

2P14 有機化合物自動構造推定システム、SEoN/Spec2D のインターフェースの開発

○橋大樹、船津公人、増井秀行

豊橋技術科学大学、住友化学工業

1. はじめに

本研究室では、構造未知の有機化合物の構造推定を行うシステムとして、SEoN[1]/Spec2D[2]を開発している。SEoN とは、自動構造推定システム CHEMICS[3]や各種スペクトル予測システムを統合的に用い、構造推定を自動的に行うことができるシステムである。一方、Spec2D は分子式を必要とせず、 ^1H -NMR スペクトル、HH-COSY 情報から構造推定を行うシステムである。

これらのシステムには、十分な GUI が実装されておらず、操作上不便な点が存在していた。そこで本研究では、インターフェースを開発することにより、両システムの利便性を向上させることを目的とした。

2. Spec2D

Spec2D は ^1H -NMR スペクトル、HH-COSY 情報から構造未知の有機化合物の構造式を推定するシステムである。このシステムは入力情報に分子式を必要とせず、またスペクトル解析に知識ベース（構造解析についての知識ルールの集合）を利用するという特徴を持つ。

これまで本システムは UNIX の CUI 上でのみ動作するため、操作上不便な点があった。そこで本研究では、このシステムを Windows に移植し、GUI を実装することによって利便性の向上を図った。図 1 に Spec2D の実行画面を示す。下のウィンドウでは、 ^1H -NMR スペクトル、HH-COSY 情報の入力やそれらの編集、およびグラフ表示が可能である。上のウィンドウは、構造推定の結果、得られた構造を表示するためのものである。



図 1. Spec2D の実行画面

3. SEoN

SEoN はクライアント/サーバ型システムとして動作する有機化合物自動構造推定システムである。クライアントはユーザに操作しやすい GUI を提供し、サーバはクライアントからの要求に応答し、構造推定のための計算を行う。サーバは CHEMICS および、CHEMICS が提案した候補

構造を検定する ^{13}C -NMR スペクトル予測システム TUTCMR、 ^1H -NMR スペクトル予測システム TUTHMR、質量スペクトル予測システム TUTMASS から構成されている。

これまで、CHEMICS 自体では実装されているが SEoN では利用できない状態になっている機能がいくつか存在していた。これらの機能を SEoN から利用するための GUI を実装することにより、構造推定システムとしての実用性を高めることが可能となる。以下に実装した機能について説明する。

^{13}C — ^{13}C シグナル結合情報入力機能

CHEMICS では 2 次元 NMR 情報の一つである ^{13}C — ^{13}C シグナル結合情報を構造推定のための情報として利用することが可能である。この情報により炭素—炭素間の結合関係を検定することが可能となり、構造解析の精度を高めることができる。また、完全な ^{13}C — ^{13}C シグナル結合情報が手元にない場合でも、部分的な ^{13}C — ^{13}C シグナル結合情報を入力情報として利用可能である。

NMR 化学シフト相関表の編集機能

NMR 化学シフト相関表とは、CHEMICS が構造を組み立てるために使用する 630 種の部分構造(コンポーネント)について、その化学シフトの出現範囲を設定したものである。標準ではこれらの値は汎用性を重視しているため、余裕を持って設定されている。これを適切に編集することにより、構造解析の精度を高めることが可能となる。この機能を SEoN に実装したことにより、候補構造の数を減らすことができ、解析に要する時間を短縮することが可能となった。

4. まとめ

本研究では、SEoN/Spec2D の GUI の開発を行った。これにより、ユーザは両システムをより有効に利用することが可能となった。

参考文献

- [1] 梅尾裕美, ネットワークを利用した分子構造推定システム(SEoN)の開発, 2000, 豊橋技術科学大学修士論文
- [2] 増井秀行, スペクトルを用いる有機化合物の構造解析システムに関する研究, 2000, 豊橋技術科学大学博士論文
- [3] 佐々木慎一, 船津公人, CHEMICS—コンピュータによる構造解析—, 1994, 共立出版株式会社