

構造式マクロパッケージ X_YMT_EX の例文集

(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-ku, Kyoto, 606-8585 Japan. ©(1994, 1996, 2006) by S. Fujita

このドキュメントの履歴

1994/01/16 第 1.00 版発行

1996/08/16 第 1.01 版発行

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 |
| 第 2 章 | 基本事項 | 9 |
| 2.1 | X _Y MI _Y EX の構造式の作る箱 | 9 |
| 2.2 | parbox 命令の中での利用 | 12 |
| 2.3 | tabular 環境などを利用する方法 | 13 |
| 2.4 | 数式環境を利用する方法 | 15 |
| 2.5 | picture 環境の利用 | 16 |
| 第 3 章 | 化学環境の命令の基礎 | 17 |
| 3.1 | 化合物の箱を作る命令 | 17 |
| 3.2 | 反应用の矢印を作る命令 | 20 |
| 3.3 | 化合物番号 | 21 |
| 第 4 章 | 例文 | 23 |
| 4.1 | 例文 1 | 23 |
| 4.1.1 | ソースリスト | 23 |
| 4.1.2 | 出力 | 24 |
| 4.2 | 例文 2 | 25 |
| 4.2.1 | ソースリスト | 25 |
| 4.2.2 | 出力 | 26 |
| 4.3 | 例文 3 | 28 |
| 4.3.1 | ソースリスト | 28 |
| 4.3.2 | 出力 | 29 |
| 4.3.3 | 別法 | 29 |
| 4.4 | 例文 4 | 30 |
| 4.4.1 | ソースリスト | 30 |
| 4.4.2 | 出力 | 31 |
| 4.4.3 | 別法 | 31 |
| 4.5 | 例文 5 | 32 |
| 4.5.1 | ソースリスト | 32 |
| 4.5.2 | 出力 | 33 |
| 4.6 | 例文 6 | 35 |
| 4.6.1 | ソースリスト | 35 |
| 4.6.2 | 出力 | 35 |
| 4.7 | 例文 7 | 36 |

| | | |
|--------------|--|-----------|
| 4.7.1 | ソースリスト | 36 |
| 4.7.2 | 出力 | 37 |
| 4.7.3 | 別法 | 37 |
| 4.8 | 例文 8 | 38 |
| 4.8.1 | ソースリスト | 38 |
| 4.8.2 | 出力 | 39 |
| 4.9 | 例文 9 | 40 |
| 4.9.1 | ソースリスト | 40 |
| 4.9.2 | 出力 | 40 |
| 4.10 | 例文 10 | 41 |
| 4.10.1 | ソースリスト | 41 |
| 4.10.2 | 出力 | 42 |
| 4.10.3 | 別法 | 42 |
| 4.11 | 例文 11 | 44 |
| 4.11.1 | ソースリスト | 44 |
| 4.11.2 | 出力 | 45 |
| 4.11.3 | 別法 | 45 |
| 4.12 | 例文 12 | 46 |
| 4.12.1 | ソースリスト | 46 |
| 4.12.2 | 出力 | 47 |
| 4.13 | 例文 13 | 47 |
| 4.13.1 | ソースリスト | 47 |
| 4.13.2 | 出力 | 49 |
| 第 5 章 | TEX/L^AT_EX 互換モードと PostScript 互換モード | 51 |
| 5.1 | PostScript 互換モードにおける立体化学表示 | 51 |
| 5.2 | フィッシャー投影図 | 53 |
| 5.3 | 立体配座の表示 | 55 |
| 第 6 章 | PostScript 機能の活用 | 57 |
| 6.1 | 拡大縮小 | 57 |
| 6.2 | 回転 | 58 |
| 6.3 | 網掛け | 59 |

第1章 はじめに

筆者は、化学構造式を描くための \LaTeX 用マクロパッケージとして、1993年に \XyMTeX (version 1.00) を公開しています [1]。これは、 \LaTeX の `picture` 環境の範囲内 (すなわち、図形組版の範囲内) で、広範囲の構造式を簡単に描く手段を与えるソフトウェアです。有機化学の論文や書籍を書くのに必要な化合物の代表的なもの、たとえば、

- 単環状の炭素化合物
- 縮合環炭素化合物
- 単環状のヘテロ環化合物
- 縮合環状のヘテロ環化合物
- 非環状の化合物

などを描くためのマクロ (命令) を作成して、マクロ集としたものです。これらの化合物を描くには、各母核を描く命令を使い、その引数として置換基や環上の二重結合を指定します。その使い方の詳しい説明については、このパッケージの中にマニュアル [2] を収録してあります。また、これらのマクロの機能やその実現方法については別に報告を行いました [3, 4]。

\XyMTeX は、 \LaTeX の `picture` 環境の範囲で実現したものですから、`picture` 環境の制限をそのまま受け継いでいます。その中でとくに触れておかなければならないのは、

- 短い直線が描けないこと
- 任意の角度で直線が描けないこと

の二つです。これらは、`picture` 環境を使う限りどうしようもない制限項目です。`epic` でこれらが回避できているとされていますが、斜めの結合が微妙にずれるなどの欠点のため、 \XyMTeX の初期のバージョンでは、`epic` を基礎におくことは避けました。しかし、バージョン 3.00 で `epic` の欠点を回避して、第一の「短い直線が描けない」という制限事項を取り除くことができました。その後、バージョン 4.00 で PostScript 対応にしたので、第二の「任意の角度の直線が描けない」という制限事項も取り除くことができました。ただし、デバイス非依存 (`dvi`) の特徴はバージョン 3.00 の段階では保障されていますが、バージョン 4.00 では保障されず、画面表示や印刷には PostScript 対応のデバイスが必要になっています。

デバイス非依存 (`dvi`) は $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ の大きな特徴であるので、 \XyMTeX バージョン 4.00 以降でも、 $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ 互換モードとして残すことにしました。したがって、 \XyMTeX バージョン 4.00 以降は、 $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ 互換モードと PostScript 互換モードのうちから、どちらかを選んで動かすことになります。

\XyMTeX は現在バージョン 4.03 となっています。次の二つのモードで動くようになっています。

1. $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ 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

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{xymttx}
\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: `xymttxps.sty` を読み込んだ場合は、 $\X\TeX$ 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{xymttxps}
\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。

一方、筆者は「化学環境」として、`chemist.sty` や `mathchem.sty` を作成しており、フロッピーディスクの形で拙著 [6] の付録として公開しています。これらのパッケージ (スタイルファイル) は、

- 反応式に番号を付す `chemeqn` 環境
- 反応式列挙のための `chemeqnarray` 環境
- 化合物番号、誘導体番号などの化学用カウンター
- 反応スキームのための箱
- 反応式用の矢印

など、構造式や反応スキームの体裁を整えるための各種命令を定義したマクロ集です。その使い方は、同書 [6] の第 9 章に詳しく説明しました。

1996 年に、 $\text{L}\text{A}\text{T}\text{E}\text{X} 2_{\epsilon}$ に対応した $\X\TeX$ (version 1.01) を公開した際に、ポリマーを組版するためのマクロを追加するとともに、化学環境を定義した `chemist.sty` ($\text{L}\text{A}\text{T}\text{E}\text{X} 2_{\epsilon}$ 対応としたもの) を $\X\TeX$ の中に含めることにしました。このことによって、 $\X\TeX$ と化学環境を併用して、いろいろな構造式や反応スキームが描けるようになりました。

その後の $\X\TeX$ の改良 (現在のバージョンは 4.03) で、立体化学に関する描画能力が強化されたので、いっそう応用範囲が広がりました。 $\X\TeX$ を PostScript 対応にしたついでに、`chemist.sty` で定義した命令も PostScript 対応としました。この追加分は `chmst-ps.sty` で定義してあります。したがって、PostScript 対応 $\X\TeX$ のすべての機能を使うには、次のように指定する必要があります。

```
%documentclass{article}
%usepackage{xymtexp}
%usepackage{chemist, chmst-ps}
%begin{document}
(formula)
%end{document}
```

本マニュアルでは、PostScript 互換モードのできることを解説します。例文のソースリストとその出力を示して、 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ と関連ソフトウェアとの併用の仕方を説明します。本マニュアルの姉妹編として、「構造式マクロパッケージ $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ の例文集」(T_EX/L_AT_EX 互換モード)があります。両者は、基本的な構成は同じです。

なお、構造式を L_AT_EX に取り込むのをはじめて試みる方は、本例文集にとりかかる前に、拙著 [6] の第 9 章、第 10 章 (特に 10.2 項)、 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ のマニュアル [2, 5] (特に第 1-4 章) の順に目を通すことをおすすめします。

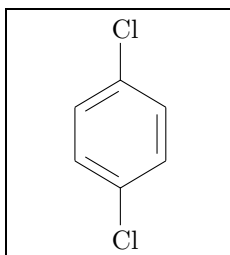
第2章 基本事項

この章では、 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ の各命令が作る構造式を収めている $\text{\X}\text{\M}$ ^{ボックス} 箱について説明します。個々の命令の $\text{\X}\text{\M}$ 箱については、マニュアル [2] に図示しましたので参照してください。ここでは、 $\text{\X}\text{\M}$ 箱が $\text{\L}\text{\A}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ の組版の上でどういう意味をもっているのかを説明し、その取り扱い方を述べることにします。その上で、 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ による構造式の描画命令を、 $\text{\L}\text{\A}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ 標準の各種命令や環境と組み合わせて利用する方法について説明します。

2.1 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ の構造式の作る箱

$\text{\T}\text{\E}\text{\X}/\text{\L}\text{\A}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ においては、一つの文字も箱であり、その文字の集まりもまた箱とみなします。また、 $\text{\L}\text{\A}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ の `picture` 環境で描いた図形もまた一つの箱とみなされます。 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ の各命令は、内部で `picture` 環境を用いて、構造式を描いています。したがって、 $\text{\L}\text{\A}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ の処理においては、構造式は一つの箱 (picture box) として取り扱われます。 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ の各命令で描いた構造式の箱を、このドキュメントでは、 $\text{\X}\text{\M}$ ^{ボックス} ($\text{\X}\text{\M}\text{\b}\text{\o}\text{\x}$, キュムボックスあるいはキュムばこ) と呼ぶことにします。

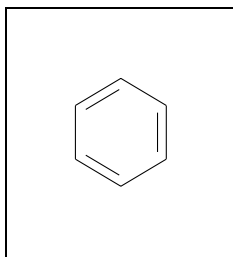
たとえば `\fbox{\bzdrv{1==Cl;4==Cl}}` と指定すると、次の出力が得られます。



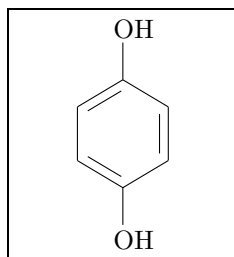
ここで、外枠は、`\bzdrv` 命令の内部で宣言された `picture` 環境の描画範囲 ($\text{\X}\text{\M}$ 箱) を示しています。この例のように、`\fbox` を使えば、 $\text{\X}\text{\M}$ 箱を明示することができます。

$\text{\X}\text{\M}$ 箱の寸法を求めるには、 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ のマクロの定義を覗くか、あるいは、次の例のように $\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ プリミティブ命令 `\setbox` を用いて、実際に組版した後、生じた $\text{\X}\text{\M}$ 箱を計測します。

```
\setbox0=\hbox{\bzdrv{}}
\fbox{\copy0} width = \the\wd0; height = \the\ht0; depth = \the\dp0 \par
\setbox0=\hbox{\bzdrv{1==OH;4==OH}}
\fbox{\copy0} width = \the\wd0; height = \the\ht0; depth = \the\dp0
```

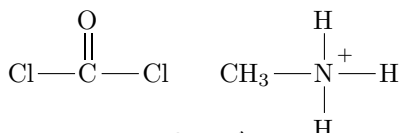


width = 80.00488pt; height = 88.00537pt; depth = 0.0pt



width = 80.00488pt; height = 88.00537pt; depth = 0.0pt

$\X\TeX$ で描いた構造式の収まった $\X\TeX$ 箱は、通常の文字の箱と同じものですから、文章の途中にそのまま挿入することができます。たとえば、この段落で、`\tetrahedral{0==C;1D==0;2==Cl;4==Cl}` および `\tetrahedral[{}]{0==N;1==H;2==CH$_3$;3==H;4==H}` と宣言すると、各構造式が一つの文字とみ

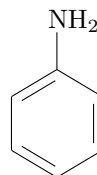
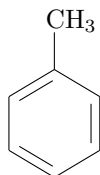
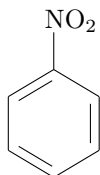


なされて出力されます。実際に出力すると、および のようになります。文章行にこのような大きな構造式を挿入することは通常はおこないませんが、ここでは、 $\X\TeX$ 箱がどのようなものかを見るためにあえて挿入したものです。

ここで、生じた $\X\TeX$ 箱の基準線（参照点を通る水平線）に注意しておく必要があります。二つの構造式の前後の文章行が、この場合の基準線になっています。なお、この二つの構造式では、左下の端が参照点です。ただし、methylammonium イオンでは、メチル基が $\X\TeX$ 箱より若干飛び出しています。参照点は、 $\X\TeX$ の各命令に固有ですので、詳しくは $\X\TeX$ のマニュアル [2] を参照してください。

$\X\TeX$ 箱が一つの文字として取り扱われることを理解すれば、次の例のように center 環境の中で列挙する方法も容易に思い付くでしょう。

```
\begin{center}
\bzdrv{1==NO$_2$} \quad \bzdrv{1==CH$_3$} \quad \bzdrv{1==NH$_2$}
\end{center}
```



この例では、 \TeX の `\quad` 命令によって、箱の間隔を調整しています ([6, 3.3 節] 参照)。もちろん、flushright 環境や flushleft 環境などの中で $\X\TeX$ 命令を使うこともできます ([6, 3.2.2 項] 参照)。

このように構造式が箱とみなせることによって、構造式組版があたかも通常の文章の組版と同じ感覚でおこなえるのは、他の方法にないメリットです。

次の例は、段落の先頭に $\X\TeX$ による構造式をぶら下げにしたものです。パッケージファイルとして、drop.sty が手に入る場合は、もう少し簡単に指定できます。

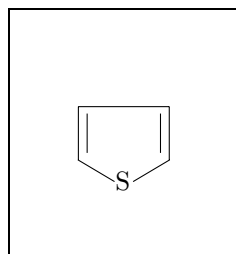
```
\setbox0=\hbox{\fiveheterov[bd]{1==S}{}}
\noindent
\fbbox{\copy0}
\dimen0=\wd0\advance\dimen0 by 1zw
```

```

%hskip-%wd0%vskip-%ht0%vskip-%baselineskip
%par%hangindent=%dimen0%hangafter=-7
%noindent
{\bf チオフェン} (Thiophene) 分子式 C$_4$H$_4$S; 分子量 84.14.
沸点 84.4\degC{/760mmHg} の液体 . ペンゼンに似た臭いをもつ .
コールタール, 石炭ガス, 工業用ベンゼン中に存在する .
ベンゼンの沸点が 80.1\degC{/760mmHg} であり, 通常の蒸留操作では分離できない .
V. Meyer, {\bf Ber.} {\bf 16}, 1471 (1883); {\bf 17}, 2642 (1884) を
見よ . この発見の経緯の簡単な解説が, Fieser and Fieser,
{\it Introduction to Organic Chemistry}, Heath (1957), p355 に
載っている . 実験室での製法は,
コハク酸ナトリウム sodium succinate を三硫化リン phosphorus trisulfide と
ともに加熱するというものである ({\it Org. Syn.} {\bf Coll. Vol. II},
578 (1943)) . 工業的には, ブタンとイオウから作られる . 溶媒として用いるほか,
染料や医薬の合成原料としても使われる .
%par

```

のように入力すると, 次の出力が得られます .



チオフェン (Thiophene) 分子式 C_4H_4S ; 分子量 84.14. 沸点 $84.4^\circ C/760\text{mmHg}$ の液体 . ペンゼンに似た臭いをもつ . コールタール, 石炭ガス, 工業用ベンゼン中に存在する . ペンゼンの沸点が $80.1^\circ C/760\text{mmHg}$ であり, 通常の蒸留操作では分離できない . V. Meyer, *Ber.* **16**, 1471 (1883); **17**, 2642 (1884) を見よ . この発見の経緯の簡単な解説が, Fieser and Fieser, *Introduction to Organic Chemistry*, Heath (1957), p355 に載っている . 実験室での製法は, コハク酸ナトリウム sodium succinate を三硫化リン phosphorus trisulfide とともに加熱するというものである (*Org. Syn. Coll. Vol. II*, 578 (1943)) . 工業的には, ブタンとイオウから作られる . 溶媒として用いるほか, 染料や医薬の合成原料としても使われる .

