloromycetin Derivatives with Hammett Constants and Partition Coefficients” が Hansch–Fujita 法に関する論文としては先になります。QSAR の最初の解析は除草剤のフェノキシ酢酸系列に関するもの（医薬でなく農薬）であったのです。

上記の 1964 年の  $\rho$ - $\sigma$ - $\pi$  Analysis の論文は Institute of Scientific Information によって 1982 年の Citation Classic (引用数 535 以上) に、そして同年に発表の論文 “*JACS*, **86**, 5175–5180 (1964): T. Fujita, J. Iwasa, and C. Hansch: A New Substituent Constant,  $\pi$  Derived from Partition Coefficients” も 1986 年に Citation Classic (引用数 780 以上) に取り上げられています。2003 年のアメリカ化学会の統計によれば、*JACS* に発表された論文の中で、引用回数に関するトップ 125 のうち、 $\pi$  Constant の論文が 39 位に、 $\rho$ - $\sigma$ - $\pi$  Analysis の論文が 44 位にランクされていて、日本人の論文としては、最も高いランク付けでした。藤田先生の御業績に対し、これまでに日本農薬学会から 1979 年に業績賞、2000 年に功労賞が、日本農芸化学会から 1967 年に奨励賞、1989 年に功績賞が、1994 年にはアメリカ化学会の Agrochemical Division から研究国際賞が授与されています。2004 年 9 月にはトルコのイスタンブールで開催された The 15<sup>th</sup> European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships & Molecular Modeling (QSAR の主要国際シンポジウムの一つ) においても、Hansch 先生と藤田先生の業績を記念するセレモニーが行われました。

京都大学大学院農学研究科応用生命科学専攻 中川好秋