

X_YTEX 入門

(PostScript 互換モード)

藤田 眞作¹

2006 年 8 月 31 日 (第 1.02P 版)

¹ふじた しんさく, 京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科物質工学部門; Shinsaku Fujita, Department of Chemistry and Materials Technology, Kyoto Institute of Technology, Matsugasaki, Sakyo, Kyoto, 606-8585 Japan. ©(1994, 1996, 2006) by S. Fujita

このドキュメントの履歴

1994/01/31 第 1.00 版発行

1996/08/16 第 1.01 版発行 (L^AT_EX 2_ε対応版)

2006/08/31 第 1.02P 版発行 (PostScript 互換モード)

目次

第 1 章	はじめに	5
1.1	X _Y TEX の目的	5
1.1.1	旧バージョン (1.00)	5
1.1.2	旧バージョン (1.01)	6
1.1.3	その後のバージョン	6
1.2	X _Y TEX を動かすには	7
1.2.1	インストール	7
1.2.2	指定方法	7
1.2.3	TEX/L ^A TEX 処理, 表示, 印刷	9
第 2 章	ベンゼン誘導体を描く	11
2.1	X _Y TEX の命令を使うには	11
2.2	置換基の指定	11
2.3	結合様式の指定	13
2.3.1	ベンゼン環の二重結合	13
2.3.2	キノン体などの描き方	14
2.4	置換基の右勝手と左勝手	15
2.5	その他のタイプ I 命令	15
第 3 章	シクロヘキサン誘導体の描き方	19
3.1	置換基の指定	19
3.2	環内二重結合の個別指定	20
3.3	その他のタイプ II 命令	21
第 4 章	置換基の位置の微調整	25
4.1	水平位置の微調整	25
4.2	垂直位置の微調整	28
第 5 章	ピリジン誘導体を描く	31
5.1	縦型のピリジン	31
5.2	横型のピリジン	32
5.3	6 員環の含窒素ヘテロ環を描くためのタイプ III の命令	33
5.4	5 員環の含窒素ヘテロ環を描くためのタイプ III の命令	34
5.5	含窒素縮合ヘテロ環を描くためのタイプ III の命令	35
第 6 章	ヘテロ環を描く一般的な方法	39
6.1	6 員環ヘテロ環を描く	39
6.2	5 員環ヘテロ環を描く	41
6.3	6-6 縮合ヘテロ環を描く	42
6.4	6-5 縮合ヘテロ環を描く	44

第 7 章	X _Y TeX 命令と L ^A T _E X 命令	47
7.1	center 環境の中で	47
7.2	equation 環境中で	49
7.3	tabular 環境中で	49
第 8 章	構造式の拡大縮小	51
8.1	拡大縮小の機能の使い方	51
8.2	もとの picture 環境での描画との比較	52
8.3	構造式中の文字の変更	52

第1章 はじめに

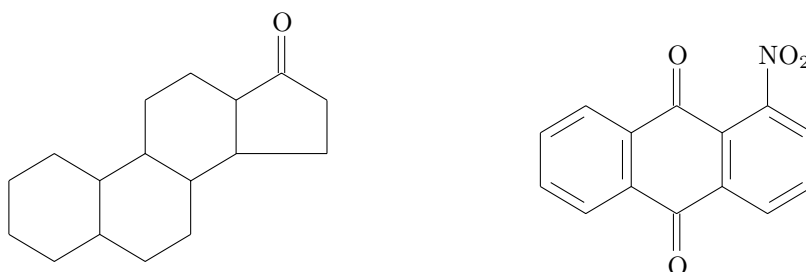
$\text{\X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ は化学構造式を書くためのマクロパッケージです．ここでは， $\text{\X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ の概略やこの入門を書いた目的などを説明します．

1.1 $\text{\X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ の目的

1.1.1 旧バージョン (1.00)

$\text{\La}^{\text{T}}\text{E}_\text{X}$ では，図形組版のために，`picture` 環境が用意されています．しかし，用意された命令だけで，複雑な図形，たとえば化学構造式などを描くのは難しいとされてきました．実際，この点については，拙著 [1] を書いたときに痛感しました．この欠点を補うため，いくつかのマクロ集が報告されています．化学構造式を描くためには，`chemtex.sty` などがフリーソフトウェアとして，出回っていますが，その使いやすさや適用範囲の点で，不十分なところがありました．

$\text{\X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ は，化学構造式を簡単に描くために作った道具 ($\text{\La}^{\text{T}}\text{E}_\text{X}$ 用のマクロパッケージ) です [2]． $\text{\X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ では，広範囲の構造を描くために，いろいろな母核構造を描くマクロ命令を作成してあります．かなり複雑な構造式が，それぞれ 0.5 数行程度の長さの命令を書くだけで，描けるようになっていきます．たとえば，次の二つの構造式:



を組版するための命令は，次に示す通りきわめて簡単です．命令の名前は，化学化合物名から容易に類推できるように決めましたので，(少なくとも有機化学を勉強した方には) 記憶しやすいと思われます．

```
\steroid{{17}D==0}
\anthracenev[p]{9D==0;{10}D==0;1==NO$_2$}
```

この例のように母核構造として不変のところは，指定しなくても自動的に組版されるようになっていきます．さらに，使いやすくするために，置換基の指定や二重結合などの位置指定を統一的な方法で行えるようにしました．

$\text{\La}^{\text{T}}\text{E}_\text{X}$ の `picture` 環境の範囲内 (図形組版) で組版しますので，その固有の制限 (短い線分が描けないこと，線分の勾配に制限があることなど) があります．しかし，この制限内でも広範囲の構造式を描くことができます．しかも，図形組版ですから，できあがった `dvi` ファイルは，文字通り完全に `device-independent` です．このため， $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{\La}^{\text{T}}\text{E}_\text{X}$ が使える環境ならば，プリンターを選ばず出力できるというメリットがあります．

$\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ は、マクロの定義の内部では `picture` 環境を使っていますが、単に構造式を描くだけなら (本入門の範囲では)、この事実を意識する必要はありません。通常のマクロ命令と同様に使えます。すなわち、できあがった構造式を一つの文字とみなして、通常の $\text{T}\mathcal{E}\mathcal{X}/\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ の命令とともに自由に組版してゆくことができます。

$\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ (バージョン 1.00) を使うためのマニュアルとしては、NIFTY-Serve の FPRINT (文字情報と印刷・DTP フォーラム) LIB7 にアップロードした No. 201 の $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 本体に付属するマニュアル (英文), No. 202 の例文集 (和文), No. 204 の入門 (和文), があります。

番号	ID	登録日付	バイト	データ名
204	HBH00445	94/01/31	76093	xymtexi.lzh-XyMTeX 入門
202	HBH00445	94/01/13	77281	xymtexj.lzh-XyMTeX 例文集
201	HBH00445	93/12/02	299053	xymtex.lzh for drawing chem. structures

「 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 入門」(No. 204) は、 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ を使うための導入部として書いたもので、このマニュアルのもとになったものです。

1.1.2 旧バージョン (1.01)

その後、 $\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X} 2_{\epsilon}$ の日本語対応版の $\text{p}\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X} 2_{\epsilon}$ が整備されたので、 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ も改良をおこないました。 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ バージョン 1.01 での主な変更点は次の通りです。

- $\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X} 2_{\epsilon}$ 対応。もともとバージョン 1.00 の本体は $\text{p}\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X} 2_{\epsilon}$ でも動くので、主として `dtx` ファイルの整備を行いました。
- ポリマー描画などの機能追加。
- `chemist.sty` との統合。

これにともない、上記のマニュアル類も、 $\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X} 2_{\epsilon}$ 対応とするために改訂し、「 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 入門 (バージョン 1.01)」としましたが、公開には至りませんでした。この改訂版は、 $\text{p}\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X} 2_{\epsilon}$ の処理に通るように、旧版 (バージョン 1.00, No. 204) を最小限の手直しをしたものです！その後、 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ に関する単行本 [3] (筆者が富士フィルムから京都工芸繊維大学に転職した 1997 年に出版) に、この改訂版を、他のマニュアル類と一緒に収録しました。

1.1.3 その後のバージョン

上記のマニュアル (旧バージョン) は、もともとパソコン通信 (NIFTY-Serve の FPRINT フォーラム) にアップロードしたものでした。インターネットの爆発的な発展により、FPRINT フォーラムが廃止されたため、上記のマニュアルは入手できなくなりました。また、拙著 [3] も増刷がなく、現時点では、事実上、手に入らなくなっています。日本語のマニュアルが少ないことから、そろそろ「 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 入門」をバージョンアップして公開する時期がきました。

この間、 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 本体は、改良を重ねてバージョン 4.03 までになっています。表 1.1 に各バージョンの改良点をまとめてあります。とくに、バージョン 3.00 で、拡大縮小 (`dvi` の範囲内で) ができるようになったこと、バージョン 4.00 以降で PostScript 対応になったことが大きな特徴です。

表 1.2 には、 $\mathcal{X}\mathcal{Y}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ バージョン 4.03 に含まれるパッケージファイルとその機能を示してあります。PostScript 対応とする際に、`PSTrick` パッケージ [10] の機能を使っています。PostScript 対応としたため、PostScript 互換モードを使う場合には、`dvi` の特徴は失われてしまいましたが、そのかわり、立体化学 (楔形結合など) の機能が強化されました。

¹手直しは、主として `xymmani.sty` の改訂です。`p\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X} 2_{\epsilon} 用の jbook.sty が、 $\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X} 2.09$ 用のものに比べてかなり変更されたところがあり、旧版の xymmani.sty (バージョン 1.00) ではエラーになるところがでてきたために行ったものです。`

表 1.1: $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ の各バージョンの特徴

version	パッケージファイルと注釈
1.00 (1993)	($\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}2.09$ 対応) 文献 [4, 5] 参照. aliphath.sty, carom.sty, lowcycle.sty, heterom.sty, heteromh.sty, hcycle.sty, chemstr.sty, locant.sty, xymtex.sty
1.01 (1996)	($\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}2_\epsilon$ 対応) 文献 [3] 参照. ccycle.sty, polymers.sty, chemist.sty
1.02 (1998)	(配布せず) ‘yl’-function による置換基の入れ子 .
2.00 (1998)	$\mathcal{X}\mathcal{M}$ 記法に基づく増強バージョン . 文献 [6, 7] 参照. fusering.sty, methylen.sty
2.01 (2001)	(配布せず) 拡大縮小を可能にしたバージョン, sizeredc.sty (version 1.00)
3.00 (2002)	拡大縮小パッケージ (sizeredc.sty, version 1.01) およびコマンド体系の再編 . 文献 [8] 参照
4.00 (2002)	(配布せず) PostScript 対応 (xymtx-ps.sty, version 1.00 および chmst-ps.sty, version 1.00)
4.01 (2004)	(PostScript 対応) 中心原子の大きさ可変 .
4.02 (2004)	(立体化学対応) PostScript 対応および楔形結合 .
4.03 (2005)	(立体化学増強) PostScript 対応および波形結合 .

1.2 $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ を動かすには

1.2.1 インストール

ダウンロードした $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ は、圧縮ソフトで圧縮してありますので、解凍して使用する必要があります²。 $\mathcal{p}\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}2_\epsilon$ 処理のパスがつながっているディレクトリー (通常は、usr/local/share/texmf/tex/latex 以下の適当なディレクトリー . ここなら通常はパスが通っている) の下位に、適当な名称のディレクトリー (たとえば $\mathcal{M}\mathcal{Y}\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$) を作成して、その中で解凍してください。あらかじめ、 $\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}2_\epsilon$ さえ動くようになっていれば ($\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ を使おうとされる方のパソコンは当然そうになっているはずですが)、なにも設定せずに使えます³。

$\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ は、 $\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}2_\epsilon$ 用のマクロパッケージセットです⁴。構造式を描く命令 (マクロ) は、いくつかのパッケージ (スタイルファイル) に分けて格納されています。必要な命令が、どのパッケージに入っているかは、 $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 付属のマニュアルをみて下さい。

1.2.2 指定方法

$\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ バージョン 4.03 は、次の二つのモードで動くようになっています。

1. $\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}/\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 互換モード: xymtex.sty を読み込んだ場合は、上記のパッケージのうち、xymtx-ps.sty 以外のパッケージをすべて読み込みます。このモードでは、dvi の範囲内でも picture 環境の制限を超え

²筆者のホームページ (<http://imt.chem.kit.ac.jp/fujita/fujitas/fujita.html>) から入手できます。また、各バージョンのマニュアル (英文) が付属しています。それぞれの改良点を書いてあり、最新版でも有効です。

³ $\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}/\mathcal{L}\mathcal{A}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}2_\epsilon$ 処理のときには、kpathsea によるファイル探索がおこなわれます。この探索は、設定したディレクトリー以下の検索をおこなうようになっています。検索を速めるため、ls-R というリストファイルが作られていて、これを参照して、その中に記載されているファイルのみを見にゆきます。ls-R ファイルを使っている場合は、 $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ をインストールすると、mktexlsr を動かして ls-R ファイルを更新する必要があります。パッケージファイルを追加することに、ls-R の追加をおこなうのが面倒なむきには、便法があります。ls-R ファイルがない場合には、kpathsea は設定したディレクトリー以下のすべてのファイルを検索する仕様になっています。そこで、便法として、ls-R をはずして使用すればよろしい。昨今は、パソコンの能力があがっていますので、そんなにいららざる事態にはなりません。

⁴ $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ の使用によってもたらされたいかなる事態に対しても著者は責任を負いません。

表 1.2: \LaTeX および関連のパッケージファイル

パッケージ名	含まれる機能
\LaTeX パッケージファイル	
aliphatic.sty	脂肪族化合物の描画マクロ
carom.sty	炭素環化合物の縦型・横型描画のためのマクロ
lowcycle.sty	5員環以下の炭素環化合物の描画マクロ
ccycle.sty	ピシクロ化合物の描画マクロ
hetarom.sty	ヘテロ環化合物の縦型描画マクロ
hetaromh.sty	ヘテロ環化合物の横型描画マクロ
hcycle.sty	ピラノース, フラノース誘導体の描画マクロ
chemstr.sty	原子および結合描画のための基本命令
locant.sty	ロカントの打ち出し命令
polymers.sty	ポリマーの描画命令
fusering.sty	縮合環ユニットの描画命令
methylen.sty	ジグザクのポリメチレン鎖の描画マクロ
sizedrc.sty	拡大縮小のためのマクロ
xymtx-ps.sty	PostScript 対応 (バージョン 4.02). chemstr パッケージのマクロのいくつかを置き換える.
\LaTeX 周辺マクロ	
xymtex.sty	xymtx-ps.sty 以外のすべてのパッケージを読み込むためのパッケージ (no PostScript)
xymtexps.sty	すべてのパッケージを読み込むためのパッケージ (xymtx-ps.sty による PostScript 対応)
関連ファイル	
chemist.sty	'chem' version および化学環境
chmst-ps.sty	PostScript 対応. chemist パッケージのマクロのいくつかを置き換える.

