

X^MM Notation を中核とした化学文書作成

○ 藤田 眞作

京都工芸繊維大学工芸学部物質工学科 (〒606-8585 京都市左京区松ヶ崎御所海道町)

[はじめに]

従来からの冊子体 (印刷物) に加えて, 電子出版 (CD-ROM) やインターネット配信など, 情報の流通形態が多様化している. この状況をふまえて, 化学文書をいかに流通させるかの問題が再浮上してきた. 化学文書では, 構造式や反応式を, 単なる画像情報としてだけでなく, 化学的に意味のある情報として伝達することが肝要であり, 新しいアプローチが求められている.

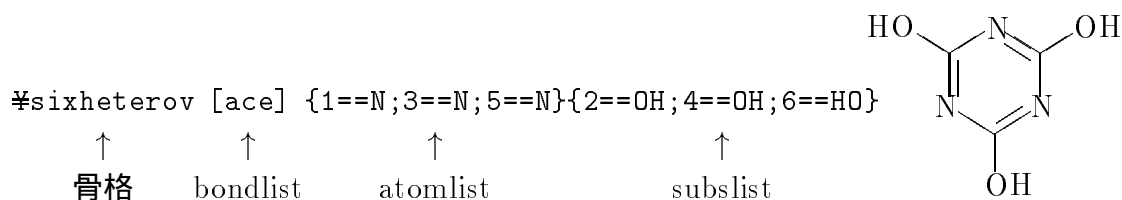
[従来の方法の検討]

まず, ワードプロソフト (MS-Word など) と構造式描画ソフト (ChemDraw など) の組み合わせる方法を拡充するアプローチが考えられる. この場合, 化学構造式や反応式が画像情報 (バイナリーデータ) として含まれていることがネックとなる. なぜなら, 一般に, 画像情報のみから, 化学的に意味のある情報を取り出すことは困難であるからである. 一方, 化学データベースにおいては, 化学構造式を結合表の形で取り扱い, あらかじめ部分構造を抽出しておき, これを検索キーとして使うことが広くおこなわれている. この方法の延長として, 化学文書に結合表を含ませる方式も試みられているが, 結合表から検索キーをその場で取り出すような検索エンジンはまだ開発されていない.

[X^MMNotation による化学文書作成]

われわれは, 構造式の線形表現に着目して, 化学文書の流通に適用することを検討してきた. 新規に提案した線形表現 X^MM Notation を中核とした化学文書の作成システムの概略を報告する.

X^MM Notation では, 構造式の情報を, 骨格, 結合の多重度 (bondlist), 骨格ヘテロ原子 (atomlist), 置換基 (sublist) に分けて記述する. X^MM Notation は, X^MMT_EX を組み込んだ T_EX/L^AT_EX により図形化される. 一例として cyanuric acid の X^MM Notation とそれを X^MMT_EX 処理をした結果を示す.



今回, X^MMT_EX を PostScript 対応にしたものを開発した. また, 各種の学術雑誌への投稿スタイル (L^AT_EX のパッケージ) を作成したので, これらを組み合わせることにより, 高品質の化学文書を作ることが可能になった. 文書全体を PostScript に変換し, さらに PDF に変換することにより, インターネット配信をおこなう道が開けた. すでに報告した X^MMJavaなどを併用すれば, 化学情報の流通形態の多様化に対処するための基礎ができたといえる.

[文献] (1) N. Tanaka, S. Fujita, *J. Computer Aided Chem.*, **3**, 37–47 (2002). (2) N. Tanaka, T. Ishimaru, S. Fujita, *J. Computer Aided Chem.*, **3**, 81–89 (2002)