

平成 11 年 6 月 23 日

機能材料工学専攻		紹介教官氏名	船津 公人
申請者氏名	佐藤 耕司		

論文要旨(博士)

論文題目	合成設計システム AIPHOS の実用化に関する研究
------	----------------------------

(要旨 1,200 字程度)

Corey によりコンピュータ利用による合成設計に関する報告がなされて以来、現在までに 50 以上の合成設計システムが開発されてきている。合成設計システムは逆合成解析のアプローチ方法により経験型、論理型システムの二つのタイプに大別される。前者は、LHASA, SECS などに代表される経験型システムであり、提案逆合成ルートの実際性が保証されている点が特徴として挙げられる。後者は、SYNGEN, SECS などに代表される論理型システムであり、提案される逆合成ルートにオリジナリティーおよび新規性があるといった特徴を有している。これらアプローチは両者ともに、有機化学者にとって興味深いアプローチであった。

一方、現在、著者らが開発中の AIPHOS は、経験型・論理型両システムの利点を相補的に活用した折衷型システムである。このため、実験室において実行可能なオリジナルかつ新規性を有した逆合成ルートを提案することが可能になっている。しかし、現時点では、AIPHOS はシステムの枠組みが完成した段階であり、実用化のためには、さらなる機能拡張が必要であった。そこで、著者はこの問題に対処するために本研究を開始した。

本研究は、情報化学および有機化学両面からのアプローチによる合成設計システム AIPHOS の実用化向上に関する研究の成果をとりまとめたものである。

本論文は情報化学、有機化学の二つのアプローチによる研究から構成されている。情報化学の観点から、AIPHOS システムの機能向上を検討した(第 3-5 章)。有機化学の観点からは、第 6 章において、AIPHOS の能力評価を検討した。

本論文の構成は以下の通りである。

第 1 章の序論では、合成設計システム開発の歴史と本研究の必要性を議論した。

第 2 章では、AIPHOS の概略とその特徴である知識ベースに関して論じた。さらに、本研究の合成設計システム開発における目的と位置づけを明確にした。

第 3 章では、出発物質を想定した逆合成解析機能を AIPHOS へ導入するために必要な出発物質ライブラリーを構築した。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た。

第 4 章では、合成化学者が標的化合物の合成設計を行なう際に直感的に閃く合成ルートをコンピュータ上にて具現化するために transform を利用した経験志向型合成設計システム TOSP を開発した。

第 5 章では、反応部位周りを抽象化することによって、記述されている AIPHOS 知識ベースを利用した新規経験志向型合成設計システム KOSP を開発した。

第 6 章では、医薬品中間体の AIPHOS による逆合成解析を行なった。その結果、有望な逆合成ルートが提案されたため、AIPHOS 提案に基づいた実験による検証を検討し、効率的な新規合成ルートを開発した。

最後に第 7 章では、結論として本研究において得られた成果を総括するとともに、今後の展望を述べた。