

1. はじめに

XyM Notation (XyM 記法)は、藤田によって開発された LaTeX によって化学構造式を作図するためのマクロパッケージシステムである XyMTeX における化学構造式表記法であり、化学構造式の線形表記法の一つである[1]。藤田らはさらに、XyM Notation を HTML 文書中に埋め込んで発信し、受信側のブラウザには、埋め込まれた XyM Notation を解読して画面に表示するための Java アプレット(XyMJava)を開発し[2,3]、XyM Notation が WWW による化学構造式伝達の方法として利用可能であることを示した。

このように XyM Notation はインターネット時代における化学情報伝達の際の化学構造表記法としての有用性が期待できるが、一方では線形表記法に共通の欠点である、一般の化学者にとっては直感的に構造が把握しにくく、取っ付き難いという難点をもっている。

現在では、一般の化学者が化学構造式を作図する際には、ChemDraw などの構造式エディタを使うことが日常的に行われている。したがって、これらの構造式エディタで作成された構造データを解釈して XyM Notation に変換するプログラムができれば一般の化学者にとっては理想的かもしれないが、任意に作図された構造式から自動的に XyM Notation を作成するアルゴリズムの考案はプログラム作成者にとっては、必ずしも容易ではない。そこで、両者の妥協の産物とも言うべき、化学構造式エディタと同様の操作で画面上に化学構造を組み立てることにより、XyM Notation が発生する、XyM Notation 作成支援プログラムの開発を行った。

2. 開発および実行可能システム

プログラムの開発は WindowsXP システム上でを行い、開発言語は Visual Basic を用いた。実行可能性は、WindowsXP および Windows98 システムで確認した。確認はしていないが、Windows95、NT および 2000 でも動作可能と思われる。将来は Java システムへの移植を検討している。

3. 操作の概要

プログラムの実行画面を図 1 に示す。構造式表示画面は 2 つあり、左が主画面、右が副画面である。構造式組み立て操作の大半は主画面で行い、2 つの構造を結合させたり、環同士を融合させる場合のみ両画面を使用する。

操作の基本は、XyM Notation であらかじめ定義されている基本骨格を組み合わせ、原子種の変更、置換基の導入、結合次数の指定などの操作により目的の構造を組み立てることである。

基本骨格の原子種変更、置換基、結合次数指定

- (1) "Skeleton"のコンボボックスから基本骨格を選択し、ボタンを押すと画面に構造が表示される。
- (2) "Atom", "Subst", "Bond"の何れかのボタンを押すと、画面の構造上に指定した操作が可能な位置がマークされる。
- (3) マウス操作によって、上記可能な位置から一つを選択する。
- (4) 原子種、置換基はテキストボックスにキーボードから入力し、結合次数の場合はコンボボックスで選択する。
- (5) "Set"ボタンを押す。
- (6) 同種操作を続ける場合は(3)より繰り返す。
- (7) 別種操作の場合は、いったん"End"ボタンでその操作を終了し、(2)より別の操作を選択する。

以上の操作で構造が作成され、その構造はファイルへの保存が可能となる。

基本骨格同士の結合および環の融合

- (1) 主画面および副画面のそれぞれについて "Skeleton"コンボボックスから基本骨格を選択して画面に表示する。
- (2) 両画面の間にある"<<Connect"または"<<Fuse"ボタンを押して、結合あるいは融合を指定すると、両画面上のそれぞれの構造において結合あるいは環融合可能な位置がマークによって示される。
- (3) マウス操作によって、上記可能な位置から各一つを選択する。
- (4) "Do"ボタンを押す。

