

嘉南藥理科技大學專題研究計畫成果報告

烷類同分異構物之虛擬實境立體影像建構

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：

執行期間：92 年 1 月 1 日至 92 年 12 月 31 日

計畫主持人：劉育寰

共同主持人：

計畫參與人員：

執行單位：資管系

中華民國 九十三年 二月 二十九 日

嘉南藥理科技大學專題研究計畫成果報告

烷類同分異構物之虛擬實境立體影像建構

計畫編號：CNMI92-01

執行期限：92 年 1 月 1 日至 92 年 12 月 31 日

主持人：劉育寰 嘉南藥理科技大學 資訊管理系

中文摘要

發展一個演算法來自動產生 4 個碳以上 10 個碳以下烷類的同分異構物，並利用 Java 3D API 呈現其立體影像。在做 3D 立體顯示時，吾人將設計一個資料庫對應的方式來簡化類似結構重複顯示的複雜度。本計畫的難處在於設計一個演算法產生所有的組合方式，並利用類似樹狀的資料結構來自動消除結構的重複性與對稱性。而後續的研究將著重於其他有機化合物（如烯類、炔類等）的同分異構物的演算法。

關鍵詞：同分異構物、烷類、Java 3D、分子模型

Abstract

An algorithm is developed for automatically produce the isomers of Alkane, whose carbon number are lower than 10. The 3D structures of these isomers are displayed by means of Java 3D API. A database is used to simplify the procedure of 3D rendering, especially when the 3D structures are highly repetitious.

Keywords: Isomers, Alkane, Java 3D, Molecular Modeling.

Introduction

利用電腦自動產生烷類的同分異構物並呈現其立體結構其實並不是一件非常困難的研究，但它卻是利用電腦分析複雜的有機化合物的結構的入門工作；甚至是有機圖譜的辨識及立體結構的能量最小化，都有可能藉由電腦的輔助來實現。本計畫提供一個練習的機會給資管系的學生，一方面讓學生學習 Java 及 Java 3D 電腦語言，另一方面可增進他們對烷類同分異構物的了解。

考慮到演算法的複雜度，剛開始先做到 10 個碳的烷類同分異構物。原因是如果支鏈的碳數超過 3 個，支鏈的複雜度會增加很多。以 10 個碳為例，當取出 3 個碳當支鏈時，主鏈會有 7 個碳，這種狀況之下就會產生支鏈有 3 個碳的情

況。不過幸運的是，這樣的同分異構物只有 2 種，在本計畫中將這種情況當作特殊案例處理，並不以通用的演算法來產生這 2 種同分異構物，而留在後續的研究中探討。

由於烷類的分子結構相似性很高，且結構相當規律，若不考慮高碳數烷類的雙鍵及環狀結構，碳與氫之間鍵結的角度是固定的(109.5°)。所以可以將烷類的結構分解成幾個基本的部分，而所有的烷類同分異構物則可由這些部分組合而成。因此，將這些基本的部分以資料庫的方式來對應其立體結構，那麼每一種同分異構物則可以用這些部分的組合來建立另一個資料庫。只要能建立出烷類的各式同分異構物的資料庫，日後只要讀取資料庫，就能立即顯示其立體結構，不但可以節省計算同分異構物時所浪費的時間，同時可作為日後顯示更複雜有機化合物立體結構的基礎。

因此，本計畫主要分為 2 個部分：基本結構資料庫的建立與立體顯示技術、支鏈碳數小於 3 的烷類同分異構物演算法。

Method

基本結構資料庫的建立與立體顯示技術

烷類的基本結構是 4 個單鍵的碳，而每個鍵結的立體角是 109.5° ，碳-氫的鍵結長度為 1.1\AA ，碳-碳的鍵結長度為 1.53\AA 。每一個基本元件的中心點一定有 1 個碳，而其 4 個鍵結則有各種不同的組合，將每種組合給定一個名稱，如表格 1 所示。

