

目 次

1	化学反応と化学情報学	1
1.1	化学反応の予測を考える	1
1.1.1	化学反応の複雑さと多様性	1
1.1.2	化学反応と化学者	1
1.2	化学とコンピュータ	4
1.3	新しいコンピュータ利用のかたち	5
1.3.1	化学情報学	5
1.3.2	化学反応予測と化学情報学—筆者らのアプローチ—	6
1.4	化学情報学と情報学	8
1.4.1	情報学と化学と化学情報学	8
1.4.2	化学情報学とバイオインフォマティクス	12
2	化学情報とコンピュータシステム	13
2.1	化学情報の基本的な種類	13
2.2	さまざまな化学コンピュータシステム	14
3	化学反応の予測 (1) —さまざまなシステムのかたち—	17
3.1	コンピュータで考える化学合成と反応	17

3.2	化学合成経路設計と化学反応予測	21
3.3	化学反応予測システム	24
3.3.1	CAMEO システム	25
3.3.2	EROS6.0 システム	27
3.3.3	SOPHIA システム	32
3.4	SOPHIA システム	34
3.4.1	システムの構成	34
3.4.2	SOPHIA の化学反応知識ベース	34
3.4.3	SOPHIA による化学反応予測	50
3.4.4	SOPHIA のこれから	54
3.5	SOPHIA の反応部位認識機能を利用した副反応評価システム	55
4	化学反応の予測 (2) — 定量的な予測のための取組み —	57
4.1	化学反応の定量的予測	57
4.2	定量的予測のためのアイデアと構想	58
4.2.1	化学反応の複雑さと多様性	58
4.2.2	研究構想 — 化学反応の定量的予測のしくみを創る —	59
4.3	化学反応の支配因子の表現法と反応分類	65
4.3.1	物理化学パラメーターによる化学反応の表現と分類	65
4.3.2	化学反応特性の数量化と化学反応試薬の分類	77
4.4	反応試薬の作用予測モデル	83
4.4.1	予測モデルの構築	83
4.4.2	モデルを用いた化学反応試薬作用の予測	86
4.5	反応性のランキング化の試み	92
4.5.1	「反応しなかったデータ」に相当する情報の誘導	93
4.5.2	反応性のランキング化	93
4.6	化学反応の系図と反応予測	98

5	化学反応生成物の分子構造予測	101
5.1	化学構造を決める	101
5.2	分子構造推定システム	104
5.2.1	分子構造推定と人工知能	104
5.2.2	種々の分子構造推定システム	105
5.2.3	分子構造解析の自動化	106
5.3	核磁気共鳴スペクトル予測	108
5.3.1	核磁気共鳴スペクトル	108
5.3.2	NMR スペクトル予測システム	110
5.3.3	NMR による分子構造の決定	111
5.4	コンピュータで立体化学を表現する	114
5.4.1	立体化学とは	114
5.4.2	立体化学のコンピュータにおける表現	116
5.4.3	立体化学の規範的表記法 CAST	117
5.5	CAST/CNMR システム	161
5.5.1	^{13}C -NMR 化学シフト予測への CAST 法の応用	161
5.5.2	システムの考え方	162
5.5.3	システムの構成	162
5.5.4	20-Hydroxyecdysone の ^{13}C -NMR 化学シフト予測	164
5.5.5	Arisugacin F の ^{13}C -NMR 化学シフト予測	169
5.5.6	CAST/CNMR のこれから	173
6	将来への展望	175
6.1	化学反応データベース	175
6.1.1	現状と問題点	175
6.1.2	現状のデータベースの有効利用	177
6.1.3	新しいデータベースと活用の展望	177

6.2 化学コンピュータシステム.....	179
6.3 化学情報学の展望	180
参 考 文 献.....	183
欧 文 索 引.....	189
和 文 索 引.....	191