て、構造式の拡大縮小ができるようになっています。ただし、立体化学の表示に関しては不十分で、 β 結合は太線、 α 結合は点線であらわされます。

```

\documentclass{article}
\usepackage{xymtex}
\begin{document}
(formula)
\end{document}

```

構造式の拡大縮小をおこなうために、epic.sty を自動的に読み込むようになっています (内部の命令を改良して使っています)。

2. PostScript 互換モード: xymtexps.sty を読み込んだ場合は、 \LaTeX system のすべてのパッケージファイルを (xymtx-ps.sty も) 読み込みます。ただし、立体化学表示の慣用にしがたって、 β 結合は楔形、 α 結合は太い破線であらわされます。

```

\documentclass{article}
\usepackage{xymtexps}
\begin{document}
(formula)

```



```
¥end{document}
```

PostScript 対応とする際に、PSTrick パッケージの機能を使っていますので、関連のパッケージを自動的に読み込むようになっています。

X_YTeX の基本的な部分は、T_EX/L^AT_EX 互換モードで実現されています。したがって、入門編としてのこのマニュアルでは、T_EX/L^AT_EX 互換モードでできる機能を中心にしますが、それらの機能が PostScript 対応モードでどうなるのかということを説明することにします。

T_EX/L^AT_EX 互換モードは、L^AT_EX の picture 環境 (および epic.sty の 1 命令) のみを使っていますので、L^AT_EX 2_ε (pL^AT_EX 2_ε) が動く環境ならば使用することができます。また、プリンターとしては、dvi ウェア (たとえば dviout) に対応しているものならば使えます。

一方、PostScript 互換モードでは、dvi ファイルを作成したのち、そのファイルを PostScript ファイルに変換する必要があります。その変換には、フリーソフトウェアの dvips (あるいは日本語対応の dvipsk) を使います。表示と印刷には、フリーソフトウェアである GhostScript および GSview の組み合わせを使用します。

X_YTeX のパッケージのうち必要な命令が含まれるものを¥usepackage の引数として指定するだけで、X_YTeX の各命令が使えるようになります。X_YTeX では、拡大縮小の機能を使うには、sizedc.sty が必要です。また、PostScript 対応の機能を使うには xymtx-ps.sty が必要です。たとえば、

```
¥documentclass{jbook}
¥usepackage{epic,carom,hetarom,hetaromh,sizedc,xymtx-ps}
¥begin{document}
(構造式を含む本文)
¥end{document}
```

というように¥usepackage の引数として指定します。ただし、パッケージ間でマクロを共用している場合には、片方だけを読み込むとエラーとなることがあります。滅多にないことですが、このときは相互関係を調べてどちらのパッケージも読み込む必要があります。X_YTeX に含まれる全パッケージ (PostScript 互換モード用および T_EX/L^AT_EX モード用) を xymtexps.sty として呼び出せるようにしていますので、面倒ならば上記のように¥usepackage{xymtexps}を指定することも可能です。昨今はパソコンの能力が上がって、メモリー不足によるエラーがほとんどでなくなりましたので、¥usepackage{xymtexps}を使う方法をお奨めします。

1.2.3 T_EX/L^AT_EX 処理, 表示, 印刷

このようにして作成した tex ファイルを、pL^AT_EX 2_ε 処理をして、dvi ファイルを作成します。このファイルはこのままでは読めませんので、PostScript ファイルに変換します。通常フリーの dvips (あるいは日本語対応の dvipsk) を使います。コマンドプロンプトの画面に

```
dvipsk -D2400 -Pd1 XyMTeXiP
```

入力して、処理をおこなうと XyMTeXiP.dvi から XyMTeXiP.ps ファイルへの変換がおこなわれます。

生じた PostScript ファイル (ここでは XyMTeXiP.ps) の表示と印刷には、フリーソフトウェアである GhostScript および GSview の組み合わせを使用します。この操作については、T_EX/L^AT_EX の参考書を参照してください。

第2章 ベンゼン誘導体を描く

ここでは、簡単なベンゼン誘導体の描き方を説明します。

- 置換基のリストを引数として指定するやり方と
- 環の結合様式をオプション引数とし指定するやり方

を取り扱います。

2.1 X_YMT_EX の命令を使うには

この章では、`carom.sty` というパッケージファイルに格納されている命令を例にとって、説明してゆきます。したがって、`tex` ファイルには、次のような宣言をする必要があります。

```

\documentclass{jbook}
\usepackage{carom,xymtx-ps}
\begin{document}
(化学構造式を含む本文)
\end{document}

```

`carom` と `xymtx-ps` を指定していることに注意してください。

このマニュアルでは、すべてのパッケージを読み込むようにしてあります。

```

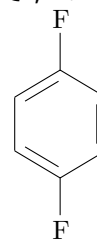
\documentclass{jbook}
\usepackage{xymtexps}
\begin{document}
(化学構造式を含む本文)
\end{document}

```

できあがった `tex` ファイルは、通常通り L^AT_EX の処理, PostScript の変換処理にかけます。

2.2 置換基の指定

実例で説明したほうがわかりやすいので、具体的な入力と相当する出力を並記することにします。まず、文章の途中に、`1,4-difluorobenzene` を挿入してみましょう。これは簡単で、`\bzdrv{1==F;4==F}` と入力す



るだけです。すると、`1,4-difluorobenzene` の構造式が、文の途中に、 と出力されます。このように、X_YMT_EX で描かれた構造式は、一つの文字と同じように取り扱われます。

`\bzdrv` はベンゼン誘導体を縦方向に描くための命令です。語尾の `v` は、`vertical` (垂直) の略です。引数の中は置換基のリストです。セミコロンで区切られたところが、それぞれ一つの置換基を表しています。た

例えば、上記の 1==F は、1 位に F が置換していることを指定したものです。このように、==の前に置換位置、後に置換基を指定します。置換位置の番号は、それぞれの命令で決まっています。bzdrv の場合は、頂上の頂点が 1 で、時計回りに番号を振っています。その他の命令について、詳しくは X^YMT_EX のマニュアルをご覧ください。

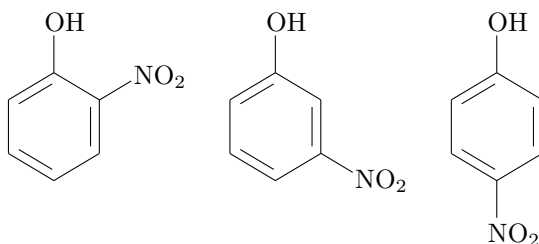
置換基は、添え字なども付けることができます。nitrophenol の三つの異性体を列挙してみましよう。各構造式が一つの文字とみなされますから、単に命令を並べるだけで、構造式を列挙することができます。

```

%bzdrv{1==OH;2==NO$_2$}
%bzdrv{1==OH;3==NO$_2$}
%bzdrv{1==OH;4==NO$_2$}

```

と入力すると、次のような出力が得られます。



それぞれ、2-nitrophenol, 3-nitrophenol, 4-nitrophenol という名称ですから、これらの名称を書くのと同じ感覚で置換基を指定してゆけばよいことになります。

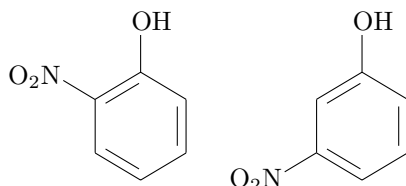
ニトロ基が逆方向に付いたものは次のように指定します。ここでは、ニトロ基を左方向から読むように書き換えています。

```

%bzdrv{1==OH;6==O$_2$N}
%bzdrv{1==OH;5==O$_2$N}

```

と入力すると、次のような出力が得られます。



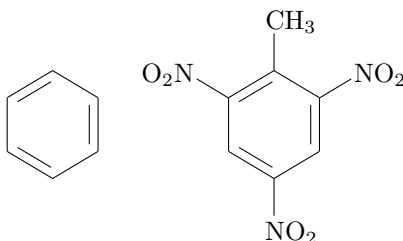
このように、引数の中に置換位置と置換基を列挙すれば、必要な結合手を描いた上で、置換基を印刷します。置換基を指定しない位置には、何も出力されません。極端なときは空の置換基リストを指定することもできます。この場合は母核のベンゼンそのものが出力されます。四つの置換基を指定する例として、爆薬として有名な TNT (2,4,6-trinitrotoluene) の構造式を描いてみましょう。同じ要領で、置換基を列挙してゆきます。この場合も、名称から次の命令を書き下すことは容易です。

```

%bzdrv{}
%bzdrv{1==CH$_3$;2==NO$_2$;4==NO$_2$;6==NO$_2$}

```

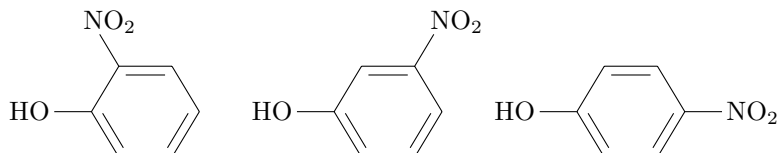
と入力すると、次のような出力が得られます。



縦出力の`\bzdrv` に対して、ベンゼン誘導体を横方向に描くための命令が、`\bzdrh` です。語尾の `h` は、horizontal (水平) のを表しています。上記の nitrophenol の三つの置換体をこの命令で描いてみましょう。

```
\bzdrh{1==HO;2==NO$_2$}
\bzdrh{1==HO;3==NO$_2$}
\bzdrh{1==HO;4==NO$_2$}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。



2.3 結合様式の指定

2.3.1 ベンゼン環の二重結合

このタイプの \LaTeX の命令は、オプションの引数 `OPT` を取るようになっています。この入門では、タイプ I の命令と呼ぶことにします！ここでこれらの書式を一般的に示しておきます。

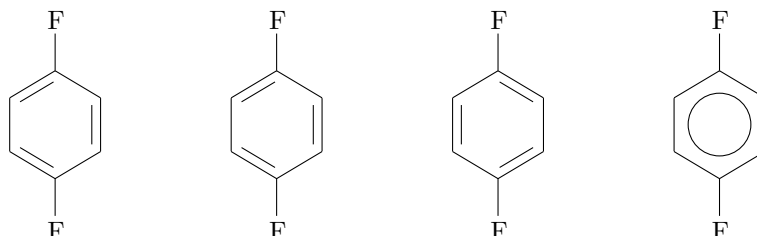
```
\bzdrv [OPT] {SUBSLIST}
\bzdrh [OPT] {SUBSLIST}
```

`\bzdrv` や `\bzdrh` の場合のオプション引数 `OPT` は、1文字あるいは2文字のアルファベットで、結合様式 (bond pattern) を指定するためのものです。SUBSLIST は前節で説明した置換基リストです。これらの引数の詳細は、この入門では触れず、話が通る範囲で例示するにとどめます。

ベンゼン環の二重結合は、標準設定 (default) としては、2-3, 4-5, 6-1 の位置に二重結合が交互に印刷されます。オプション `[OPT]` として `[r]` と指定しても同じ出力が得られます。これを 1-2, 3-4, 5-6 の二重結合に変えるには、オプションに `[l]` と指定します。また、芳香族の共役をあらわすために、円を描くこともあります。このためには、`[c]` とオプション指定します。

```
\bzdrv{1==F;4==F}
\bzdrv[r]{1==F;4==F}
\bzdrv[l]{1==F;4==F}
\bzdrv[c]{1==F;4==F}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。



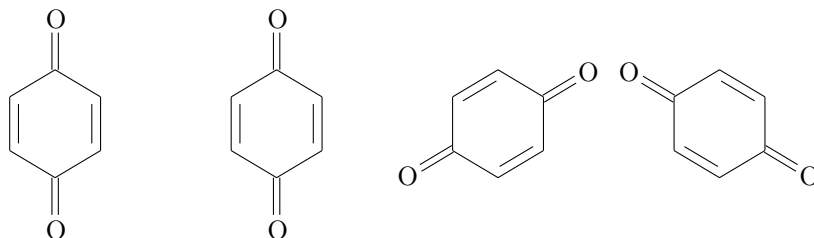
¹ \LaTeX のマニュアルでは、specified user commands for drawing carbocycles と呼んでいます。

2.3.2 キノン体などの描き方

`\bzdrv` や `\bzdrh` の場合のオプション引数は、キノン体を描くためにも使えます。オプションの1文字あるいは2文字の指定で、p-ベンゾキノンの三つの書き方のいずれをも出力することができます。

```
\bzdrv[p]{1D==0;4D==0}
\bzdrv[pa]{1D==0;4D==0}
\bzdrv[pb]{2D==0;5D==0}
\bzdrv[pc]{3D==0;6D==0}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。

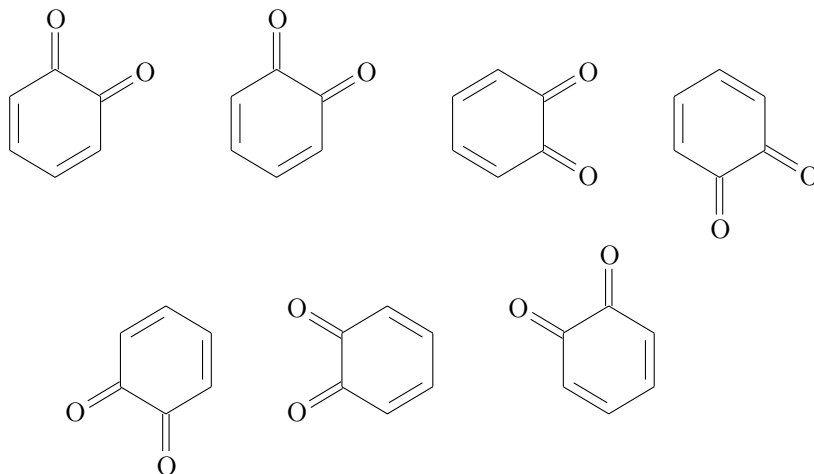


ここで、置換基リストの位置指定 (==の前) が、数字と文字の組合わせになっていることに注意してください。このDは、該当の置換基 (==の後) を二重結合で結ぶことを指定するものです。この場合は、カルボニル基の酸素の出力に使っています。

同様に、オプションの1文字あるいは2文字の指定で、o-ベンゾキノンの六つの書き方のいずれをも出力することができます。

```
\bzdrv[o]{1D==0;2D==0}
\bzdrv[oa]{1D==0;2D==0}
\bzdrv[ob]{2D==0;3D==0}
\bzdrv[oc]{3D==0;4D==0}
\bzdrv[od]{5D==0;4D==0}
\bzdrv[oe]{5D==0;6D==0}
\bzdrv[of]{1D==0;6D==0}
```

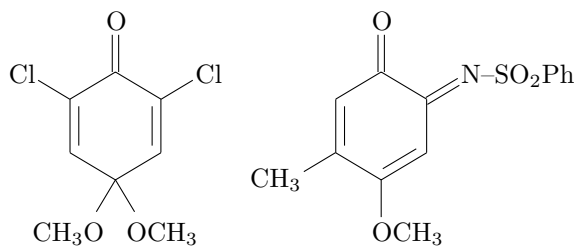
と入力すると、次のような出力が得られます。



OPT と SUBSLIST は独立に指定できるようになっていますので、さらにいろいろな化合物の構造を描くに使えます。次の例は、p-キノンアセタル誘導体や o-スルホンアミド誘導体を描いた例です。

```
\bzdrv[p]{1D==0;4Sa==OCH$_3$;4Sb==CH$_3$0;2==C1;6==C1}\quad
\bzdrv[o]{1D==0;2D==N--SO$_2$Ph;4==OCH$_3$;5==CH$_3$}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。



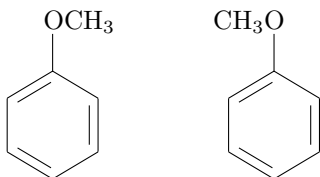
このソースリストの`\quad` は、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ の命令で水平方向に空白を空けます。

2.4 置換基の右勝手と左勝手

`\bzdrv` 命令で描いたベンゼン環の 1 位および 4 位の置換基は、右方向に描くこと (右勝手) が普通ですが、込み合ってくると左方向に描きたいこと (左勝手) もあります。X $\text{M}_{\text{T}}\text{E}_{\text{X}}$ 標準では、右勝手にしましたが、これを強制的に左勝手に変えるには `\lmoiety` 命令を使います。必要なら、右勝手に変える `\rmoiety` 命令も使えます。

```
\bzdrv{1==OCH$_3$}
\bzdrv{1==\lmoiety{CH$_3$O}}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。



2.5 その他のタイプ I 命令

`\bzdrv` や `\bzdrh` と同じ書式をもつ命令には、

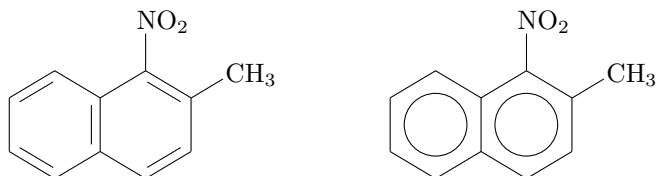
ナフタレンを描くための	<code>\nathdrv</code>	および	<code>\naphdrh</code> ,
テトラリンを描くための	<code>\tetralinev</code>	および	<code>\tetralineh</code> ,
アントラセンを描くための	<code>\anthracenev</code>	および	<code>\anthraceneh</code> ,
フェナントレンを描くための	<code>\phenanthrenev</code>	および	<code>\phenanthreneh</code> ,

などがあります。オプション引数 `OPT` および引数 `SUBSLIST` をもつ書式を取ります。それぞれの置換位置の番号などは、X $\text{M}_{\text{T}}\text{E}_{\text{X}}$ 付属のマニュアルをご覧ください。

これらの命令を使った例をいくつかあげておきましょう。`\naphdrv` および `\naphdrh` については、これまでの説明から容易に使うことができるでしょう。ナフタレン環の二重結合の書き方はいくつか可能ですが、標準としては、縮合結合が二重結合となるようにしてあります。共役を円であらわすことも可能です。