表格 1 基本元件資料表，其中 C 表示碳原子，H1, H2, H3, H4 表示 4 個不同位置的氫，Null 表示沒有接任何原子。

Name	Comp0	Comp1	Comp2	Comp3	Comp4
Full	C	H1	H2	H3	H4
Left	C	H1	H2	H4	Null
Right	C	H1	H2	H3	Null
M134	C	H1	H3	H4	Null
M234	C	H2	H3	H4	Null
M12	C	H1	H2	Null	Null
M34	C	H3	H4	Null	Null
M1	C	H1	Null	Null	Null
M2	C	H2	Null	Null	Null

Name	Comp0	Comp1	Comp2	Comp3	Comp4
M3	C	H3	Null	Null	Null
M4	C	H4	Null	Null	Null
C	C	Null	Null	Null	Null

爲了要做立體顯示，必須求出碳與氫的相對立體座標。爲方便計算，假設座標原點在碳的中心點，且 H1 在 y-軸上，H2 在 y-z 平面上（如圖 1 所示）。求得 4 個氫的座標如公式(1)~(4)。

$$H1 = (0.0, r, 0.0) \quad (1)$$

$$H2 = (0.0, -h, -a) \quad (2)$$

$$H3 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -h, \frac{a}{2} \right) \quad (3)$$

$$H4 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}a, -h, \frac{a}{2} \right) \quad (4)$$

其中 $r = 1.1 \text{ \AA}$, $h = r \sin \theta$, $a = r \cos \theta$, $\theta = 109.5^\circ - 90^\circ$ 。

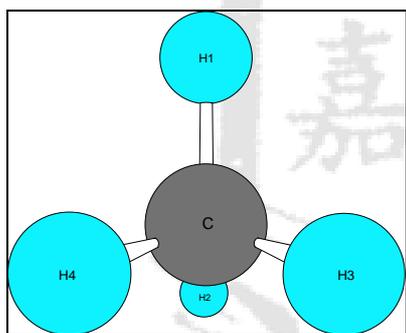


圖 1 碳與氫的相對立體座標。假設座標原點在碳的中心點，且 H1 在 y-軸上，H2 在 y-z 平面上。

在不考慮能量最小化的情況之下，其實每個基本元件的旋轉角度是不固定的，但爲了方便電腦顯示其立體結構，令第奇數個碳與第偶數個碳對 x-軸的旋轉角度相差 180° ，而基本旋轉量爲對 x-軸逆時鐘旋轉 $109.5^\circ/2$ （如圖 2 所示）。在顯示立體結構時，令主鏈落在 x-軸上，故 x-, y-, z-軸向的基本位移量分別爲 $Offset_X$, $Offset_Y$, $Offset_Z$ ，如公式(5)~(7)所示。

$$Offset_X = rc \cos \theta \quad (5)$$

$$Offset_Y = rc \sin \theta \quad (6)$$

$$Offset_Z = rc \cos \theta \quad (7)$$

其中 $rc = 1.53 \text{ \AA}$, $\theta = 109.5^\circ - 90^\circ$ 。

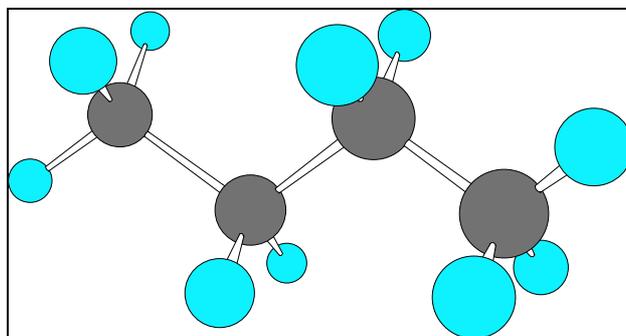


圖 2 爲顯示的方便，直鏈上第奇數個碳與第偶數個的旋轉角度相差 180° 。

對於每個同分異構物亦有一個資料庫相對應，其中紀錄了旋轉角度及位移量，如表格 2 所示。

表格 2 同分異構物的資料表，其中 Name 欄位與基本元件資料表相對應，Angle 爲需要幾個單位的旋轉角度，Offset_X, Offset_Y, Offset_Z 爲需要幾個單位的位移量。

