

## 立体配座に依存する順位付けの説明

CANOST 表記中でいくつかの原子の出現する順番には、入力ファイルの Molfile における立体配座によって決まったものがあります。

このため、同一の分子であっても Molfile における立体配座の違いにより、その CANOST 表記をもとに生成された CAST 表記が異なってしまうという問題を生じることがあります。

「-d」オプションを用いることで、その情報を得ることが出来ます。

分子ツリーにおいて立体配座に依存して出現する順番が決まった原子より下の原子の出現する順番も異なりますが、出力されるのは、そのような部分構造の分子ツリーにおける先頭の原子 (そのような部分構造に対応する分子ツリーの部分ツリーの根) だけを出力します。

例えば図 1 の分子の原子 1 を先頭にした CANOST 表記では、原子 2, 3, 4, 5 の出現する順番は立体配座に依存します。したがって、原子 2, 3, 4 の先の部分構造と原子 5 の先の部分構造は立体構造は異なるので、Molfiles の立体配座によっては CAST 表記が異なる可能性があります。

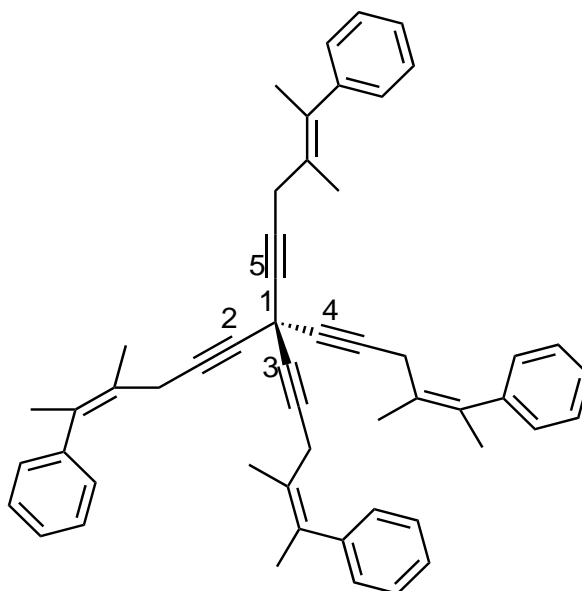


図 1: example1

この場合、原子 2, 3, 4, 5, それぞれを CANOST 表記で一番最初に出現するようにした CANOST 表記を出力するので (つまり 4 通り)、残りの 3 つが立体配座依存で順位を決めたと考えます。したがって、出力は以下ようになります。

```
C*T;T;T;T*T,T,T,T*D1,D1,D1,D1*D1;H,D1;H,D1;H,D1;H*( ---- 省略 ---- )
Orders of following atoms depend on their conformation
3;4;5;
22;26;
37;41;
27;31;
32;36;
C*T;T;T;T*T,T,T,T*D1,D1,D1,D1*D1;H,D1;H,D1;H,D1;H*( ---- 省略 ---- )
Orders of following atoms depend on their conformation
```

2;4;5;  
 27;31;  
 41;37;  
 32;36;  
 26;22;  
 C\*T;T;T;T\*T,T,T,T\*D1,D1,D1,D1\*D1;H,D1;H,D1;H,D1;H\*( ---- 省略 --- )  
 Orders of following atoms depend on their conformation  
 2;3;5;  
 32;36;  
 41;37;  
 26;22;  
 27;31;  
 C\*T;T;T;T\*T,T,T,T\*D1,D1,D1,D1\*D1;H,D1;H,D1;H,D1;H\*( ---- 省略 --- )  
 Orders of following atoms depend on their conformation  
 2;3;4;  
 41;37;  
 27;31;  
 26;22;  
 32;36;