以上の操作で主画面に構造が作成され、その構造はファイルへの保存が可能となる。

*nakano@eng.u-hyogo.ac.jp

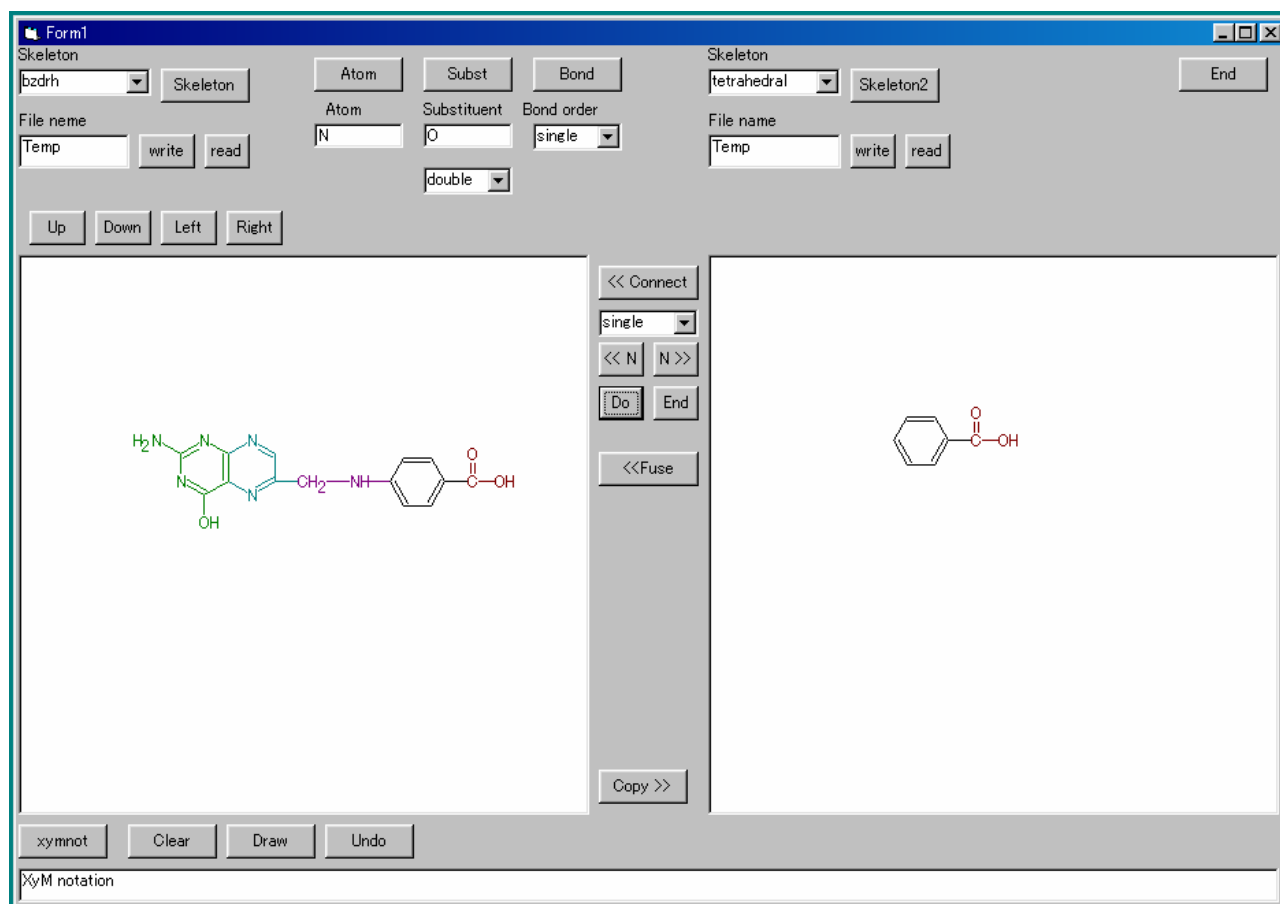


図 1. 実行画面

複合構造に対する操作

以上のようにして作成された構造に対して、さらに原子種変更、置換基導入、結合次数指定、他の構造との結合、環融合などの操作を加えることが可能である。操作の概要は、上記に示した基本骨格に対する操作と同様である。ただ、それぞれの操作可能な位置のマークに対しては、複数個の基本骨格からなる構造に対して同時にすべてを表示すると、基本構造が隣接している境界部分などでは、どちらの基本構造に対する操作かが明確にならないので、ボタンを押すことにより順次表示することとしている。

XyM Notation の生成

”Xymnot”ボタンを押すことによって、作成された構造にたいする XyM Notation が出力される。

以下に示すのが、出力例である。

```

%sixheterov[bdf[B%sixfusev[ac]{ 1=N;%
  4=N}{ 3Sa==%ryl( 4=CH$_2$)%
  { 4==%ryl( 4=NH){ 4==%bzdhrh[r]{ 1=(yl)%
; 4==%tetrahedral{0=C; 1D=O;%
  2=(yl); 4=OH}}}]][e]]{ 1=N;%
  5=N}{ 4=OH; 6=H$_2$N}

```

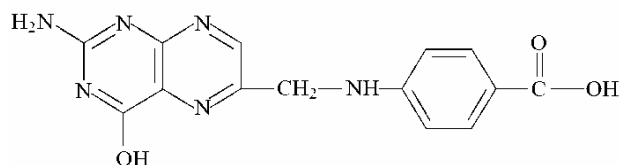


図 2. XyMTeX による作図結果

この XyM Notation を LaTeX のソースに組み込み、XyMTeX のシステムで処理した結果が図 2 である。

4. おわりに

以上のように、本プログラムを使用すれば、複雑な構造でも比較的簡単に XyM Notation による化学構造の記述が可能となる。

参考文献

- [1] S. Fujita, *Comput. Chem.*, **18**, 109-116 (1994)
- [2] N. Tanaka, S. Fujita, *J. Comput. Aided Chem.*, **3**, 37-47 (2002)
- [3] N. Tanaka, T. Ishimaru, S. Fujita, *J. Comput. Aided Chem.*, **3**, 81-89 (2002)