

平成13年2月28日

豊橋技術科学大学長 殿

審査委員長 阿部 英次



## 論文審査及び学力の確認の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。

記

学位申請者	増井 秀行	報告番号	第 146 号
申請学位	博士(工学)	専攻名	機能材料工学専攻
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		
公開審査会の日	平成13年2月6日		
論文審査の期間	平成13年1月25日～平成13年2月27日	論文審査の結果	合格
学力の確認の日	平成13年2月6日	学力の確認の結果	合格

論文内容の要旨  
本論文は、<sup>1</sup>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いたる研究成果から構成されている。第一章では、本研究の目的、背景、意義が述べられ、第二章では、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、<sup>1</sup>H-NMRとともに、<sup>13</sup>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について議論されている。さらに、第三章では、第二世代のスペクトル構造解析システムについて、その研究成果が示されている。すなわち、<sup>1</sup>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システムについて示されている。このコードを利用して、<sup>1</sup>H-NMRデータベースから知識ベースの誘導、構造情報から<sup>1</sup>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<sup>1</sup>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)について述べられている。第六章では、<sup>1</sup>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て入力データに矛盾しない大きな部分構造を抽出することで、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)の開発が論じられている。最後に研究成果の総括と本分野の今後の展望が述べられている。

審査結果の要旨  
有機化学に関連した研究分野では、構造未知の化合物の構造を決めることがあらゆる研究の端緒となる。この分野へのコンピュータ利用の歴史は30年以上にわたるが、本研究により実現された構造解析システムは、化学系企業の中で必要とされる実用的な観点からの徹底したデータベース構築、データ登録時に必要なデータ品質管理機能、さらにはそのデータベースから自動誘導した知識ベースを活用した構造未知の化合物の網羅的候補構造創出機能などを含み、きわめて完成度の高い独創的なシステムとして国内外で注目されている。特に測定しやすい<sup>1</sup>H-NMRおよびH-H COSYデータのみで(未知試料の分子式を必要としない)候補構造を推定できる世界で初めてのプログラムシステムとして、そのアルゴリズムのエlegantさと性能の高さにより注目されている。本論文の研究成果は、構造決定過程の自動化に大きく寄与する可能性を持っていると同時に、研究の独創性、実用性の観点できわめて高いレベルにある。今後のこの分野の研究への波及効果は大きい。

以上により、本論文は博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員

阿部英次



神崎清隆



舟橋 英次



印

印

印

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。