```
\naphdrv{1==NO$_2$;2==CH$_3$} \quad
\naphdrv[A]{1==NO$_2$;2==CH$_3$}
```

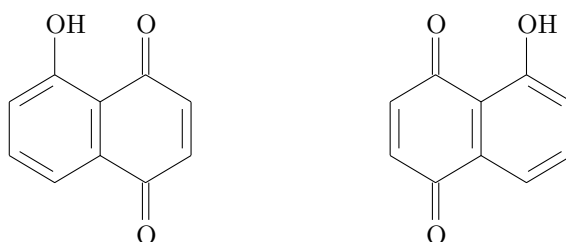
と入力すると、次のような出力が得られます。



p-ナフトキノン誘導体も、オプション指定で描くことができます。たとえば、

```
¥naphdrv [p] {1D==0;4D==0;8==OH} ¥quad
¥naphdrv [pb] {5D==0;8D==0;1==OH}
```

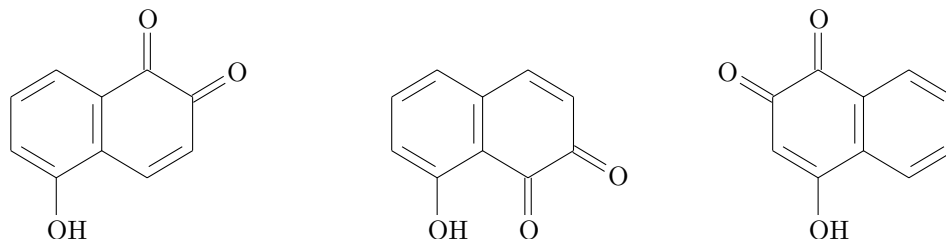
と入力すると、次のような出力が得られます。



o-ナフトキノン体もすべての可能性が書けるように、[oa] から [of] までオプション指定できるようになっています。たとえば、

```
¥naphdrv [oa] {1D==0;2D==0;5==OH} ¥quad
¥naphdrv [oc] {3D==0;4D==0;5==OH} ¥quad
¥naphdrv [of] {7D==0;8D==0;5==OH}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。

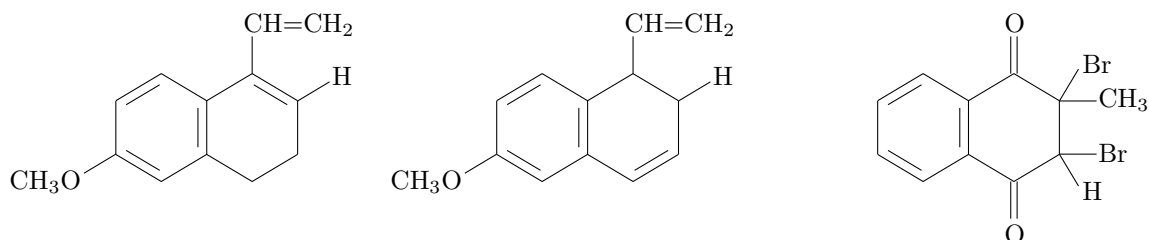


ナフトキノン体はこれ以外にも、2,6-ナフトキノンなどがありますが、これもこの命令を用いて描けます。詳しくは、X²MI_EX 付録のマニュアルをご覧ください。

¥tetralinev および¥tetralineh についても同様です。左側の環が芳香環となります。ただし、[ea] から [ec] を使うようにして、左側の環の二重結合の位置は、縮合位置が二重結合になるように固定されています。

```
¥tetralinev [ea] {2==H;1==CH=CH$_2$;6==CH$_3$} ¥quad
¥tetralinev [ec] {2==H;1==CH=CH$_2$;6==CH$_3$} ¥quad
¥tetralinev {1D==0;4D==0;2Sa==CH$_3$;2Sb==Br;3Sa==Br;3Sb==H}
```

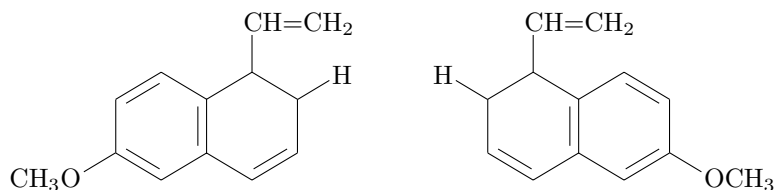
と入力すると、次のような出力が得られます。



ただし, テトラリンの描画は, `\decalinev` および `\decalineh` というタイプ II 命令として定義されているものを使うことをお勧めします. タイプ II 命令については次の章で説明しますが, 二重結合を個別に指定することができる命令のことであり, たとえば,

```
\decalinev[fhkc]{2==H;1==CH=CH$_2$;6==CH$_3$0} \quad
\decalinev[ackf]{7==H;8==CH=CH$_2$;3==OCH$_3$}
```

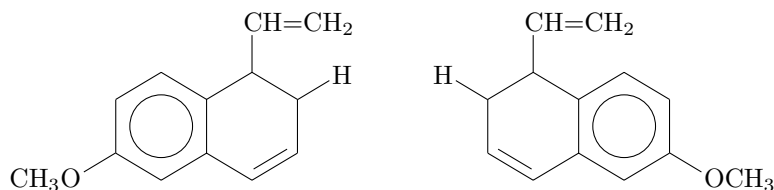
と入力すると, 次のような出力がえられます.



ベンゼン環の共役をあらわすために, 円を描くこともできます. たとえば,

```
\decalinev[Ac]{2==H;1==CH=CH$_2$;6==CH$_3$0} \quad
\decalinev[Bf]{7==H;8==CH=CH$_2$;3==OCH$_3$}
```

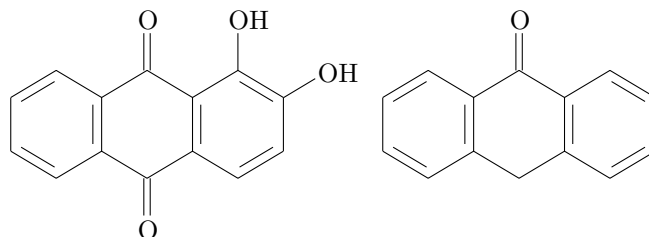
と入力すると, 次のような出力がえられます.



`\anthracenv` は, 三環系の化合物を描くための命令です. たとえば, alizarin と anthrone の構造式は,

```
\anthracenv[p]{9D==0;{\10}D==0;1==OH;2==OH} \quad
\anthracenv[p]{9D==0}
```

と入力します. すると, 次のような出力が得られます.



この入力で 10 位の置換基の位置指定に特殊な方法を用いていることに注意してください. これは, $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ の処理時に一まとめにして処理するように強制的に指定するためのものです. たとえば, 10 を添え字として付けるときに, $\$a_{10}\$$ ではだめで, $\$a_{\{10\}}\$$ などのように指定しなければならないことと同じ事情です.

第3章 シクロヘキサン誘導体の描き方

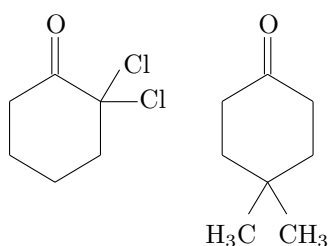
ここでは、シクロヘキサン誘導体を描く`\cyclohexanev` 命令を例にとって、 $\X\TeX$ のもう一つのタイプの命令 (タイプ II 命令) の使い方を説明します。

3.1 置換基の指定

`\cyclohexanev` 命令は、引数として SUBSLIST を取ります。これは、これまで述べたのと基本的には同じです。たとえば、

```
\cyclohexanev{1D==O;2Sa==Cl;2Sb==Cl}
\cyclohexanev{1D==O;4Sa==CH$_3$;4Sb==H$_3$C}
```

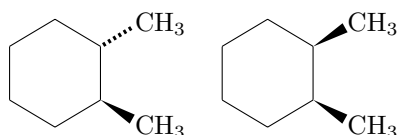
と入力すると、次のような出力が得られます。



$\X\TeX$ の \TeX / \LaTeX 互換モードでは、立体化学に使う楔形の結合はありませんが、PostScript 互換モードでは、楔形と太い点線が標準出力となっています。

```
\cyclohexanev{2A==CH$_3$;3B==CH$_3$}
\cyclohexanev{2B==CH$_3$;3B==CH$_3$}
```

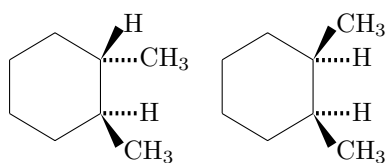
と入力すると、次のような出力が得られます。



上の例では、立体化学を示すのに、一つの位置あたり一つの置換基で代表させて表示しました。完全に表示するには次のように指定します。

```
\cyclohexanev{2SA==CH$_3$;2SB==H;3SB==CH$_3$;3SA==H}
\cyclohexanev{2SB==CH$_3$;2SA==H;3SB==CH$_3$;3SA==H}
```

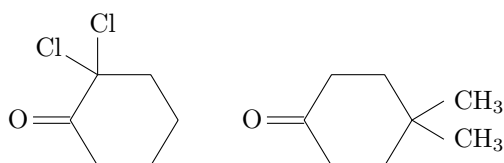
と入力すると、次のような出力が得られます。



`%cyclohexaneh` 命令は、横型のシクロヘキサン環を作図する命令です。引数として SUBSLIST を取りま
す。これは、これまで述べたのと基本的には同じです。たとえば、

```
%cyclohexaneh{1D==0;2Sa==Cl;2Sb==Cl}
%cyclohexaneh{1D==0;4Sa==CH$_3$;4Sb==CH$_3$}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。



3.2 環内二重結合の個別指定

このタイプの X²MI_EX の命令は、オプションの引数 BONDLIST を取るようになっていました。この入門
では、タイプ II の命令と呼ぶことにします！ここでこれらの書式を一般的に示しておきます。

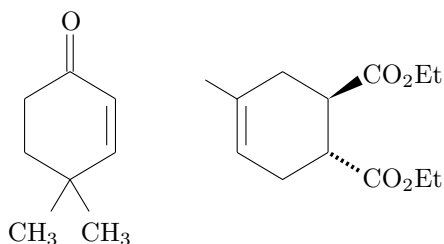
```
%cyclohexanev[BONDLIST]{SUBSLIST}
%cyclohexaneh[BONDLIST]{SUBSLIST}
```

`%cyclohexanev` や `%cyclohexaneh` のオプション引数 BONDLIST で、環内の二重結合を一つずつ指定して
ゆきます。この指定をするために、1-2 結合には a, 2-3 結合には b, ... という具合に各結合には a-f の文字
が割り当てられています。たとえば、a を指定すると 1-2 が二重結合になります。SUBSLITST は前節で説
明した置換基リストです。

次の例では、環内二重結合は一つしかありませんが、構造式に応じて多数の文字を指定することができ
ます。

```
%cyclohexanev[b]{1D==0;4Sa==CH$_3$;4Sb==CH$_3$}
%cyclohexanev[e]{6==;2B==CO$_2$Et;3A==CO$_2$Et}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。



後者では、6 位の置換位置の指定はありますが、置換基は指定していないことに注意してください。この
ようにすると結合だけが印刷されます。

¹X²MI_EX のマニュアルでは、general user commands for drawing carbocycles と呼んでいます。

3.3 その他のタイプ II 命令

`¥cyclohexanev` や `¥cyclohexaneh` と同じ書式をもつ命令には,

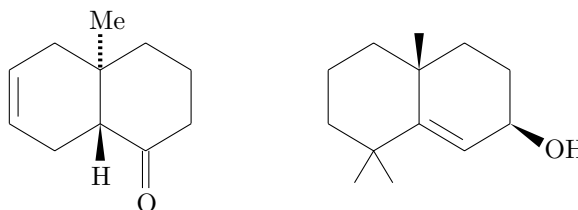
シクロペンタンを描くための	<code>¥cyclopentanev</code>	および	<code>¥cyclopentaneh</code> ,
	<code>¥cyclopentanevi</code>	および	<code>¥cyclopentanehi</code> ,
シクロブタンを描くための	<code>¥cyclobutane</code> ,		
シクロプロパンを描くための	<code>¥cyclopropane</code> ,		
インダンを描くための	<code>¥indanev</code>	および	<code>¥indaneh</code> ,
	<code>¥indanevi</code>	および	<code>¥indanehi</code> ,
デカリンを描くための	<code>¥decalinev</code>	および	<code>¥decalineh</code> ,
ヒドロアントラセンを描くための	<code>¥hanthracenev</code>		
ヒドロフェナントレンを描くための	<code>¥hphenanthrenev</code>		
ステロイドを描くための	<code>¥steroid</code>	および	<code>¥steroidchain</code>

などがあります. オプション引数 `BONDLIST` および引数 `SUBSLIST` をもつ書式を取ります. それぞれの置換位置の番号などは, \LaTeX 付属のマニュアルをご覧ください.

デカリン誘導体では, 縮合位 (橋頭位) の置換基の指定が行えるようになっています. この場合, 位置番号として, 9 および 10 を使います. 通常的位置は 1-8 の数字を使います.

```
¥decalinev [g] {4D==0; {10}A==Me; 9B==H}
¥decalinev [d] {3B==OH; 5Sa==; 5Sb==; {10}B==}
```

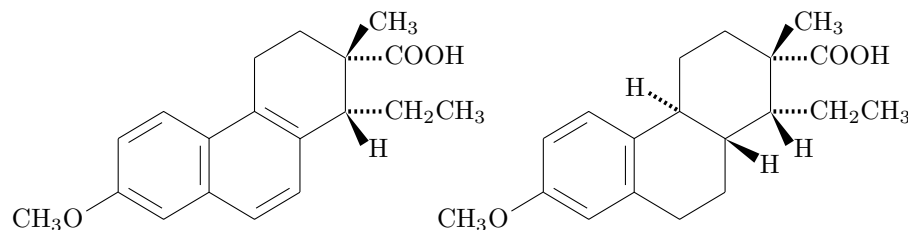
と入力すると, 次のような出力が得られます.



ヒドロフェナントレンを描くための命令 `¥hphenanthrenev` を用いて, `doisynoestrol` および `doisynolic acid` (A series) の構造式を描いてみます.

```
¥hphenanthrenev [olpig] {1SB==H; 1SA==CH$_2$CH$_3$;%
  2SA==COOH; 2SB==CH$_3$; 7==CH$_3$O}¥quad¥quad
¥hphenanthrenev [pig] {1SB==H; 1SA==CH$_2$CH$_3$;%
  2SA==COOH; 2SB==CH$_3$; 7==CH$_3$O; {{11}FA}==H; {{11}GB}==H}¥¥
```

と入力すると, 次のような出力が得られます.



