

専攻	材料 システム工学	学籍番号	855502	指導教官氏名	伊藤 浩一
申請者氏名	須々田 寛				阿部 英次
					宮下 芳勝

## 論 文 要 旨

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 -
------	---

(要旨 1,200 字以内)

有機化合物の自動構造推定システム CHEMICS は、未知試料の分子式とスペクトルデータの入力に対してそのデータに矛盾しない候補構造を提示するためのコンピュータプログラムである。そのデータ解析における処理能力の効率化は、ある一定レベルに到達している。しかしテルペン類などの試料の場合、その 1 次元核磁気共鳴 (1D NMR) スペクトルデータだけの利用では化学シフト値の構造への帰属処理における曖昧さのために候補構造がかなり多く発生する問題点がある。一方、有機化合物の構造推定における有力な測定手法として 2 次元フーリエ変換 (2D FT) NMR 法が注目されている。これは 2D FT-NMR 測定法の技術進歩によってカップリングの関係にあるシグナルを一度に観測できるためである。本研究では候補構造数を絞り込むために、2D NMR 情報を入力データとして取扱い、そのデータ解析処理機能を開発することでシステムの改良を試みた。2D NMR 情報を A-B シグナル結合情報と表現する時、これは A 核の NMR のあるシグナルと B 核の NMR のあるシグナルとの間にカップリング関係があること、つまりどのシグナルとどのシグナルがその結合関係にあるかを意味する。さて、取扱うシグナル結合情報の種類は  $^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$  シグナル結合情報、 $^{13}\text{C}-^1\text{H}$  シグナル結合情報、および  $^1\text{H}-^1\text{H}$  シグナル結合情報の 3

つである。

これまで 1D NMR スペクトルデータ解析では、各シグナルについてその化学シフト値をパラメータとして構造解析に利用してきた。なぜならば化学シフト値と対応する観測原子核の化学的環境との間に相関関係があることが知られているため、部分構造 - NMR 化学シフト相関表（経験則）として整理できる。その経験則にしたがって、ある化学シフトが観測されたとき対応する部分構造推定が行われ、シグナル結合情報はそれぞれのシグナルに相当する部分構造間のつながりへと導かれる。つまり、 $^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$  シグナル結合情報からは直接炭素原子間の連結関係を、 $^{13}\text{C}-^1\text{H}$  シグナル結合情報からは炭素原子と水素原子間の結合関係を、 $^1\text{H}-^1\text{H}$  シグナル結合情報からは間接的な意味でその水素原子が結合する炭素原子間の連結関係をそれぞれ推定できる。これらシグナル結合情報を、システムの構造組立て工程における制約条件として、あるいは発生した候補構造の検定のための条件として利用した。また、経験則に基づいた NMR シグナルの構造に対する帰属結果には曖昧性が多く含まれたままであるため、2D NMR 情報の活用により自動的にその帰属関係を明確化するプログラムを開発した。もし 2D FT-NMR 測定ができない場合には解析者によるスペクトル解析についての考察結果をシグナル結合情報としてシステムに反映させることも可能である。以上述べた 2D NMR 情報解析機能付き自動構造推定システムにより候補構造数を大巾に減らすことができ良好な結果を得た。