

1. はじめに

有機反応を理論的に列挙し、実現可能かどうかを考察することは、有機反応の全体像を把握する上で重要である。この問題に取り組むにあたり、大量記憶と高速処理というコンピュータの特徴を生かすことが考えられる。有機反応をコンピュータで取り扱う表現方法として、ITS (虚遷移構造) [1]を用いると、構造情報や反応形式情報を特定的手段により取り出すことが可能である。ITS とは、出発系と生成系を相互に分離して記述せず出発系と生成系を重ね合わせた一種の化学構造式である。ITS は反応に関与しない結合 par-bond (—), 反応において生成する結合 in-bond (---), 反応において切断する結合 out-bond (---) という 3 種類の結合を定義することによって、通常で表される情報を包含することができる[2]。本研究ではコンピュータを媒介して反応の数え上げをおこなうアルゴリズム的組み合わせ論を用いて、ITS において 5, 7 員環を形成する反応グラフの数え上げをおこなった。なお、本研究では C 言語を用い、コンパイラーは gcc (Cygwin) を用いた。

2. 方法概要

図 1 は数え上げをおこなうためのアルゴリズムを、フローチャートであらわしたものである。まず in-bond , out-bond を交互に配置し 5, 7 員環の辺を形成し、次に環の頂点の位置にあたる node に、原子を配置した(このように in-bond と out-bond で環を形成し node に原子を配置したグラフを基本反応中心グラフ(BRCG)と呼ぶ)。配置した原子は炭素、窒素、酸素の 3 種類で原子価はそれぞれ 4 価, 3 価, 2 価とした。5 員環では、5 本の隣接辺があり、さらに 5 本の非隣接辺を形成することができる。また 7 員環では 7 本の隣接辺と 14 本の非隣接辺を形成することができる。これらの辺に、次の条件 A, B にそって par-bond を配置した(基本反応中心グラフの辺に par-bond を配置したグラフを反応中心グラフ(RCG)と呼ぶ)。

