

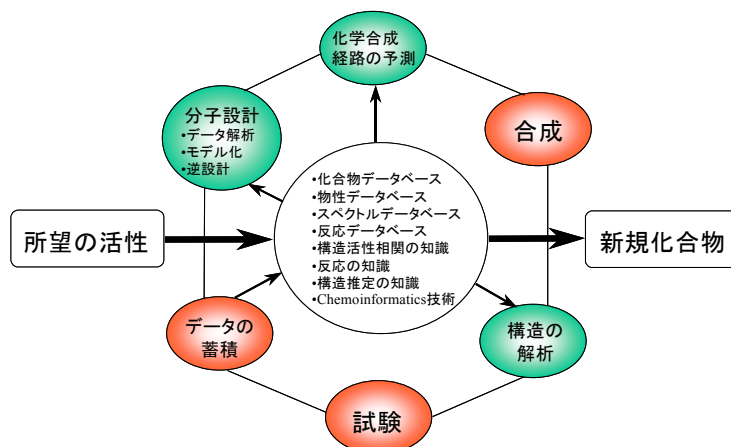
RD06

予測と設計のための知的基盤技術の構築

— 分子設計トータルシステムを目指して —

豊橋技術科学大学知識情報工学系
コンピュータ化学研究室（船津研究室）
〒441-8580 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘 1-1

所望の活性を有する構造をデザインする。これだけをとってみれば「分子設計」という言葉で表せる。しかしながら、その構造を有する化合物を望ましくない副生成物や有害な反応条件を避けてどのように合成すれば良いか。さらには、そのような考えの下にデザインされた合成経路を通して得られた化合物が確かに目的の構造を持つ化合物であるどうかを確認する。以上の3つ要素を総合して分子設計の流れは完結し、現実の研究開発と対応するのではなからうか。そのサイクルの中では、相互に様々な情報が連結され手法が利用される。総合的な知識情報工学的な手法が求められる。



分子設計トータルシステム概念図

本研究展示ブースでは、分子設計関係ソフトウェア、ケモメトリックスソフトウェア Chemish、合成設計システム（AIPHOS, KOSP, TOSP）、反応予測システム（RESUK）、さらには自動構造推定システム CHEMICS を核とする SeoN や COSY データによる構造推定システム Spec2D などの展示とデモを行う予定である。