

専攻	材料システム 工学	学籍番号	895503	指導教官氏名	船津 公人
申請者氏名	速水 健一				阿部 英次
					宮下 芳勝

論 文 要 旨

論文題目	有機化合物の自動構造推定システムの開発 - 構造発生法に関する研究 -
------	--

(要旨 1,200 字以内)

有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS の開発過程では、2次元 NMR 情報の活用により代表されるように新しい分析手法により得られる各種構造情報を利用可能としてきた。また一方で、Counterpart 推定などの新たな解析手法の導入も図られてきた。これらによる機能の向上を実現するために CHEMICS 本体の改良や、その手法による効果を最大限に生かすために多くのオプションプログラムが開発されてきた。しかし、様々な情報を取り扱うことができるようになったとはいえ、CHEMICS に入力可能な未知試料に関する情報を十分に持っていなかったり、分子量が大きいといった理由から多数の候補構造が提示されるという問題が残っていた。また、分子式の入力が必須条件であることは、時として CHEMICS の利用を困難にした。

これらの問題に対処するために、最初の問題に対しては、確度の高い候補構造から順に提示させるように CHEMICS の改良を行った。この機能は、CHEMICS から一度、提示された候補構造に対して別なオプションプログラムによりランク付けを行うという形ではなく CHEMICS 本体の構造発生アルゴリズムを改良することにより実現された。すなわち、まず、構造組立ての単位として用いている各部分構造（2次、3次コンポーネント）に対する

^{13}C -、 ^1H -NMR化学シフト出現頻度分布関数を新たに作成した。その上で、利用者の入力した ^{13}C -、 ^1H -NMRデータをもとに、この関数を参照して各部分構造にもっともらしさの序列を付け、このもっともらしい部分構造から順に用いて候補構造を組み立て、正解構造を含む確度の高い候補構造を短時間内に発生するというものである。そして、この改良の有効性は、実行例を通して確認された。

残りの問題に対しては、CHEMICS 本体とは別なプログラムとして、未知試料についていくつかの部分構造情報が得られている場合に、これらの部分構造をつなぎ合わせてより大きな部分構造を、そして場合によっては未知化合物全体を推定するプログラムを作成した。本プログラムを使用するに当たり部分構造情報は欠かせないものであるが、一方で一般の構造推定プログラムでは欠かせない分子式に関する情報が曖昧もしくは欠けていても使用できるようになった。また、部分構造を獲得する手段として、すでに開発されているIRスペクトル解析から部分構造を提案するプログラムを用いることもできる。本プログラムから提示される候補構造は全構造のみならず部分構造フラグメントをも含んでいるが、同じく開発済みの ^{13}C -、 ^1H -NMRやMSスペクトルの予測と評価プログラムは部分構造をも取り扱うことができ、本プログラムにより提示される候補構造の妥当性評価が可能である。

今回、構造発生法に注目することにより、先に挙げた問題の解決を図ることができ、構造推定へのコンピュータ利用の新たな方策を提案することができた。