Name	Angle	Offset_X	Offset_Y	Offset_Z
Left	0	0	0	0
M12	1	1	-2	0
M12	0	2	0	0
M12	1	3	-2	0
M12	0	4	0	0
M12	1	5	-2	0
M12	0	6	0	0
M12	1	7	-2	0
Right	0	8	0	0

支鏈碳數小於 3 的烷類同分異構物演算法

找出同分異構物的方法主要是排列組合的問題。從原本的碳數中拿出一個(些)碳，然後排在主鏈上的適當位置做爲支鏈，需考慮左右與上下對稱的問題同時也須考慮主鏈上的碳可以接幾個碳做爲支鏈。所以整個演算法可以下列幾個步驟來完成。

1. 先求出碳數爲 CNum，最多可拿出多少個碳 (MaxC) 來當作支鏈。

若從 CNum 個碳中取出 MaxC 個碳做爲支鏈，那麼主鏈上的碳數爲 $SC = CNum - MaxC$ 。第 i 個主鏈上的碳可以接的支鏈碳數不可以超過它到主鏈端點的碳數，且非端點主鏈上的碳都有 2 個鍵結可以皆知鏈的碳，所以第 i 個主鏈上的碳可以接的支鏈碳數爲 $2 \times \min(i-1, MaxC-i)$ ，所以 SC 個主鏈碳數總共可以接的支鏈碳數爲

$$C = \sum_{i=1}^{SC} 2 \times \min(i-1, MaxC-i)$$
，找出一個最大的 MaxC 使得 $MaxC \leq C$ ，該 MaxC 即爲總碳數 CNum 可取出的最多碳數。

2. 對每組可以拿出來當支鏈的碳數建立主鏈

位置的取樣空間。

每個不同的主鏈數 SC 會有各自對應的取樣空間 X。如步驟 1 所述，每個非端點的主鏈有 2 個鍵結，因此，在第 i 個主鏈 +z-方向的鍵結(取樣空間)定義為 + i ，而 -z-方向的鍵結(取樣空間)定義為 - i 。

3. 以可取出的碳數配合主鏈上可接的支鏈碳數求出所有的組合。

由於每個支鏈上可接的最多碳數可能不一樣，所以每組可取出的碳數 NC 對應到主鏈碳數 SC 的取樣空間可能會不一樣。例如，NC=2, SC=5 時，在第 3 個主鏈可以接 2 個碳，所以取樣空間為{3, -3}，求出取出 1 個的組合狀況；但也可以 2 個碳分別接到不同位置的主鏈上，所以其取樣空間為{2, -2, 3, -3, 4, -4}，求出取出 2 個的組合狀況。

4. 根據步驟 3 的結果作對稱性的消除。

在此需消除主鏈的左右對稱(即第 i 個碳與第 SC- i 個碳是對稱的)及上下對稱(及同一個主鏈上的碳支不同鍵結位置)。

Results

對碳數介於 4 到 10，求出 MaxC, SC, NC 等參數，如表格 1 所示。F1 為支鏈碳數為 1 的組數，F2 為支鏈碳數為 2 的組數，F3 為支鏈碳數為 3 的組數。對於每個 NC 必須先依序拆解成 3 個碳、2 個碳、1 個碳的混合組合。對於只有單獨一種碳數組合的取樣空間是比較容易建立的，而有不同碳數混合組合的狀況就必須進行重疊取樣以求的正確的取樣空間。

表格 3 CN 為 CNum；MC 為 MaxC；F1、F2、F3 分別為支鏈碳數為 1，2，3 的組數。

CN	MC	SC	NC	F1	F2	F3	CN	MC	SC	NC	F1	F2	F3	
4	3	3	1	1			9	5	6	3	1	1		
5	3	4	1	1					6	3	3			
		3	2	2					5	4		2		
6	4	5	1	1					5	4	2	1		
		4	2	2					5	4	4			
7	4	6	1	1					9	1	1			
		5	2		1		8	2		1				
		5	2	2			8	2	2					
		4	3	3			7	3			1			
8	4	7	1	1			7	3	1	1				
		6	2		1		7	3	3					
		6	2	2			6	4		2				
		5	3	1	1		6	4	2	1				
		5	3	3			6	4	4					
		4	4	4			5	5	1	2				
9	5	8	1	1			5	5	3	1				
		7	2		1		5	5	5					
		7	2	2										

