

豊橋技術科学大学長 殿

平成 11 年 8 月 27 日

審査委員長

西山久雄

## 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	佐藤耕司	報告番号	第 127 号
申請学位	博士(工学)	専攻名	機能材料工学
論文題目	合成設計システムAIPHOSの実用化に関する研究		
公開審査会の日	平成 11 年 8 月 25 日		
論文審査の期間	平成 11 年 7 月 28 日～平成 11 年 8 月 27 日	論文審査の結果	合格
学力の確認の日	平成 11 年 8 月 25 日	学力の確認の結果	合格

本論文は有機合成設計システムAIPHOSの、情報化学および有機化学両面からのアプローチによる実用化向上に関する研究成果を取りまとめたものである。

第1章では、合成設計システムの開発の歴史と本研究の必要性を述べている。第2章では、AIPHOSの概要とその特徴である知識ベースに関して論じている。第3章では、出発物質を想定した逆合成解析機能をAIPHOSに導入するために必要な出発物質ライブラリーの構築について述べている。また、実際に構築した出発物質ライブラリーを利用し、出発物質を想定した逆合成解析例を示している。第4章では、有機合成化学者が標的化合物の合成設計を行う際に直感的に閃く合成ルートをコンピュータ上で具現する手法として、反応のTransformを利用した経験指向型合成設計システムTOSPを提案している。第5章では、大量の反応データから自動的に誘導された知識ベースを利用する経験指向型合成設計システムKOSPを提案している。第6章では、本研究により開発された新規合成設計システムを医薬品中間体の逆合成解析に適用し、効率的で新規な合成経路が提案されるとともに、実験で実証したことを述べている。第7章では、本研究において得られた成果を総括するとともに、今後の展望を述べている。

化学工業・製薬業界では、既存の合成経路の見直しや新規化合物の合成経路の迅速な開発が省エネルギー、環境問題、特許などの問題と絡んで大きな検討課題となっている。同時に、年々蓄積されて行く有機合成反応データをこれらの課題に効果的に活用するなど、コンピュータを利用した合成設計のための研究が従来にも増して強く望まれるようになってきた。本研究で研究・開発された有機合成設計システムは、情報化学的な観点から、素反応自体の新規性や素反応の組み合わせの新規性を検討できるとともに、その実際性についても検討できるところに有機合成化学者の研究の助けとなるユニークさを持っている。そのほか、合成標的と入手可能な出発原料をつなぐ合成経路の創出を可能とするなど、従来欧米で開発されてきた合成設計システムの持っていた問題点を解決し、はるかに実用性のあるシステムとして完成されている。また、これを用いて実際にLevofloxacin, キノロン系合成抗菌剤DU-6859aなどの医薬品中間体の新規合成経路の開発に取り組み、成功を収めたことから、本研究成果は今後、化学工業・製薬業界などの合成設計問題に対して大きく貢献するものと期待される。

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  
 西山久雄  
 阿部英次  
 伊津野真一  
 伊津野真一  
 伊津野真一  
 伊津野真一

(注) 論文審査の結果及び学力の確認の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。