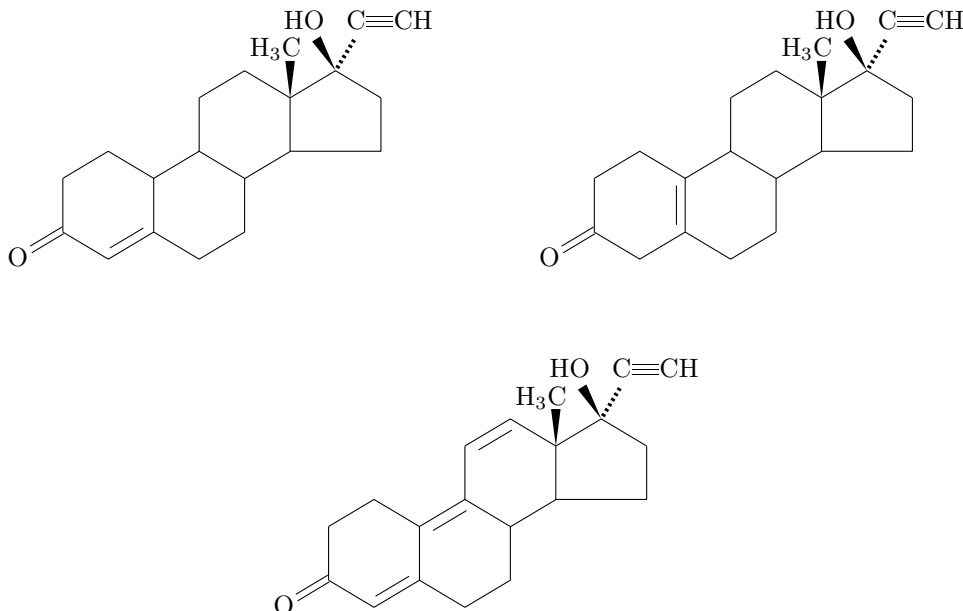
この場合も、縮合位 (橋頭位) の置換基の指定が行えるようになっています。位置番号として、 $\{11\}F$, $\{11\}G$, $\{12\}F$, $\{12\}G$ を使います。通常的位置は 1-10 の数字を使います。この例のように、SUBSLIST が長くなるときには、行末に % を使い改行します。

ステロイドを描く命令 $\%steroid$ も同様に使います。 $\%steroid$ 命令のオプション引数 BONDLIST には、アルファベット a-t を指定します。各文字がどの結合に対応しているかを知りたいときは、 \LaTeX 付属のマニュアルを参照してください。

次の例は、オプションの BONDLIST の指定をいろいろに変えたものです。norethindorone, norethynodrel, norgestrienone の構造式を順次描きます。三重結合を描くための $\%triplebond$ の定義を拙著から引用して使います。

```
% %triplebond の定義
% chemist.sty (藤田眞作著, 化学者・生化学者のための LaTeX,
% 東京化学同人 (1993) より引用
\def%triplebond{\leavevmode\kern.2pt\raisebox{.2ex}{\hbox{\vbox{%
\hrule height.03ex width1em\kern.4ex
\hrule height.03ex width1em\kern.4ex
\hrule height.03ex width1em}}}\hskip.4pt}
%ethynyl 基を box0 に保存する
\setbox0=\hbox{C%triplebond{}}CH}
%norethindorone, norethynodrel, norgestrienone の描画
%steroid[d]{3D==0;{\13}B==\lmoiety{H$_3$C};{\17}SB==H0;%
{\17}SA==\copy0}\quad\quad
%steroid[k]{3D==0;{\13}B==\lmoiety{H$_3$C};{\17}SB==H0;%
{\17}SA==\copy0}\quad
%steroid[dim]{3D==0;{\13}B==\lmoiety{H$_3$C};{\17}SB==H0;%
{\17}SA==\copy0}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。



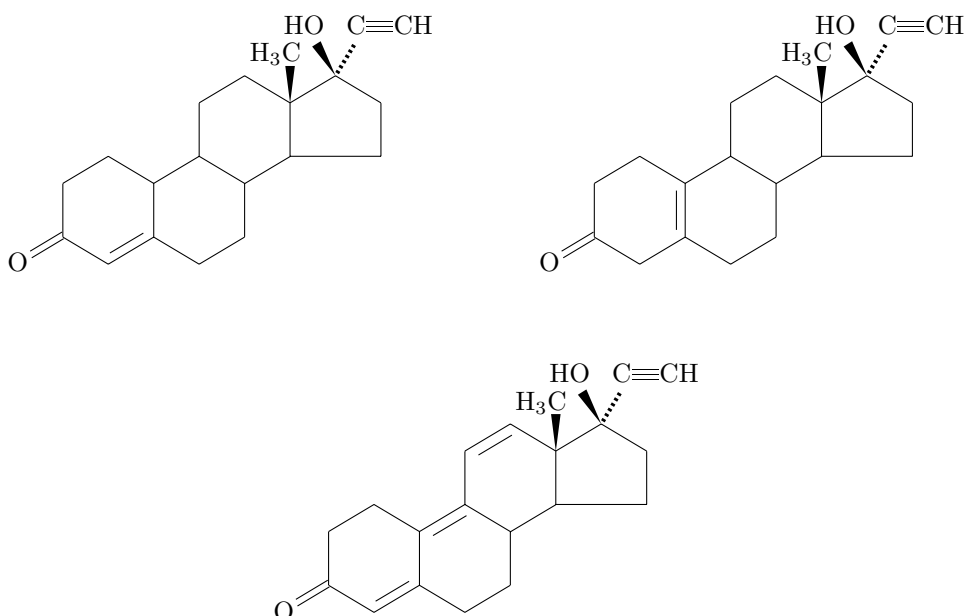
この例では、やや特殊ですが有用なテクニックを使っていますので、これについて説明しましょう。上記の化合物では、 $C\equiv CH$ を置換基として指定しています。この例では、 $C\equiv CH$ の出力に $\%triplebond$ というマクロを使っていますが、このようなマクロを直接 SUBSLIST の中に書き込むとエラーになることがあります。このような場合は、 $\%setbox$ 命令 ($T_{E}X$ プリミティブ命令ですので、詳しくは、 $T_{E}Xbook$ を参照して

ください) を使って, $C\equiv CH$ の組版の結果を, 一時的に`%box0` に保管しておきます. これを, BONDLIST の中で, `%copy0` (一度だけのときは`%box0` でも可) を指定して利用します.

エチニル基を`%def%ethynyl{\mbox{C\triplebond}{CH}}`のように命令としておく手もあります. 同じ化合物をこのテクニックで描いてみましょう.

```
%エチニル基の定義
%def%ethynyl{\mbox{C\triplebond}{CH}}
%norethindorone, norethynodrel, norgestrienone の描画
%steroid[d]{3D==0;{{13}B}==\lmoiety{H$_3$C};{{17}SB}==HO;%
  {{17}SA}==%ethynyl}%quad%quad
%steroid[k]{3D==0;{{13}B}==\lmoiety{H$_3$C};{{17}SB}==HO;%
  {{17}SA}==%ethynyl}%¥¥
%steroid[dim]{3D==0;{{13}B}==\lmoiety{H$_3$C};{{17}SB}==HO;%
  {{17}SA}==%ethynyl}
```

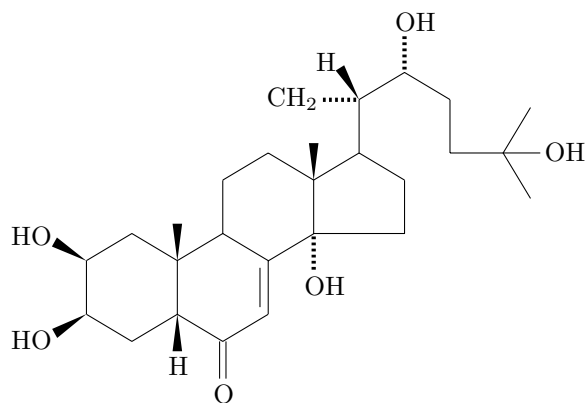
と入力すると, 次のような出力が得られます.



昆虫ホルモンの一種である α -ecdysone の構造は, `%steroidchain` 命令を使って描きます. 複雑な構造式ですが, 次のように SUBSLIST に置換位置と置換基を列挙してゆくだけです.

```
%steroidchain[g]{2B==HO;3B==HO;{{10}B}==;5B==H;6D==0;{{13}B}==;%
  {{14}A}==OH;{{20}SA}==CH$_2$;{{20}SB}==H;{{22}A}==OH;{{25}}==OH}
```

と入力すると, 次のような出力が得られます.



第4章 置換基の位置の微調整

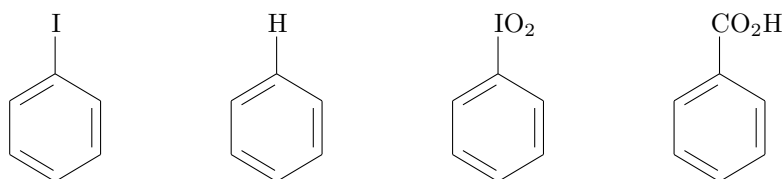
置換基の出力位置は、多くの場合に適合するように、最大公約的なものを選んでいきますので、場合によっては、調整する必要があります。本章では、この調整法を説明します。

4.1 水平位置の微調整

置換基の出力位置は、置換基として指定した文字列の最初の文字が取得できる場合には、取得した文字の中央に結合が来るようにしてあります。たとえば、

```
%bzdrrv{1==I}
%bzdrrv{1==H}
%bzdrrv{1==IO$_{2}$}
%bzdrrv{1==CO$_{2}$H}
```

と入力しますと、出力は、次のようになります。

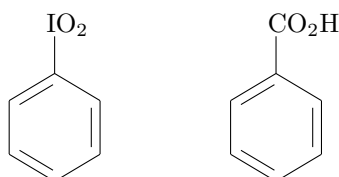


一番目と二番目の出力でわかるように、文字 I と文字 H は文字幅が異なりますが、どちらも一文字ですから、文字として認識されるので、文字の中心線に結合がきています。三番目と四番目は、置換基が文字列の例です。最初の文字 I と C が取得できるので、どちらも最初の文字の中心線に結合が来ています。

ところが、`iodylbenzene` を描く際に、置換基を `%def%iodyl{IO$_{2}$}` のようにマクロとして記述した場合は、最初の文字が取得できないため、上記の自動調整の機構が働きません。このような場合には、C、N、O などよく現れる文字の幅に適合するように決めてあります。したがって、文字によっては、文字の中心線よりのずれが目立つことがあります。たとえば、

```
%def%iodyl{IO$_{2}$}
%def%carboxyl{CO$_{2}$H}
%bzdrrv{1==%iodyl}
%bzdrrv{1==%carboxyl}
```

と入力しますと、出力は、次のようになります。

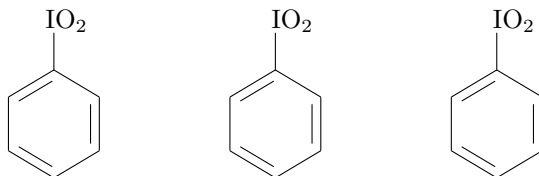


一番目では、文字 I の中心線と結合が微妙にずれていることがわかりす。二番目は、自動調整の機能なしでも文字 C の中心に来ています。

次の例は、iodylbenzene のヨウ素の位置を、微調整したものです。

```
%bzdrrv{1==%iodyl}
%bzdrrv{1==%hbox{%kern0.16em %iodyl}}
%bzdrrv{1==%kern0.16em%iodyl}
```

と入力しますと、出力は、次のようになります。

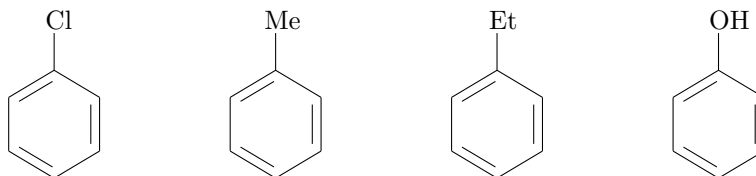


左端の出力が、調整なしのもので、左側にずれていることがわかります。第一の調整法 (出力は二番目のもの) は、`%hbox` と `%kern` によるものです。これらは \TeX のプリミティブ命令です。`%kern` を `%hbox` の中で使うと水平方向に空白をあけて移動します。この場合は、`0.16em` (`em` は寸法の単位) だけ右へずらして印刷します。`%kern` に設定する寸法は、試行錯誤で求めたものです。厳密には文字の長さを測って決めるのがよいのですが、試行錯誤によるのも現実的な手段です。三番目は、`%hbox` を省略したものです。この場合は、省略してもうまくゆきます。

`Cl` のように元素記号が 2 文字のときは、一文字目の中心に結合が来るようになっています。置換基を略号であらわすときも同様の仕様で出力されます。たとえば、

```
%bzdrrv{1==Cl}
%bzdrrv{1==Me}
%bzdrrv{1==Et}
%bzdrrv{1==OH}
```

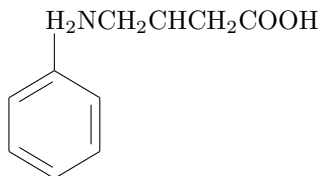
と入力しますと、出力は、次のようになります。



長い置換基の中途の原子のところで結合させたいことがあります。この位置調整に第一の方法を応用してみます。たとえば、 $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CHCH}_2\text{COOH}$ という基の `CH` のところでベンゼン環に結合させたいとしましょう。普通に、

```
%bzdrrv{1==H$_2$NCH$_2$CHCH$_2$COOH}
```

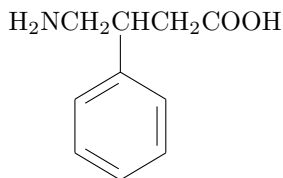
と入力すると、次のように出力されてしまいます。



これを望み通り出力させるには,

```
¥bzdrrv{1==¥hbox{¥kern-39pt H$_2$NCH$_2$CHCH$_2$COOH}}
```

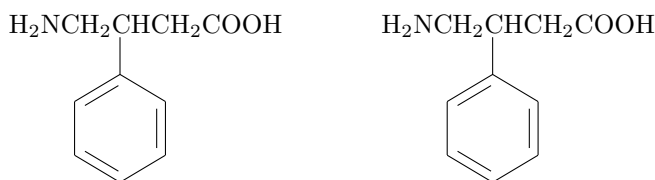
と入力します. 出力は, 次の通りです. この場合は, ¥kern に負の値を設定していますので, 39pt だけ左へ戻って重ね書きをすることになります.



¥llap および同等の機能を用いる別の方法を, 次に示します.

```
¥bzdrrv{1==¥llap{H$_2$NCH$_2$CHCH$_2$COOH} ¥hskip2cm}
¥bzdrrv{1==¥hbox to0pt{¥hss H$_2$NCH$_2$CHCH$_2$COOH}}
```

と入力します. 出力は, 次の通りです. なお, ¥hskip は後続の寸法だけ水平方向にアキをとります.

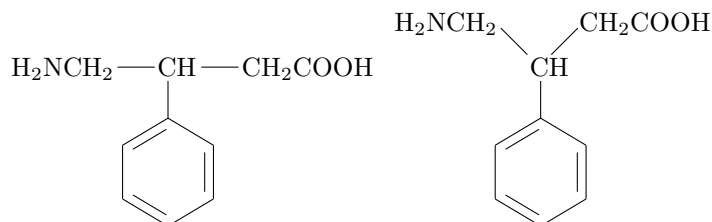


これらの方法では, 具体的な寸法を指定していないことに注意してください. ¥hbox to0pt は, 幅 0pt (幅無し) の箱を用意して, その中に指定した式を出力する命令です. 箱の中に収めるために, ¥hss (TEX プリミティブ命令の一つ) を使います. この命令は, 無限の伸縮する空白を取るためのもので, 幅無しの箱と組み合わせて使います. ¥llap は, 同等の機能をもつマクロです. ¥hss の効果についてはやや難しいので, 興味のある方は, TEXbook を参照してください.

X_YMI_YTEX バージョン 2.00 以降は, (yl) 機能によって, 構造式の入れ子ができるようになっています. この機能を使って, 同じ化合物を描いた例を次に示します. ただし, 描画した構造式には, 置換基中央の CH から結合が出ることとなります.

