

平成 12 年 12 月 25 日

機能材料工学専攻	
申請者氏名	増井秀行

紹介教官氏名	船津公人
--------	------

論文要旨 (博士)

論文題目	スペクトルを用いる有機化合物の構造解析システムの開発に関する研究
------	----------------------------------

(要旨 1,200 字程度)

有機化合物の構造解析には、質量スペクトル (MS)、赤外線吸収スペクトル (IR)、核磁気共鳴スペクトル (NMR) などが有効である。また、コンピュータの構造解析への適用には、大きく分けて三つの世代がある。第一世代はデータベースの構築と利用であり、第二世代は化学構造からのスペクトル予測である。第三世代は、構造解析システムの最終目標であるスペクトルからの構造提案である。著者は、各種スペクトルの内、最も直接的な構造情報の多い NMR スペクトルに重点を置き、コンピュータを用いた構造解析システムの各世代への適用に関する研究を行った。

NMR の内  $^1\text{H}$ -NMR スペクトルは測定感度が良好なため、日常分析として最も多く測定されているが、そのスペクトルパターンの複雑さに起因して、データの取り扱いが困難で、その研究は  $^{13}\text{C}$ -NMR スペクトルに比較して少ない。この  $^1\text{H}$ -NMR スペクトル情報を有効活用する事が、構造解析の効率化を大いに向上させることとなる。また、近年パルス磁場勾配法により、日常的に 2D-NMR スペクトルが測定されている。その中でも H-H COSY スペクトルは、少量試料、短時間で測定が可能で、2D-NMR の中で最も測定の容易なものである。著者は、水素原子を対象とし、 $^1\text{H}$ -NMR と H-H COSY スペクトルを用いた構造解析の方法論を確立し、そのシステムを実現し、構造解析の効率化を図るために本研究を開始した。

本論文は、 $^1\text{H}$ -NMR スペクトルに焦点を置き、構造解析システムの第一世代のデータベースの構築から、第三世代の構造提案に至る研究成果から構成されている。はじめに、本研究の目的、背景、意義を議論し (第一章)、第一世代のシステムとして、スペクトル情報管理システム SPECTRA の開発と、その  $^1\text{H}$ -NMR とともに、 $^{13}\text{C}$ -NMR、MS、IR スペクトルの波形データを含むデータベースの構築を議論した (第二章)。さらに、第二世代、第三世代のスペクトル構造解析システムについて、その研究成果を明らかにした。すなわち、 $^1\text{H}$ -NMR スペクトルの特殊性を表現できる新規部分構造表記方法 (HYPER コード) を考案し、そのコードを発生させる HYPERGEN システムについて述べた (第三章)。このコードを活用して、 $^1\text{H}$ -NMR データベースから知識ベースを誘導し、構造情報から  $^1\text{H}$ -NMR と H-H COSY スペクトルを予測するシステム (SimCOSY) の開発 (第四章)、その  $^1\text{H}$ -NMR スペクトルデータベースの品質を向上させるためのシステム (SpecQC) の開発 (第五章) について記述した。また、 $^1\text{H}$ -NMR と H-H COSY スペクトルを入力情報とし、知識ベースを活用し、入力データに矛盾しない大きな部分構造を抽出し、その帰属情報を用いた構造組み立て方法により構造を提案するシステム (Spec2D) の開発について論じた (第六章)。最後に (第七章) 本研究の成果を総括し、本分野の今後の展望を述べた。