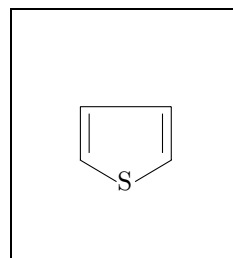
次の例は, 同じ文章を`%parbox`の中に入れたものです .

```

%setbox0=%hbox{\fiveterov[bd]{1==S}{}}
%dimen0=%textwidth%advance%dimen0-1.2%wd0
%noindent
%parbox[b]{%dimen0}{%
{\bf チオフェン} (Thiophene) 分子式 C$_4$H$_4$S; 分子量 84.14.
沸点 84.4\degC{/760mmHg} の液体 . ペンゼンに似た臭いをもつ .
コールタール, 石炭ガス, 工業用ベンゼン中に存在する .
ベンゼンの沸点が 80.1\degC{/760mmHg} であり, 通常の蒸留操作では分離できない .
V. Meyer, {\bf Ber.} {\bf 16}, 1471 (1883); {\bf 17}, 2642 (1884) を
見よ . この発見の経緯の簡単な解説が, Fieser and Fieser,
{\it Introduction to Organic Chemistry}, Heath (1957), p355 に
載っている . 実験室での製法は,
コハク酸ナトリウム sodium succinate を三硫化リン phosphorus trisulfide と
ともに加熱するというものである ({\it Org. Syn.} {\bf Coll. Vol. II},
578 (1943)) . 工業的には, ブタンとイオウから作られる . 溶媒として用いるほか,
染料や医薬の合成原料としても使われる . }
%hfill%raisebox{20pt}{%fbox{%box0}}%par

```

チオフェン (Thiophene) 分子式 C_4H_4S ; 分子量 84.14. 沸点 $84.4^\circ C/760\text{mmHg}$ の液体。ベンゼンに似た臭いをもつ。コールタール, 石炭ガス, 工業用ベンゼン中に存在する。ベンゼンの沸点が $80.1^\circ C/760\text{mmHg}$ であり, 通常の蒸留操作では分離できない。V. Meyer, Ber. 16, 1471 (1883); 17, 2642 (1884) を見よ。この発見の経緯の簡単な解説が, Fieser and Fieser, *Introduction to Organic Chemistry*, Heath (1957), p355 に載っている。実験室での製法は, コハク酸ナトリウム sodium succinate を三硫化リン phosphorus trisulfide とともに加熱するというものである (*Org. Syn. Coll. Vol. II*, 578 (1943))。工業的には, ブタンとイオウから作られる。溶媒として用いられるほか, 染料や医薬の合成原料としても使われる。

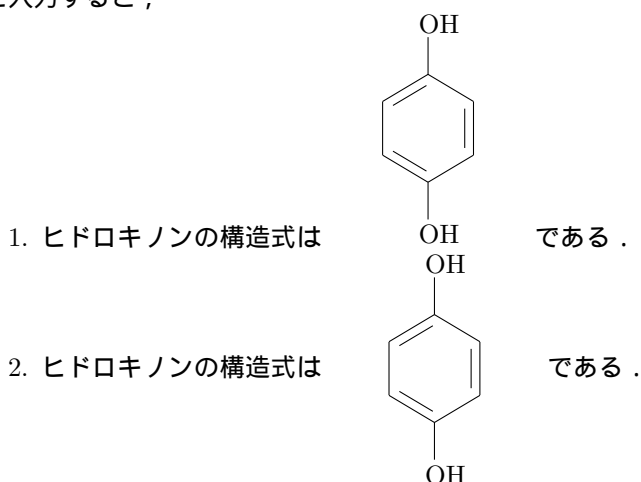


2.2 parbox 命令の中での利用

\LaTeX で作った構造式は, `\parbox` の中で使用することもできます。この場合, もともとの \LaTeX 箱の基準線が, \LaTeX 箱の下端から真ん中になります。この方法は, 垂直方向の位置調整に使えます。たとえば,

1. ヒドロキノンの構造式は `\bzdrv{1==OH;4==OH}` である。 `\par`
2. ヒドロキノンの構造式は `\parbox{80pt}{\bzdrv{1==OH;4==OH}}` である。 `\par`

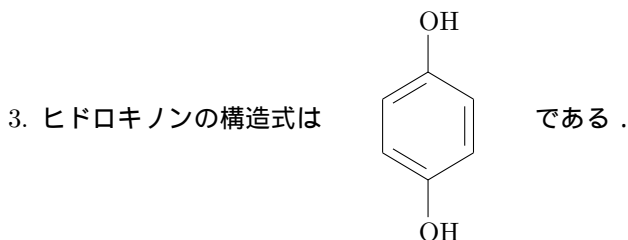
と入力すると,



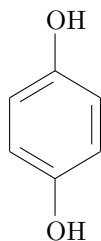
のように出力されます。

基準線の高さをいろいろ変えて出力したいときは, `\raisebox` を使います。次の例は, 負の引数を与えて, \LaTeX 箱を基準線より沈めたものです。

3. ヒドロキノンの構造式は `\raisebox{-44pt}{\bzdrv{1==OH;4==OH}}` である。 `\par`
4. ヒドロキノンの構造式は `\raisebox{-60pt}{\bzdrv{1==OH;4==OH}}` である。 `\par`



4. ヒドロキノンの構造式は



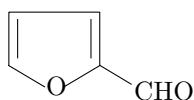
である。

高さの調整法としては、このほかにもいくつか考えられます。次の方法は、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ のプリミティブ命令を利用したものです。AND の位置が基準線です。

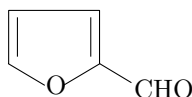
```

\setbox0=\hbox{\fiveterov[bd]{1==0}{2==CHO}}
\leavevmode\copy0 \quad AND \quad $\vcenter{\copy0}$
\quad AND \quad \quad \lower40pt\copy0\relax

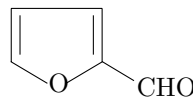
```



AND



AND



ここで、 \leavevmode という $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ プリミティブ命令を使っていることに注意してください。興味のある方は、これを除いてみると参考になるでしょう [6, 12.2.2 項]。 \vcenter は parbox の定義の中で使われているので、両者は本質的に同じ調整方法です。

2.3 tabular 環境などを利用する方法

次の例は、 tabular 環境の中に入れて、化合物名を併記したものです。

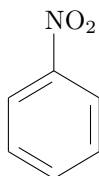
```

\begin{center}
\begin{tabular}{ccc}
ニトロベンゼン: & トルエン: & アニリン: \\
\text{\bzdrrv{1==NO$_2$}} & \text{\bzdrrv{1==CH$_3$}} & \text{\bzdrrv{1==NH$_2$}} \\
\end{tabular}
\end{center}

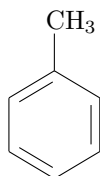
```

と入力すれば、次のような出力が得られます。

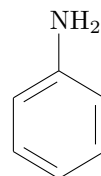
ニトロベンゼン:



トルエン:



アニリン:



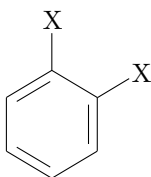
次の例は, tabular 環境を使ったやや複雑な例です.

```

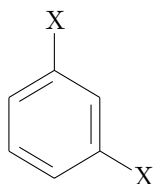
\begin{center}
\begin{tabular}{ccc}
\multicolumn{3}{l}{disubstituted derivatives} \\
\bdzdrv{1==X;2==X} & \bdzdrv{1==X;3==X} & \bdzdrv{1==X;4==X} \\
{\it ortho} & {\it meta} & {\it para} \\
1,2 & 1,3 & 1,4 \\
\multicolumn{3}{l}{trisubstituted derivatives} \\
\bdzdrv{1==X;2==X;3==X} & \bdzdrv{1==X;2==X;4==X} & \bdzdrv{1==X;3==X;5==X} \\
{\it vic} & {\it as} & {\it s} \\
1,2,3 & 1,2,4 & 1,3,5 \\
\end{tabular}
\end{center}

```

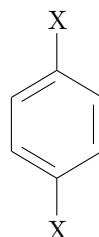
disubstituted derivatives



ortho
1,2

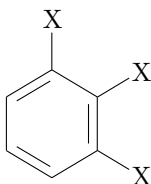


meta
1,3

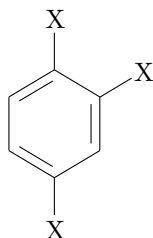


para
1,4

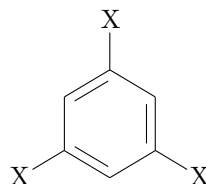
trisubstituted derivatives



vic
1,2,3



as
1,2,4



s
1,3,5

tabular 環境は, 1 列のものも許容されています. しかも組み上がったものは, 一つの文字とみなされま
す. したがって, 次の例のように, tabular 環境をつなぎ合わせて 1 行に組版することができます. たとえば,

```

\noindent
\begin{tabular}{c}
\cyclohexanev[a]{} \\
\end{tabular}
\raisebox{5pt}{+}
\begin{tabular}{l}
\kern-10pt\fiveheteroh{1==N}{1==Br;2D==0;5D==0} \\
N-Bromosuccinimide
\end{tabular}
\raisebox{5pt}{\$\rightarrow$}
\begin{tabular}{c}
\cyclohexanev[a]{3==Br} \\
\end{tabular}

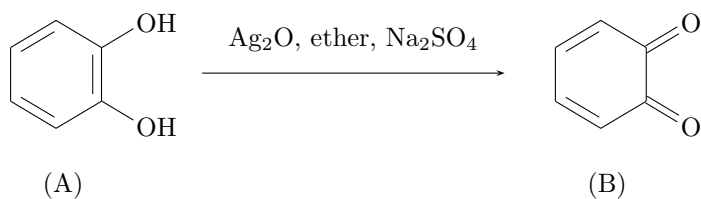
```


2.5 picture 環境の利用

\LaTeX の命令は, `picture` 環境の中で使用することもできます. 各命令は, `\put` 命令の引数として指定します. たとえば,

```
\begin{picture}(3000,1000)(0,0)
\put(50,100){\bzdrv{2==OH;3==OH}}
\put(1000,100){\reactrarrow{42pt}{4cm}{Ag$_2$O, ether, Na$_2$SO$_4$}{}}
\put(2100,100){\bzdrv[ob]{2D==O;3D==O}}
\put(400,100){(A)}
\put(2450,100){(B)}
\end{picture}
```

と入力すると, 次のような反応式が出力されます.



この方法は, 複雑な位置合わせが必要なときに使うと有効です. 座標をいちいち指定しなければならないので, 面倒ですが, まあ我慢できる範囲でしょう.

第3章 化学環境の命令の基礎

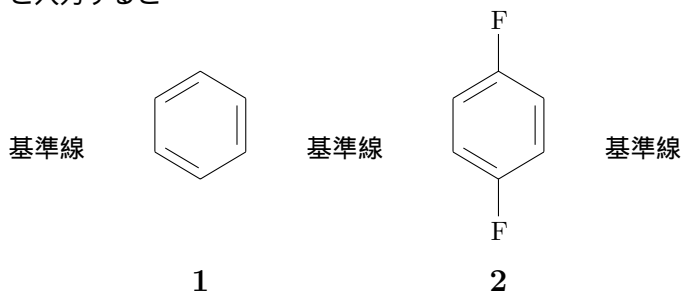
ここでは，化学環境 [6, 第9章] で定義した命令を使う際に注意すべきことを，実際に例を示しながら説明します．

3.1 化合物の箱を作る命令

化合物の箱を作る命令 [6, 9.3 節] の中では，`\cdtwoocell` が最も使いやすい．たとえば，

```
基準線\cdtwoocell{0pt}{80pt}{\bzdrv{}}{\compd\label{cmpd01}}基準線
\cdtwoocell{0pt}{80pt}{\bzdrv{1==F;4==F}}{\compd\label{cmpd02}}基準線 \#
```

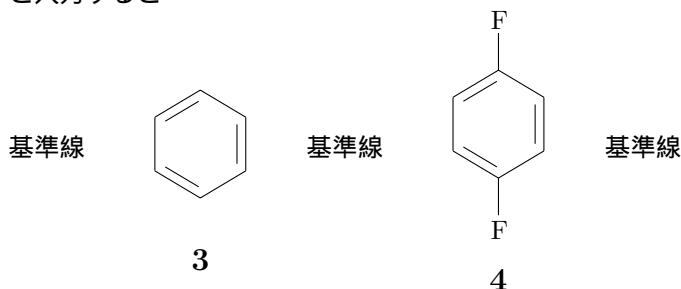
と入力すると



のように出力されます．`\bzdrv` のような \LaTeX 命令では，置換基がすべて指定されたときに，その大部分が収まるように， \LaTeX 箱 (描画領域) を設定してあります．したがって，化合物 1 の場合は，構造式と番号の間が空きすぎると感じられます．このような場合は，`\vskip` 命令を `\cdtwoocell` の第 3 引数の末尾に用いれば調整できます．

```
基準線\cdtwoocell{0pt}{80pt}{\bzdrv{\vskip-15pt}}{\compd\label{cmpd03}}基準線
\cdtwoocell{0pt}{80pt}{\bzdrv{1==F;4==F}}{\compd\label{cmpd04}}基準線 \#
```

と入力すると



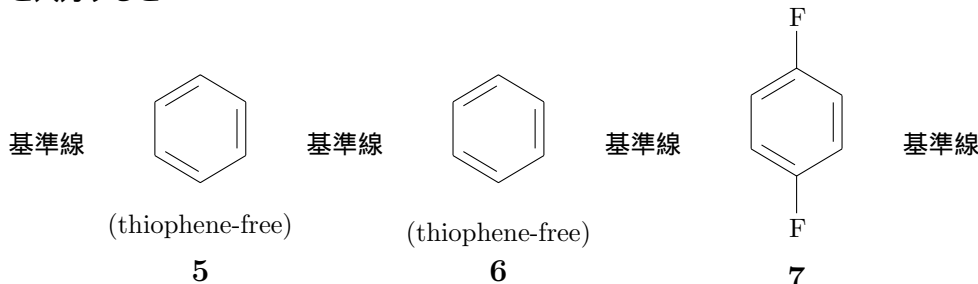
が得られます．また，`\cdtwoocell` の第 3 引数や第 4 引数は，`\#` によって改行することができます．たとえば，

```

基準線\cdtwocell{0pt}{80pt}{\bzdrv{}¥¥[-20pt] (thiophene-free)}%
{\compd¥label{cmpd05}}基準線
\cdtwocell{0pt}{80pt}{\bzdrv{}¥¥skip-20pt}%
{(thiophene-free) ¥¥ \compd¥label{cmpd06}}基準線
\cdtwocell{0pt}{80pt}{\bzdrv{1==F;4==F}}{\compd¥label{cmpd07}}基準線 ¥¥

```

と入力すると



のように出力されます。

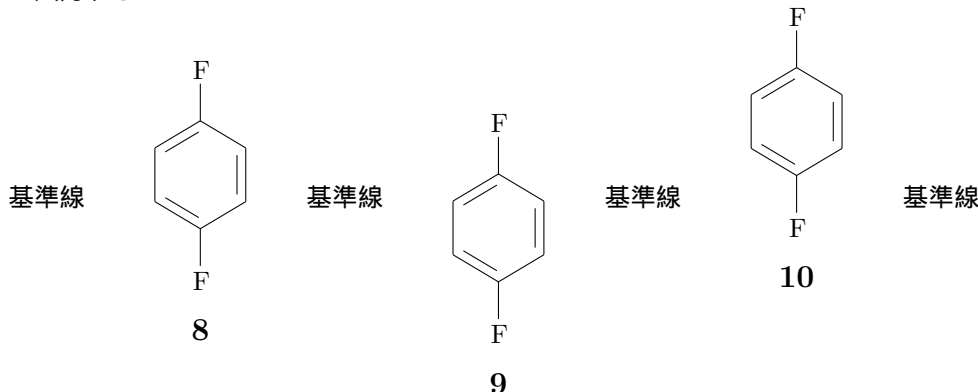
構造式の出力位置 (上下) は, $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ の第 1 引数によって, 調整します。たとえば,

```

基準線\cdtwocell{0pt}{80pt}{\bzdrv{1==F;4==F}}{\compd¥label{cmpd08}}基準線
\cdtwocell{-20pt}{80pt}{\bzdrv{1==F;4==F}}{\compd¥label{cmpd09}}基準線
\cdtwocell{20pt}{80pt}{\bzdrv{1==F;4==F}}{\compd¥label{cmpd10}}基準線 ¥¥