A) par-bond をすべての辺および非隣接辺に配置できるが、各辺には 1 本しか配置で

きない

B) 複数本の par-bond を配置させることができるが、非隣接辺には配置できない

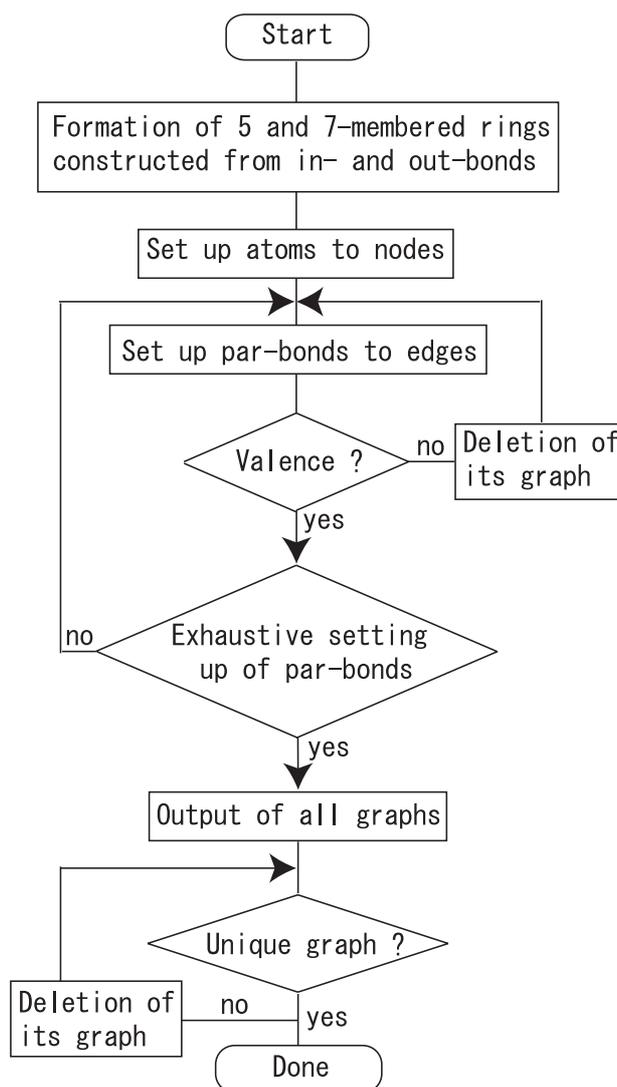


図 1 Flow chart of the enumeration

原子価をチェックしながら網羅的に par-bond を配置させ、全ての反応中心グラフを出力した。しかし、これらのグラフには対称操作によって重ねあわすことのできるグラフが含まれているため、 unique なグラフを数え上げたことにならない。そこで、ITS に unique な名前 (正準名) を付与することのできるアルゴリズムを利用し、 unique な反応中心グラフのみを数え上げることに成功した。

3. 結果と考察

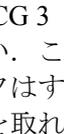
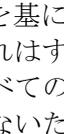
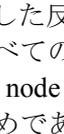
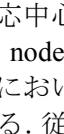
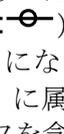
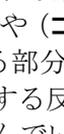
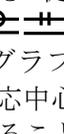
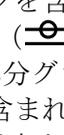
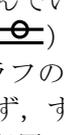
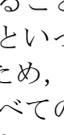
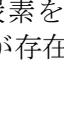
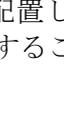
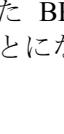
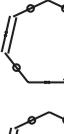
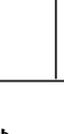
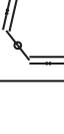
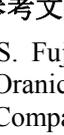
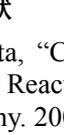
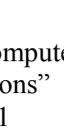
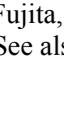
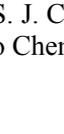
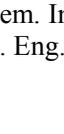
結果の一部として、7員環のすべての node に炭素、窒素、酸素をそれぞれ配置した場合を検討する。条件 A に基づいて par-bond を配置したときの数え上げの結果を、par-bond の数ごとに分類して表 1 に示した。なお、すべての node に炭素を配置した基本反応中心グラフを BRCG 1, 窒素を配置したグラフを BRCG 2, 酸素を配置したグラフを BRCG 3 とした。

表 1 数え上げの結果

	BRCG 1	BRCG 2	BRCG 3
Par-bond	No. of RCGs	No. of RCGs	No. of RCGs
0	1	1	1
1	12	12	9
2	111	102	27
3	669	492	11
4	2820	1269	0
5	8370	1500	0
6	17133	546	0
7	22794	0	0
8	17520	0	0
9	6048	0	0
10	429	0	0
11	0	0	0
⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮
21	0	0	0
sum	75907	3922	48

表 2 は BRCG 1 - 3 の辺に同じ様式で par-bond を辺に 2 本ずつ配置したときに、得られるグラフの数ごとに分類している。group B には、BRCG 3 を基にした反応中心グラフは含まれていない。これはすべての node に酸素を配置したグラフはすべての node において、3 価以上の原子価を取れないためである。従って、group C のグラフは () や () といった node の原子価が 3 になる部分グラフを含んでいない。一方、group B に属する反応中心グラフはこのような部分グラフを含んでいることになる。同様に、group A では、() といった節点の原子価が 4 になる部分グラフのため、BRCG 2 を基にしたグラフは含まれず、すべての node に原子価が 4 である炭素を配置した BRCG 1 を基にしたグラフのみが存在することになる。

表 2 数え上げの分類

group A			
group B			
			
			
			
			
			
group C			
			
			
			

参考文献

- [1] S. Fujita, "Computer-Oriented Representation of Organic Reactions" Yoshioka Shoten Publishing Company. 2001
- [2] Fujita, S. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1986, 26, 205. See also Chem. Eng. News. 1986(Sept 29), 75.