

専攻	材料システム 工学専攻	学籍番号	8 8 9 8 0 1 1	指導教官氏名	船 津 公 人
申請者氏名	原 藤 寛				神 野 清 勝
					阿 部 英 次
論文要旨				宮 下 芳 勝	
論文題目	有機化合物の自動構造推定システムの開発 - NMRスペクトルデータの 高次利用と構造発生法に関する研究 -				

有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS は、部分構造推定とそれをもとにした構造創出の 2 つの機能を結合して、利用者が入力した分子式や IR, NMR スペクトルデータに矛盾しない候補構造を漏れなく重複なく提示する計算機プログラムである。これら両過程を機能的に結合する情報媒体の単位として 1 次, 2 次, 3 次コンポーネントという部分構造が設定されている。また構造推定に際して、利用者が存在を肯定したり否定する任意の大きさの部分構造を 2 次コンポーネント単位で正及び負のマクロコンポーネント情報としてシステムに入力し構造創出に反映させることが可能である。この正及び負のマクロコンポーネント情報は 2 次コンポーネントそのものを処理の単位としているが、2 次コンポーネントにはその中に別の 2 次コンポーネントを部分構造として包含するという構造的包含関係が存在する場合がある。本研究では、このような複雑な関係を考慮してマクロコンポーネント情報が構造推定に正しく反映されるよう改良した。しかし従来から指摘されている構造創出におけるマクロコンポーネント処理の問題点は依然として残った。この問題には全体から既知部分構造をさし引いた残りの部分構造を構造的スペクトル的両制約条件下 COUNTERPART として集中的に推定し、これら推定された COUNTERPART と既知部

分構造として定義された HOST PART とを整合させ全構造を獲得する方法が考えられていた。現在この一連の手順の中で、 COUNTERPART のみを推定する機能だけが利用可能である。本研究では、推定された COUNTERPART と HOST PART を整合させ全構造を獲得出来る機能を拡張した。それと同時に、 2次元 NMR データが獲得されている場合は、 COUNTERPART 推定に必要なシグナル結合情報のみをシステムが自動的に選択し解析を行えるよう機能を拡張した。このシグナルの選択には、 COUNTERPART 推定の際に利用者によって HOST PART に確実に帰属されると指定された NMR シグナル情報も考慮される。さらに、 ^{13}C -NMR 帰属情報を伴って推定された COUNTERPART と HOST PART を整合させて得られる ^{13}C -NMR 帰属情報を伴った全構造の出力に際しては、入力されている ^{13}C - ^{13}C , ^1H - ^1H シグナル結合情報などによる HOST PART と COUNTERPART の結合の妥当性の検定が行われ、これらの情報に矛盾する構造は出力されない。また、 HOST PART 及び推定される COUNTERPART がそれぞれ単数、複数の部分構造から構成されるという構造的形態に対しても 1次元、2次元 NMR データの利用による構造推定が可能ないように機能を拡張した。さらに 構造推定後、出力された候補構造式の観察を通して、再び構造発生を行う事なく特定の部分構造が存在する、あるいは存在しないものだけを取り出す機能を付加機能として追加した。以上実用性の高い機能を CHEMICS に付加することで CHEMICS の実用性はさらに向上するものと考えられる。