```

と入力すると



のようになります。

構造式の出力範囲と位置を指定する $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 環境も用意されています。 $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ バージョン 2.00 以降では, $\mathcal{Y}\mathcal{L}$ 機能による入れ子により複雑な構造式を描けるようになっていますが, 入れ子の置換基は幅なしで出力されるため, 出力範囲は構造式の大きさを反映していません。次の二つの構造式を比較してください。同じ化合物ですが, 一方は $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ の $\mathcal{Y}\mathcal{L}$ 機能を用いて描いた構造式を $\mathcal{F}\mathcal{B}\mathcal{O}\mathcal{X}$ で囲んで, 占める実効の大きさを示しています。二番目は, 同じものを $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 環境で出力して, 出力範囲と位置を調整しています。

```

\fbbox{%
\fiveheterov[d]{1==N;5==N}{1==Ph;2D==0;4==H$_{2}$N;%
3D==¥ryl(5==N--NH){4==¥bzdrh{1==(¥l);2==¥lmoiety{Me0};5==SO$_{2}$C1}}
}
\hskip4cm
\fbbox{%

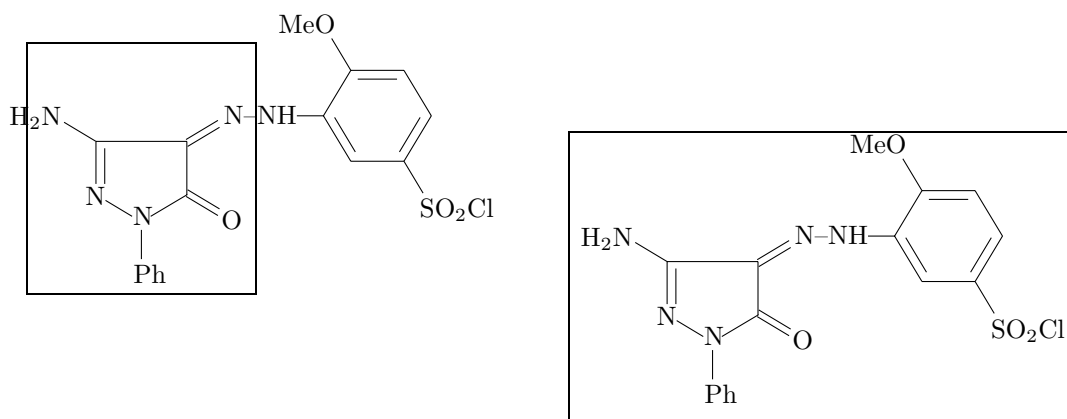
```

```

\begin{XyMcompd}(1700,1000)(-50,0){}{}
\fiveheterov[d]{1==N;5==N}{1==Ph;2D==0;4==H$_{2}$N;%
3D==\ryl(5==N--NH){4==\bzdrh{1==(y1);2==\lmoiety{MeO};5==SO$_{2}$Cl}}
\end{XyMcompd}
}

```

第一引数の (1700,1000) は単位寸法の倍数であらわした出力範囲です。第二引数の (-50,0) は、左下の座標を動して、出力位置を決めための指定です。第三引数と第四引数には化合物番号と下位の指定符号を入れます。実際に出力すると次のようになります。



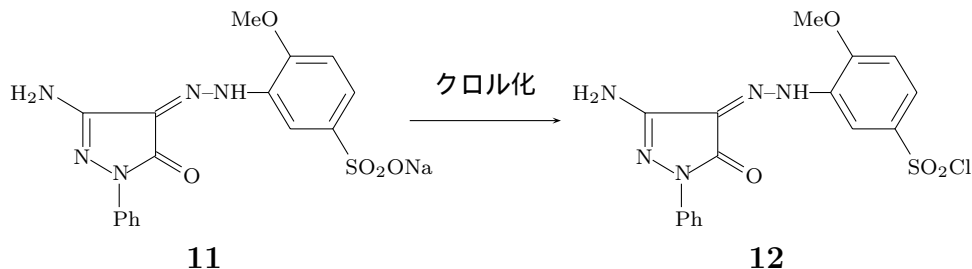
このようにすると、中央揃えの反応式を容易に描くことができます。第三引数に文字列を入れると、`\xref{ydye01}` や `\xref{ydye02}` などとして化合物番号 11 や 12 を参照することができます。

```

\begin{center}
\changeunitlength{0.08pt}
\begin{XyMcompd}(1700,1000)(-50,0){ydye01}{}
\fiveheterov[d]{1==N;5==N}{1==Ph;2D==0;4==H$_{2}$N;%
3D==\ryl(5==N--NH){4==\bzdrh{1==(y1);2==\lmoiety{MeO};5==SO$_{2}$ONa}}
\end{XyMcompd}
\reactrarrow{10pt}{2cm}{クロル化}{\strut}
\begin{XyMcompd}(1700,1000)(-50,0){ydye02}{}
\fiveheterov[d]{1==N;5==N}{1==Ph;2D==0;4==H$_{2}$N;%
3D==\ryl(5==N--NH){4==\bzdrh{1==(y1);2==\lmoiety{MeO};5==SO$_{2}$Cl}}
\end{XyMcompd}
\end{center}

```

実際に出力すると次のようになります。



この出力では、`\changeunitlength{0.08pt}` と指定して、構造式を縮小してあります。

3.2 反作用の矢印を作る命令

長さ可変の矢印 [6, 9.4 節] が使いやすいので、この使い方を説明することにしましょう。矢印の上下にコメントを出力した組版の高さの半分の位置が基準線となります。したがって、片方だけのコメントのときは、垂直位置が狂うので、次のように調整します。

```
基準線 \reactrarrow{0pt}{1.5cm}{HCl}{MeOH}
基準線 \reactrarrow{0pt}{1.5cm}{HCl}{}
基準線 \reactrarrow{0pt}{1.5cm}{}{MeOH}
基準線 \reactrarrow{0pt}{1.5cm}{HCl}{\phantom{MeOH}}
基準線 \reactrarrow{0pt}{1.5cm}{\phantom{HCl}}{MeOH} 基準線 \phantom{}
```

と入力すると、

```

      HCl          HCl          HCl
基準線  →  基準線  →  基準線  →  基準線  →  基準線  →  基準線
      MeOH          MeOH          MeOH
```

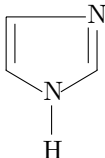
のようになります。もちろん第 1 引数に適当な値を指定して、上下位置を調整することも可能です。

長さ可変の矢印の第 3 引数および第 4 引数は、内部で、 $$ によって、改行することが可能です。たとえば、

```
基準線 \reactrarrow{0pt}{3cm}{BuLi}{$-20\deg C$ \phantom{85\%}}
基準線 \reactrarrow{0pt}{7cm}{%
1. THF, RT \phantom{
2. DIBAH, $-78\deg C$}{%
3. t-BuLi, HMPT \phantom{
      BnBr \phantom{
4. Bu4NF, THF \phantom[-20pt]
\raisebox{30pt}{5. I2, PPh3,}
{\unitlength=0.1pt\fiveheterov[bd]{1=N;3=N}{1=H}}}}
基準線
```

と入力すると、次の出力が得られます。

```

      BuLi          1. THF, RT
基準線  →  基準線  →  基準線
      -20°C          2. DIBAH, -78°C
      85%           3. t-BuLi, HMPT
                   BnBr
                   4. Bu4NF, THF
                   5. I2, PPh3,
                               
```

この出力では、第 4 引数の中で、 \LaTeX による構造式を取り込んでいることに注意してください。この際、行間隔の調整のために $\phantom[-20pt]$ と指定しています。

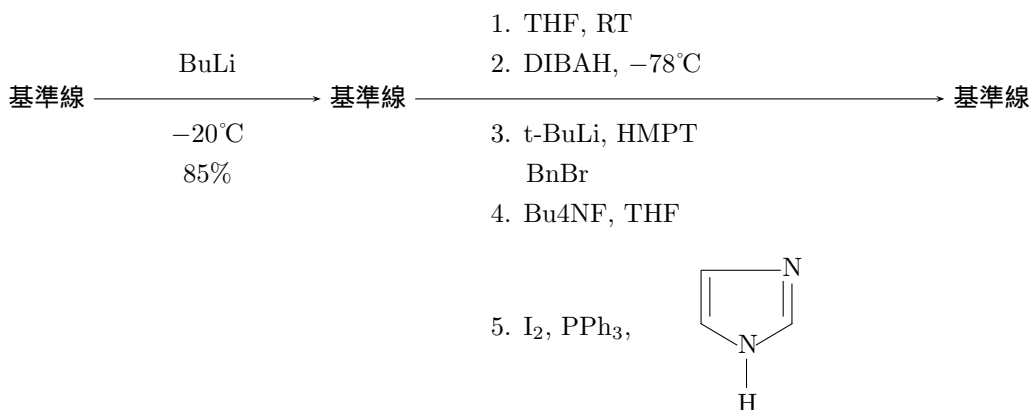
番号を揃えたいときには、若干強引ですが、次のように指定するとうまくゆきます。ほぼ同じ結果を与える二つの方法を示しましたので、比較してください。 $$ による改行は、垂直モードを抜ける必要があります。

```

基準線 \reactrarrow{0pt}{3cm}{BuLi}{\$-20\degC\$ \Y 85\Y}
基準線 \reactrarrow{0pt}{7cm}{%
\makebox[5cm][l]{1. THF, RT} \Y
\makebox[5cm][l]{2. DIBAH, \$-78\degC\$}}{\%
\makebox[5cm][l]{3. t-BuLi, HMPT} \Y
\leavevmode\hbox to5cm{~~~~BnBr\hss} \Y
\leavevmode\hbox to5cm{4. Bu4\$NF, THF\hss} \Y[-20pt]
\leavevmode\hbox to5cm{\raisebox{30pt}{5. I\$_2\$, PPh\$_3\$,}
{\unitlength=0.1pt\fiveheterov[bd]{1==N;3==N}{1==H}\hss}}}
基準線 \Y

```

と入力すると、次のような出力が得られます。



矢印の出力位置 (上下) は、`\reactrarrow` などの第 1 引数によって調整します。この調整は、上述の `\cdtwocell` の場合と同じ要領でおこないます。

3.3 化合物番号

化合物番号の出力のために、`\compd` 命令および `\deriv` 命令が使えます。すでに、3.1 節のいくつかの箇所、`compd` を用いています。詳しい説明は、拙著 [6, 9.2 節] に譲ります。

第4章 例文

本章では、 \LaTeX と化学環境を組み合わせ、さまざまな反応スキームを描きます。その中で、 \LaTeX を使う上でのテクニックを紹介します。

4.1 例文 1

この例文の題材は、有機合成化学協会誌¹から採ったものです。ここでは、 \LaTeX の単一命令では描けない構造式をあらかじめ組版し、`setbox` によって保存した上で用いています。

4.1.1 ソースリスト

```

インスタントカラー写真に使う色素放出剤は、
 $\text{\LaTeX}$ -スルホンアミドフェノール誘導体である。
この合成のためには、
 $\text{\LaTeX}$ -アミノフェノール誘導体 ( $\text{\LaTeX}$ cm06) が中間体として必要である。
この合成経路を、次にスキームとして示した。
 $\text{\LaTeX}$ setbox1= $\text{\LaTeX}$ hbox{%ベンズオキサゾール中間体を組版 . box1 として保存}
 $\text{\LaTeX}$ begin{picture}(800,1000)(50,0)
 $\text{\LaTeX}$ put(0,0){ $\text{\LaTeX}$ bzdrv{4==OH;5==R $\text{\LaTeX}$ ^2 $\text{\LaTeX}$ ;6==R $\text{\LaTeX}$ ^1 $\text{\LaTeX}$ }}
 $\text{\LaTeX}$ put(400,650){ $\text{\LaTeX}$ fivefusev[b]{2==N;4==0}{3==CH $\text{\LaTeX}$ _3 $\text{\LaTeX}$ }{e}}
 $\text{\LaTeX}$ end{picture}}
 $\text{\LaTeX}$ setbox2= $\text{\LaTeX}$ hbox{%ベンズオキサゾール中間体を組版 . box2 として保存}
 $\text{\LaTeX}$ begin{picture}(800,1000)(50,0)
 $\text{\LaTeX}$ put(0,0){ $\text{\LaTeX}$ bzdrv{4==OC $\text{\LaTeX}$ _16 $\text{\LaTeX}$ }{H $\text{\LaTeX}$ _33 $\text{\LaTeX}$ };5==R $\text{\LaTeX}$ ^2 $\text{\LaTeX}$ ;6==R $\text{\LaTeX}$ ^1 $\text{\LaTeX}$ }}
 $\text{\LaTeX}$ put(400,650){ $\text{\LaTeX}$ fivefusev[b]{2==N;4==0}{3==CH $\text{\LaTeX}$ _3 $\text{\LaTeX}$ }{e}}
 $\text{\LaTeX}$ end{picture}}
%
 $\text{\LaTeX}$ setbox0= $\text{\LaTeX}$ hbox{%オキシムを組版 . box0 として保存}
 $\text{\LaTeX}$ begin{picture}(800,1000)(0,0)
 $\text{\LaTeX}$ put(0,0){ $\text{\LaTeX}$ bzdrv{1==OH;4==OH;5==R $\text{\LaTeX}$ ^2 $\text{\LaTeX}$ ;6==R $\text{\LaTeX}$ ^1 $\text{\LaTeX}$ }}
 $\text{\LaTeX}$ put(400,650){ $\text{\LaTeX}$ fivefusev[b]{2==C;3==N}{2==CH $\text{\LaTeX}$ _3 $\text{\LaTeX}$ ;3==OH}{e}[cde]}
 $\text{\LaTeX}$ end{picture}}
%
 $\text{\LaTeX}$ begin{flushleft}%ここから反応スキームの描画の記述
 $\text{\LaTeX}$ cdtwocell{0pt}{80pt}{ $\text{\LaTeX}$ bzdrv{1==OH;4==OH;5==R $\text{\LaTeX}$ ^2 $\text{\LaTeX}$ ;6==R $\text{\LaTeX}$ ^1 $\text{\LaTeX}$ }}%
  { $\text{\LaTeX}$ compd $\text{\LaTeX}$ label{cm01}}%化合物 1 (ラベルは cm01)
 $\text{\LaTeX}$ hskip-20pt $\text{\LaTeX}$ reactrarrow{0pt}{3cm}{CH $\text{\LaTeX}$ _3COOH/BF $\text{\LaTeX}$ _3 $\text{\LaTeX}$ }{ $\text{\LaTeX}$ strut}%矢印
 $\text{\LaTeX}$ cdtwocell{0pt}{80pt}{ $\text{\LaTeX}$ bzdrv{1==OH;4==OH;5==R $\text{\LaTeX}$ ^2 $\text{\LaTeX}$ ;6==R $\text{\LaTeX}$ ^1 $\text{\LaTeX}$ ;2==COCH $\text{\LaTeX}$ _3 $\text{\LaTeX}$ }}%
  { $\text{\LaTeX}$ compd $\text{\LaTeX}$ label{cm02}}%化合物 2 (ラベルは cm02)
 $\text{\LaTeX}$ reactrarrow{0pt}{2cm}{NH $\text{\LaTeX}$ _2OH}{ $\text{\LaTeX}$ strut}%矢印
 $\text{\LaTeX}$ cdtwocell{0pt}{80pt}{ $\text{\LaTeX}$ box0}{ $\text{\LaTeX}$ compd $\text{\LaTeX}$ label{cm03}}%化合物 3 (ラベルは cm03)
 $\text{\LaTeX}$ ¥¥[10pt]%改行後, 10pt 空け

```

¹藤田 眞作, 有合化, 40, 176-187 (1982).

