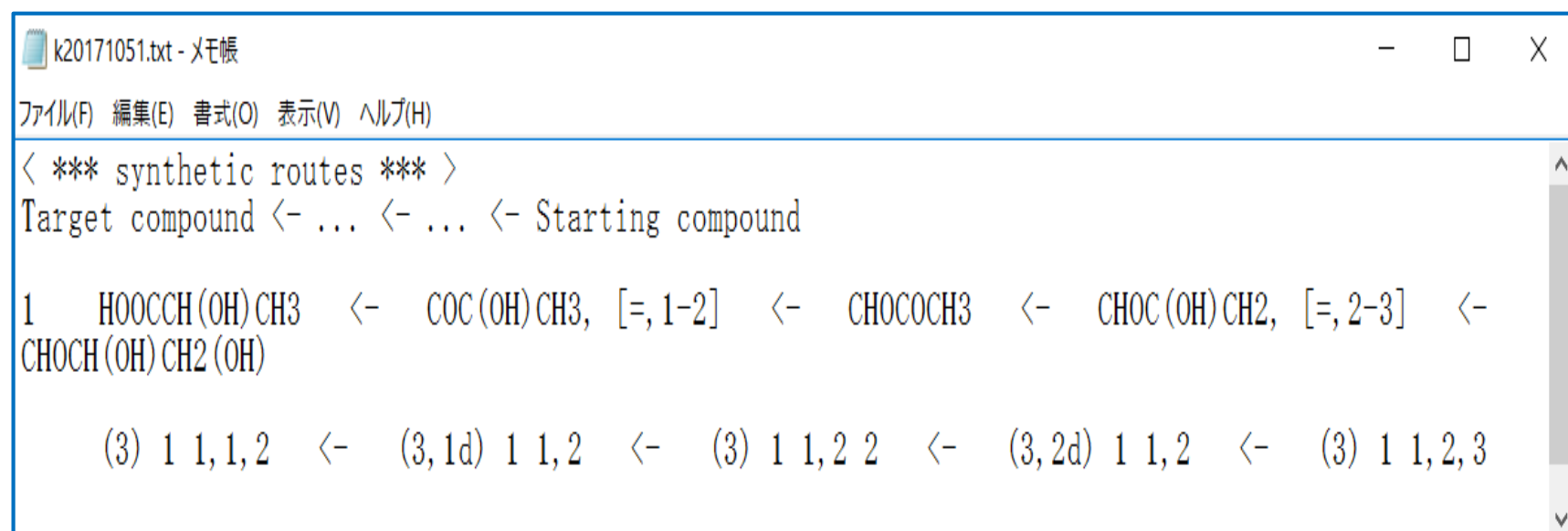


# SugarCascade支援ソフトウェア DispRoute

■DispRouteは文字列を化合物の構造(配列表現)と構造式図に変換します。

SugarCascadeを用いた経路探索結果は「メモ帳」に表示されます。

例として乳酸をターゲット化合物とし出発原料グリセルアルデヒドとした場合の経路探索した結果」を図1に示します。



```
k20171051.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
< *** synthetic routes *** >
Target compound <- ... <- ... <- Starting compound

1  HOOCCH(OH)CH3 <- COC(OH)CH3, [=,1-2] <- CHOCOCH3 <- CHOC(OH)CH2, [=,2-3] <-
  CHOCH(OH)CH2(OH)

      (3) 1 1,1,2 <- (3,1d) 1 1,2 <- (3) 1 1,2 2 <- (3,2d) 1 1,2 <- (3) 1 1,2,3
```

図1 乳酸をターゲット化合物として出発原料をグリセルアルデヒドとした経路探索結果」

結果を示す最初の行に

< \*\*\* synthetic routes \*\*\* >と記載されています。

次に、Target compound <- ... <- ... <- Starting compound との記載があります。その下に変換経路1が記載されています。

