

演 題	XyMTeX による化学構造式表記を支援するための構造式エディタの試作	
発 表 者 (所 属)	○中野英彦, 林 治尚 (姫路工大院・工)	
連 絡 先	〒671-2201 姫路市書写 2167 姫路工業大学大学院工学研究科物質系工学専攻 Tel: 0792-67-4894, Fax: 0792-66-8868 e-mail: nakano@chem.eng.himeji-tech.ac.jp	
キ ー ワ ー ド	XyMTeX, XyM 記法, 化学構造式エディタ	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	XyMTeX による化学構造式記述法 (XyM 記法) による化学構造式表記の支援を行うプログラム。これにより、基本骨格の選択、結合多重度、ヘテロ原子、置換基指定を、画面に構造を表示させながら操作し、簡単に XyM 記法が可能となる。	
環 境	適 応 機 種 名	Windows 搭載 PC
	OS 名	Windows
	ソース言語	Visual Basic
	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. はじめに

XyMTeXは、藤田によって開発された、LaTeXを使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¹⁾。藤田等はさらに、このシステムにける化学構造式表記法 (XyM記法、 XyM Notation)を利用して画面に構造式を表示するためのJava Applet(XyMJava)を開発するとともに、XyM記法をHTML文書中に埋め込み、WWWによる情報伝達に化学構造式を含める方法を提案している^{2,3)}。XyM記法は、まず構造式の骨格を指定するとともに、4種のパラメータによって、結合の多重度(bondlist)、骨格ヘテロ原子(atomlist)、置換基(subslist)を与えることによって構造式の情報に記述するものである。従って、単なる図形情報として記述するのではなく、内部に化学的情報を保持していることが特徴である。このように、XyM記法は化学構造式の情報伝達、化学文書の流通において優れた方法であると考えられるが、難点はXyM記法による記述が、一般の化学者にとって手軽に利用するにはかなり煩雑であることである。そこで、今回XyM記法による化学構造式記述を支援するための構造式エディタを試作したので報告する。

2. システムの概要

開発は、Windows 搭載の IBM-PC 互換機上で行い、開発言語は、試作品である関係で、Windows 上で動作するプログラムの開発が容易である Visual Basic を用いた。

本プログラムによる実行画面は、後述するように 2 つの構造を結合する操作に対応するために、主と副の 2 面の構造式表示画面を有し、構造式組み立ての操作を指示するための操作ボタン、選択肢の中から選択するためのコンボボックス等からなっている。

3. 操作の概要

3.1 1 個の基本骨格からなる構造の作成

- (1) 基本骨格を選ぶコンボボックスから、希望の骨格を選択すると、主表示画面に構造が表示される。
- (2) bondlist, atomlist, sublist の何れかの操作ボタンを押すと、画面の構造に操作可能な位置がマークされる (例えば sublist ボタンを押すと、置換可能な位置が示される)。
- (3) マウス操作によって、上記の可能位置から 1 つを選択する(上記例では、置換希望位置を指定する)。
- (4) 上記例では、指定位置に置換する置換基をキーボードより入力する。
- (5) 実行ボタンを押す。

以上のような操作で構造が作成され、その構造はファイルへの保存、呼び出し等が可能となる。

3.2 複数の基本骨格が組み合わされた構造の作成

- (1) 3.1 の操作によって作成された構造を、主画面と副画面におく。
- (2) 例えば、主画面の構造に副画面の構造を置換によって結合する場合には、そのための操作ボタンを押すと、主画面の構造の置換可能位置と、副画面の結合可能位置がマークされるので、マウス操作によって希望位置を指定する。
- (2) 実行ボタンを押す。

以上のような操作で、2 個の基本骨格が組み合わされた構造が作成される。これを繰り返せば、任意の数の基本骨格が組み合わされた構造が作成される。

3.3 作成された XyM 記法の XyMTeX による確認

上記操作によって構造を作成すると、主画面の構造に対しては自動的に XyM 記法による記述が作成される。しかし、主画面に表示されている構造は、本プログラムが独自に作成した基本骨格のデータを用いて、上記操作による変更を加えたデータについて、簡易な方法で表示されたものである。従って、XyMTeX あるいは XyMJava による表示と必ずしも完全に一致するものではない。そこで、作成された XyM 記法による記述を XyMTeX のシステムにかけて確認を行う必要がある。

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)