

SugarCascadeによる「グルコースに反応操作“脱水”を1回行った場合の探索例

■出発化合物(単糖)に”反応操作“行った場合の経路探索方法

出発化合物に、“反応操作”(脱水、脱水素化、水素化)を行って、生成される化合物と変換経路を探索したい場合には、経路探索ソフトウェアtautosyn1を使用します。

最終化合物に“レトロアルドール反応”を行った場合の変換経路を示す場合は、tautosynra1を使用します。

■ SugarCascade tautosyn1、 autosynra1 への入力は、出発化合物に対し、1回目の反応操作、2回目の反応操作を指定します。ソフトを実行すると、生成すると考えられる化合物とその化合物までの多くの変換経路がテキストファイルに表示されます。

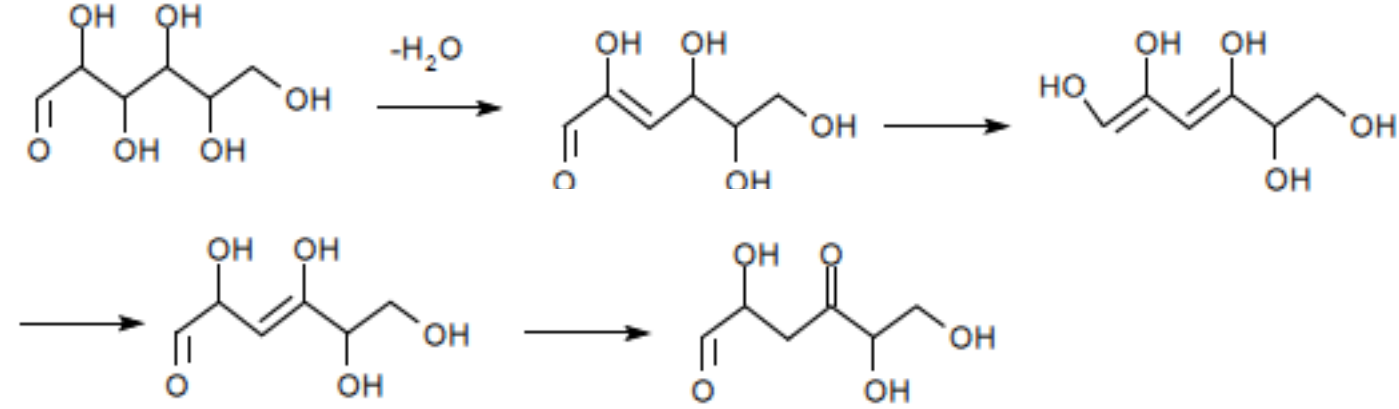
例:グルコースに反応操作“脱水”を1回行った場合の入力画面

計算結果を示します。(ここでは、1..3までを表示)

```

k20178121.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
< *** routes *** >
Various compounds <- ... <- ... <- Starting compound
1  CHOCH(OH)CH2COCH(OH)CH2(OH) <- CHOCH(OH)CHC(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,3-4] <- CH(OH)C(OH)CHC(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,1-2]
   [=,3-4] <- CHOC(OH)CHCH(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,2-3] <- CHOCH(OH)CH(OH)CH(OH)CH(OH)CH2(OH)
   (6) 1 1,2,4 4,5,6 <- (6,3d) 1 1,2,4,5,6 <- (6,13d) 1,2,4,5,6 <- (6,2d) 1 1,2,4,5,6 <- (6) 1 1,2,3,4,5,6
2  CH2(OH)COCH2COCH(OH)CH2(OH) <- CH2(OH)COCHC(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,3-4] <- CH(OH)C(OH)CHC(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,1-2]
   [=,3-4] <- CHOC(OH)CHCH(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,2-3] <- CHOCH(OH)CH(OH)CH(OH)CH(OH)CH2(OH)
   (6) 1,2 2,4 4,5,6 <- (6,3d) 1,2 2,4,5,6 <- (6,13d) 1,2,4,5,6 <- (6,2d) 1 1,2,4,5,6 <- (6) 1 1,2,3,4,5,6
3  CH2(OH)C(OH)CHC(OH)C(OH)CH2(OH), [=,2-3] [=,4-5] <- CH2(OH)COCHC(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,3-4] <- CH(OH)C(OH)CHC(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,1-2] [=,3-4]
   <- CHOC(OH)CHCH(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,2-3] <- CHOCH(OH)CH(OH)CH(OH)CH(OH)CH2(OH)
  
