- 1979-80年 財団法人東京都臨床医学総合研究所医療工学研究室に於いて、神沼二眞、鈴木勇らによって化学生物学分野の統合システムの研究が開始され、栗原章浩(株)フジミックおよび CIS プロジェクトの協力の下に CIS (Chemical Information System) の部分的な移植実験に成功する。
- 1981 年 3月 上記の活動を基に、「計算機と化学・生物学の会」の設立準備会を開催する。
  - 4月 「計算機と化学・生物学の会設立準備事務局」を開設し、その下にフォーラムとワークショップを置く。事務局を東京都臨床研医療工学研究室に置き。代表として神沼二眞(東京都臨床研)を選出する。
  - 10月 第1回研究講演会を開催
  - 12月 第1回研究連絡会議を持つ。

第1期2ヶ年計画の実施を決定する。

- 1982 年 化学生物学分野の研究支援システムとその利用に関する研究講演会を積極的に開催する。
- 1983年 7月 第2期2ヶ年計画の実施を決定する。
- 1983-84 年 東京都臨床研において CHEMLAB、TRIBBLE を始めとする分子のモデリングとグラフィックシステムの移植・評価実験を行う。
- 1985年 7月 「計算機と化学・生物学の会設立準備事務局」を「計算機と化学・生物学の会」と名称変更し、併せて運営組織を改組する。神沼二眞(東京都臨床研)が、代表となる。
- 1986年 4月 「計算機と化学・生物学の会」事務局をアドイン研究所内(東京都渋谷区神南)に移す。
- 1987年 4月 「計算機と化学・生物学の会」事務局を日本科学技術研修所内(東京都渋谷区千駄ヶ谷) に移す。
- 1988年 3月 大澤映二(北海道大学)が、代表となる。
- 1989年 3月 大澤映二(北海道大学、現豊橋技術科学大学)が、代表に再任される。
- 1990年 6月 「計算機と化学・生物学の会」事務局を(社)日本工業技術振興協会(東京都港区赤坂) に移す。
- 1991 年 8月 「計算機と化学・生物学の会」事務局を愛知産業ビル内(東京都品川区北品川)国民工業 振興会に移す。
- 1992年 3月 細矢治夫(お茶の水女子大学)が、代表となる。
- 1994年 4月 独自のサーバ機を導入し、インターネットへの接続環境を構築するとともにネットワーク 団体として登録する。
- 1997年 「計算機と化学・生物学の会」事務局をイイダビル(東京都世田谷区用賀)に移す。
- 1999年 10月 平山令明(東海大学)が、代表となる。
- 2000 年 4月 「計算機と化学・生物学の会」を「情報計算化学生物学会」と名称変更する。
- 2001年 4月 多田幸雄(大鵬薬品)が代表となる。
- 2003年 4月 代表に多田幸雄(大鵬薬品)が再任される。
- 2005年 4月 代表に多田幸雄(大鵬薬品)が再任される。
- 2007年 4月 河合隆利 (エーザイ) が代表となる。
- 2009年 4月 代表に河合隆利 (エーザイ) が再任される。
- 2011年 4月 田中博(東京医科歯科大学)が代表となる。
  - 6月 事務局を横浜市に移す。所轄庁の変更(所在地変更)に伴い東京都より特定非営利活動法 人の認証が下りた。
- 2012 年 4月 横浜市より、特定非営利活動法人設立の認証が下り、小長谷明彦(東京工業大学)が理事 長となる。

- 2013年 4月 代表に田中博(東京医科歯科大学)が再任される。
- 2015年 4月 代表に田中博(東北メディカルメガバンク機構)が再任される。
- 2016 年 6月 事務局を東京都新宿区に移す。所轄庁の変更(所在地変更)に伴い東京都より特定非営利 活動法人の認証が下りた。
- 2017年 4月 片倉晋一(第一三共 RD ノバーレ、慶應義塾大学)が代表となる。
- 2019年 1月 事務局を東京都港区に移す。
  - 4月 片倉晋一(慶應義塾大学)が代表に再任される。
  - 4月 定款変更申請(事業の追加)に関して、東京都から4月1日付け認証書が届く。情報計算 化学生物学に関する調査・研究事業を追加し、CBI研究機構を設立して事業を始める。
- 2020年 10月 評議員会のメール審議を経て、現会長の任期を一年間延期することが決まった。
- 2022年 4月 相良武 (大鵬薬品) が代表となる。
  - 8月 定款変更申請(役員の選任)に関して、東京都から8月19日付け認証書が届く。