```
¥bzdrrv{1==¥tetrahedral{3==(yl);0==CH;2==H$_2$NCH$_2$;%
4==CH$_2$COOH}} ¥hskip2cm
¥bzdrrv{1==¥utrigonal{1==(yl);0==CH;3==H$_2$NCH$_2$;%
2==CH$_2$COOH}}
```

と入力します. 出力は, 次の通りです.

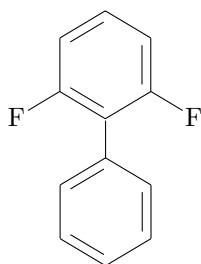


4.2 垂直位置の微調整

X^YTeX のマクロで作った構造式断片を、さらに他のマクロ命令の置換基として用いたいことがあります。この時には、`\setbox0` 命令を用いるのがよいでしょう。次の例では、ベンゼン環をさらにベンゼン環に置換しています。

```
\setbox0=\hbox{\kern-37pt\bzdrv{3==F;5==F}}
\bzdrv{1==\lower25pt\box0}
```

と入力しますと、出力は、次のようになります。

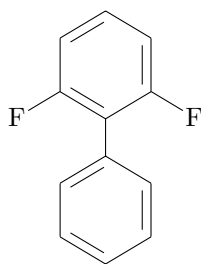


水平方向の位置調整には、上と同じく、`\hbox` 内で `\kern` を利用しています。垂直方向の位置調整には、`\lower` を使っています。これらの調整に使った命令は、いずれも TeX のプリミティブ命令です。`\kern` や `\lower` の寸法は、X^YTeX の内部命令などをきちんとみれば、厳密に計算することができます。しかし、この例のように、試行錯誤で決めたほうが簡単です。

X^YTeX バージョン 2.00 以降は、`(y1)` 機能によって置換基を入れ子にすることができる方法を利用することができます。同じ化合物を、この方法で描くには、

```
\bzdrv{1==\bzdrv{4==(y1);3==F;5==F}}
```

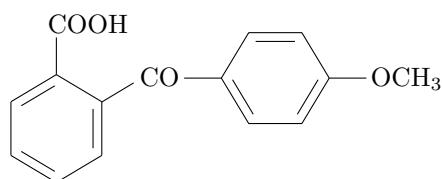
と入力します。出力は次のようになります。入れ子にした `\bzdrv{4==(y1);3==F;5==F}` は、置換基を作るための方法を例示しています。ベンゼン環の 4 の位置で `(y1)` 機能を使っていますので、ここで母核のベンゼン環に結合します。この方法では、位置調整のための数値は一切使っていません。



もう一つ例をあげておきます。次の例では、すでに内部処理で `\box0` が使用されているため、出力がおかしくなります。このため、代わりに `\box4` を使って一時保管を行っています。状況によっては、このようなことが起こることがありますので、そのときは `\box0` - `\box9` の中から空きの箱を選んでください。

```
\setbox4=\hbox{\kern8pt\bzdrh{1==CO;4==OCH$_3$}}
\bzdrv{1==COOH;2==\lower37pt\box4}
```

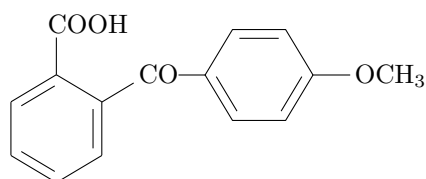
と入力しますと、出力は、次のようになります。



X_YTeX バージョン 2.00 以降は、(yl) 機能によって置換基を入れ子にすることができま
す。同じ化合物を、この方法で描くには、

```
¥bzdrv{1==COOH;2==¥ry1(5==CO){4==¥bzdrh{1==(yl);4==OCH$_{3}$}}
```

と入力します。出力は次のようになります。この方法では、位置調整のための数値は一切使っていません。

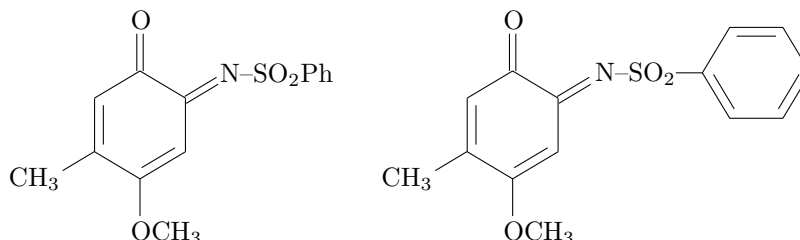


なお、¥ry1 命令は、置換基を簡単なユニット (ここでは CO) を介して右勝手に結合させる機能をもってい
ます。丸括弧内の口カント番号は、左側の結合手の方向を示します。

¥ry1 命令は、使い道の多い命令です。たとえば、*o*-スルホンアミド誘導体を描いた例を次に示します。

```
¥bzdrv[o]{1D==0;2D==N--SO$_{2}$Ph;4==OCH$_{3}$;5==CH$_{3}$} ¥hskip2cm
¥bzdrv[o]{1D==0;2D==¥ry1(5==N--SO$_{2}$){4==¥bzdrh{1==(yl)}};4==OCH$_{3}$;5==CH$_{3}$}
```

と入力すると、次のような出力が得られます。

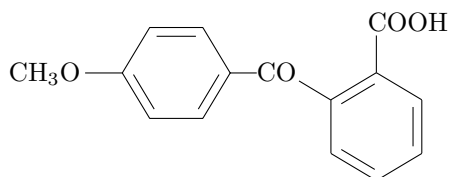


一番目は、(yl) 機能を使わずに、フェニル基を Ph であらわした例です。二番目は、(yl) 機能と¥ry1 命令を
用いて、N-SO₂ を仲介する形に改めたものです。Ph とせず、6 員環の形で出力することができます。

なお、¥ry1 命令に対して、¥ly1 命令があり、置換基を簡単なユニットを介して逆向きに (左勝手に) 結
合させる機能をもっています。丸括弧内の口カント番号は、今度は、右側の結合手の方向を示します。上の
化合物を左勝手に描くには、

```
¥bzdrv{1==COOH;6==¥ly1(5==CO){4==¥bzdrh{4==(yl);1==CH$_{3}$0}}
```

と入力します。出力は次のようになります。ここでも、位置調整のための数値は一切使っていません。



第5章 ピリジン誘導体を描く

この章ではヘテロ芳香環の代表として、ピリジン誘導体を描く命令を説明します。

5.1 縦型のピリジン

ピリジン誘導体を描く命令は、次の通りです。すでに前章までで、BONDLIST と SUBSLIST については説明しましたが、ピリジン誘導体の命令でも指定の仕方は同様です。

```

\pyridinev[BONDLIST]{SUBSLIST}
\pyridinevi[BONDLIST]{SUBSLIST}

```

オプション引数のない場合は、ピリジン母核 (二重結合が交互に共役したもの) が印刷されます。この形の引数を取る \LaTeX 命令をタイプ III と呼ぶことにします¹。語尾の *v* は、縦型の組版を行う命令であることを示します。さらに、*i* は天地が逆の縦型の構造式を出力することを示します。

これらの命令は、パッケージファイル `hetaromh.sty` に格納されていますので、これを `\usepackage` の引数として指定しておく必要があります。

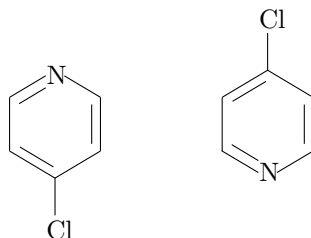
簡単なピリジン誘導体を天地を逆にした形で出力してみましょう。

```

\pyridinev{4==Cl}
\pyridinevi{4==Cl}

```

と入力すると、次のように出力されます。



置換位置の番号は天地が逆になっても、窒素原子が 1 となっています。これは、IUPAC 命名に従うようにしたのですが、命令を使い回すときに便利です。上の例では、単に語尾の *i* を付けるかどうかの違いで、同じピリジン誘導体を天地を逆に出力できるわけです。

オプション引数 BONDLIST は、環内の二重結合を指定するものです。たとえば、

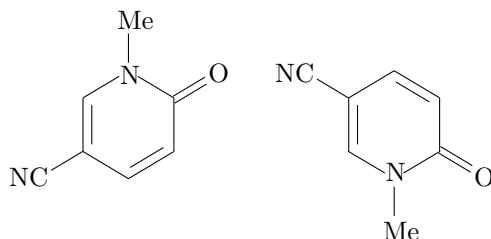
```

\pyridinev[ce]{2D==0;1==Me;5==NC}\quad
\pyridinevi[ce]{2D==0;1==Me;5==NC}

```

と入力すると、次のように出力されます。

¹ \LaTeX のマニュアルでは、specified user commands for drawing heterocycles あるいは short-cut commands for drawing heterocycles と呼んでいます。



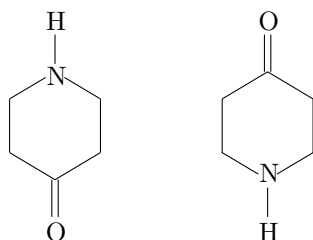
一方、完全な飽和ヘテロ環を出力したいときは、次のいずれかの指定をします。

```

%pyridinev[] {4D==0;1==H}
%pyridinevi[H] {4D==0;1==H}

```

と入力すると、次のように出力されます。



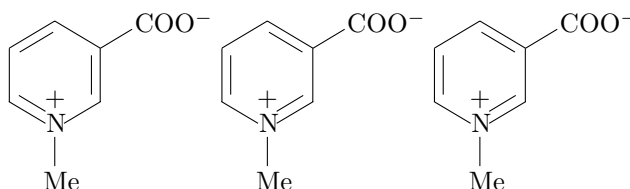
BONDLIST には、窒素上の電荷の指示{1+}などを含めることができます。この指示を行うと、標準のピリジン環二重結合の指示が消えてしまいますので、改めて、[r], [l] などの指定を行う必要があります。

```

%pyridinevi[r{1+}]{1==Me;3==C00$^{-}$}
%pyridinevi[l{1+}]{1==Me;3==C00$^{-}$}
%pyridinevi[ace{1+}]{1==Me;3==C00$^{-}$}

```

と入力すると、次のように出力されます。



5.2 横型のピリジン

ピリジン誘導体を寝た形に描く命令は、次の通りです。語尾の h は、横型の組版を行う命令であることを示します。さらに、i は左右が逆の横型の構造式を出力することを示します。

```

%pyridineh[BONDLIST]{SUBSLIST}
%pyridinehi[BONDLIST]{SUBSLIST}

```

これらの命令は、パッケージファイル hetaromh.sty に格納されていますので、これを%usepackage の引数として指定しておく必要があります。

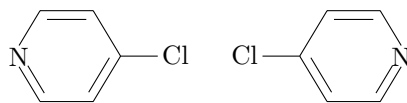
前節の最初の例を横型で描くには、次のように入力します。

```

%pyridineh{4==Cl}%quad
%pyridinehi{4==Cl}

```


この入力によって、次のよう出力されます。



5.3 6員環の含窒素ヘテロ環を描くためのタイプ III の命令

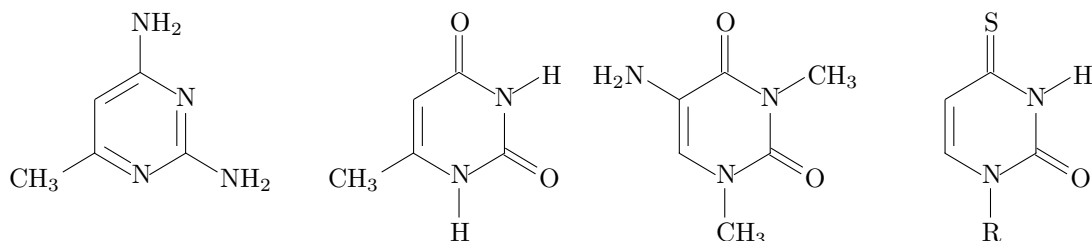
複数個の窒素原子を含んだ 6 員環ヘテロ芳香環を描く命令もあります。次のリストに代表的なものを集めました。前節の命令と同様に、BONDLIST, SUBSLIST で詳細を指定します。語尾の v, vi, h, hi による区別は、これまでの説明と同様です。

ピラジンを描くための	pyrazinev,	pyrazineh,
ピリミジンを描くための	pyrimidinev,	pyrimidineh,
	pyrimidinevi,	pyrimidinehi,
ピリダジンを描くための	pyridazinev,	pyridazineh,
	pyridazinevi,	pyridazinehi,
トリアジンを描くための	triazinev,	triazineh,
	triazinevi,	triazinehi,

これらの命令は、環内の窒素原子と骨格を固定したものであることに注意してください。環内の二重結合と置換基は自由に指定することができます。¥pyrimidine 命令の例を示します。

```
¥pyrimidinevi{6==CH$_3$;2==NH$_2$;4==NH$_2$}¥qqquad¥qqquad
¥pyrimidinevi[e]{1==H;3==H;6==CH$_3$;2D==0;4D==0}¥qqquad
¥pyrimidinevi[e]{3==CH$_3$;1==CH$_3$;5==H$_2$N;2D==0;4D==0}¥qqquad
¥pyrimidinevi[e]{1==R;3==H;2D==0;4D==S}
```

と入力すると、次のよう出力されます。

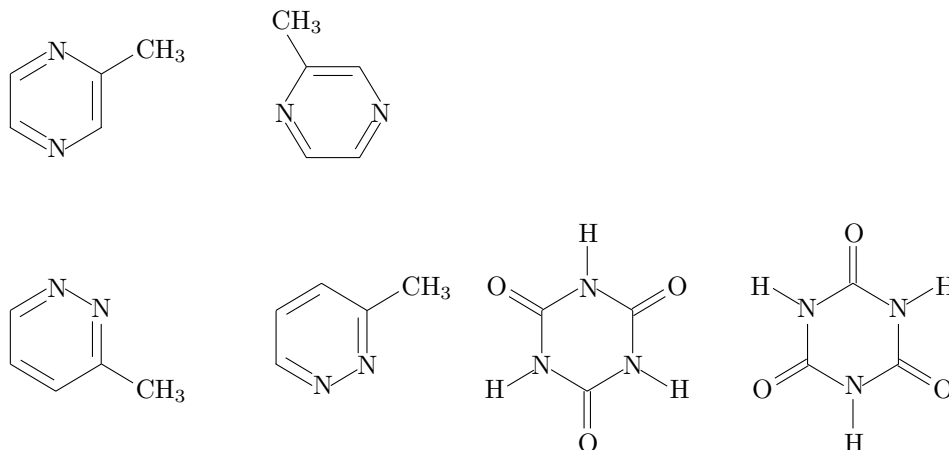


¥pyrimidinevi 命令を用いる限り、環内の窒素原子は、ここで示した位置に固定です。他の場所に出力したいときは、もう少し一般的な命令を使います。これについては、次章で説明します。

さらに単環の例をあげておきましょう。横型のものも同様に使うことができます。

```
¥pyrazinev{2==CH$_3$}¥qqquad
¥pyrazineh{2==CH$_3$}¥¥
¥pyridazinev{3==CH$_3$}¥qqquad
¥pyridazinevi{3==CH$_3$}¥qqquad
¥triazinev[] {2D==0;4D==0;6D==0;1==H;3==H;5==H}¥qqquad
¥triazinevi[] {2D==0;4D==0;6D==0;1==H;3==H;5==H}¥¥
```

と入力すると、次のよう出力されます。



5.4 5員環の含窒素ヘテロ環を描くためのタイプ III の命令

窒素を含む 5 員環のヘテロ環はよく出てきますので、これらを描くためのタイプ III の命令を作成してあります。前節の命令と同様に、BONDLIST、SUBSLIST で詳細を指定します。語尾の v, vi, h, hi による区別は、これまでの説明と同様です。

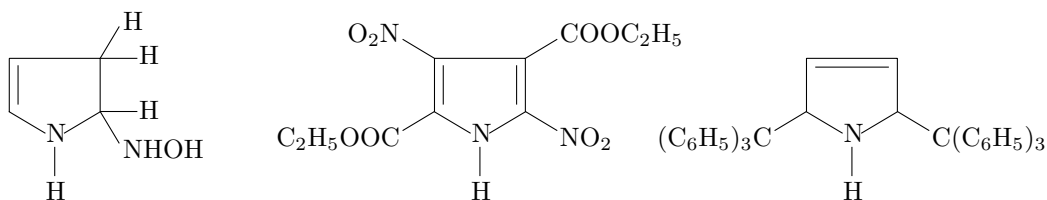
ピロールを描くための	pyrrolev,	pyrroleh,
	pyrrolevi,	pyrrolehi,
ピラゾールを描くための	pyrazolev,	pyrazoleh,
	pyrazolevi,	pyrazolehi,
イミダゾールを描くための	imidazolev,	imidazoleh,
	imidazolevi,	imidazolehi,
イソキサゾールを描くための	isoxazolev,	isoxazoleh,
	isoxazolevi,	isoxazolehi,
オキサゾールを描くための	oxazolev,	oxazoleh,
	oxazolevi,	oxazolehi,

次に、ピロール誘導体を描いた例をいくつか掲げます。

```

¥pyrrolev[d]{1==H;2Sa==H;2Sb==NHOH;3Sa==H;3Sb==H}¥hskip80pt
¥pyrrolev{1==H;2==NO$_2$;4==O$_2$N;3==COOC$_2$H$_5$;5==C$_2$H$_5$COO}
¥hskip60pt
¥pyrrolev[c]{1==H;2==C(C$_6$H$_5$)$_3$;5==(C$_6$H$_5$)$_3$C}
  
```

と入力すると、次のように出力されます。



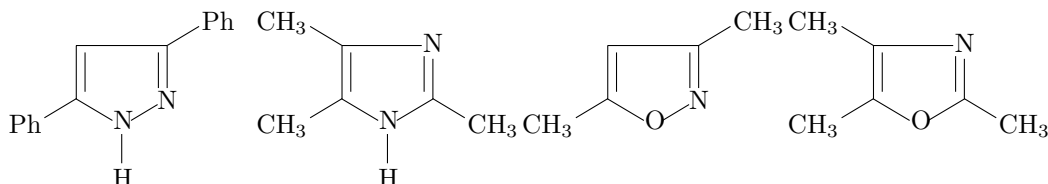
他の命令も同様に使うことができます。ここでは、オプションの BONDLIST を指定していない例をあげるにとどめます。

