

豊橋技術科学大学長 殿

平成2年 2月 28日

審査委員長 伊藤 浩一

## 論文審査及び最終試験の結果報告書

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	須々田 寛	学籍番号	第 855502 号	
申請学位	工学博士	専攻名	材料システム工学	
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 高次利用に関する研究－			
公開審査会の日	平成2年 1月 30日			
論文審査の期間	平成2年 1月 25日～平成2年 2月 20日	論文審査の結果	合格	
最終試験の日	平成2年 1月 30日	最終試験の結果	合格	

論文内容の要旨

本研究では構造未知の有機化合物の2次元NMRスペクトルデータを解析し、そこから得られる情報を構造推定に活用するためのコンピュータプログラムの開発を行なった。第1章では研究の背景となっている自動構造解析システムについて述べ、第2章では本研究の目的を述べている。第3章では炭素－炭素シグナル結合情報の解析のアルゴリズムとその実行例について述べている。第4章では炭素－水素シグナル結合情報の解析アルゴリズムの開発及びその実行例について述べている。第5章では水素－水素シグナル結合情報の解析アルゴリズムの開発とその実行例について述べている。第6章ではNMRシグナル帰属情報を自動構造解析システムで活用するためのアルゴリズムについて述べている。第7章では第3章から第6章までに述べたアルゴリズムを既存の自動構造解析システムに如何に組み込むかについて述べている。第8章ではこのシステムの実行例について述べている。第9章で全体を総括している。

審査結果の要旨

有機化学の重要な基礎技術の一つとして未知化合物の構造推定がある。これをコンピュータによって自動的に行なうシステムとしてスペクトルデータの自動解析を中心としたCHEMICSがある。本研究はこのCHEMICSの性能の向上を図るために、近年その進歩が著しい2次元NMRスペクトルデータの解析を行なうコンピュータプログラムの開発を行なったものである。2次元NMRスペクトルには各種の測定法があるが本研究では、いわゆるCOSY (Correlation Spectroscopy) によって得られるデータの解析を目標とし、それを達成している。本研究の成果をCHEMICSに組み込んだ結果、そこから出力される候補構造の数は顕著に減少した。すなわち、本研究は有機化合物の自動構造解析システムの実用化に大きく寄与したものと見える。

以上により、本論文は工学博士の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員

伊藤 浩一

伊藤

伊藤 健児

伊藤

阿部 健一

阿部

阿部 英次

阿部

宮下 芳勝

宮下

高橋 由雅

高橋

(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。