

SugarCascade支援ソフトウェア DispSymbolic

■DispSymbolicはターゲット化合物の構造を「記号による表現」に変換するソフトウェアです。

SugarCascadeにより経路探索を行う場合、用意された化合物リストにない化合物の場合、その化合物構造を「記号による表現」に変換することが必要となります。これを行うのがソフトDispSymbolicです。図1に実行した時の最初の画面を示します。ここでは化合物の炭素原子数に合わせてC3、C4、C5、C6のいずれかを選択します。次に、化合物の構造入力方法を選択します。例として乳酸(C3)の手順を以下に示します。

化合物記号による表現の図4、左側に「化合物の構造(配列表現)」、右側に乳酸の構造式、下部中央に、「記号(文字列)による表現」が示されています。「化合物の構造(配列表現)」、「記号(文字列)による表現」が当社が化合物を表現する方法として独自に開発しSugarCascadeで使用しているものです。乳酸は記号(文字列)表現では「(3) 1 1, 1,2」と示されます。

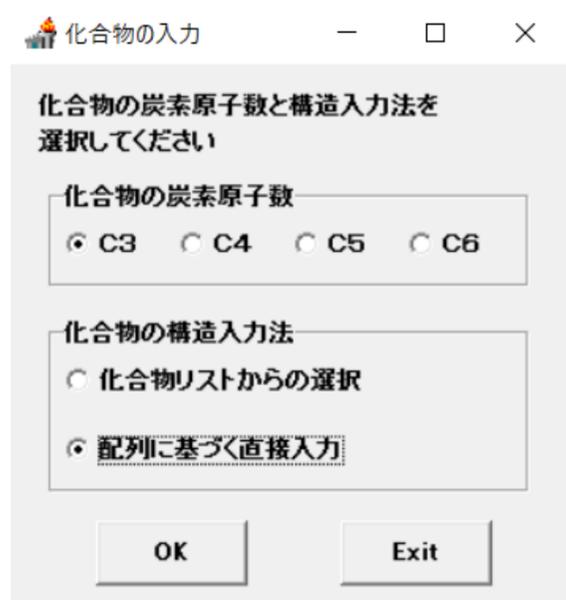


図1 化合物の入力画面

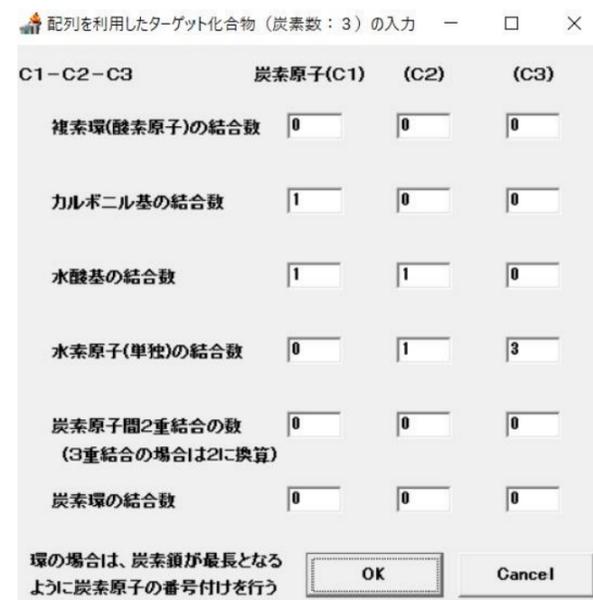


図2 乳酸の配列表画面

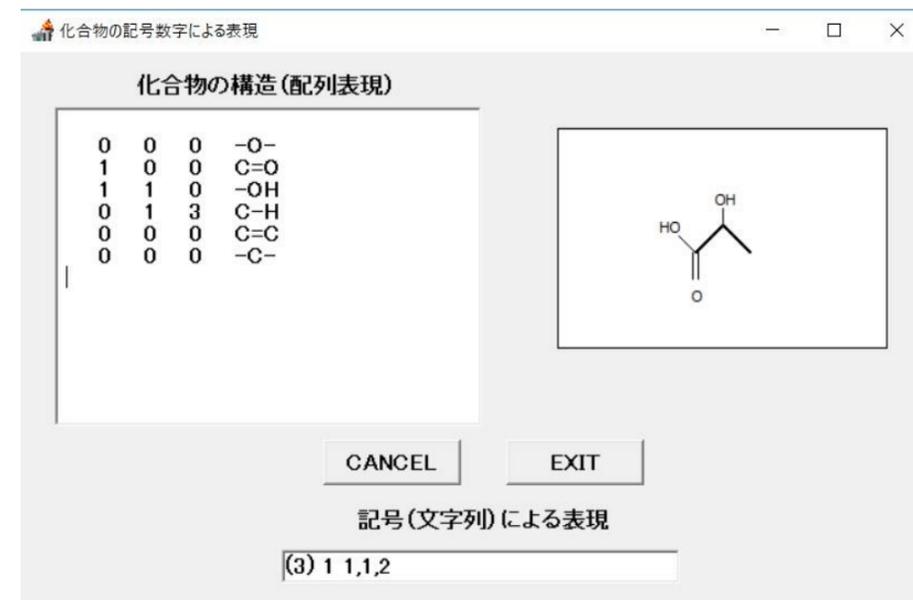


図4 「乳酸の記号(文字列)による表現」画面

手順1: 乳酸は炭素原子数3個。したがってC3を選択します。次に「化合物の構造入力法」で、「配列に基づく直接入力」を選択「OK」ボタンをクリックすると図2の画面になります。

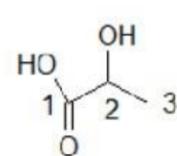


図3 乳酸の構造式

手順2: 次に図2の配列表への入力(最初は空欄)。乳酸の左図3に示す構造式から
①炭素原子C1とC=O, -OH基が結合
②炭素原子C2と-OH基が結合
③炭素原子C3と-CH3が結合
これらを配列表に入力し「OK」ボタンをクリックすると図4の画面となります。

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