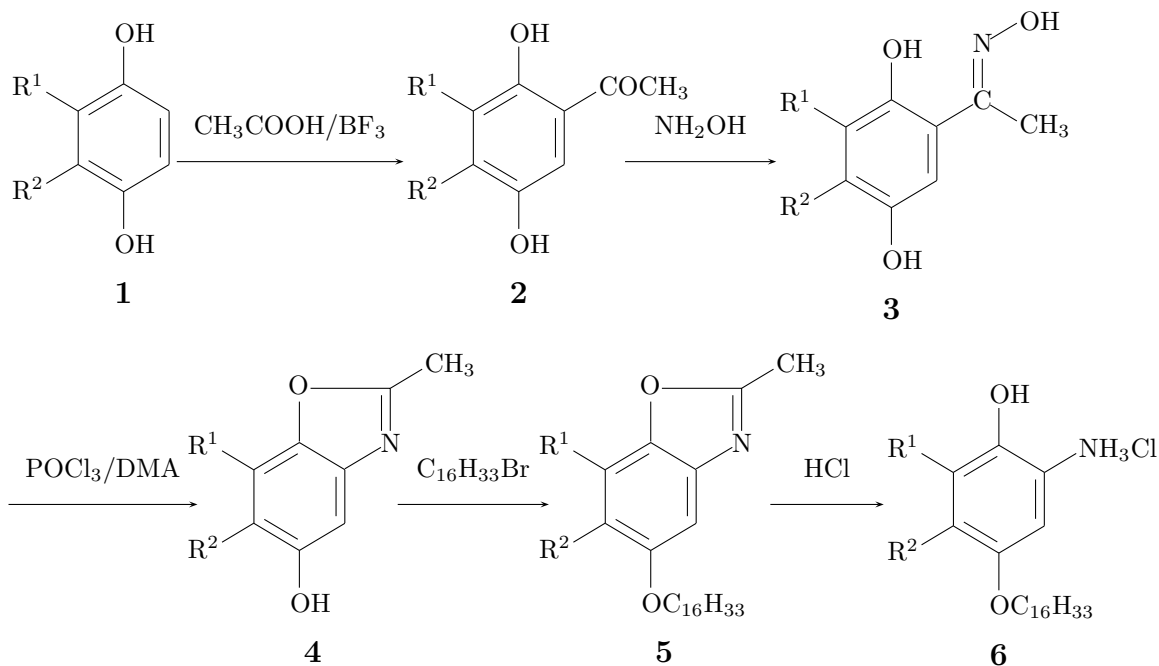
$\xrightarrow{\text{POCl}_3/\text{DMA}}$ 化合物 4 (ラベルは cm04)
 $\xrightarrow{\text{C}_{16}\text{H}_{33}\text{Br}}$ 化合物 5 (ラベルは cm05)
 $\xrightarrow{\text{HCl}}$ 化合物 6 (ラベルは cm06)
 $\xrightarrow{\text{HCl}}$ 化合物 6 (ラベルは cm06)

この合成経路の成功の鍵は、

ベンズオキサゾール中間体 (化合物 4) を合成するための一般的な方法として、ヒドロキノン誘導体 (化合物 3) のベックマン転位を利用する反応を開発したことである。工業的には、このベックマン転位の温和な反応剤として、オキシ塩化リン/*N,N*-ジメチルアセトアミド (POCl₃/DMA) を見つけたことも、大きな成果であった。

4.1.2 出力

インスタントカラー写真に使う色素放出剤は、*o*-スルホンアミドフェノール誘導体である。この合成のためには、*o*-アミノフェノール誘導体が中間体として必要である。この合成経路を、次にスキームとして示した。



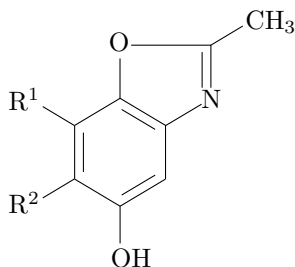
この合成経路の成功の鍵は、ベンズオキサゾール中間体 (4) を合成するための一般的な方法として、ヒドロキノン誘導体 (3) のベックマン転位を利用する反応を開発したことである。工業的には、このベックマン転位の温和な反応剤として、オキシ塩化リン/*N,N*-ジメチルアセトアミド (POCl₃/DMA) を見つけたことも、大きな成果であった。

[注] ベンズオキサゾール中間体 3 は、次のように組版することもできます。


```

\begin{XyMcompd}(800,1000)(50,0){}{}
\cyclohexanev[{\a\fivefusev[b]{2==N;4==0}{3==CH$_3$}{e}}ace]{4==OH;5==R$^2$;6==R$^1$}
\end{XyMcompd}

```



4.2 例文 2

この例文の題材は、有機合成化学協会誌²から採ったものです。化学環境の`\noderiv`などのカウンター命令の使い方に注意してください。

4.2.1 ソースリスト

```

McKillop らの報告した
キノモノアセタール (\cref{cmb12}) の合成法は、
 $\rho$ -メトキシフェノール類 (\cref{cmb11}) を
硝酸タリウム (III) (TTN)/メタノールで酸化するものである。
次に示すように高い収率で目的の誘導体が得られる。
無置換の\cref{cmb12a}については、求核反応剤との反応などが
特に詳しく検討されている。
\begin{center}
\cduocell{0pt}{90pt}{\bzdrrv{1==OH;4==OCH$_3$;%
2==R$^1$;3==R$^2$;5==R$^3$;6==R$^4$}}{\compd\labe{l}{cmb11}}%
\noderiv\labe{l}{cmb11a}
\noderiv\labe{l}{cmb11b}\noderiv\labe{l}{cmb11c}
\noderiv\labe{l}{cmb11d}\noderiv\labe{l}{cmb11e}
\noderiv\labe{l}{cmb11f}\noderiv\labe{l}{cmb11g}\noderiv\labe{l}{cmb11h}}
\reactrarrow{10pt}{3cm}{TTN}{CH$_3$OH}
\cduocell{0pt}{90pt}{\bzdrrv[pa]{1D==0;4Sa==OCH$_3$;4Sb==CH$_3$0;%
2==R$^1$;3==R$^2$;5==R$^3$;6==R$^4$}}{\compd\labe{l}{cmb12}}%
\noderiv\labe{l}{cmb12a}\noderiv\labe{l}{cmb12b}\noderiv\labe{l}{cmb12c}
\noderiv\labe{l}{cmb12d}\noderiv\labe{l}{cmb12e}
\noderiv\labe{l}{cmb12f}\noderiv\labe{l}{cmb12g}\noderiv\labe{l}{cmb12h}}
\end{center}
\begin{tabular}{cccccccc}
\hline
誘導体 & \cref{cmb12a} & \cref{cmb12b} & & & & & \\
\cref{cmb12c} & \cref{cmb12d} & \cref{cmb12e} & & & & & \\
\cref{cmb12f} & \cref{cmb12g} & \cref{cmb12h} & \& \& \& \& \\
\hline
R$^1$ & H & CH$_3$ & CH$_3$ & C(CH$_3$)$$_3$ & H & & & H & & & Cl&Br&
R$^2$ & H & H & H & H & OCH$_3$ & OCH$_3$ & H & H&
R$^3$ & H & H & H & H & OCH$_3$ & OCH$_3$ & H & H&

```

²藤田 眞作, 有合化, 40, 307-320 (1982).

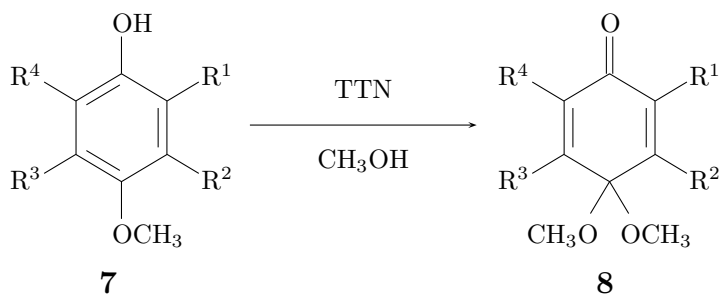
```
R$^4$ & H & H      & CH$_3$ & C(CH$_3$)$_3$ & H      & OCOCH$_3$ & H & H¥¥
¥hline
収率 (¥%) & 97 & 89 & 87      &      96      & 95      & 92 & 97 & 91¥¥
¥end{tabular}
¥end{center}
```

Swenton らは、キノモノアセタールの位置選択的な環生成反応を見出した。キノモノアセタールとして cmb02 を用いて、この反応をおこなえば、アントラセン骨格 (cmb03) を合成することができる。さらに、 cmb04 を用いれば、アントラシクレン (cmb05) の骨格合成に応用することができる。

```
¥setbox0=¥hbox{¥begin{picture}(800,950)(0,0)
¥put(0,0){¥bzdrv{3==COOH;2==CH$_2$}}
¥put(780,800){¥lmoiety{CH$_3$OC0}}
¥put(740,700){¥line(0,1){80}}¥end{picture}}
%
¥setbox1=¥hbox{¥begin{picture}(1300,950)(0,0)
¥put(0,0){¥anthracenev[pa]{{{10}D}==0;%
9=¥lmoiety{CH$_3$OC0¥kern-10pt};1==OCH$_3$;4==OH}}%
¥put(1250,340){¥sixfusev}{2==R}{e}}¥end{picture}}
%
¥setbox2=¥hbox{¥kern-30pt R = H,¥kern15pt
¥lower35pt¥hbox{¥fiveheterohi{2==0;5==0}{1Sa==CH$_3$;1Sb==}}¥hss}
¥begin{flushleft}
¥cdtwocell{0pt}{90pt}{¥copy0}{¥compd¥label{cmb01}}
¥raisebox{8pt}{+}
¥cdtwocell{0pt}{80pt}{¥bzdrv[p]{4D==0;2==R;1Sb==CH$_3$0;1Sa==OCH$_3$}}%
{¥compd¥label{cmb02}}
¥hskip-15pt¥reactrarrow{-10pt}{2cm}{1} NaH}%
(2) H$^{+}$ ¥¥[20pt] ¥rlap{¥mbox{R = H, ~Br, ~CH$_3$}}}%
¥hskip-20pt¥cdtwocell{0pt}{130pt}{¥anthracenev[pa]{{{10}D}==0;%
9=¥lmoiety{CH$_3$OC0¥kern-10pt};1==OCH$_3$;2==R;4==OH}}%
{¥compd¥label{cmb03}} ¥¥[10pt] %改行した後, 10pt 空け
¥cdtwocell{0pt}{90pt}{¥copy0}{¥large¥bf ¥ref{cmb01}}
¥raisebox{8pt}{+}
¥cdtwocell{0pt}{120pt}{¥decalinev[gk]{5D==0;2==R;8Sb==CH$_3$0;8Sa==OCH$_3$}}%
{¥compd¥label{cmb04}}
¥hskip-15pt¥reactrarrow{-35pt}{2cm}{1} NaH}{2) H$^{+}$ ¥¥[-10pt] ¥box2¥hss}
¥hskip-60pt¥cdtwocell{0pt}{150pt}{¥box1}%
{¥mbox{¥kern50pt¥compd¥label{cmb05}} ¥quad R = H, Ac}}
¥end{flushleft}
```

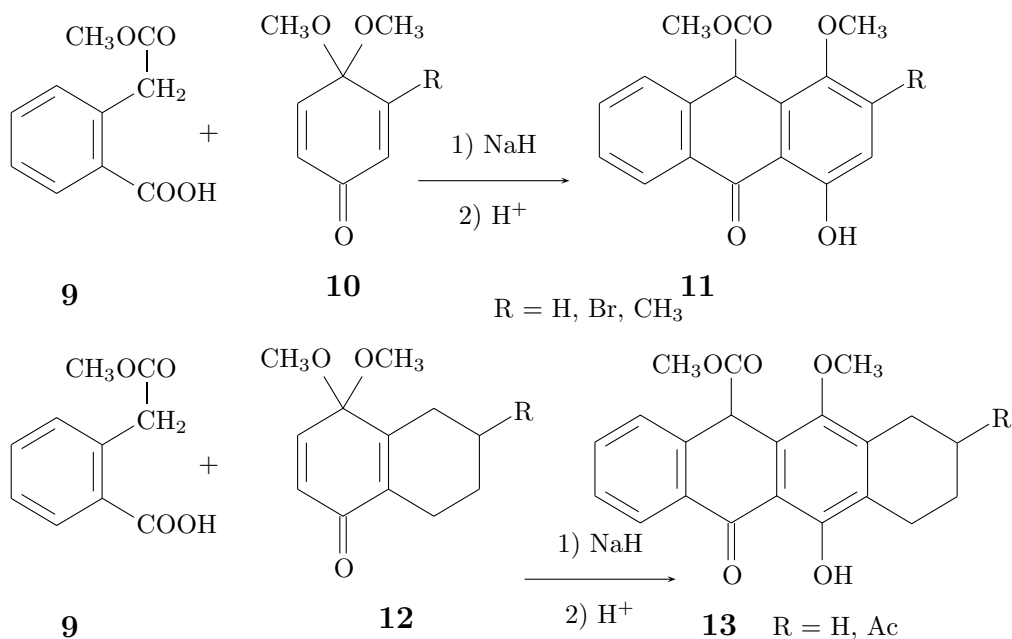
4.2.2 出力

McKillop らの報告したキノモノアセタール (8) の合成法は、*p*-メトキシフェノール類 (7) を硝酸タリウム (III) (TTN)/メタノールで酸化するものである。次に示すように高い収率で目的の誘導体が得られる。無置換の 8a については、求核反応剤との反応などが特に詳しく検討されている。



| 誘導体 | 8a | 8b | 8c | 8d | 8e | 8f | 8g | 8h |
|----------------|----|-----------------|-----------------|----------------------------------|------------------|--------------------|----|----|
| R ¹ | H | CH ₃ | CH ₃ | C(CH ₃) ₃ | H | H | Cl | Br |
| R ² | H | H | H | H | OCH ₃ | OCH ₃ | H | H |
| R ³ | H | H | H | H | OCH ₃ | OCH ₃ | H | H |
| R ⁴ | H | H | CH ₃ | C(CH ₃) ₃ | H | OCOCH ₃ | H | H |
| 収率 (%) | 97 | 89 | 87 | 96 | 95 | 92 | 97 | 91 |

Swenton らは、キノンモノアセタールの位置選択的な環生成反応を見出した。キノンモノアセタールとして 10 を用いて、この反応をおこなえば、アントラセン骨格 (11) を合成することができる。さらに、12 を用いれば、アントラシクレン (13) の骨格合成に応用することができる。

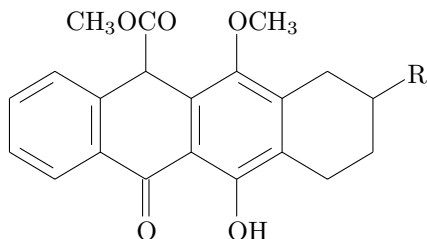


[注] アントラシクレン (13) は、次のように組版することもできます。

```

\begin{XyMcompd}(1400,950)(300,10)
\hfill
\hanthracenev[{}]{2==R}{E}{ach}op[{}]{10}D==0;%
9==\lap{CH$_3$O}CO;1==OCH$_3$;4==OH}%
\end{XyMcompd}

```



4.3 例文 3

この例文の題材は、*Bull. Chem. Soc. Jpn.*³から採ったものです。 \LaTeX の命令を組み合わせ、ピリジノファンを描く命令`\pyridinophane`を作っています。これによって、ソースリストがすっきりする効果があります。もしも、このようにして作った命令に汎用性があるならば、新たにパッケージファイルを起こしてもよいでしょう。

4.3.1 ソースリスト

[7](2,6)ピリジノファン ([\cmc01](#)) の α 位置のメチレン鎖は、活性であり、メチルリチウムで処理すると容易にリチオ体 ([\cmc02](#)) に変わる。この溶液に酸素を吹き込むと、アルコール体 ([\cmc03](#)) が得られる。これを酸化し、ケトン体 ([\cmc04](#)) に変換した。ケトン体は、アセタール ([\cmc05](#)) に誘導することができる。

