

糖鎖合成支援システムのための構造入力ツールの開発

西村拓朗¹、山田一作¹、水野真盛¹、白井孝¹、船津公人²¹財団法人野口研究所(〒173-0003 東京都板橋区加賀1-8-1)²東京大学大学院工学系研究科(〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1)

【緒言】

糖鎖工学の進展により、糖鎖を化学的に合成したり、人工的な機能糖鎖を合成して産業や医療に応用しようとする要請が強まり、より効率的な合成経路の提案を期待して、従来の合成事例の整理とその応用による糖鎖合成支援システムへの期待が高まっている。本研究では、糖鎖合成支援システムの実現を目的として、そのプラットフォームとなる、効率的な糖鎖構造入力システムを開発した。既に化学構造入力ツールとして、ISIS/Draw や Chem Draw、ACD/ChemSketch が事実上のスタンダードとなっているが、これらに遜色ない機能を持たせた上で、さらに糖鎖化合物に特有な意味合い、独特な慣用表記法等を反映した入力操作を実現し、操作の簡便性を追及した。

【方法】

本ツールは、WindowsXP 上で OpenGL を利用して Visual Fortran により開発した。

【結果】

上記の汎用構造入力(作成・作図・保存)ツールと同等のハンドリングルーチンを作成し、さらに単糖構造の追加組み合わせ作業に関して、これら既存ソフトよりも効率的に作業が行える。

単糖構造のピラノース環炭素ノード番号を内部に保持できているという点と、構造の追加拡張作業において、対象ノードを起点として簡便に構造を付加させることができるという点で、既存ソフトとの差別化を図った。

また、糖鎖化合物の表記で一般的な、文字列による文字構造表記や、ピラノース環の表示モード切替(楔結合表示の on/off)、Mills 表示に対応させている。

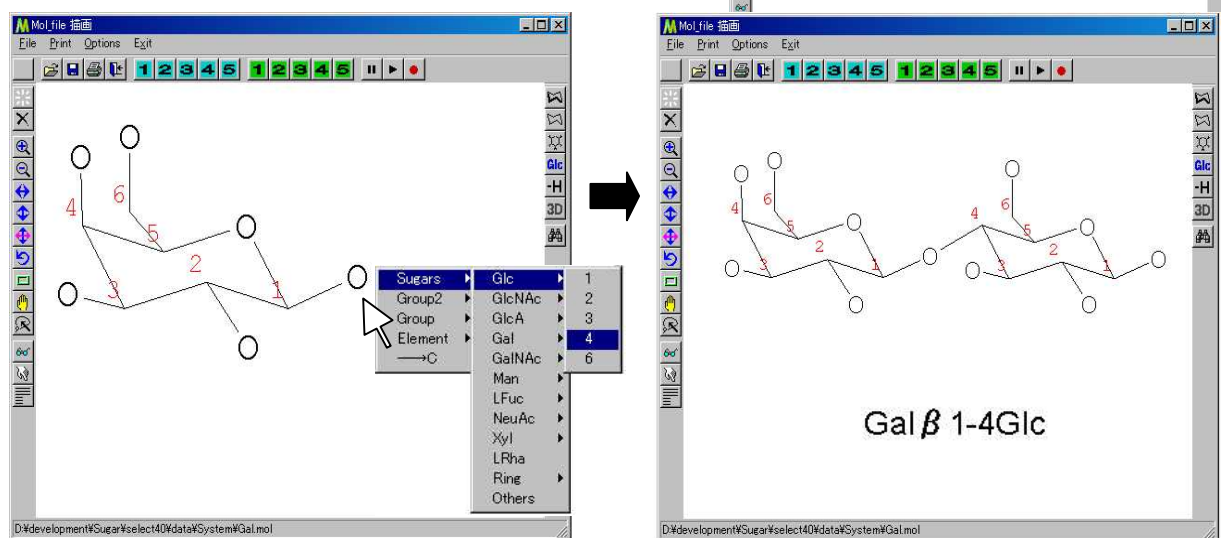


図1 ピラノース環炭素のノード番号保持と、ノード指定による単糖構造追加表示例