

# SugarCascade支援ソフトウェア DispSymbolic

## ■ 糖類の構造を「化合物の構造」から「記号による表現」に変換するソフトウェア

変換経路を探索する場合ターゲット化合物は用意されている化合物リストから選択することができます(図1化合物の入力画面)。

リストにない化合物をターゲット化合物する場合に「化合物の構造」を「記号表現」に変換するものです。例として乳酸(炭素数3)の例を図2に示します。

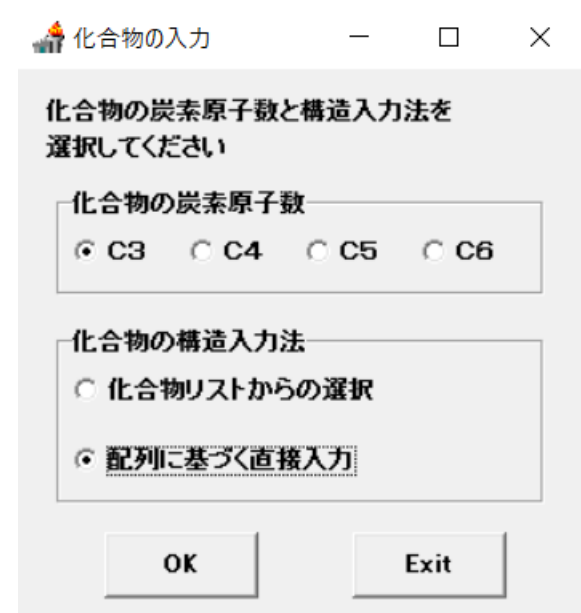


図1 化合物の入力画面

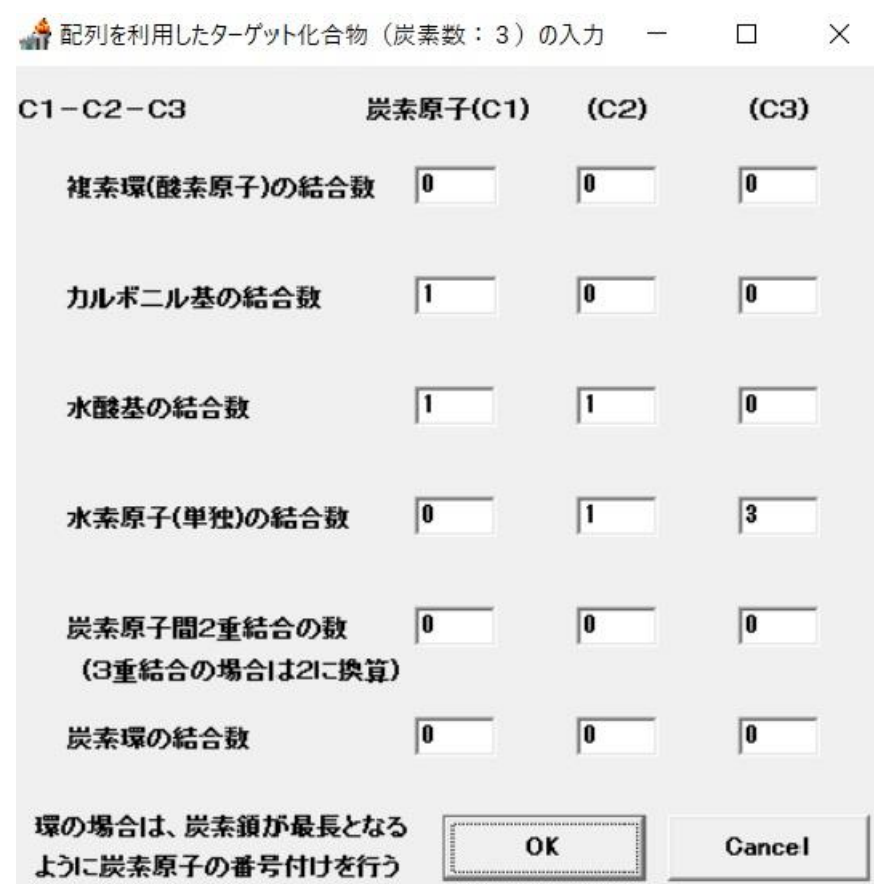


図2 乳酸の配列表力画面

乳酸の構造から  
1番目の炭素には、C=O,-OH基が結合している。  
2番目の炭素には、-OH基が結合している。  
3番目の炭素には、-CH<sub>3</sub>が結合している。  
これらを配列表に記入すると上記のようになります。  
ここで「OK」ボタンをクリックすると図3の画面になります。