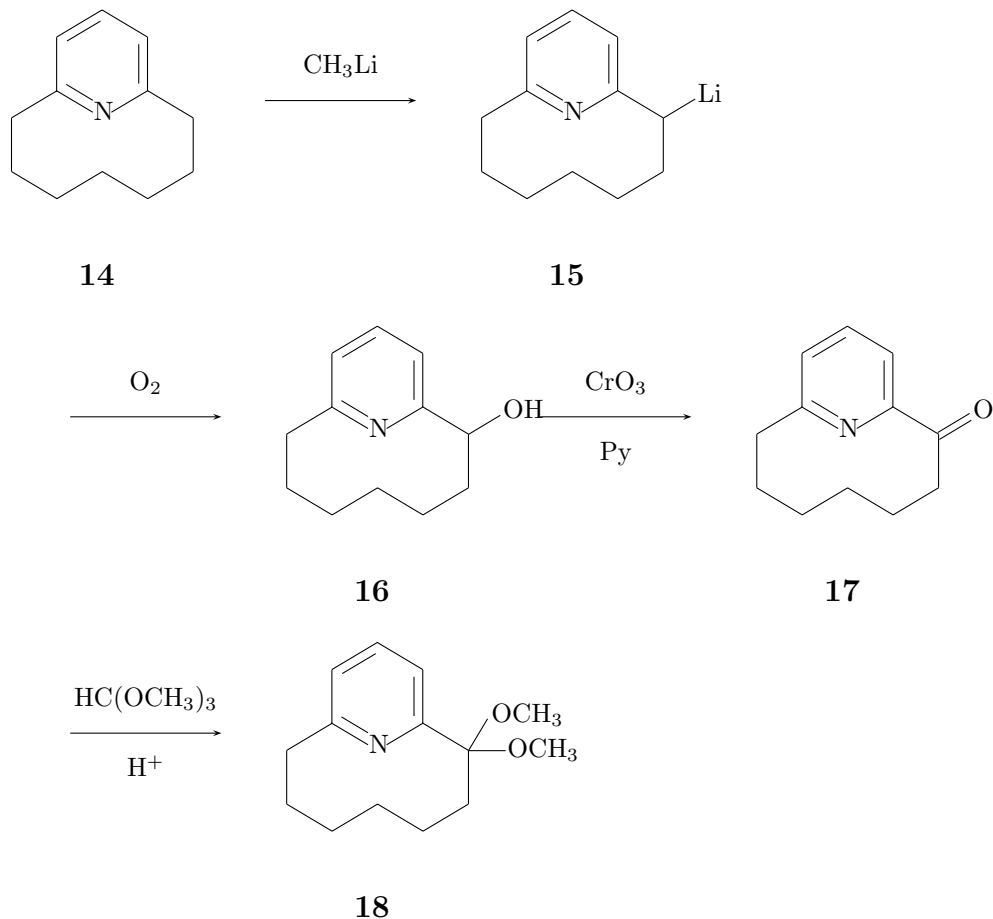
```
\def\pyridinophane#1{%ピリジノファンのマクロを一時的に作成
\begin{picture}(1200,1000)(-450,-550)
\put(0,0){\sixfusev{a}{b}}
\put(171,-303){\sixfusev{#1}{e}{f}}
\put(-230,-342){\pyridinevi{}}
\end{picture}}

\noindent
\cdoctwo{0pt}{120pt}{\pyridinophane}{\compdlabel{cmc01}}
\reactrarrow{10pt}{2cm}{CH$_3$Li}{\strut}
\hskip-10pt\cdoctwo{0pt}{120pt}{\pyridinophane{2=Li}}%
{\compdlabel{cmc02}} \#
\hspace*{50pt} \reactrarrow{10pt}{2cm}{O$_2$}{\strut}
\hskip-10pt\cdoctwo{0pt}{120pt}{\pyridinophane{2=OH}}%
{\compdlabel{cmc03}}
\reactrarrow{10pt}{2cm}{CrO$_3$}{Py}
\hskip-10pt\cdoctwo{0pt}{120pt}{\pyridinophane{2D=O}}%
{\compdlabel{cmc04}} \#
\hspace*{50pt} \reactrarrow{10pt}{2cm}{HC(OCH$_3$)$_3$}{H$^+$}
\hskip-10pt\cdoctwo{0pt}{120pt}%
{\pyridinophane{2Sa=OCH$_3$;2Sb=OCH$_3$}}{\compdlabel{cmc05}}
```

³Shinsaku Fujita, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **44**, 2827–2833 (1971).

4.3.2 出力

[7](2,6) ピリジノファン (14) の α 位置のメチレン鎖は、活性であり、メチルリチウムで処理すると容易にリチオ体 (15) になる。この溶液に酸素を吹き込むと、アルコール体 (16) が得られる。これを酸化し、ケトン体 (17) に変換した。ケトン体は、アセタール (18) に誘導することができる。



4.3.3 別法

\LaTeX バージョン 2.00 以降は、縮合環の入れ子が可能になっているので、ピリジノファンのマクロをこの方式で書き直すことができます。また、chemist パッケージで定義した `XyMcompd` 環境を、`\cdoctwo cell` の代わりに用いることにします。ここでは、さらに、 \LaTeX バージョン 3.00 以降にサポートした構造式縮小の機能を使ってみましょう。

```

\def\Pyridinophane#1#2{%ピリジノファンのマクロを一時的に作成
\begin{XyMcompd}(900,700)(-50,-50){#2}{
\sixheterovi[{\a\sixfusev}{#1}{f}{e}]{f\sixfusev}{a}{b}bdf]{1=N}{
\end{XyMcompd}}

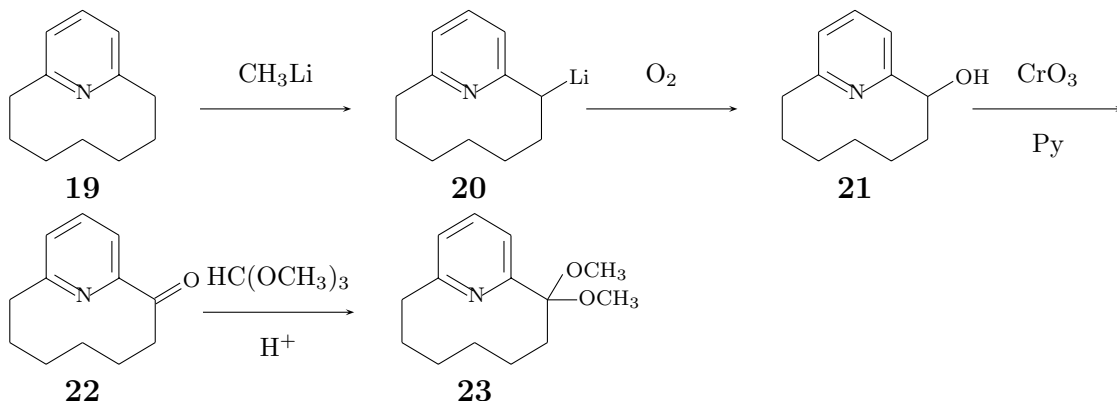
\begin{quote}
\changeunitlength{0.08pt}
\Pyridinophane}{cmcA01}

```

```

\reactrarrow{0pt}{2cm}{CH$_3$Li}{\strut}
\Pyridinophane{2==Li}{cmcA02}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{O$_2$}{\strut}
\Pyridinophane{2==OH}{cmcA03}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{CrO$_3$}{Py}
\Pyridinophane{2D==O}{cmcA04}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{HC(OCH$_3$)$_3$}{H$^+$}
\Pyridinophane{2Sa==OCH$_3$;2Sb==OCH$_3$}{cmcA05}
\end{quote}

```



4.4 例文 4

この例文の題材は, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. I*⁴から採ったものです.

4.4.1 ソースリスト

POCl₃/DMA と POCl₃/DMF は, どちらもスルホン酸を対応するスルホニルクロリドに変換する. しかし, 次の例で示すように, スルファモイル基に対する作用は異なる.

```

\def\yellowdye#1#2{%黄色色素のマクロ
\begin{picture}(2000,1000)(-200,120)
\put(0,0){\fiveterov[d]{1==N;5==N}{#1};1==Ph;2D==O;3D==N--NH}}
\put(890,230){\bzdrh{#2};1==;2==\lmoiety{MeO}}
\end{picture}}

\begin{center}
\cdtwocell{0pt}{200pt}{\yellowdye{4==H$_2$NCO}{5==SO$_2$ONa}}%
{\compd\label{cmd01}}
\reactrarrow{-15pt}{1.5cm}{POCl$_3$}{DMA}
\hspace*{-4pt}\cdtwocell{0pt}{200pt}{\yellowdye{4==H$_2$NCO}{5==SO$_2$Cl}}%
{\compd\label{cmd02}} \quad \text{\texttt{}}[10pt]
\cdtwocell{0pt}{200pt}{\yellowdye{4==H$_2$NCO}{5==SO$_2$ONa}}%
{\large\bf \ref{cmd01}}
\reactrarrow{-15pt}{1.5cm}{POCl$_3$}{DMF}
\hspace*{-4pt}\cdtwocell{0pt}{200pt}{\yellowdye{4==NC}{5==SO$_2$Cl}}%
{\compd\label{cmd03}} \quad \text{\texttt{}}[10pt]
DMA = CH$_3$CON(CH$_3$)$_2$; DMF = HCON(CH$_3$)$_2$

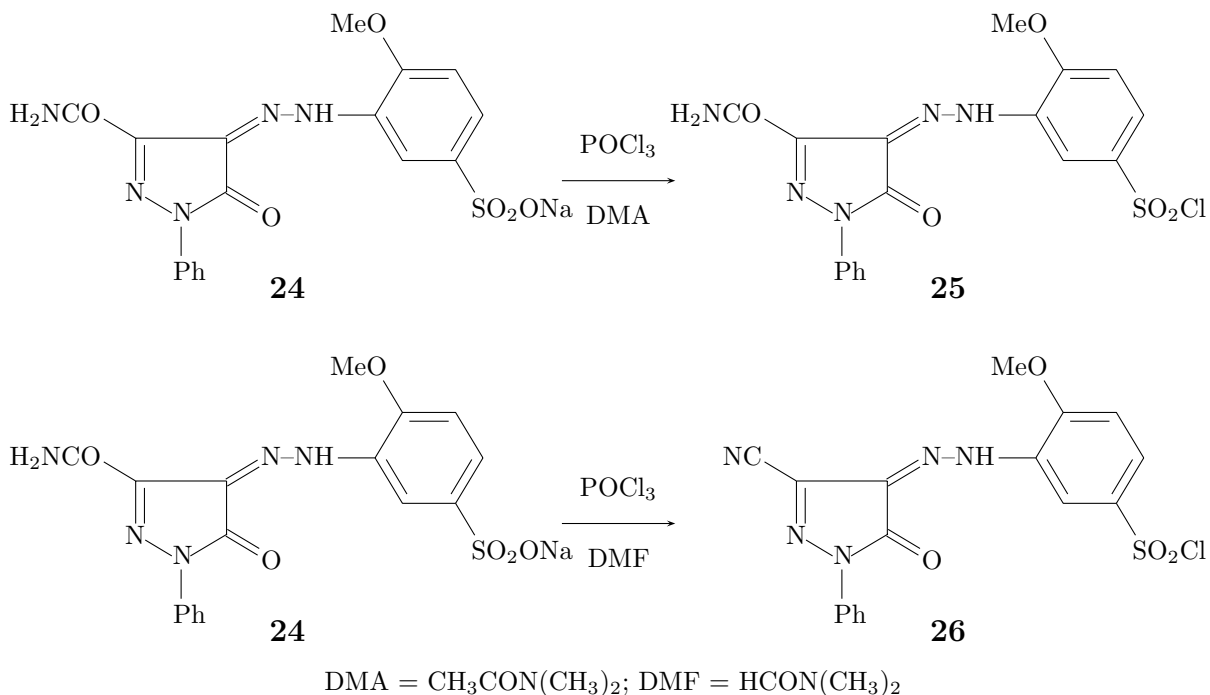
```

⁴Shinsaku Fujita, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. I*, 1519–1522 (1982).

¥end{center}

4.4.2 出力

POCl₃/DMA と POCl₃/DMF は、どちらもスルホン酸を対応するスルホニルクロリドに変換する。しかし、次の例で示すように、スルファモイル基に対する作用は異なる。



4.4.3 別法

X^YMT_EX バージョン 2.00 以降は、置換基の入れ子が可能になっているので、黄色色素のマクロをこの方式で書き直すことができます。また、chemist パッケージで定義した XyMcompd 環境を、¥cdtwocell の代わりに用いることにします。一部、化合物番号を書き出すために tabular 環境を用います。さらに、X^YMT_EX バージョン 3.00 以降にサポートした構造式縮小の機能を使います。

```

¥def¥YellowDye#1#2#3{%黄色色素のマクロ
¥begin{XyMcompd}(1900,1000)(-150,0){#3}{
¥fiveheterov[d]{1==N;5==N}{#1}{;1==Ph;2D==0;%
3D==¥ry1(5==N--NH){4==¥bzdhrh{1==(y1);2==¥lmoiety{MeO};#2}}
¥end{XyMcompd}}

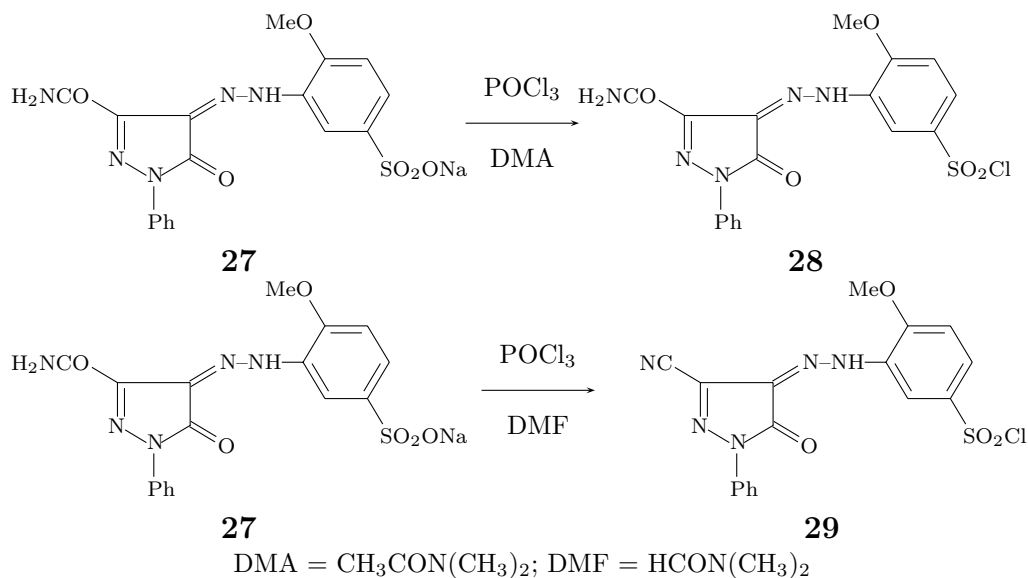
¥begin{center}
¥changeunitlength{0.08pt}
¥YellowDye{4==H$_2$NCO}{5==SO$_2$ONa}{comdB01}
¥reactrarrow{10pt}{1.5cm}{POCl$_3$}{DMA}
¥YellowDye{4==H$_2$NCO}{5==SO$_2$Cl}{comdB02} ¥¥
¥begin{tabular}{c}
¥YellowDye{4==H$_2$NCO}{5==SO$_2$ONa}{ } ¥¥

```

```

{\large\cref{comdB01}}\end{tabular}
\reactarrow{10pt}{1.5cm}{POCl_3}{DMF}
\YellowDye{4==NC}{5==SO_2Cl}{comdB03}{ }
DMA = CH_3CON(CH_3)_2; DMF = HCON(CH_3)_2
\end{center}

```



4.5 例文 5

この例文の題材は、東京大学大学院理学系研究科化学専攻の修士課程の平成 2 年度第 2 次試験から採ったものです。少し、変更を加えてあります。この例では、 \LaTeX の list 環境の中で、 \LaTeX の命令を用いています。各項目の間は独立しているので、図形組版の途中でページが変わっても自動的に処理されます。この点は、ChemDraw などで図形を作って取り込む方法に比較して便利などとおもわれます。相互参照用のカウンターとして、この箇条書に付属するものを利用しています。

4.5.1 ソースリスト

```

次の反応式の生成物の構造を記せ。さらに付問に答えよ。
\setbox0=\hbox{\%cyclopentadiene dimer}
\begin{picture}(1000,800)(0,0)
\put(0,0){\bornane[e]{2Sb==H;3Sb==H;2Sa==;3Sa==}}
\put(800,100){\line(5,3){168}}
\put(810,130){\line(5,3){120}}
\put(874,352){\line(3,-5){90}}
\end{picture}
\setbox1=\hbox{\%}
\begin{picture}(1200,800)(100,0)
\put(0,0){\cyclopentaneh{}}
\put(606,0){\cyclopentanehi{}}
\put(646,400){\line(1,0){200}}
\put(646,400){\line(0,1){220}}
\put(846,400){\line(0,1){220}}
\put(506,630){H0}