本計畫所建立的圖形介面如圖 3 所示。最上方“C Number”為碳的個數，下方“Total

Compound #”為所有的同分異構物數目，Current Compound #”則為目前的同分異構物，最下方的“Rx”與“Rz”可用來改變視角。中間區域則為同分異構物的立體圖形顯示區。

經由本計畫的演算法所求得同分異構物數如表格 4 所示。

表格 4 各種不同碳數的同分異構物數

碳數	4	5	6	7	8	9	10
同分異構物數	2	3	5	7	18	35	75

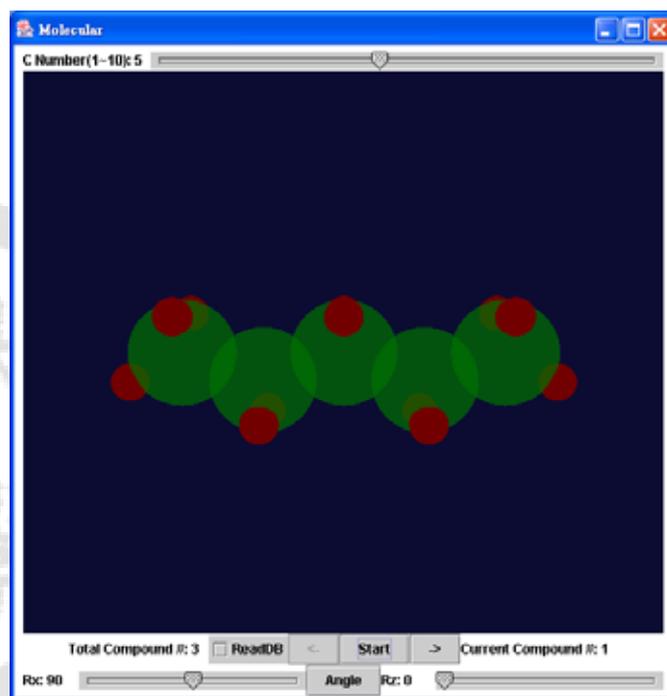
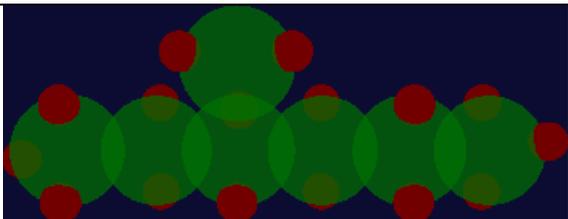
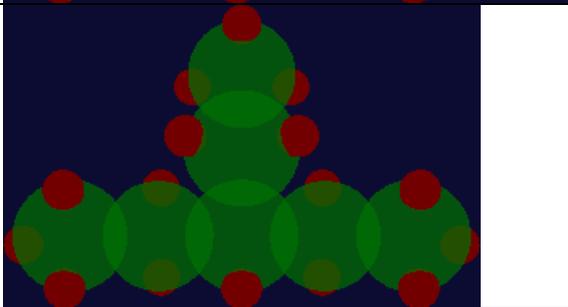
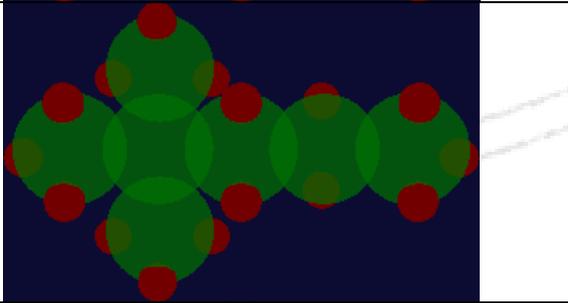
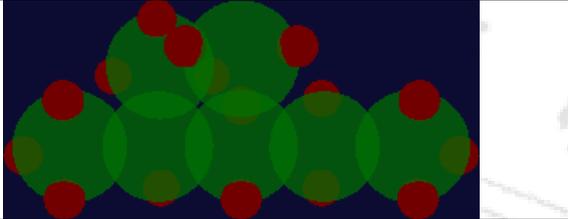
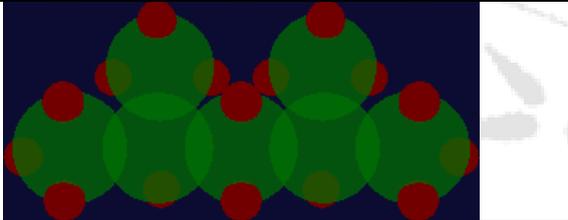
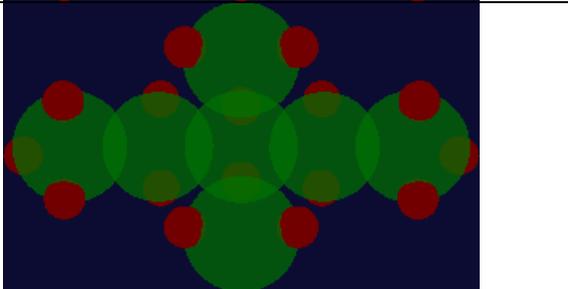