図2下部にある「OK」ボタンをクリックすると図3が示されます。ここに、図2で入力した「化合物の構造(配列表表現)」、右に構造式さらに下部に示される「記号(文字列)による表現」として「(3) 1 1, 1, 2」が表示されています。この数字が、乳酸の構造を示す「記号による構造」となります。

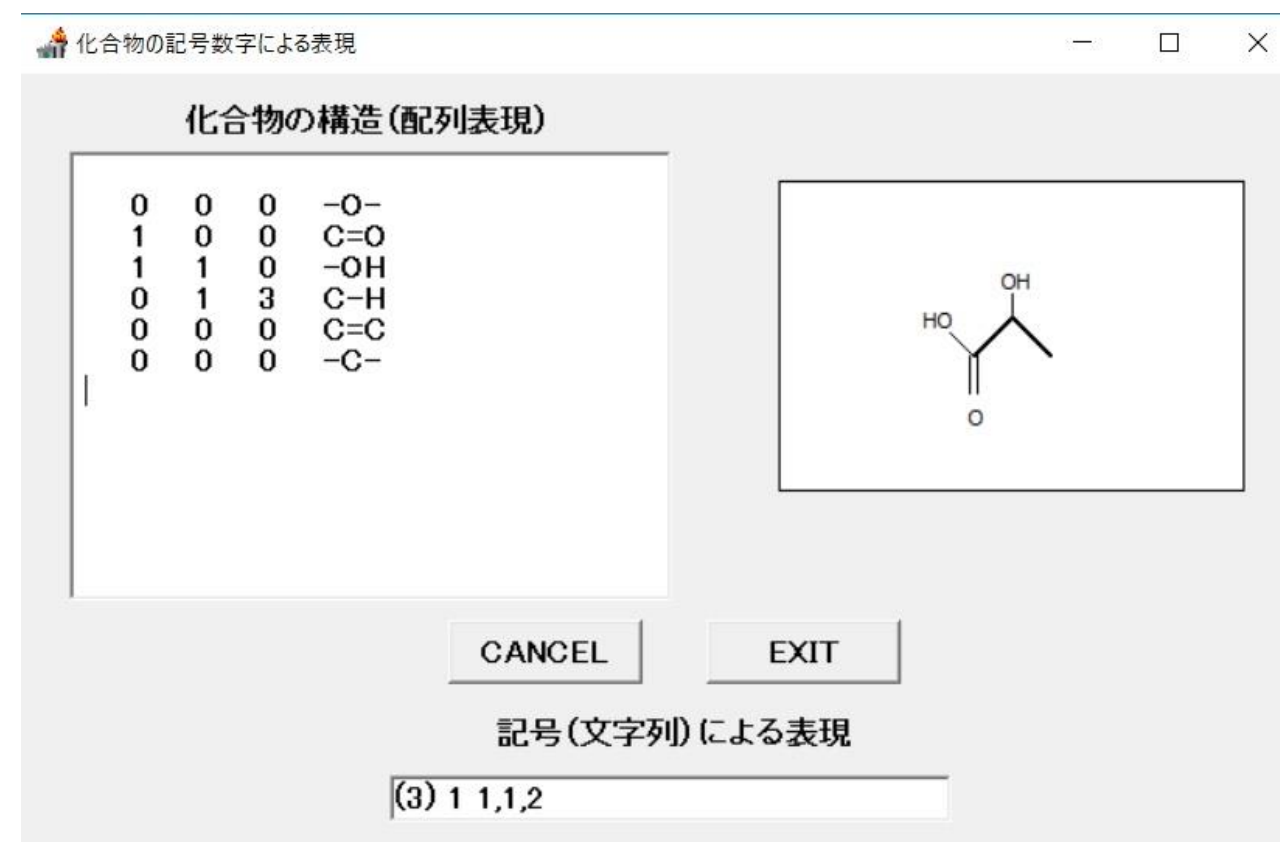


図3 乳酸の記号(文字列)による表現画面

### DISPSymbolic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

最初にこの画面が表示されます。  
最初に化合物の炭素原子数を選択します。乳酸はC3化合物なのでC3を選択します。  
次に、化合物の入力法で配列に基づく直接入力(乳酸はリストにあります)がここでは直接入力を選択)そして「OK」ボタンをクリックすると図2の画面になります。