```

%pyrazolev{1==H;3==Ph;5==Ph}%quad
%imidazolev{1==H;2==CH$_3$;4==CH$_3$;5==CH$_3$}%quad
%isoxazolev{3==CH$_3$;5==CH$_3$}%quad
%oxazolev{2==CH$_3$;4==CH$_3$;5==CH$_3$}

```

と入力すると、次のように出力されます。



そのほか、4員環や3員環のヘテロ環を描くマクロもありますが、この入門では省略します。詳しくは、 $\text{X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ のマニュアルをご覧ください。

5.5 含窒素縮合ヘテロ環を描くためのタイプ III の命令

天然物には、キノリン環やイソキノリン環など、6-6 の縮合環を含む化合物が多く存在します。 $\text{X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ では、これらの縮合環を描くために、次に示すタイプ III 命令を使います。

キノリンを描くための	quinolinev,	quinolineh,
	quinolinevi,	quinolinehi,
イソキノリンを描くための	isoquinolinev,	isoquinolineh,
	isoquinolinevi,	isoquinolinehi,
キノキサリンを描くための	quinoxalinev,	quinoxalineh,
	quinoxalinevi,	quinoxalinehi,
キナゾリンを描くための	quinazolinev,	quinazolineh,
	quinazolinevi,	quinazolinehi,
ヒノリンを描くための	cinnolinev,	cinnolineh,
	cinnolinevi,	cinnolinehi,
プテリジンを描くための	pteridinev,	pteridineh,
	pteridinevi,	pteridinehi,

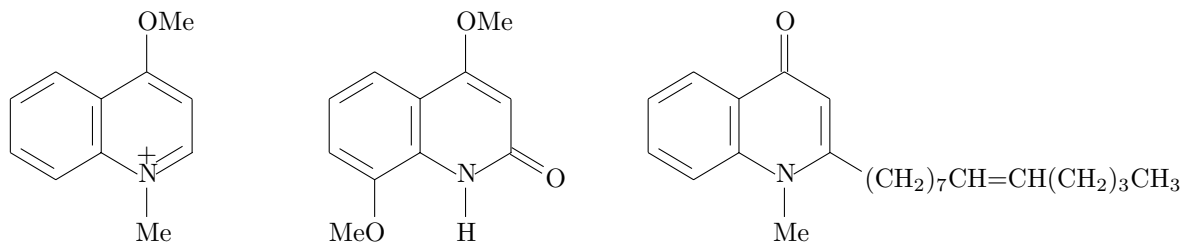
次に示すのは、それぞれ echinorine, edulitine, evocarpine という慣用名で呼ばれている化合物の構造式です。これらは、`%quinolinevi` 命令で描いたものです。

```

%quinolinevi [r{1+}]{1==Me;4==OMe}
%quinolinevi [cfhk]{2D==O;1==H;4==OMe;8==%lmoiety{MeO}}
%quinolinevi [bfhk]{4D==O;1==Me;2==(CH$_2$$_2$)$$_7$CH=CH(CH$_2$$_2$)$$_3$CH$_3$}

```

と入力すると、次のように出力されます。



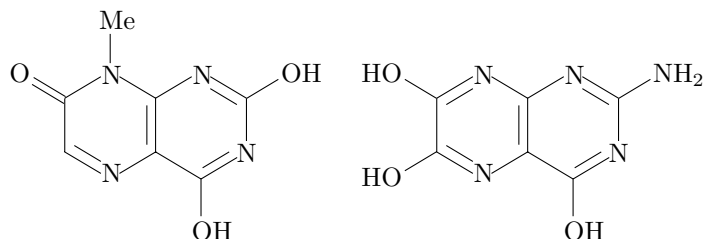
次に示すのは、それぞれ luciopterin, leucopterin という慣用名で呼ばれている化合物の構造式です。これらは、`%pteridinevi` 命令で描いたものです。

```

¥pteridinev[ackf]{4==OH;2==OH;8==Me;7D==0}¥qqquad
¥pteridinev{4==OH;2==NH$_2$;6==HO;7==HO}

```

と入力すると、次のように出力されます。



5-6 の縮合環を含む化合物も多く存在します。X²MI_EX では、これらの縮合環を描くためには、次に示すタイプ III 命令を使います。窒素ヘテロ環だけでなく酸素ヘテロ環の命令も用意してあります。

プリンを描くための	purinev,	purineh,
	purinevi,	purinehi,
インドールを描くための	indolev,	indoleh,
	indolevi,	indolehi,
インドリジンを描くための	indolizinev,	indolizineh,
	indolizinevi,	indolizinehi,
イソインドールを描くための	isoindolev,	isoindoleh,
	isoindolevi,	isoindolehi,
ベンゾフランを描くための	benzofuranev,	benzofuraneh,
	benzofuranevi,	benzofuranehi,
イソベンゾフランを描くための	isobenzofuranev,	isobenzofuraneh,
	isobenzofuranevi,	isobenzofuranehi,
ベンゾキサゾールを描くための	benzoxazolev,	benzoxazoleh,
	benzoxazolevi,	benzoxazolehi,

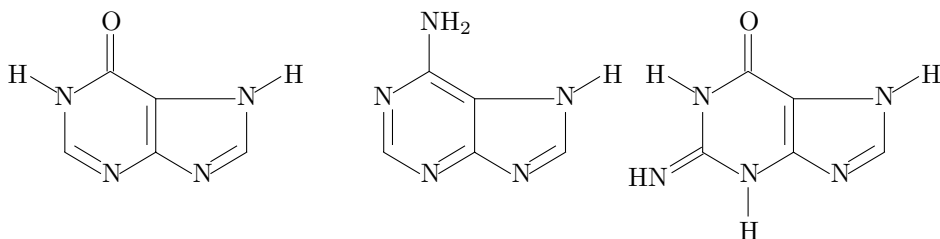
次に示すのは、それぞれ hypoxanthine, adenine, guanine という慣用名で呼ばれている化合物の構造式です。これらは、¥purinev 命令で描いたものです。この命令では、5 員環の下部の窒素の番号が 1 となっており、反時計回りに番号が振られていることに注意してください。

```

¥purinev[agj]{3==H;5==H;4D==0}
¥purinev[adfh]{3==H;4==NH$_2$}
¥purinev[aj]{3==H;4D==0;5==H;6D==HN;7==H}

```

と入力すると、次のように出力されます。



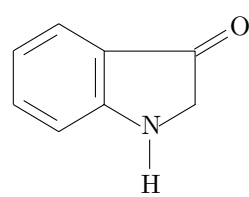
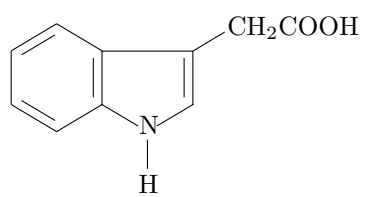
indoleacetic acid および indoxyl の構造式を、¥indolev 命令で描いたものを次に掲げます。

```

¥indolev{1==H;3==CH$_2$COOH}¥hskip4Opt
¥indolev[egj]{1==H;3D==0}

```

と入力すると、次のように出力されます。



第6章 ヘテロ環を描く一般的な方法

¥pyridinev など前章で説明した命令は、環内のヘテロ (窒素) 原子を固定で出力するものです。本章では、もう少し一般的な命令として、BONDLIST, SUBSLIST のほかに、ATOMLIST で環内のヘテロ原子を指定できるものを説明します。

6.1 6員環ヘテロ環を描く

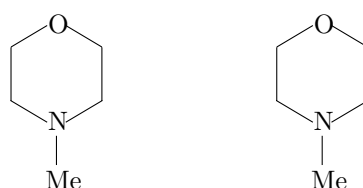
前章のやり方では、すべての環内のヘテロ原子の組み合わせについて一つずつ命令を作る必要がありますので、膨大な数の命令を作らなければなりません。そこで、環内のヘテロ原子を ATOMLIST として指定できる命令を作りました。¥sixheterov と ¥sixheterovi を例にとって、書式を示します。

```
¥sixheterov [BONDLIST] {ATOMLIST} {SUBSLIST}
¥sixheterovi [BONDLIST] {ATOMLIST} {SUBSLIST}
```

この形の引数を取る X_YMT_EX 命令をタイプ IV と呼ぶことにします！ BONDLIST と SUBSLIST については前章までに説明した通りです。ATOMLIST は、環内のヘテロ原子の位置番号と種類を列挙してゆくもので、列挙の仕方は SUBSLIST に準じます。¥sixheterov は、最上段の頂点を 1 として、時計回りに番号を付けます。¥sixheterovi は、最下段の頂点を 1 として、反時計回りに番号を付けます。たとえば、

```
¥sixheterov [] {1==O;4==N}{4==Me}¥qqquad
¥sixheterovi [] {4==O;1==N}{1==Me}
```

と入力すると、次のように同じ構造式が出力されます。ATOMLIST および SUBSLIST の位置番号に注意してください。

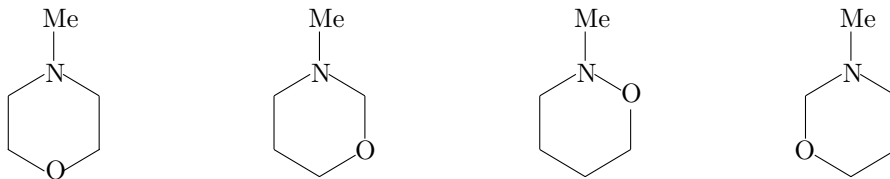


ATOMLIST で指定したヘテロ原子の位置では、頂点を削ってそのヘテロ原子を出力するための余地を作ります。一方、指定されない頂点では接合する結合が交わるようにしなければなりません。このような処理を上記の命令では、自動的に行うようになっています。この処理の実例として、窒素と酸素が環内にあるヘテロ環をいろいろ描いてみましょう。

```
¥sixheterovi [] {1==O;4==N}{4==Me}¥qqquad
¥sixheterovi [] {2==O;4==N}{4==Me}¥qqquad
¥sixheterovi [] {3==O;4==N}{4==Me}¥qqquad
¥sixheterovi [] {6==O;4==N}{4==Me}¥qqquad
```

と入力すると、次のよう出力されます。

¹X_YMT_EX のマニュアルでは、general user commands for drawing heterocycles と呼んでいます。



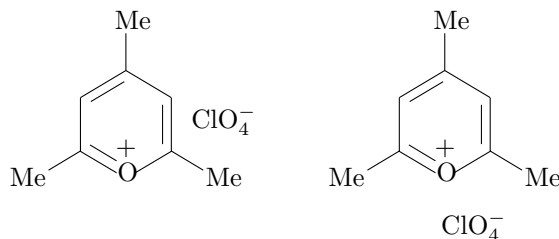
次に示す二つ例では、ピリリニウム塩の対イオンの印刷に多少凝ったことをしています。いずれの場合も O^+ と ClO_4^- は同じ箱の中に置かれています。¥raise, ¥lower, ¥kern などの TeX プリミティブ命令で出力位置の調整を行っています。

```

¥sixheterovi[r{1+}]%
  {1==¥hbox{0¥raise20pt¥hbox{¥kern20pt ClO$_{4}^{-}$}}}%
  {2==Me;4==Me;6==Me}¥qqquad¥qqquad
¥sixheterovi[r{1+}]%
  {1==¥hbox{0¥lower20pt¥hbox{¥kern-0.6em ClO$_{4}^{-}$}}}%
  {2==Me;4==Me;6==Me}

```

と入力すると、次のように出力されます。



次の二つの例では、ピリジン N-オキシドの二つの指定の仕方を比較してください。正電荷の印刷するのに、一つは、BONDLIST の指定によっていますが、もう一つは、N の上ツキとして出力しています。また、この二つ例のの環内窒素は、タイプ III の ¥pyridinev 命令などでは描けないことにも注意してください。

```

¥sixheterovi[r{2+}]{2==N}{2==O$^{-}}¥qqquad
¥sixheterovi[bdf]{2==N$^{+}}{2==O$^{-}}

```

と入力すると、次のように出力されます。



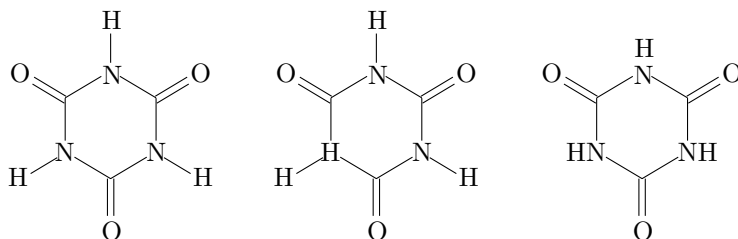
環内の窒素に水素原子が置換している化合物を通常の方法で描きますと、N—H のように結合手を介して出力されます。これを NH のように結合抜きで描くこともよく行われます。

```

¥triazinev[] {2D==0;4D==0;6D==0;1==H;3==H;5==H}¥qqquad
¥sixheterovv[] {1==N;3==N;5==H}{2D==0;4D==0;6D==0;1==H;3==H;5==H}¥qqquad
¥sixheterov[] {1==¥hbox{N¥kern-0.65em¥raise11pt¥hbox{H}};3==NH;5==HN}%
  {2D==0;4D==0;6D==0}

```

と入力すると、次のように出力されます。右側の二つは、タイプ III と IV の命令の標準的な出力です。三番目が、結合抜きの構造式です。この方法は、ピリリニウム塩の対イオンの印刷と同じです。



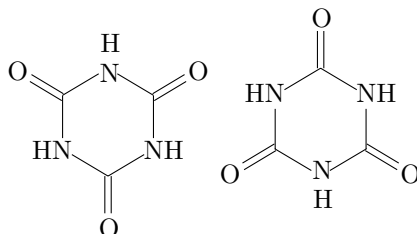
このような描き方は、比較的よく行われますので、次のようにマクロにしておくといいでしょう。

```

\def\upnobond#1#2{\hbox{#1\kern-0.72em\raise10pt\hbox{#2}}}
\def\downnobond#1#2{\hbox{#1\kern-0.72em\lower10pt\hbox{#2}}}
\sisxheterov [] {1==\upnobond{N}{H};3==NH;5==HN}%
{2D==0;4D==0;6D==0}
\sisxheterovi [] {1==\downnobond{N}{H};3==NH;5==HN}%
{2D==0;4D==0;6D==0}

```

と入力すると、次のように出力されます。



横型の構造式を描くタイプ IV 命令として、`\sisxheteroh` および `\sisxheterohi` があります。この使い方も同様ですので、本入門では、説明を省きます。

6.2 5員環ヘテロ環を描く

縦型の5員環ヘテロ環を描くためのタイプ IV 命令は、`\fiveheterov` と `\fiveheterovi` です。この書式を示します。

```

\fiveheterov [BONDLIST] {ATOMLIST} {SUBSLIST}
\fiveheterovi [BONDLIST] {ATOMLIST} {SUBSLIST}

```

横型の5員環は、`\fiveheteroh` および `\fiveheterohi` で、描くことができます。書式は同様です。

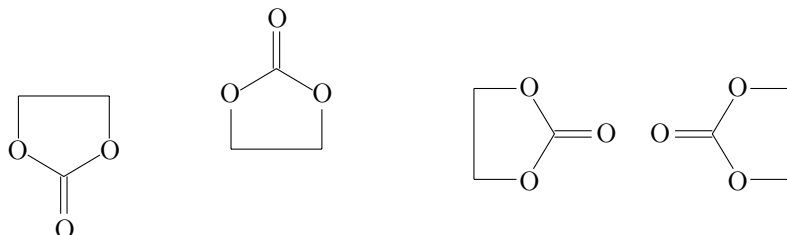
引数を同じに指定して、これらの命令を使ってみましょう。次の例は、ethylene carbonate を描いたものです。