1 HOOCCH(OH)CH3 <- COC(OH)CH3, [=,1-2] <- CHOCOCH3 <- CHOC(OH)CH2, [=,2-3] <- CHOCH(OH)CH2(OH)

さらに下段に

「(3) 1 1,1,2 <- (3,1d) 1 1,2 <- (3) 1 1,2 2 <- (3,2d) 1 1,2 <- (3) 1 1,2,3」

の文字列が表示されています。この文字列 (3) 1 1,1,2、が「構造式を示す記号」です。

DispRouteの「記号(文字列)の入力」欄に、探索結果に示された「文字列」を入力することにより化合物の構造(配列表現)と構造式を表示できます。

DispRouteを起動させると図2初期画面が表示されます。

この画面の「記号文字列の入力」部に、文字列「(3) 1 1,1,2」を「記号(文字列)の入力」欄に貼り付けて、「OK」をクリックすれば、文字列で示される「化合物の構造」と「構造式」が表示されます。図3

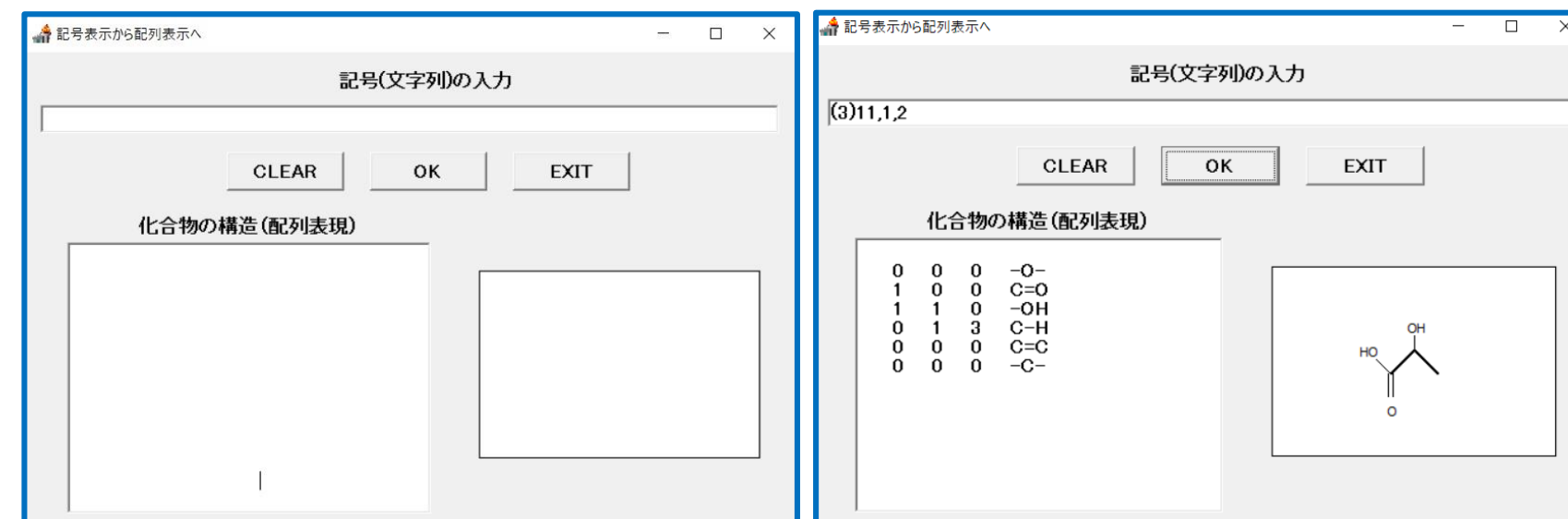


図2初期画面

図3 (3)11,1,2入力画面

DISPRouteについて

- 炭素、水素、酸素原子のみで構成される化合物・中間体について取り扱います。
- トポロジカルに直鎖状の炭素鎖の化合物のみを取り扱います。
- 幾何異性体や光学異性体、炭素鎖の切断や延長には、対応していません。
- 構造に対する配列や記号表現の詳細は、特開2005-179199、Journal of Computer Chemistry, Japan, Vol.5, pp.59-74 (2006) を参照ください。

動作環境

- Windows XP Service Pack 3またはWindows Vista上で実行(EXE)ファイルを直接実行
- インターネット接続、CD-Rドライブ、XGA以上の高解像度モニター、キーボード必須