

# SugarCascadeによる「脱水反応でフルフラールが生成され場合の前の化合物の探索例」

## ■ターゲット化合物になる“前の化合物”の経路探方法

ターゲット化合物から”戻る反応操作”により、ターゲット化合物の前化合物、前々化合物の経路探索ができます。この探索を行う場合には、SugarCascade tatutoretro1を使用します。

■ここでは“戻る反応操作”を「○○反応の逆反応」と呼ぶことにします。例えば、脱水により生成されたターゲット化合物から戻る反応操作を“脱水の逆反応”と呼びます。

■この経路探索によりターゲットからさかのぼって、出発化合物、前駆体化合物の候補化合物を探し出すことができます。

■tatutoretro1には、ターゲット化合物と逆変換操作を選択し、ソフトを実行すると生成すると考えられる化合物と変換経路がテキストファイルに表示されます。

## フルフラールが脱水反応で生成された場合の“前化合物”を探索する画面

0	1	0	0	1	-O-
1	0	0	0	0	C=O
0	0	0	0	0	-OH
1	0	1	1	1	C-H
0	1	1	1	1	C=C
0	0	0	0	0	-C-

connect 4 5 C=C  
connect 2 3 C=C  
connect 2 5 -O-

## 経路探索結果 探索経路数 3

■この例では3つの「前化合物」と変換経路が表示されました。

```
k20178151 Furfural+H2O.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  CHOCHCHCHCH(OH), [-O-,2-5] [=,3-4] <-  CHOCCHCHCH, [-O-,2-5] [=,2-3] [=,4-5]
   (5,3d) 2 5,1 1,5 <- (5,24d) 2 5,1 1
2  CHOCHCH(OH)CHCH, [-O-,2-5] [=,4-5] <-  CHOCCHCHCH, [-O-,2-5] [=,2-3] [=,4-5]
   (5,4d) 2 5,1 1,3 <- (5,24d) 2 5,1 1
3  CH(OH)2CCHCHCH, [-O-,2-5] [=,2-3] [=,4-5] <-  CHOCCHCHCH, [-O-,2-5] [=,2-3] [=,4-5]
   (5,24d) 2 5,1,1 <- (5,24d) 2 5,1 1

Precursor compounds <- ... <- ... <- Starting compound
```

■ 3つの「前化合物」の構造式を示します。

