

## 2P09

演 題	TSDB を用いた合成経路評価手順の検討	
発 表 者 ( 所 属 )	○山口 徹 (山口大学大学院理工学研究科応用化学工学専攻) 堀 憲次 (山口大学工学部応用化学工学科)	
連 絡 先	〒755-8611 山口県宇部市常盤台2丁目16番1号 TEL: 0836-85-8232	
キーワード	遷移状態、データベース、MO 計算	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	計算化学と情報化学を融合した合成経路開発システムにおいて重要な反応検索を可能とさせる	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	Windows
	ソ ー ス 言 語	CAL(ChemFinder Automation Language)
	周 辺 機 器	なし
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	<ul style="list-style-type: none"> <li>・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする</li> <li>・独自に頒布する</li> <li>・ソフトハウス、出版社等から市販</li> <li>・ソフトの頒布は行なわない</li> <li>・その他 <input checked="" type="radio"/>未定</li> </ul>	具 体 的 方 法

## TSDB を用いた合成経路評価手順の検討

○山口 徹<sup>1</sup>, 堀 憲次<sup>2</sup><sup>1</sup>山口大学大学院理工学研究科 (〒755-8611 山口県宇部市常盤台 2 丁目 16 番 1 号),<sup>2</sup>山口大学工学部応用化学工学科 (〒755-8611 山口県宇部市常盤台 2 丁目 16 番 1 号)

## 【緒言】

我々はこれまで合成経路開発に遷移状態データベース (TSDB) [1]をどのように利用するかについて検討を行ってきた。TSDB を合成経路開発に利用するための一つの方法として、合成経路設計システムより提案された合成経路を TSDB のデータを用いた反応解析によりその可能性を評価することが考えられる。本研究では、合成経路設計システムの一つである Fujitsu の AIPHOS/KOSP より提案された合成経路を、TSDB を用いて評価する手順についての検討を行ったので報告するとともに、実際にいくつかの分子の合成経路を例に取り、コンピュータによるデモンストレーションを行う。

## 【反応検索】

TSDB に登録されているデータの構造検索を行うツールである FIND\_TSINFO[2]に、今回新たに反応検索の機能を追加した。TSDB には反応に関与する分子の構造が CT (Connection Table) ファイルとして登録されている。これらの CT ファイルを、

反応スキームを保存可能な ChemDraw の CDX ファイル形式へと変換することができる。今回その機能を有するプログラムを開発し、それを用いて複数の反応物・生成物の CT ファイルから反応スキームの CDX ファイルを作成した。そのデータにより FIND\_TSINFO を用いた反応検索が可能となった。この検索では、反応物のみの検索が可能であるため、副反応も予測可能と考えられる。それら副反応の解析を行うことで、創出された合成経路の有用性の評価も可能となると考えられる。

## 【合成経路評価手順】

合成経路の可能性の評価は、(1)AIPHOS/KOSP により合成経路を創出し、(2)それら経路に対し FIND\_TSINFO を用いて反応検索を行って類似反応を見出し、(3)その反応の遷移状態を基に TS\_Search を用いて MO 計算のための初期構造を作成し、(4)Auto\_PTOD[3]を用いて遷移状態を計算する、という手順で行うことができる。現在のところ、AIPHOS/KOSP の出力から反応スキームの自動作成の機能は達成されておらず、今後の検討課題である。

将来的にはこの手順の自動化を行い、よりスムーズに合成経路の評価・ランキングへとつなげて行きたいと考えている。

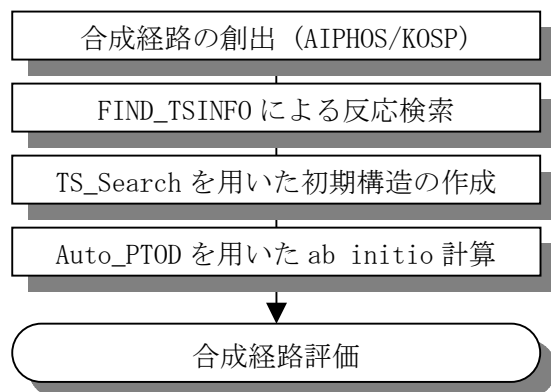


図 1 合成経路評価の手順

[1] 堀憲次、計算化学と情報化学を融合した合成経路開発システム、ファインケミカル、32、No. 6、17 (2003)。

[2] 山口徹、堀憲次、遷移状態データベース V、第 26 回情報化学討論会 JP19 (2003)。

[3] 山口徹、堀憲次、遷移状態データベース VI、日本コンピュータ化学会 2004 春季年会 1013 (2004)。