


豊橋技術科学大学長 殿

平成 2 年 2 月 28 日

審査委員長 伊藤健児 

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 | Carlos Adriel Del Carpio Munoz | 学籍番号 | 第 847550 号 |
| 申請学位 | 工学博士 | 専攻名 | 材料システム工学 |
| 論文題目 | A Novel Approach to the Perception of Precursors Directed to the Automatic ^{organic} Synthesis Design System AIPHOS (自動有機合成設計システム AIPHOS)における合成前駆体推定に関する研究) | | |
| 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



本研究は有機化合物の合成経路を自動的に設計するコンピュータソフトウェアの開発を目指したものである。第1章では、合成の目標となる化合物の構造式から、構造特徴データを自動的に抽出する為のアルゴリズムについて述べている。第2章では、合成経路予測に必要な、目標構造中の各原子及び結合の物理化学パラメータの推算を行うプログラムの作成について述べている。第3章では、第1章及び第2章で述べたプログラムによって得られた結果に基づいて目標構造中の開裂可能な結合の予測について述べ、それを用いて合成前駆体を予測するアルゴリズムについて述べている。第4章では、前章で予測された合成前駆体の安定性及び反応性の評価について述べている。第5章では、以上の結果を総合的に評価し目標化合物を合成するための前駆体(原料となる化合物)を選択する手続きとして、逆合成空間(Retrosynthetical Space)なる新しい概念を提案しその有用性について述べている。


審査結果の要旨

有機化学へのコンピュータの応用は現在急速な進展を見せている。中でも有機合成設計の自動化は、それによって医薬、農薬に代表される有用な有機化合物の開発の効率が飛躍的に向上し得ることから多くの研究がなされてきている。これまでの研究は経験を積んだ化学者の知識をデータベース(知識ベース)化しようというものと、化学反応の理論をコンピュータアルゴリズム化したものに分けられる。本研究はこの2つの手法を巧妙に組み合わせ、かつ反応性予測に関する新たな評価方法を考案して、有機合成設計の自動化の研究に新たな進展を加えたものである。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であると判定した。

審査委員

伊藤健児 
宮下共勝 

大岩元 
竹市力 

阿部英次 
高橋由雅 