```



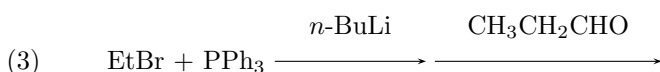
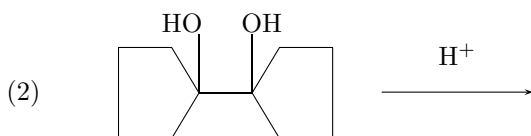
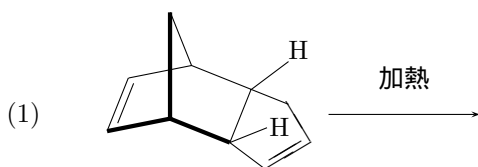
```

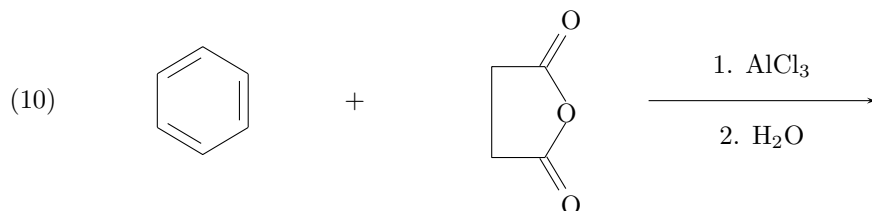
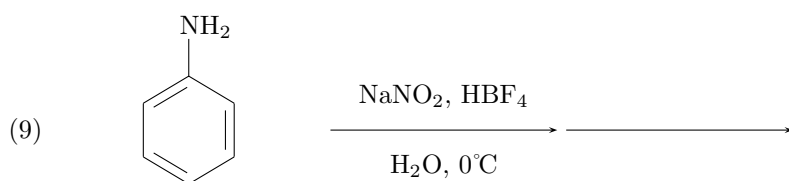
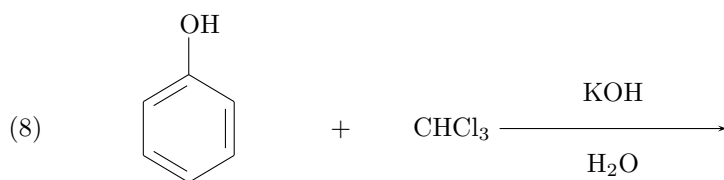
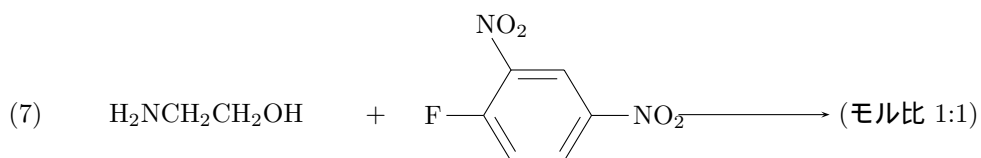
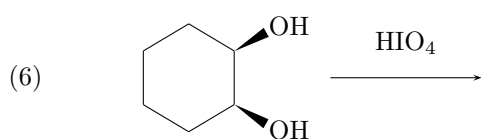
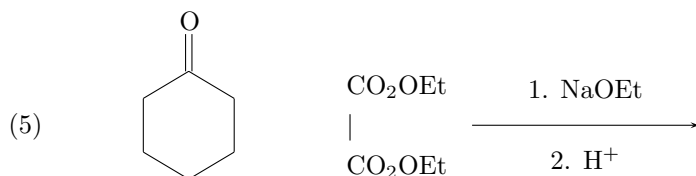
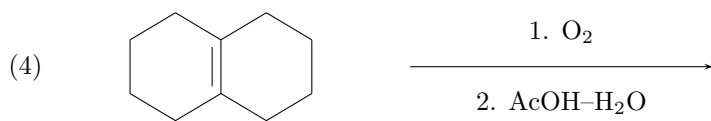
\put(806,630){OH}
\end{picture}}
\begin{list}{(\arabic{enumi})}{\fusecounter{enumi}\parsep=0pt \itemsep=0pt}
\item \label{d1} \cdonecell{10pt}{100pt}{\box0}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{加熱}{\strut}
\item \label{d2} \cdonecell{0pt}{100pt}{\box1}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{H^{+}}{\strut}
\item \hskip20pt EtBr + PPh$_3$
\reactrarrow{0pt}{2cm}{n-BuLi}{\strut}
\reactrarrow{0pt}{3cm}{CH$_3$CH$_2$CHO}{\strut}
\item \cdonecell{0pt}{130pt}{\decalinev[k]}
\reactrarrow{0pt}{4cm}{1. O$_2$}{2. AcOH--H$_2$O}
\item \cdonecell{0pt}{100pt}{\cyclohexanev{1D=0}}
\begin{tabular}{lll}CO$_2$Et \& \& CO$_2$Et \& \end{tabular}
\reactrarrow{0pt}{3cm}{1. NaOEt}{2. H^{+}}
\item \cdonecell{0pt}{100pt}{\cyclohexanev{2B==OH;3B==OH}}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{HI$_4$}{\strut}
\item \hskip20pt H$_2$NCH$_2$CH$_2$OH \quad + \quad {}
\cdonecell{0pt}{100pt}{\bzdrh{1==F;2==NO$_2$;4==NO$_2$}}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{}{} (モル比 1:1)
\item \cdonecell{0pt}{100pt}{\bzdrv{1==OH}} + \quad \quad CHCl$_3$
\reactrarrow{0pt}{3cm}{KOH}{H$_2$O}
\item \cdonecell{0pt}{100pt}{\bzdrv{1==NH$_2$}}
\reactrarrow{0pt}{3cm}{NaNO$_2$, HBF$_4$}{H$_2$O, 0\deg C}
\reactrarrow{0pt}{3cm}{}{}
\item \label{d3} \cdonecell{0pt}{100pt}{\bzdrv{}} +
\cdonecell{0pt}{100pt}{\fiveheteroh{1==0}{2D==0;5D==0}}
\reactrarrow{0pt}{3cm}{1. AlCl$_3$}{2. H$_2$O}
\item [付問] 問題 (\ref{d1}), (\ref{d2}), (\ref{d3}) の反応の名称を書け.
\end{list}

```

4.5.2 出力

次の反応式の生成物の構造を記せ．さらに付問に答えよ．





付問 問題 (1), (2), (10) の反応の名称を書け .

4.6 例文 6

この例文の題材は，Taylor のオーディオコースのテキスト⁵から採ったものです．少し，変更を加えてあります．

4.6.1 ソースリスト

3-Formylpyrrole (¥cref{cme06}) は furan (¥cref{cme01}) から次の経路で合成される．

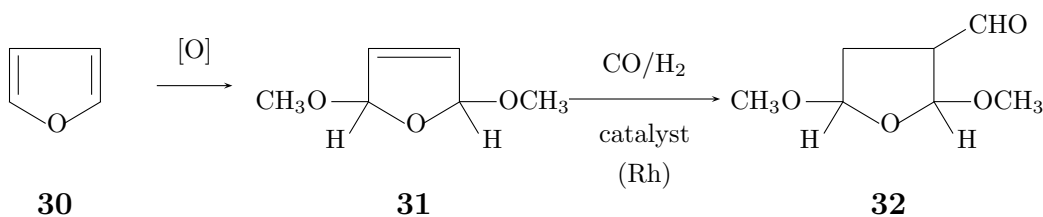
```

¥noindent
¥cdtwocell{0pt}{90pt}{¥fiveheterov[bd]{1==0}{¥vskip-10pt}%
  {¥compd¥label{cme01}}
  ¥hskip-10pt¥reactrarrow{0pt}{1cm}{[O]}¥hskip20pt
¥cdtwocell{0pt}{90pt}{¥fiveheterov[c]{1==0}%
  {2Sa==OCH$_3$;5Sa==CH$_3$0;2Sb==H;5Sb==H}¥vskip-10pt}%
  {¥compd¥label{cme02}}
  ¥hskip10pt¥reactrarrow{-5pt}{2cm}{CO/H$_2$}{catalyst ¥¥ (Rh)}¥hskip15pt
¥cdtwocell{0pt}{90pt}{¥fiveheterov{1==0}%
  {2Sa==OCH$_3$;5Sa==CH$_3$0;2Sb==H;5Sb==H;3==CHO}¥vskip-10pt}%
  {¥compd¥label{cme03}} ¥¥
¥hspace*{15pt} ¥reacteqarrow{0pt}{1cm}{-}{-} ¥hskip15pt
¥cdtwocell{0pt}{90pt}{¥fiveheterov{1==0}%
  {2Sa==OCH$_3$;5Sa==CH$_3$0;2Sb==H;5Sb==H;3D==CHOH}}{¥compd¥label{cme04}}
  ¥hskip10pt¥reactrarrow{0pt}{2.5cm}{TsOH}{H$_2$NCOOC$_2$H$_5$}¥hskip-20pt
¥cdtwocell{0pt}{90pt}{¥fiveheterov[bd]{1==N}%
  {1==COOC$_2$H$_5$;3==CHO}}{¥compd¥label{cme05}}
  ¥hskip-15pt¥reactrarrow{0pt}{1.5cm}{OH$^-$}{¥strut}¥hskip-15pt
¥cdtwocell{0pt}{90pt}{¥fiveheterov[bd]{1==N}%
  {1==H;3==CHO}}{¥compd¥label{cme06}}

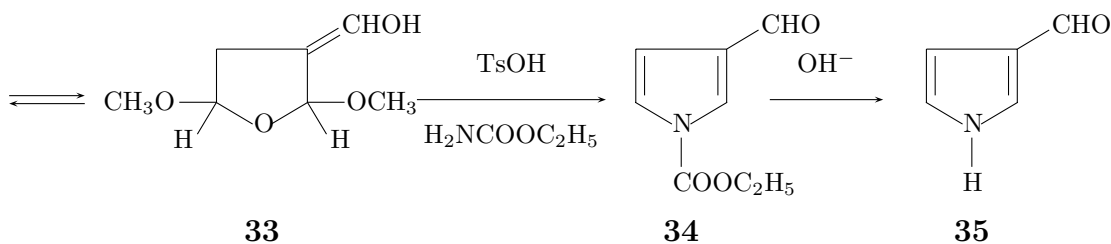
```

4.6.2 出力

3-Formylpyrrole (35) は furan (30) から次の経路で合成される．



⁵E. C. Taylor, *Principles of Heterocyclic Chemistry*, ACS Audio Courses (1974).



4.7 例文 7

この例文の題材も，Taylor のオーディオコースのテキスト⁶から採ったものです．少し，変更を加えています．

4.7.1 ソースリスト

```

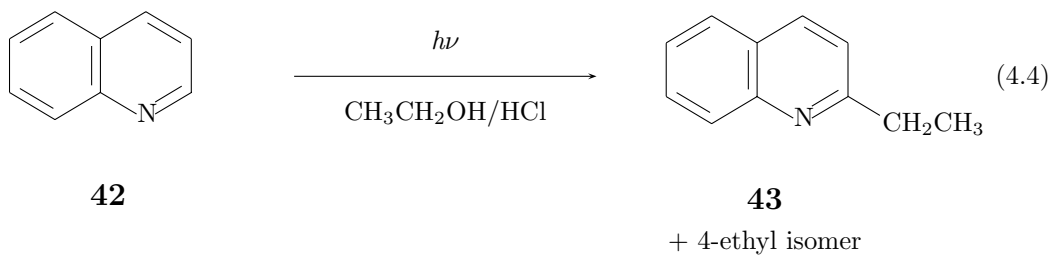
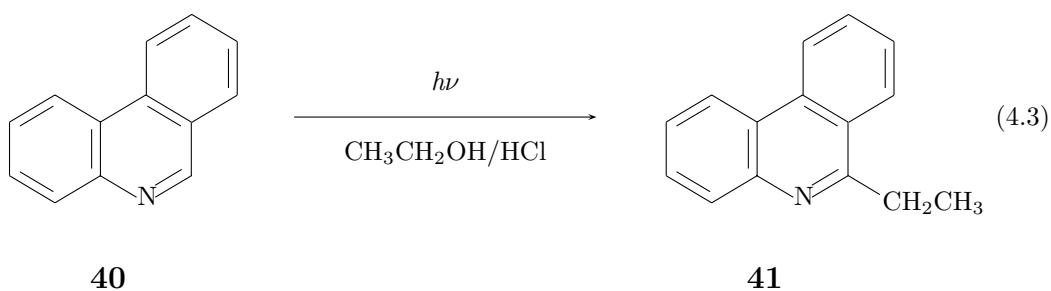
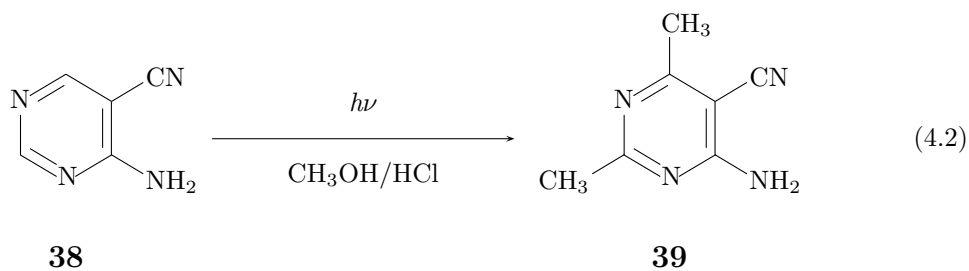
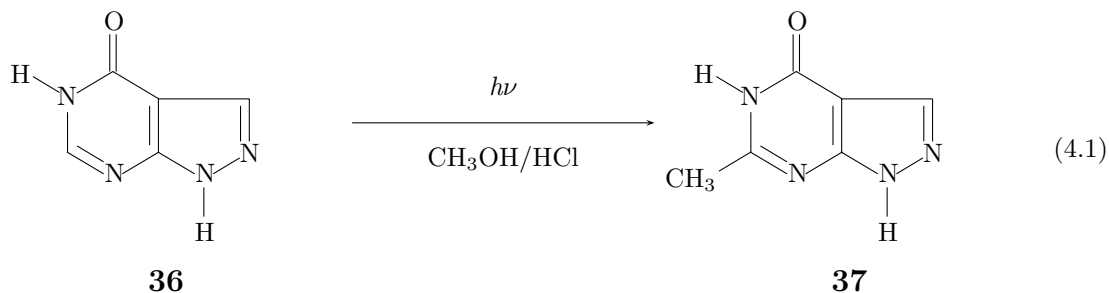
式 \ref{eqf01}--\ref{eqf04} にあげたのは，
ヘテロ環の光化学的なアルキル化の代表例である．
キノリン (\cref{cmf07}) では，2-位と 4-位にアルキル化が起こる．
\def\phenanthridine#1{%フェナントリジンのマクロ
\begin{picture}(1200,1200)(0,0)
\put(0,0){\quinolinevi{#1}}
\put(915,543){\sixfusev[bf]{}{d}}
\end{picture}}
%eqnarray 環境で描画
\begin{eqnarray}
\cdtwocell{0pt}{120pt}{\nonaheterov[bjg]{1==N;2==N;5==N;7==N}%
{1==H;5==H;4D==0}}{\compd\label{cmf01}}
& \reactrarrow{10pt}{4cm}{\it h}\nu\{CH_3OH/HCl\} &
\cdtwocell{0pt}{120pt}{\nonaheterov[bjg]{1==N;2==N;5==N;7==N}%
{1==H;5==H;4D==0;6==CH_3}}{\compd\label{cmf02}} \label{eqf01}\YY[5pt]
\cdtwocell{0pt}{90pt}{\sixheterovi[bd]{}{1==N;5==N}%
{2==NH_2;3==CN}}{\vskip-10pt}{\compd\label{cmf03}}
& \reactrarrow{0pt}{4cm}{\it h}\nu\{CH_3OH/HCl\} &
\cdtwocell{0pt}{90pt}{\sixheterovi[bd]{}{1==N;5==N}%
{2==NH_2;3==CN;4==CH_3;6==CH_3}}{\vskip-10pt}{\compd\label{cmf04}} \YY
\cdtwocell{0pt}{120pt}{\phenanthridine{}{\vskip-10pt}}%
{\compd\label{cmf05}}
& \reactrarrow{0pt}{4cm}{\it h}\nu\{CH_3CH_2OH/HCl\} &
\hskip-10pt\cdtwocell{0pt}{120pt}{\phenanthridine{2==CH_2CH_3}}{\vskip-10pt}}%
{\compd\label{cmf06}} \YY
\cdtwocell{0pt}{120pt}{\quinolinevi{}{\vskip-10pt}}%
{\compd\label{cmf07}}
& \reactrarrow{0pt}{4cm}{\it h}\nu\{CH_3CH_2OH/HCl\} &
\hskip-10pt\cdtwocell{-10pt}{120pt}{\quinolinevi{2==CH_2CH_3}}{\vskip-10pt}}%
{\compd\label{cmf08}} \YY + 4-ethyl isomer} \label{eqf04}
\end{eqnarray}

```

⁶E. C. Taylor, *Principles of Heterocyclic Chemistry*, ACS Audio Courses (1974).