```

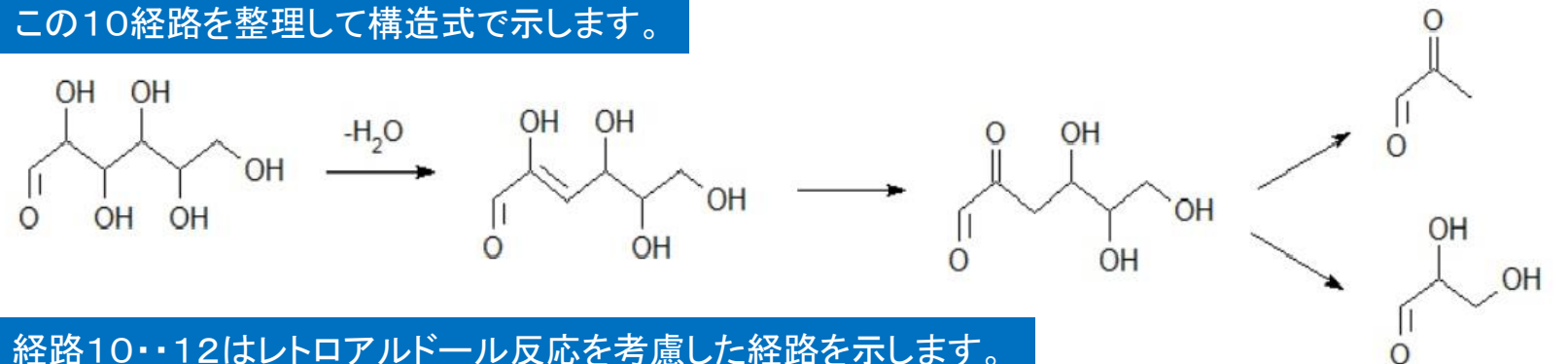
この1の変換経路を整理して構造式で示します。



```

10  CHOCOCH3 + CHOCH(OH)CH2(OH) <- CHOCOCH2CH(OH)CH(OH)CH2(OH) <- CHOC(OH)CHCH(OH)CH(OH)CH2(OH), [=,2-3] <- CHOCH
   (OH)CH(OH)CH(OH)CH(OH)CH2(OH)
   (3) 1 1,2 2 + (3) 1 1,2,3 <- (6) 1 1,2 2,4,5,6 <- (6,2d) 1 1,2,4,5,6 <- (6) 1 1,2,3,4,5,6
11  CHOCH2(OH) + CHOCHCHCH2(OH), [-0-,2-3] <- CHOCH(OH)CH(OH)CHCHCH2(OH), [-0-,4-5] <- CHOCH(OH)CH(OH)CH(OH)CH(OH)CH2
   (OH)
   (2) 1 1,2 + (4) 2 3,1 1,4 <- (6) 4 5,1 1,2,3,6 <- (6) 1 1,2,3,4,5,6
12  CHOCH2(OH) + CHOCH(OH)CHCH2, [-0-,3-4] <- CHOCH(OH)CH(OH)CH(OH)CHCH2, [-0-,5-6] <- CHOCH(OH)CH(OH)CH(OH)CH(OH)CH2
   (OH)
   (2) 1 1,2 + (4) 3 4,1 1,2 <- (6) 5 6,1 1,2,3,4 <- (6) 1 1,2,3,4,5,6
  
```

この10経路を整理して構造式で示します。



経路10..12はレトロアルドール反応を考慮した経路を示します。