```

\fiveheterov {2==0;5==0}{1D==0}
\fiveheterovi {2==0;5==0}{1D==0}
\fiveheteroh {2==0;5==0}{1D==0}\quad
\fiveheterohi {2==0;5==0}{1D==0}

```

と入力すると、次のように出力されます。



この例でわかるように、位置番号を相対的に同じ並びにしていますので、引数の指定が同じでよく、命令を流用するとき便利です。

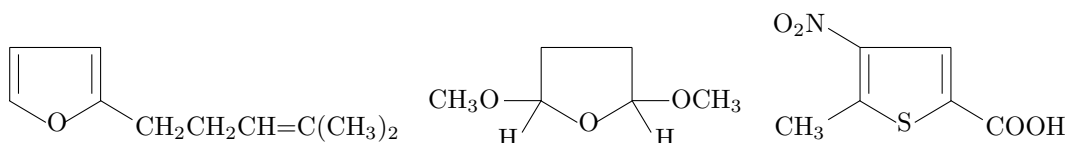
次に、フランおよびチオフェンの誘導体を描いてみましょう。BONDLIST, ATOMLIST, SUBSLIST を順に指定してゆきます。BONDLIST はオプションですので、省略可能です。省略時には、環内の二重結合は出力されないようになっています。

```

%fiveheterov [bd] {1==0}{2==CH$_2$CH$_2$CH=C(CH$_3$)$_2$} \hspace{120pt}
%fiveheterov {1==0}{2Sa==OCH$_3$; 2Sb==H; 5Sa==CH$_3$; 5Sb==H} \quad \quad \quad
%fiveheterov [bd] {1==S}{2==COOH; 4==O$_2$N; 5==CH$_3$}

```

と入力すると、次のように出力されます。



6.3 6-6 縮合ヘテロ環を描く

6員環と6員環が縮合したヘテロ環を縦型で描くためのタイプIV命令は、`%decaheterov`と`%decaheterovi`です。この書式を示します。

```

%decaheterov [BONDLIST] {ATOMLIST} {SUBSLIST}
%decaheterovi [BONDLIST] {ATOMLIST} {SUBSLIST}

```

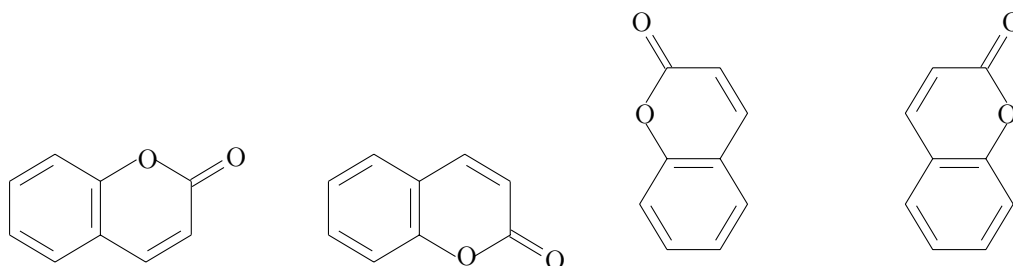
横型の6-6縮合環は、`%decaheteroh`および`%decaheterohi`で、描くことができます。書式は同様です。クマリン coumarin を、これらの命令で描いてみましょう。

```

%decaheterov [cfhk] {1==0}{2D==0}
%decaheterovi [cfhk] {1==0}{2D==0} \hspace{-20pt}
%decaheteroh [cfhk] {1==0}{2D==0} \hspace{-20pt}
%decaheterohi [cfhk] {1==0}{2D==0}

```

と入力すると、次のように出力されます。



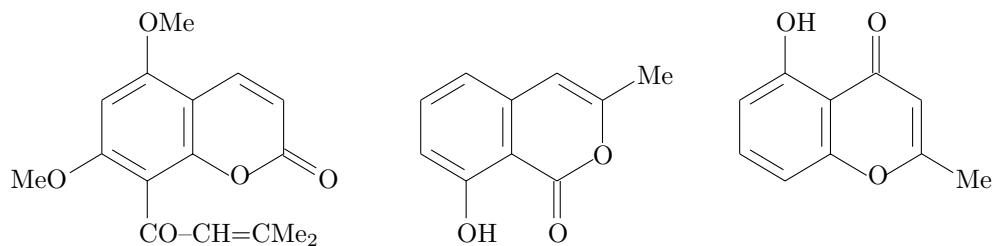
天然物の glabra-lactone, 8-hydroxy-3-methylisocoumarin, 5-hydroxy-2-methylchromone を描いてみます。

```

%decaheterovi [cfhk] {1==0}{2D==0; 5==OMe; 7==Me; 8==CO--CH=CMe$_2$}
%decaheterovi [cfhk] {2==0}{1D==0; 3==Me; 8==OH}
%decaheterovi [bfhk] {1==0}{4D==0; 2==Me; 5==OH}

```

と入力すると、次のように出力されます。



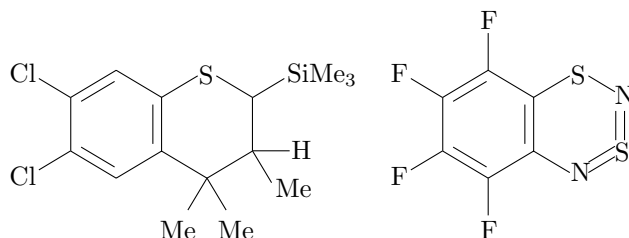
イオウを含むヘテロ環を描いてみます。オプションの BONDLIST は、各結合を独立に指定できますので、環内に四価のイオウを含む化合物も描くことができます。

```

%decaheterov [fhk] {1==S}{2==SiMe$_3$;3Sa==H;3Sb==Me;4Sa==Me;%
4Sb==Me;6==Cl;7==Cl}%quad
%decaheterov [fhkbc] {1==S;2==N;3==S;4==N}{5==F;6==F;7==F;8==F}

```

と入力すると、次のように出力されます。



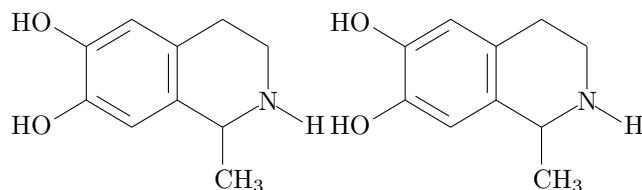
窒素を含む場合は、タイプ III の命令で代用できますことあります。次の例は、同じ化合物を%decaheterovi (タイプ IV) と%isoquinolinevi (タイプ III) で描いたものです。

```

%decaheterovi [fhk] {2==N}{6==HO;7==HO;1==CH$_3$;2==H}
%isoquinolinevi [fhk] {6==HO;7==HO;1==CH$_3$;2==H}

```

と入力すると、次のように出力されます。



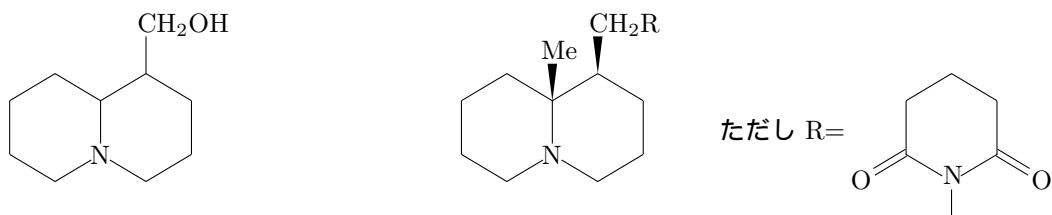
橋頭位にヘテロ原子をもつ化合物も、同様に指定することができます。橋頭位には、番号 9 および 10 が割り当てられています。たとえば、キノリチジンアルカロイド lupinine および (+)-Lamprolobine は、

```

%decaheterov [] {9==N}{1==CH$_2$OH} %\hskip50pt
%decaheterov [] {9==N}{1B==CH$_2$R;{{10}B}==Me}
%raisebox{40pt}{ただし R=}%sixheterovi [] {1==N}{2D==O;6D==O;1==}

```

と入力すると、次のように出力されます。

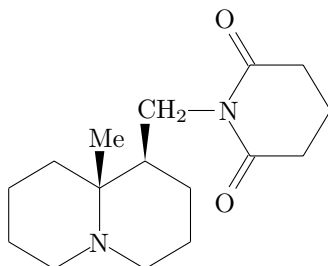


後の例では、橋頭位に β -置換基 Me をもっていることに注意してください。これは、SUBSLIST 中の $\{\{10\}B\}==Me$ で指定しています。

二番目の化合物は、R を使って、X³MT_EX の命令指定が複雑になることを回避しています。複雑になることを厭わなければ、次のように置換基を入れ子にして構造式の中に入れることができます。

```
%decaheterov [9=N]%
{1B=%ryl(8=CH$_2$){4=%sixheteroh [1=N]{1=(y1);2D=0;6D=0}};{\{10\}B}==Me}
```

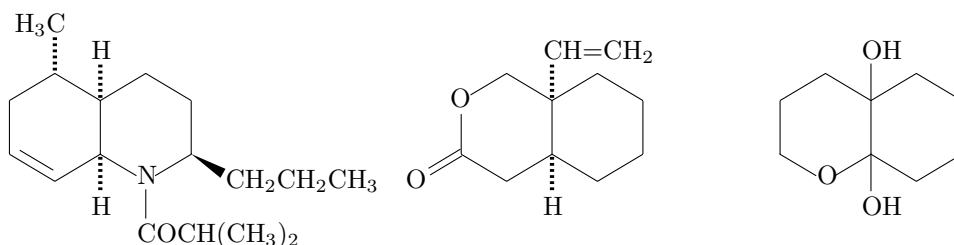
と入力すると、次のように出力されます。



橋頭位の置換基をもった化合物の例をさらに掲げます。これらの置換基の立体化学とその指定の仕方に注意してください。

```
%decaheterovi [h]{1=N}{1=COCH(CH$_3$)$_2$;2B=CH$_2$CH$_2$CH$_3$;
5A=%lmoiety{H$_3$C};9A=H;{\{10\}A}==H}\hskip50pt
%decaheterov [7=0]{6D=0;9A=H;{\{10\}A}==CH=CH$_2$}
%decaheterov [5=0]{9=OH;{\{10\}}==OH}
```

と入力すると、次のように出力されます。



6.4 6-5 縮合ヘテロ環を描く

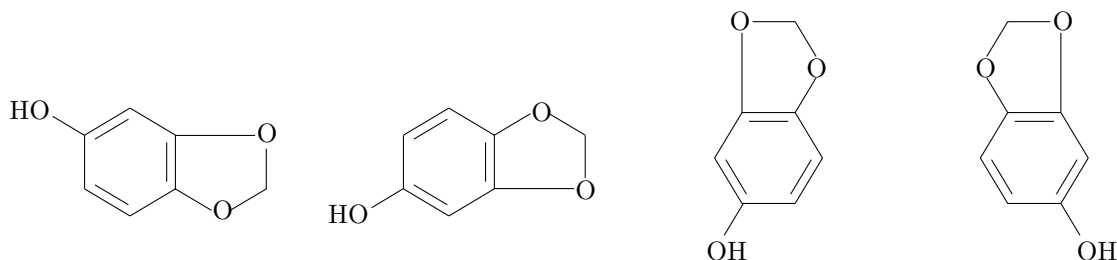
6員環と5員環が縮合したヘテロ環を縦型で描くためのタイプIV命令は、 $\%nonaheterov$ と $\%nonaheterovi$ です。この書式を示します。

```
%nonaheterov [BONDLIST]{ATOMLIST}{SUBSLIST}
%nonaheterovi [BONDLIST]{ATOMLIST}{SUBSLIST}
```

横型の6-6縮合環は、 $\%nonaheteroh$ および $\%nonaheterohi$ で、描くことができます。書式は同様です。ゴマ油の成分 sesamol の構造式をこれらの命令で描いてみましょう。

```
%nonaheterov [egj]{1=0;3=0}{5==H0}
%nonaheterovi [egj]{1=0;3=0}{5==H0}\hskip-20pt
%nonaheteroh [egj]{1=0;3=0}{5==OH}\hskip-20pt
%nonaheterohi [egj]{1=0;3=0}{5==OH}
```

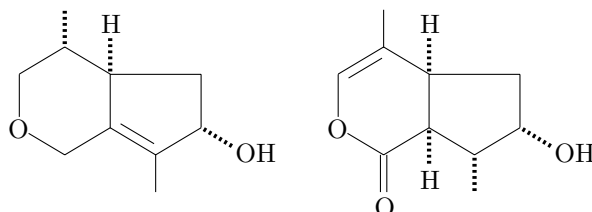
と入力すると，次のように出力されます．



マタタビ成分 allomatatabiol, nepetalactone の構造式を描くための命令を次に示します．橋頭位には，番号 8 および 9 が割り当てられています．

```
¥nonaheterov [i] {6==O}{2A==OH;1==;4A==;8A==H}
¥nonaheterov [e] {6==O}{2A==OH;1A==;4==;7D==O;8A==H;9A==H}
```

と入力すると，次のように出力されます．

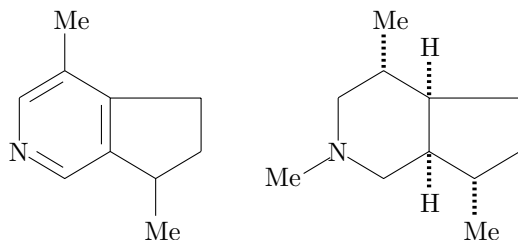


有機化学の慣例で，メチル基を結合だけで表しています．この指定の仕方 1== などで行くと，置換基を==の後に指定しないと，結合手だけが出力されます．

橋頭位の置換基をもった化合物の例をさらに掲げます．actinidine, α -skytanthine の構造式です．ここでは，メチル基を Me で表しています．

```
¥nonaheterov [egj] {6==N}{4==Me;1==Me}
¥nonaheterov [] {6==N}{4A==Me;1A==Me;6==Me;8A==H;9A==H}
```

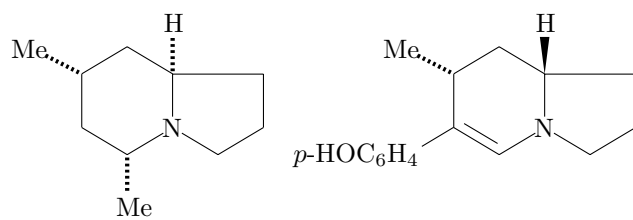
と入力すると，次のように出力されます．



橋頭位にヘテロ原子をもつ化合物も，同様に指定することができます．これも橋頭番号 8 および 9 によって指定します．たとえば，インドリジンアルカロイド dendroprimine, ipalbidine は，

```
¥nonaheterov [] {9==N}{5A==Me;7A==Me;8A==H}¥quad
¥nonaheterov [g] {9==N}{5A==Me;6==\$p\$-HOC\$_6\$H\$_4\$;8B==H}
```

と入力すると，次のように出力されます．



第7章 X_YLM_TE_X 命令と L_AT_EX 命令

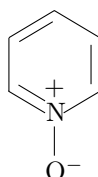
X_YLM_TE_X で描いた構造式は、一つの文字とみなされます。したがって、L_AT_EX のいろいろな環境の中で自由に使うことができます。

7.1 center 環境の中で

まず、center 環境の中で使ってみましょう。

```
%begin{center}
%pyridinevi[r{1+}]{1==O$^{\{-}$}
%end{center}
```

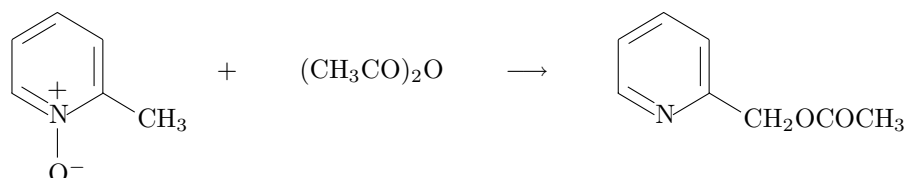
と入力すると、次のように出力されます。



簡単な反応式を描きます。%phantom{OCOCH\$_3\$}を入れずに中央揃えを行いますと、出力された反応式は右側に寄りすぎます。これを補正するため、

```
%begin{center}
%pyridinevi[r{1+}]{1==O$^{\{-}$};2==CH$_3$}
%raisebox{40pt}{%hskip20pt + %hskip20pt (CH$_3$CO)$_2$O
%hskip20pt %$longrightarrow$}%垂直方向の補正
%pyridinevi{2==CH$_2$OCOCH$_3$}%phantom{OCOCH$_3$}%水平方向の補正
%end{center}
```

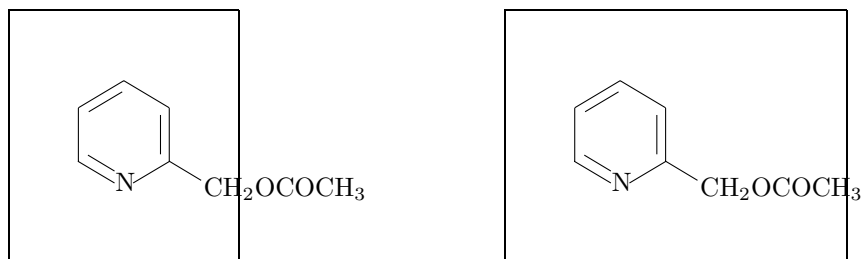
と入力すると、次のように出力されます。



ここで、この補正方法の種明かしをしておきましょう。%fbox 命令で、構造式を囲むと理由がよくわかります。

