

演 題	XyM Notation により結合表を作成するアルゴリズムの研究	
発 表 者 (所 属)	○伊藤 圭・藤田 眞作 (京都工繊大院工芸)	
連 絡 先	〒606-8585 京都市左京区松ヶ崎御所海道町 京都工繊大大学院物質工学専攻 記録材料学研究室 TEL 075-724-7543 E-mail koffice616@yahoo.co.jp	
キーワード	XyM Notation, molfile	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など	デジタル技術の発達による情報の流通形態の多様化にともない、化学文書を取り扱う際、構造式や反応式を単なる画像情報としてでなく化学的に意味のある情報として伝達することが重要になってきた。我々は化学構造を線形表現である XyM Notation で表現し、これを結合表 (molfile) に変換するプログラムを作成した。これにより、XyM Notation による構造式を市販のソフトウェアで取り扱うことができるようになった。	
環 境	適 応 機 種 名	IBM PC/AT 互換機
	O S 名	Windows XP Professional
	ソース言語	Java
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ○未定	具 体 的 方 法

1.方法

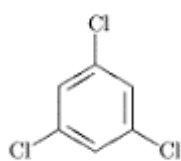
入力した XyM Notation を解析し結合表 (molfile) に変換するプログラムを Java により作成した。作成した molfile は既存の化学アプリケーション (ISIS Draw ,ChemDraw) へ応用し、化合物構造式 (図形) として表示させた。

<プログラムの概要>

{XyM Notation の入力} → {XyM Notation の構文を解析}
→ {molfile 形式のフォーマットヘータを整形, 変換} → {molfile の形式に出力}
→ 市販アプリケーション (ISIS Draw ,ChemDraw) へ応用

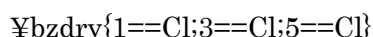
<XyM Notation とは>

XyM Notation では、それぞれの有機化合物が (1) 置換誘導、(2) 原子誘導、(3) 結合誘導に基づいて、母核の誘導体として命令される。例として下の化合物



1,3,5-Trichlorobenzene

を表現する XyM Notation は,



となる. \textyen bzdrrv の部分が母核をあらわし, ベンゼン環を縦方向に描画するコマンドである. 後ろに続く $\{1==\text{Cl};3==\text{Cl};5==\text{Cl}\}$ は置換誘導に基づくもので, ベンゼン環の 1,3,5 位に Cl が結合していることを意味する.

2.結果とまとめ

プログラムの動作の一例として, 入力した XyM Notation, 出力された molfile (Fig. 1), 得られた molfile を化学アプリケーション (ChemDraw)へ応用し表示された結果 (Fig. 2)を順に示した.

XyM Notation: $\text{\textyen pentamethylene[a]\{3==O\}\{4==Cl\}}$

```

molfile

6 5 0 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
0.0000 0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.2990 0.7500 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.5981 0.0000 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.8971 0.7500 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.2990 2.2500 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.5981 -1.5000 0.0000 Cl 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 1 0 0 0
2 3 1 0 0 0
3 4 1 0 0 0
2 5 2 0 0 0
3 6 1 0 0 0
M END

```

Fig. 1

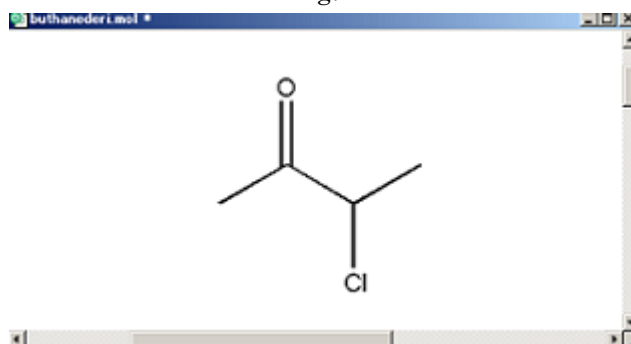


Fig. 2

本プログラムにより, 化学構造を市販の化学ソフトウェアで扱うのに適したデータ形式として保存することが可能になった. 今後さらなる発展として, XyM Notation を化学構造のフォーマットとして広く認知されている CDX ファイルへ変換するプログラムの作成を進める.