圖 3 本計畫所設計的圖形介面，最上方“C Number”為碳的個數，下方“Total Compound #”為所有的同分異構物數目，最下方的“Rx”與“Rz”可用來改變視角。

以碳數 7 為例，總共有 9 種同分異構物，各種同分異構物的立體圖形如圖 4 所示。

圖 4 碳數為 7 的 9 種同分異構物的立體圖形。

序	立體結構
1.	
2.	

序	立體結構	Conclusion
3.		<p>發展一個新的演算法可以自動求出 10 個碳數以下的烷類同分異構物，本計畫中暫時不處理支鏈碳數為 3 以上的狀況。在碳數為 10 取出 3 個碳及取出 5 個碳的情況下會有支鏈碳數為 3 的狀況發生，在本計畫中先以特例處理。在後續的計畫中在探討支鏈碳數大於 3 的各種組合。</p>
4.		<p>利用資料庫做為顯示分子立體結構的基礎，大大的提高立體顯示的彈性。但本計畫暫時不以網路版的形式開發系統，因為以 Java 開發資料庫的網路版應用程式須以 Client/Server 的方式開發，這個部分留在後續的計畫中來實做。</p>
5.		<p>在計算取樣空間的組合時所採用的是排列的演算法，故需要多花費比較多的時間。尤其是取樣空間比較多的時候，有時需要 14! 次的計算。</p> <p>在支鏈的排列方向並沒有考慮能量最小化的問題，所以容易出現支鏈的碳都出現在主鏈的同一邊，或是不同碳上的氫原子過份的接近。</p>
6.		<p>分子結構立體顯示的部分並沒有把鍵結特別化出來，其實這是合理的，但分子間的立體關係就比較難表現出來了。</p> <p>在後續的研究中將發展出碳數可以無限延伸的烷類同分異構物演算法，但須考慮所消耗的計算時間。</p>
7.		<p>Reference</p> <p>[1]. 易文韜，Java 2 程式設計設計，旗標出版社，2001。</p> <p>[2]. 林智揚，精通 Java Swing 程式設計，金禾資訊，2001。</p> <p>[3]. 周明憲 譯，Java 於演算法與資料結構之實習應用，博碩文化，2002。</p>
8.		<p>[4]. A. E. Walsh and D. Gehringer, "Java 3D API Jump-Start," Sun Microsystems, 2002.</p> <p>[5]. D. Selman, "Java 3D Programming, Manning," 2002.</p> <p>[6]. 陳吉平，有機化學，滄海書局，2002。</p> <p>[7]. 王昭鈞，有機化學，藝軒圖書，1997。</p> <p>[8]. P. J. Hansen and P. C. Jurs, <i>J. Chem. Ed.</i>, 65, 661(1988).</p> <p>[9]. Arthur Cayley</p>
9.	