4.7.2 出力

式 4.1-4.4 にあげたのは、ヘテロ環の光化学的なアルキル化の代表例である。キノリン (42) では、2-位と 4-位にアルキル化が起こる。



4.7.3 別法

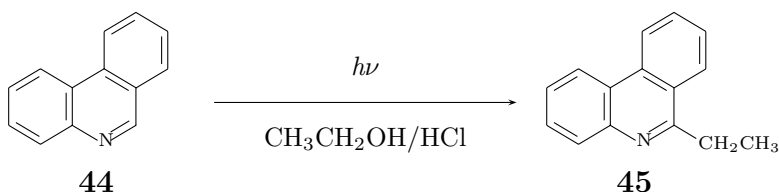
X_YMI_EX バージョン 2.00 以降は、縮合環の入れ子が可能になっているので、フェナントリジンのマクロをこの方式で書き直すことができます。tabular 環境を $\%cdtwoce11$ の代わりに用いることにし、構造式縮小の機能を使ってみましょう。

$\%def\%Phenanthridine\#1\{\%フェナントリジンのマクロ$

```

\begin{picture}(1000,800)(200,200)
\decapeterovi[acfhk{c%sixfusev[bf]{-}{d}}]{1==N}{#1}
\end{picture}
%
\begin{center}
\changeunitlength{0.07pt}
\begin{tabular}{c}
\Phenanthridine{} \text{\text{}}
\compd\label{cmfB05}
\end{tabular}
\reactrarrow{0pt}{4cm}{\textit h}\nu$}{CH$_3$CH$_2$OH/HCl}
\begin{tabular}{c}
\Phenanthridine{2==CH$_2$CH$_3$} \text{\text{}}
\compd\label{cmfB06}
\end{tabular}
\end{center}
\end{center}

```



4.8 例文 8

この例文の題材は，*Org. Synth.*⁷から採ったものです．少し，変更を加えてあります．

4.8.1 ソースリスト

式 $\ref{g1}$ に示したのは，
N-*tert*-butoxycarbonyl-2-bromopyrrole (式 $\ref{cmg04}$) の
 合成法である．第 1 段のピロール (式 $\ref{cmg01}$) のブロム化には，
 1,3-dibromo-5,5-dimethylhydantoin を用いる．反応開始剤として，
 AIBN が必要である．生じた 2-bromopyrrole は不安定なので，
 単離せずに，第 2 段階のピロールの *N*-BOC 化に進む．
 式 $\ref{g1}$ の総収率は，82--89% である．式 $\ref{g2}$ は，
N-*tert*-butoxycarbonyl-2-trimethylsilylpyrrole (式 $\ref{cmg07}$) の
 合成法である．式 $\ref{g2}$ の総収率は，80--85% である．

```

\newcounter{shikiban}
\def\theshikiban{\Alph{shikiban}}
\begin{list}{\Alph{shikiban}.}{\usecounter{shikiban}}
\item \label{g1}
\cdtwocell{10pt}{80pt}{\pyrrole{1==H}}{\compd\label{cmg01}}
+ \quad
\cdtwocell{10pt}{80pt}{\fiveheterov{1==N;3==N}%
{1==Br;2D==0;3==Br;4D==0;5Sa==H$_3$C;5Sb==H$_3$C}}%
{\compd\label{cmg02}}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{AIBN}{\textit strutt}
\cdtwocell{10pt}{80pt}{\pyrrole{1==H;2==Br}}{\compd\label{cmg03}} \text{\text{}}
\hspace*{\fill}

```

⁷W. Chen, E. K. Stephenson, M. P. Cava and Y. A. Jackson, *Org. Synth.*, **70**, 151 (1991).

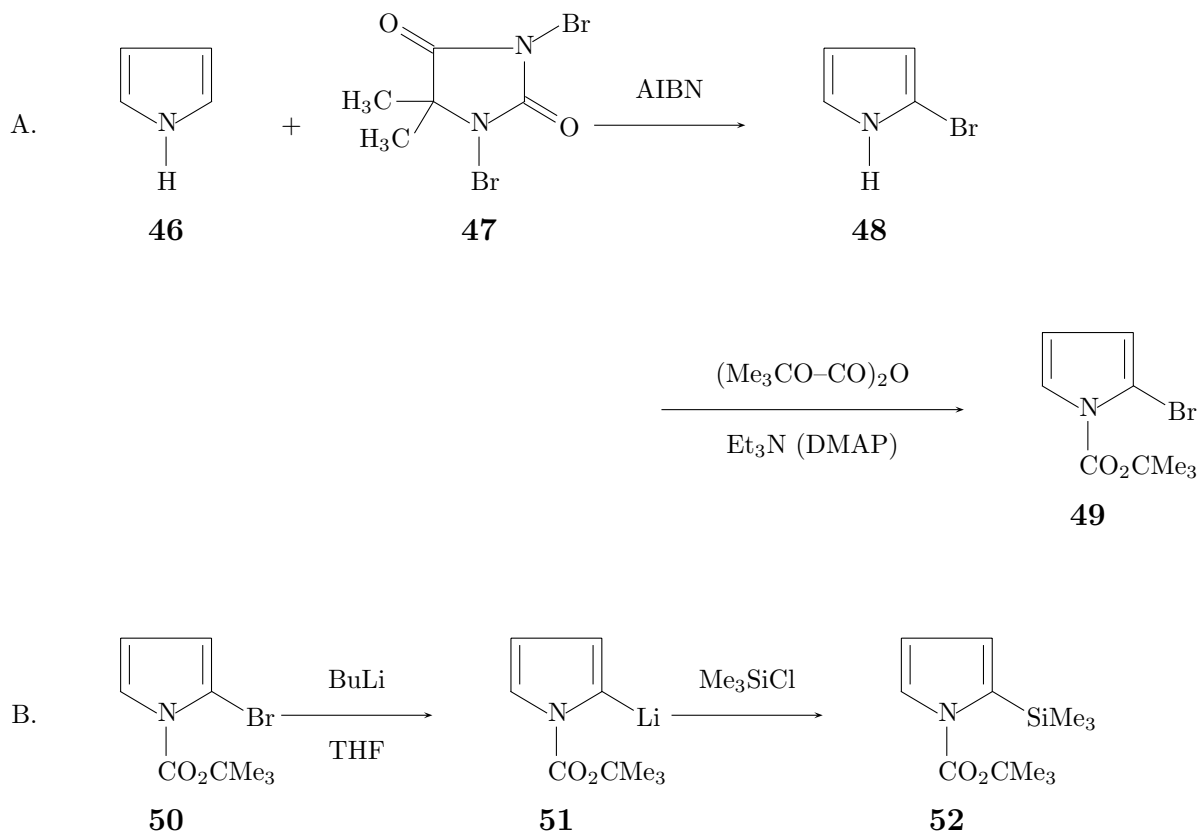
```

\reactrarrow{0pt}{4cm}{(Me$_3$CO--CO)$_2$O}{Et$_3$N (DMAP)}
\cdtwoocell{10pt}{80pt}{\pyrrole{1==CO$_2$CMe$_3$;2==Br}}%
{\compd¥label{cmg04}}
¥item ¥label{g2}
\cdtwoocell{10pt}{80pt}{\pyrrole{1==CO$_2$CMe$_3$;2==Br}}%
{\compd¥label{cmg05}}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{BuLi}{THF}
\cdtwoocell{10pt}{80pt}{\pyrrole{1==CO$_2$CMe$_3$;2==Li}}%
{\compd¥label{cmg06}}
\reactrarrow{0pt}{2cm}{Me$_3$SiCl}{¥strut}
\cdtwoocell{10pt}{80pt}{\pyrrole{1==CO$_2$CMe$_3$;2==SiMe$_3$}}%
{\compd¥label{cmg07}}
¥item[] AIBN: azoisobutyronitrile, DMAP: 4-dimethylaminopyridine,
THF: tetrahydrofuran
¥end{list}

```

4.8.2 出力

式 A に示したのは、*N*-*tert*-butoxycarboxyl-2-bromopyrrole (49) の合成法である。第 1 段のピロール (46) のブロム化には、1,3-dibromo-5,5-dimethylhydantoin を用いる。反応開始剤として、AIBN が必要である。生じた 2-bromopyrrole は不安定なので、単離せずに、第 2 段階のピロールの *N*-BOC 化に進む。式 A の総収率は、82–89% である。式 B は、*N*-*tert*-butoxycarboxyl-2-trimethylsilylpyrrole (52) の合成法である。式 B の総収率は、80–85% である。



AIBN: azoisobutyronitrile, DMAP: 4-dimethylaminopyridine, THF: tetrahydrofuran

4.9 例文 9

この例文の題材も, *Org. Synth.*⁸から採ったものです. 少し, 変更を加えてあります.

4.9.1 ソースリスト

N-fluoropyridinium triflate (¥cref{cmh02}) によるフルオロ化の例を示す.

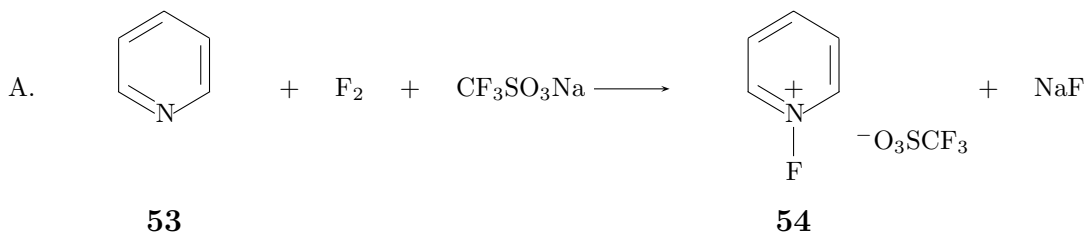
```

¥%newcounter{shikiban}
¥%def¥theshikiban{¥Alph{shikiban}}
¥begin{list}{¥Alph{shikiban}.}{¥usecounter{shikiban}}
¥item ¥label{gg1}
¥cdtwocell{0pt}{80pt}{¥pyridinevi{}}{¥compd¥label{cmh01}}
+ ¥quad F$_2$ ¥quad + ¥quad CF$_3$SO$_3$Na
¥reactrarrow{0pt}{1cm}{}{}
¥cdtwocell{0pt}{80pt}{¥pyridinevi[bdf{1+}]{1==F}}{¥compd¥label{cmh02}}
+ ¥quad NaF
¥item ¥label{gg2}
¥cdtwocell{10pt}{160pt}{¥steroid[ack]{3==CH$_3$0;{{17}D}==0;{{13}B}==}}%
{¥compd¥label{cmh03}}
¥reactrarrow{0pt}{3cm}{CF$_3$SO$_2$OSiMe$_3$}{Et$_3$N}
¥cdtwocell{10pt}{160pt}{¥
steroid[acks]{3==CH$_3$0;{{17}}==OSiMe$_3$;{{13}B}==}}%
{¥compd¥label{cmh04}}
¥item ¥label{gg3}
¥cdtwocell{10pt}{160pt}{¥
steroid[acks]{3==CH$_3$0;{{17}}==OSiMe$_3$;{{13}B}==}}%
{¥large¥bf ¥ref{cmh04}}
¥reactrarrow{0pt}{3cm}{¥cref{cmh02}}{¥strut}
¥cdtwocell{10pt}{160pt}{¥steroid[ack]{3==CH$_3$0;{{17}D}==0;{{13}B}==;%
{{16}A}==F}}{¥compd¥label{cmh05}}
¥end{list}

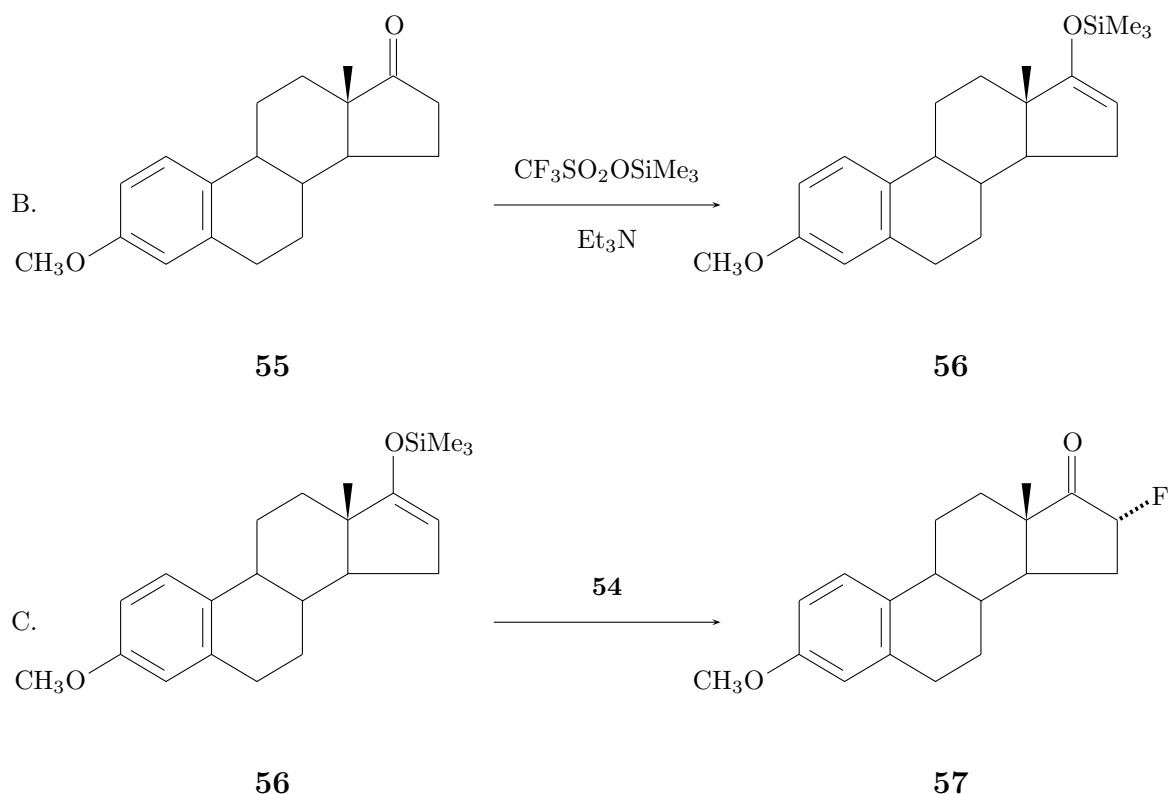
```

4.9.2 出力

N-fluoropyridinium triflate (54) によるフルオロ化の例を示す.



