

# SugarCascade® による「グリセルアルデヒドから乳酸までの探索例」

## ■ SugarCascadeによる経路探索方法

出発原料(単糖)から目的化合物までの経路探索ソフトウェア“gohen1”を使用します。出発化合物の炭素原子数により予め作成されている化合物表から選択します。次に、目的化合物を選択します。この後、ソフトを走らせば、短時間で出発原料から目的化合物までの変換経路が計算し結果をテキストファイルとして出力します。

■ 出力されたテキストファイルは、単糖に特徴的な変換反応である脱水、互変異性化・環化反応に加え酸化・還元と反応を組み合わせ変換経路を探索します。

この経路探索においては、“水和”は限定的に行っています。脱水(-H<sub>2</sub>O)、水和(+H<sub>2</sub>O)が繰り返えし行われると、“千日手”のようになり経路探索が不可能となります。

## ■ 単糖の変換反応の特徴

単糖の反応の特徴は脱水反応とそれに続いて起きる互変異性化反応です。脱水反応によって誘導される反応中間体が互変異性化反応を引き起こし、多数の互変異性体がカスケード状に生成されることが分かってきています。

■ SugarCascadeのフローチャートを下図に示します。

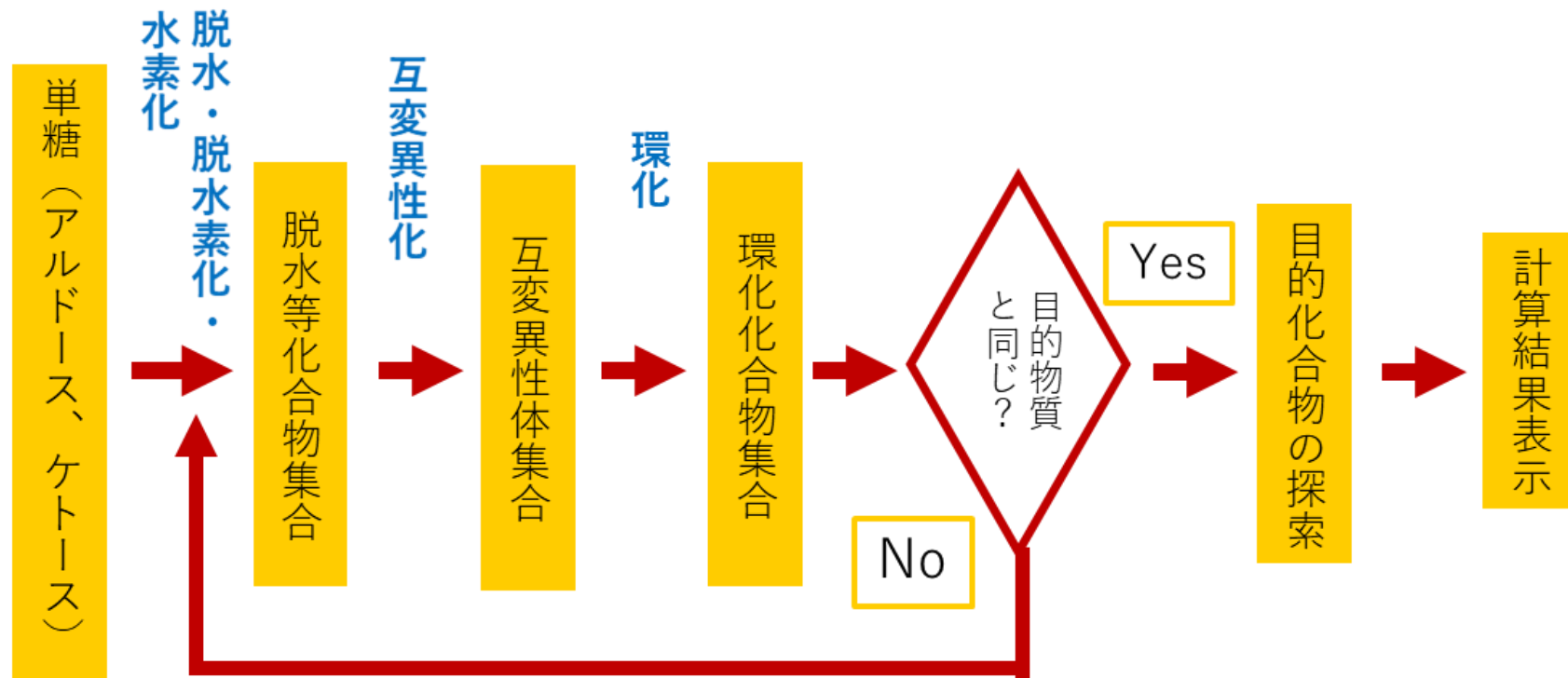
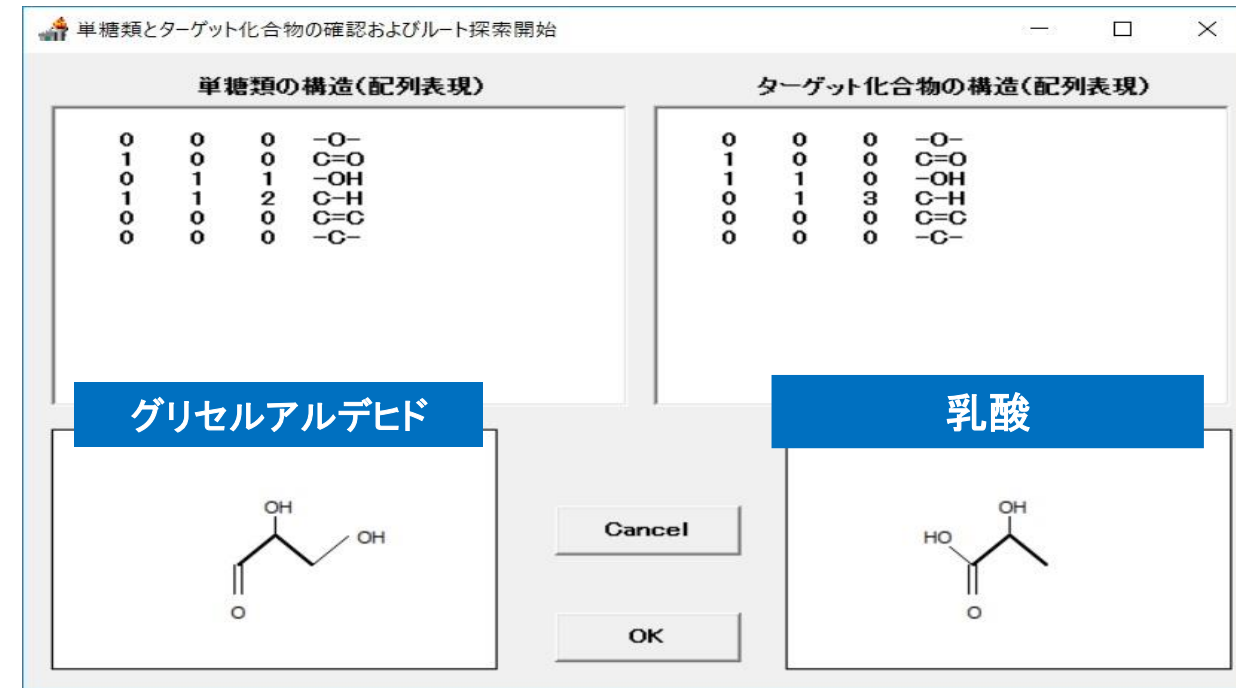
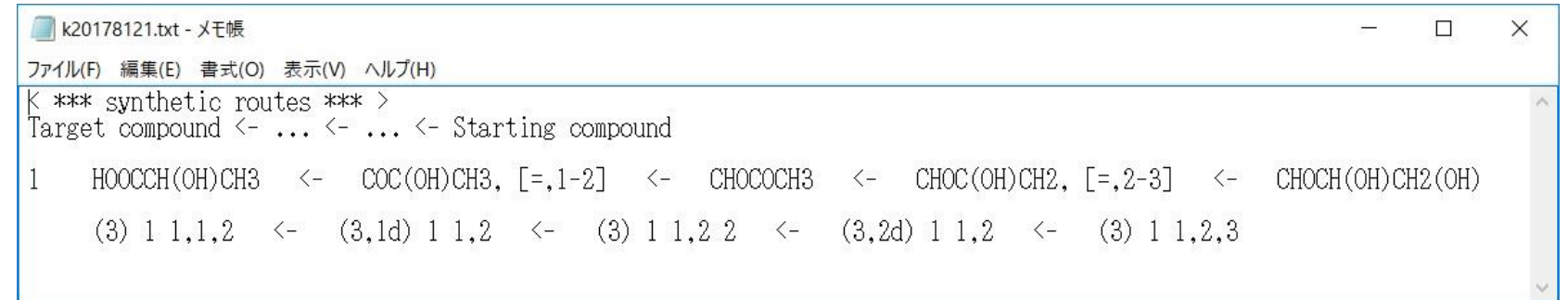