```
%fbox{%pyridinevi{2==CH$_2$OCOCH$_3$}}%hskip100pt
%fbox{%pyridinevi{2==CH$_2$OCOCH$_3$}%phantom{OCOCH$_3$}}
```

と入力すると、次のように入力されます。

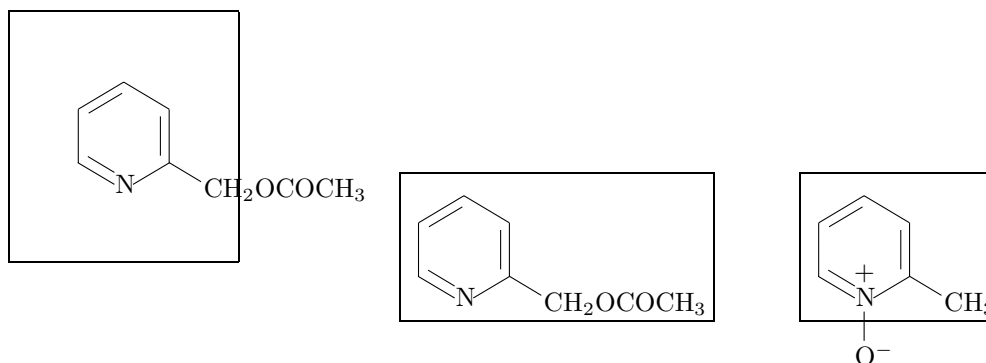


X_YMI_EX では、各命令で出力された構造式は、どんな置換基を指定しても同じ幅の箱（あるいは文字）とみなされます。大体 2 文字の基が置換したときの構造式の高さと幅を出力範囲に設定してあります。上の例では、右側の `\fbox` による枠が `\pyridinev` 命令の作る箱です。この場合は、CH2OCOCH3 という長い置換基がありますので、左の図のように、OCOCH3 に相当するの分がはみ出しているということになります。これははみ出した部分は、幅なしとみなされています。これを `` (引数の文字列の幅と高さを確保するが出力は行わないという命令) で補って、構造式全体がほぼ収まるようにしたの右の図です。上の反応式は、このテクニックを利用しています。

chemist パッケージの中には、`XyMcompd` 環境という便利な環境が含まれています。これは、構造式の大きさと出力位置を調整するための命令です。この環境を使うためには、`\usepackage{chemist}` と宣言しておく必要があります。次の二つの例を比較してください。

```
\fbox{\pyridinevi{2==CH$_2$OCOCH$_3$}} \hspace{2cm}
\fbox{%
\begin{XyMcompd}(900,400)(300,250){}{}
\pyridinevi{2==CH$_2$OCOCH$_3$}
\end{XyMcompd}}
\hspace{1cm}
\fbox{%
\begin{XyMcompd}(550,450)(250,250){}{}
\pyridinevi[r{1+}]{1==0$^{\{-}}$;2==CH$_3$}
\end{XyMcompd}}
```

出力は次のようになります。



最初は、未調整の構造式です。二番目の構造式の `XyMcompd` 環境の引数のうち (1000,450) は、`\unitlength` (X_YMI_EX 標準は 0.1pt) 単位の寸法を指定します。横 900、縦 400 の矩形の領域を取ります。第二引数の (250,250) は、箱の原点 (左下隅) の移動を指定します。第三引数と第四引数は、化合物番号を出力するためのものですが、ここでは空にしておきます。三番目の構造式は、6 員環の縦位置をそろえるため、二番目に指定に合わせたものです。これらを使って、反応式を描いて見ましょう。次のように入力します。

```
\begin{center}
\begin{XyMcompd}(550,450)(250,250){}{}
\pyridinevi[r{1+}]{1==0$^{\{-}}$;2==CH$_3$}
```

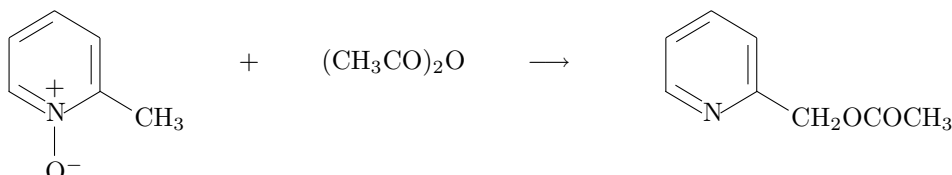


```

\end{XyMcompd}
\hskip20pt + \hskip20pt
(CH$_3$CO)$$_2$O \hskip20pt
$\longrightarrow$ \hskip20pt
\begin{XyMcompd}(1000,450)(250,250){}{
\pyridinevi{2==CH$_2$OCOCH$_3$}
\end{XyMcompd}
\vspace*{20pt}
\end{center}

```

出力は次のようになります。



この方式では, `\raisebox` による調節が必要なくなりました。

7.2 equation 環境中で

\LaTeX の命令を `equation` 環境で使った例をあげます。当然のことですが, `\label` と `\ref` による番号の参照ができます。

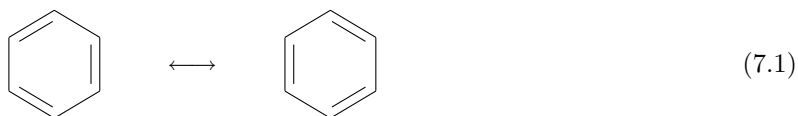
```

ベンゼンは共鳴式\ref{chem01}で表される。
\begin{equation}
\parbox{80pt}{\bzdrv[r]}
\longleftarrow
\parbox{80pt}{\bzdrv[l]} \label{chem01}
\end{equation}

```

と入力すると, 次のように出力されます。

ベンゼンは共鳴式 7.1 で表される。



前節の例では, `\raisebox` 命令で出力の垂直補正を行いました。本節の例では, `\parbox` 命令で垂直補正を行っています。

7.3 tabular 環境中で

一列の `tabular` 環境の中に構造式と名称を収めて, これを水平方向に並べます。全体を `center` 環境で中央揃えとしました。

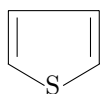
```

\begin{center}
\begin{tabular}{c}
\fiveheterov[bd]{1==S}{} \text{\textasciitilde}[-18pt]
thiophene \text{\textasciitilde}

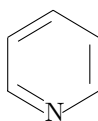
```

```
\end{tabular}
\begin{tabular}{c}
  \pyridinevi{} \vphantom{pyridine} [-18pt]
  pyridine \vphantom{pyridine}
\end{tabular}
\begin{tabular}{c}
  \quinolinevi{} \vphantom{quinoline} [-18pt]
  quinoline \vphantom{quinoline}
\end{tabular}
\end{center}
```

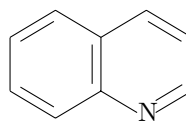
と入力すると、次のように出力されます。



thiophene



pyridine



quinoline

この例では`\vphantom`命令のオプション引数に負の寸法を指定して、構造式を名称との間隔を詰めています。

第8章 構造式の拡大縮小

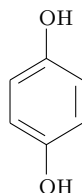
\LaTeX の構造式は、A4 判で出力したときにちょうどよい大きさになるようにしてあります。バージョン 3.00 以降は、拡大縮小が dvi の範囲内で自由におこなえるようになりました。

8.1 拡大縮小の機能の使い方

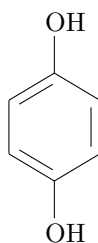
拡大縮小の機能は、sizedc パッケージで定義してありますので、`\usepackage{sizedc}` と宣言する必要があります。 `\usepackage{xymttx}` では、このパッケージを含めて、 \TeX / \LaTeX 互換モードのすべてのパッケージを読み込みます。たとえば、次のように指定しますと、

```
\documentclass{article}
\usepackage{carom}
\usepackage{sizedc}
\changeunitlength{0.08pt}
\begin{document}
\bzdrv{1==OH;4==OH}
\end{document}
```

出力は次のようになります。



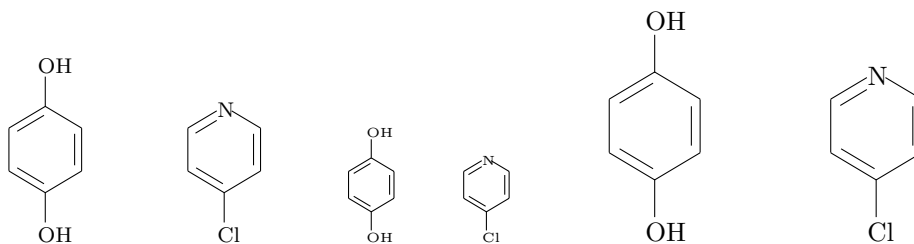
これを標準の寸法 (0.1pt) で出力した次の構造式と比較してください。



`\changeunitlength` 命令によって変更した標準寸法は、それ以後同じ命令で変更するまで、そのままの値が有効になります。描画の単位寸法を 0.08pt → 0.05pt → 0.1pt (標準) のように変化させてみましょう。

```
\changeunitlength{0.08pt}
\bzdrv{1==OH;4==OH}
\pyridinev{4==Cl}
\changeunitlength{0.05pt}
\bzdrv{1==OH;4==OH}
\pyridinev{4==Cl}
\changeunitlength{0.1pt}
\bzdrv{1==OH;4==OH}
\pyridinev{4==Cl}
```

出力は次のようになります。



8.2 もとの picture 環境での描画との比較

LaTeX のもとの picture 環境では、短い結合が描けないという欠点があります。epic パッケージにより、この欠点を補えるという報告がありましたが、実際に試してみると、6 員環の斜めの結合が微妙にずれるという欠点が残ることがわかりました。これは、epic パッケージの補正計算の途中に、桁落ちが起こることがあるのが原因だということ突き止めました [8]。X^YLaTeX バージョン 3.00 では、桁落ちをしないように改良することによって、構造式の拡大縮小を実現しています。

`\originalpicture` を宣言することによって、もとの picture 環境の機能にもどしたときの出力と、バージョン 3.00 以降の機能による出力を比較してみましょう。

```

\begin{table}
\caption{\textsf{sizedrc.sty}の有無の比較}
\label{tt:300c}
\begin{center}
\begin{tabular}{ll}
\hline
\textsf{sizedrc.sty}なし & \textsf{sizedrc.sty}あり \\
\hline
0.08pt & \originalpicture
\unitlength=0.08pt \bzdrv{} &
{\changeunitlength{0.08pt}\bzdrv{}} \\
0.07pt & \originalpicture
\unitlength=0.07pt\bzdrv{} &
{\changeunitlength{0.07pt}\bzdrv{}} \\
0.06pt & \originalpicture
\unitlength=0.06pt \bzdrv{} &
{\changeunitlength{0.06pt}\bzdrv{}} \\
\hline
\end{tabular}
\end{center}
\end{table}







```

この出力は、表 8.1 のようになります。左の列の出力では、0.07pt と 0.06pt のところで斜めの二重結合が出力されていないことがわかります。右側は、X^YLaTeX バージョン 3.00 以降で `sizedrc` を使った例で、ベンゼン環は縮小しても正常に出力されています。

8.3 構造式中の文字の変更

構造式中の文字種および大きさは、`\substfont` および `\substfontsize` で制御しています。標準値は次のように設定されています。

表 8.1: sizedrc.sty の有無の比較

sizedrc.sty なし	sizedrc.sty あり
0.08pt	
	
0.07pt	
	
0.06pt	
	

```

\let\substfont=\normalfont
\let\substfontsize=\normalsize

```

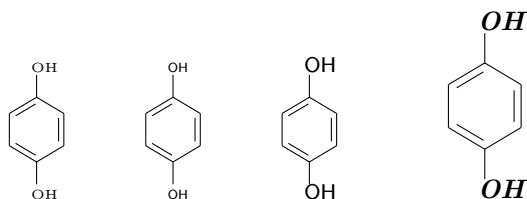
`\changeunitlength` により縮小すると、自動的に文字の大きさが変更されます。したがって、手動でこれらを変更すれば、構造式中の文字を変更することができます。次に、手動の変更例を示します。

```

{%標準縮小
\changeunitlength{0.06pt}
\bzdrv{1==OH;4==OH}
%大きさそのまま、文字種変更
\let\substfont=\sffamily
\bzdrv{1==OH;4==OH}
%文字種、大きさ変更
\let\substfont=\sffamily
\let\substfontsize=\footnotesize
\bzdrv{1==OH;4==OH}
%
{%文字種、大きさ変更
\changeunitlength{0.08pt}
\def\tempfont{\bfseries \itshape}
\let\substfont=\tempfont
\let\substfontsize=\normalsize
\bzdrv{1==OH;4==OH}
}}

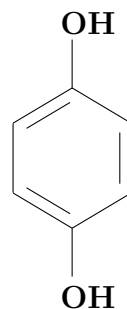
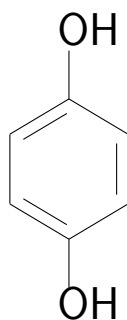
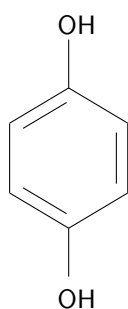
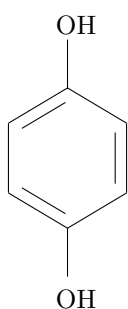
```

出力は次のようになります。



実用的ではありませんが、拡大の例も示しておきます。

```
{%標準拡大
%changeunitlength{0.13pt}
%bzdrrv{1==OH;4==OH}
%大きさそのまま, 文字種変更
%let%substfont=%sffamily
%bzdrrv{1==OH;4==OH}
%文字種, 大きさ変更
%let%substfont=%sffamily
%let%substfontsize=%LARGE
%bzdrrv{1==OH;4==OH}
%文字種, 大きさ変更
%let%substfont=%bfseries
%let%substfontsize=%large
%bzdrrv{1==OH;4==OH}
}
```



関連図書

- [1] 藤田 眞作, “化学者・生化学者のための L^AT_EX— パソコンによる論文作成の手引”, 東京化学同人 (1993).
- [2] a) Shinsaku Fujita, “Typesetting structural formulas with the tex formatter T_EX/L^AT_EX”, *Comput. Chem.*, **18**, 109 (1994). b) Shinsaku Fujita, “X^MT_EX for Drawing Chemical Structural Formulas”, *TUGboat*, **16** (1), 80 (1995).
- [3] Fujita, S., *X^MT_EX—Typesetting Chemical Structural Formulas*, Addison-Wesley, Tokyo (1997).
- [4] Fujita S., “Typesetting structural formulas with the text formatter T_EX/L^AT_EX”, *Comput. Chem.*, **18**, 109 (1994).
- [5] Fujita S., “X^MT_EX for Drawing Chemical Structural Formulas”, *TUGboat*, **16** (1), 80 (1995).
- [6] Fujita, S.; Tanaka, N. “X^M Notation for Electronic Communication of Organic Chemical Structures”, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **39**, 903 (1999).
- [7] Fujita, S.; Tanaka, N. “X^MT_EX (Version 2.00) as Implementation of the X^M Notation and the X^M Markup Language”, *TUGboat*, **21** (1), 7 (2000).
- [8] Fujita, S.; Tanaka, N., *TUGboat*, **22** (4), 285 (2001).
- [9] Fujita, S. “X^MT_EX (Version 4.01) for Typesetting Chemical Structural Formulas. A Tool for DVI- and PostScript-Typesetting”, On-line manual (2004).
- [10] van Zandt, T., Girou, D., “Inside PSTricks”, *TUGboat*, **15** (3), 239 (1995).
- [11] For graphic applications of T_EX, L^AT_EX and relevant systems, see Goossens, M., Rahtz, S., & Mittelbach, F., *L^AT_EX Graphics Companion*, Addison Wesley Longman, Reading (1997).
- [12] IUPAC Recommendations 1996, “Basic Terminology of Stereochemistry” (1996).
<http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/stereo/intro.html>