図 SugarCascadeのフローチャート

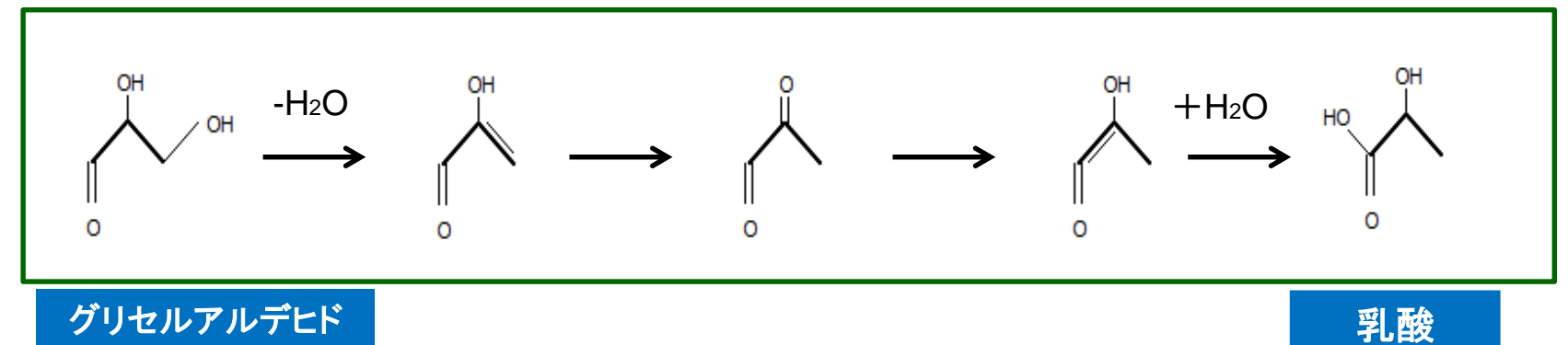
## 例:グリセルアルデヒドから乳酸までの経路探索の入力画面



■ 上図の「OK」を押すと、結果が下図に示すメモ帳(テキストファイル)で表示されます。



■ テキストファイルの”記号(文字列) (3)11,1,2 <- (3,1d)11,2 <- (3)11,22 <- (3,2d)11,2 <- (3)11,2,3”を支援ソフトウェア(DispRoute)で構造式に変換し、並べ替えて経路図を作成します。



■ 上図から「グリセルアルデヒド(左端)→水一分子が脱水し→互変異性化によってピルブアルデヒド、→ケテン→水和により乳酸(右端)になること」がわかります。