⁸T. Umemoto, K. Tomita, and K. Kawada, *Org. Synth.*, **69**, 129 (1990),



4.10 例文 10

この例文の題材は、Fieser and Fieser の教科書⁹から採ったものです。まず、`\benzpyrene` 命令を定義してあります。この定義では、ベンゾピレンの横幅にちょうど一致するように X^M 箱を選びました。すなわち、この命令の内部 `picture` 環境の座標値は、 $171 \times 7 = 1197$ および $400 - 171 = 229$ として計算したものです。 X^M 箱の上端も $240 + 406 + 303 = 949$ で計算して、構造式がちょうど収まるように設定しました。また、この構造式を収める `\cdoctwo` 命令の第 2 引数には 160pt を設定して、化合物名が収まるようにしてあります。

この例では、図全体を `picture` 環境で描き、`center` 環境で中央揃えにした上で `figure` 環境の中に入れました。 `picture` 環境を使ったのは、矢印の斜め直線部分を引くためです。

4.10.1 ソースリスト

```

ベンゾピレンは、通常のベンゼン環とは異なり、
ジアゾニウム塩と反応して、アゾ化合物を与える (図\ref{fig:i1})。
そのほか、この図に示すように、比較的穏やかな反応剤とも反応する。
\def\benzpyrene#1{\%ベンゾピレンのマクロ
\begin{picture}(1197,949)(229,0)
\put(0,0){\hanthracenev[jhpemc]{#1}}
\put(913,543){\sixfusev[bf]{}{}{d}[c]}
\put(1255,543){\sixfusev[ac]{}{}{d}[e]}

```

⁹Fieser and Fieser, *Introduction to Organic Chemistry*, Heath (1957), p566.

```

\end{picture}}
%
%%benzpyrene の XyM 箱が見たいときは%をはずすこと
%{\fboxsep=0pt \fbox{\benzpyrene{}}\quad
% \fbox{\cdtwoce11{0pt}{120pt}{\benzpyrene{}}}\par
%
\begin{figure}[htpb]
\begin{center}
%\fbox{
\begin{picture}(4200,4500)(0,0)
%構造式
\put(0,2100){%
\cdtwoce11{0pt}{120pt}{\benzpyrene{}}%
{3,4-Benzpyrene \text{\textcircled{m.p. 179\textdegree C}}}}
\put(2700,3600){%
\cdtwoce11{0pt}{160pt}{\benzpyrene{{10}}==NC$$_6H$$_4NO$$_2$}}%
{5-$p$-Nitrobenzeneazo-3,4-benzpyrene \text{\textcircled{m.p. 246\textdegree C}}}}
\put(2700,2100){%
\cdtwoce11{0pt}{160pt}{\benzpyrene{{10}}==OC(=O)C$$_3$}}%
{5-Acetoxy-3,4-benzpyrene \text{\textcircled{m.p. 210\textdegree C}}}}
\put(2700,600){%
\cdtwoce11{0pt}{160pt}{\benzpyrene{{10}}==SCN}}%
{5-Thiocyano-3,4-benzpyrene \text{\textcircled{m.p. 241\textdegree C}}}}
%矢印
\put(1400,3600){%
\reactrarrow{20pt}{130pt}{NO$$_2$C$$_6H$$_4N$$_2$Cl, \text{\textcircled{HOAc}}}{77\%}}
\put(1400,2100){%
\reactrarrow{20pt}{130pt}{Pb(OAc)$$_4$ , \text{\textcircled{HOAc--C$$_6H$$_6$}}}{94\%}}
\put(1400,600){%
\reactrarrow{20pt}{130pt}{(SCN)$$_2$ , \text{\textcircled{CCl$$_4$ , 25\textdegree C}}}{82\%}}
%斜めの直線
\put(1405,3765){\line(-3,-5){400}}
\put(1405,765){\line(-3,5){400}}
\end{picture}
%}
\caption{ベンゾピレンの反応性}
\label{fig:i1}
\end{center}
\end{figure}

```

4.10.2 出力

ベンゾピレンは、通常のベンゼン環とは異なり、ジアゾニウム塩と反応して、アゾ化合物を与える (図 4.1)。そのほか、この図に示すように、比較的穏やかな反応剤とも反応する。

4.10.3 別法

縮合環の入れ子機能を使うとベンゾピレンのマクロを簡略にすることができます。tabular 環境を `\cdtwoce11` の代わりに用いることにし、構造式縮小の機能を使うと次のようになります。

```

\def\Benzpyrene#1{%ベンゾピレンのマクロ
\begin{picture}(1197,949)(229,0)
\hanthracenev[jhpemc{m\textsixfusev[bf]}]{D}[c]}%

```

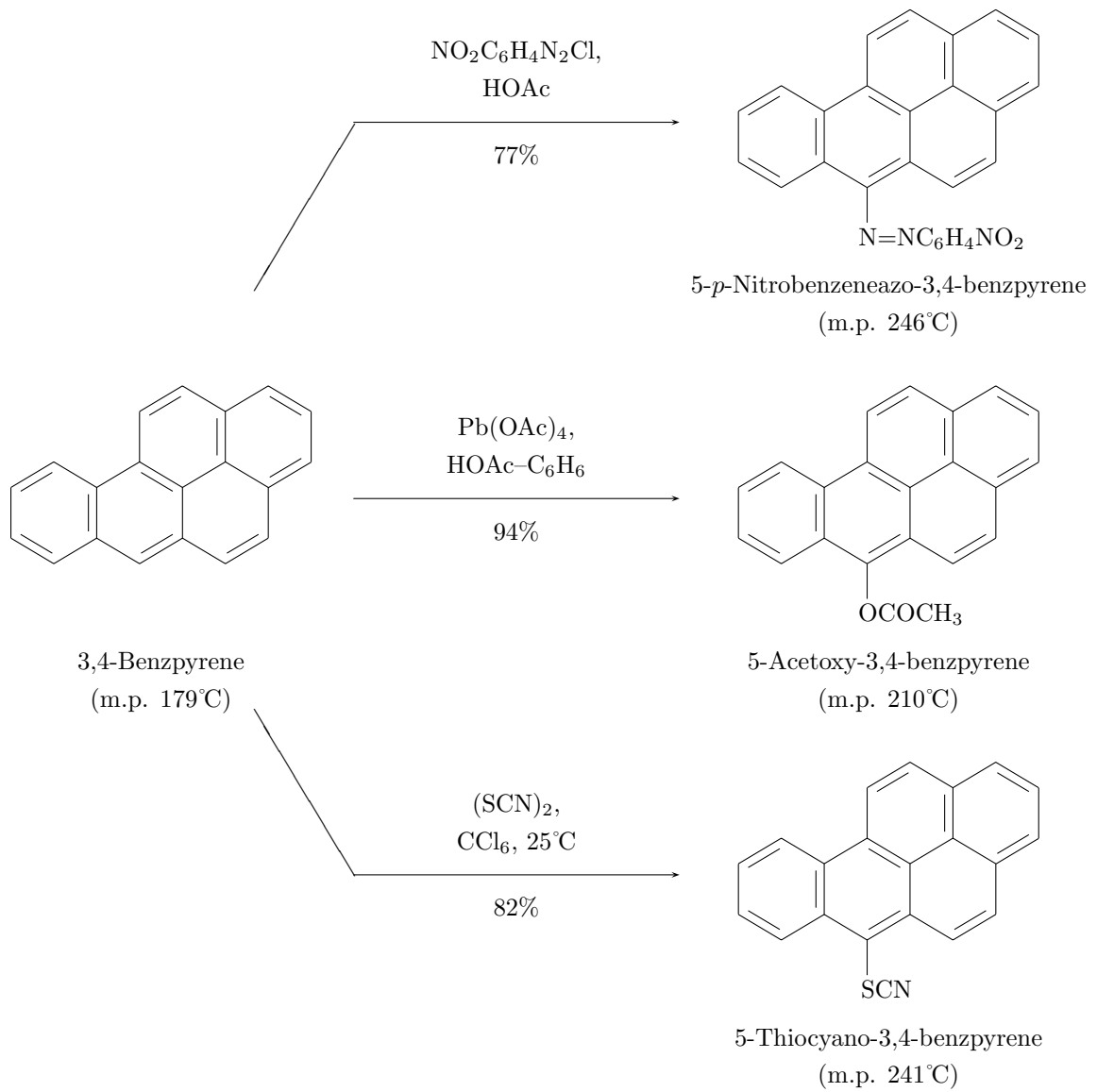
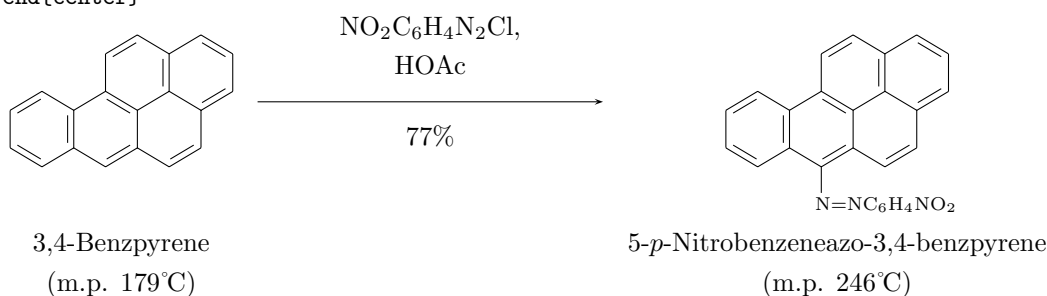


図 4.1: ベンゾピレンの反応性

```

{\a\sixfusev[ac]{}{}{D}[e]}{#1}
\end{picture}}
%
\begin{center}
\changeunitlength{0.07pt}
\begin{tabular}{c}
\BENZPYRENE{} \text{ } \\
3,4-Benzpyrene \text{ } (m.p. 179\text{deg}C) \text{ } \\
\end{tabular}
\reactrarrow{25pt}{130pt}{NO_2C_6H_4N_2Cl, HOAc}{77\%}
\begin{tabular}{c}
\BENZPYRENE{{10}}=N=NC_6H_4NO_2 \text{ } \\
5- $p$ -Nitrobenzeneazo-3,4-benzpyrene \\
\text{ } (m.p. 246\text{deg}C) \text{ } \\
\end{tabular}
\end{center}

```



4.11 例文 11

この例文の題材は、日本化学会誌¹⁰から採ったものです。この例では、table 環境の中に構造式を描いています。この際、構造式の一時保管のために、 \LaTeX の `\newsavebox` 関連の命令を用いています。これについては、拙著 [6, 10.2.4 項] を参照してください。もちろん、同じことを \TeX の `\setbox` 命令を用いておこなうこともできます。化合物番号 `\compd` と誘導体番号 `\deriv` を使用していることにも注意してください。

4.11.1 ソースリスト

```

POCl_3$/DMA によるスルホン酸を対応するスルホニルクロリド (\cref{cmj01}) に
変換する。ピラゾロンアゾ色素に応用した結果を表\ref{tabj01}にまとめた。
POCl_3$/DMF によれば、スルホニルクロリド (\cref{cmj01a}) は
生成せず、カルバモイル基がシアノ基に変化したスルホニルクロリド
(\cref{cmj01g}) が得られる。
%構造式を箱に保管
\newsavebox{\yellowdyeII}
\savebox{\yellowdyeII}{%
\begin{picture}(2000,1500)(0,-400)
\put(0,0){\fiveheterov[d]{1==N;5==N}{1==;2D==0;3D==N--NH;4==R$^1$}}
\put(890,230){\bzdrh{1==;2==R$^2$;4==R$^3$;5==R$^4$}}
\put(0,-546){\bzdrv{}}
\put(1200,-200){\compd\label{cmj01}}
\end{picture}}
%ここから table はじめ

```

¹⁰藤田 眞作, 小山 行一, 小野 茂敏, 日化誌, 1-12 (1991).

```

\begin{table}[htpb]
\begin{center}
\caption{Dye-sulfonyl chloride prepared by POCl3/DMA}
\label{tabj01}
\%fbox{%
\usebox{\%yellowdyeII}
}%
\begin{tabular}{ccccc}
\hline
Dye & R1 & R2 & R3 & R4 & Yield (%) \\
\hline
\deriv\label{cmj01a} & CONH$_2$ & OCH$_3$ & H & SO$_2$Cl & 93 \\
\deriv\label{cmj01b} & CONHCH$_3$ & OCH$_3$ & H & SO$_2$Cl & 94 \\
\deriv\label{cmj01c} & CONHCH$_3$ & OCH$_3$ & H & SO$_2$Cl & 90 \\
\deriv\label{cmj01d} & CONHCH$_3$ & CH$_3$ & H & SO$_2$Cl & 70 \\
\deriv\label{cmj01e} & CONHCH$_3$ & H & CH$_3$ & SO$_2$Cl & 95 \\
\deriv\label{cmj01f} & CN & H & OCH$_2$CH$_2$OCH$_3$ & SO$_2$Cl & 95 \\
\deriv\label{cmj01g} & CN & OCH$_3$ & H & SO$_2$Cl & 95 \\
\hline
\end{tabular}
\end{center}
\end{table}

```

4.11.2 出力

POCl₃/DMA によるスルホン酸を対応するスルホニルクロリド (58) に変換する。ピラゾロンアゾ色素に応用した結果を表 4.1 にまとめた。POCl₃/DMF によれば、スルホニルクロリド (58a) は生成せず、カルバモイル基がシアノ基に変化したスルホニルクロリド (58g) が得られる。

4.11.3 別法

黄色アゾ色素は、置換基の入れ子機能で描くこともできる。縮小機能を利用すると次のように描くことができる。

```

\begin{center}
\%changeunitlength{0.08pt}
\begin{picture}(1700,1500)(0,-400)
\%fiveheterov[d]{1==N;5==N}{1==\%bzdrrv{1==(y1)};2D==0;4==R1;%
3D==\%ryl(5==N--NH){4==\%bzdrh{1==(y1)};2==R2;4==R3;5==R4}}
\end{picture}
\end{center}

```

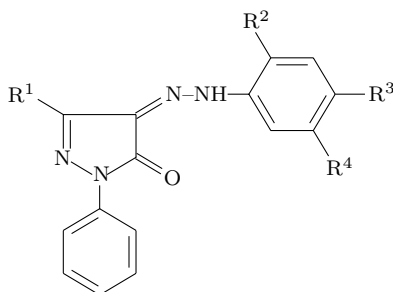
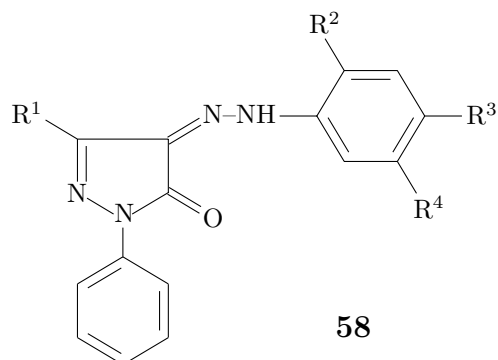


表 4.1: Dye-sulfonyl chloride prepared by POCl_3/DMA 

| Dye | R ¹ | R ² | R ³ | R ⁴ | Yield (%) |
|------------|---------------------|------------------|---|--------------------|-----------|
| 58a | CONH ₂ | OCH ₃ | H | SO ₂ Cl | 93 |
| 58b | CONHCH ₃ | OCH ₃ | SO ₂ Cl | H | 94 |
| 58c | CONHCH ₃ | OCH ₃ | H | SO ₂ Cl | 90 |
| 58d | CONHCH ₃ | CH ₃ | SO ₂ Cl | H | 70 |
| 58e | CONHCH ₃ | H | CH ₃ | SO ₂ Cl | 95 |
| 58f | CN | H | OCH ₂ CH ₂ OCH ₃ | SO ₂ Cl | 95 |
| 58g | CN | OCH ₃ | H | SO ₂ Cl | 95 |

4.12 例文 12

この例文の題材は、有機合成化学協会誌¹¹から採ったものです。矢印の命令として、`\shemellrarrow` を使っています [6, 9.4 節]。また、`grshfboxit` (斜めの影付き) 環境の中で中央揃えにしています。この環境については、拙著 [6, 12.3.5 項] を参照してください。

4.12.1 ソースリスト

キノン--ジスルホンイミド ([\cref{cmk01}](#)および[\cref{cmk04}](#)) および
 キノン--モノスルホンイミド ([\cref{cmk02}](#)および[\cref{cmk05}](#)) の化学は、
 カルボニル基 (C=O) とスルホンイミド基 (C=N--SO₂R) の
 類似性によって、キノン ([\cref{cmk03}](#)および[\cref{cmk06}](#)) の化学と
 対比して理解することができる。¶ `\bigskip`
`\begin{grshfboxit}{380pt}`
`\begin{center}\vspace*{10pt}`
`\cdtwocell{0pt}{100pt}{\bzdrv[pa]{1D==NSO2R;4D==NSO2R}}%`
`{\compd\label{cmk01}}`
`\cdtwocell{0pt}{100pt}{\bzdrv[pa]{1D==0;4D==NSO2R}}%`
`{\compd\label{cmk02}}`
`\shemellrarrow{0pt}{1cm}{-}{-}`
`\cdtwocell{0pt}{80pt}{\bzdrv[pa]{1D==0;4D==0}}{\compd\label{cmk03}} ¶[20pt]`
`\cdtwocell{0pt}{100pt}{\bzdrv[oa]{1D==NSO2R;2D==NSO2R}}\vskip-20pt%`
`{\compd\label{cmk04}}`

¹¹藤田 眞作, 有合化, 43, 153-166 (1985).

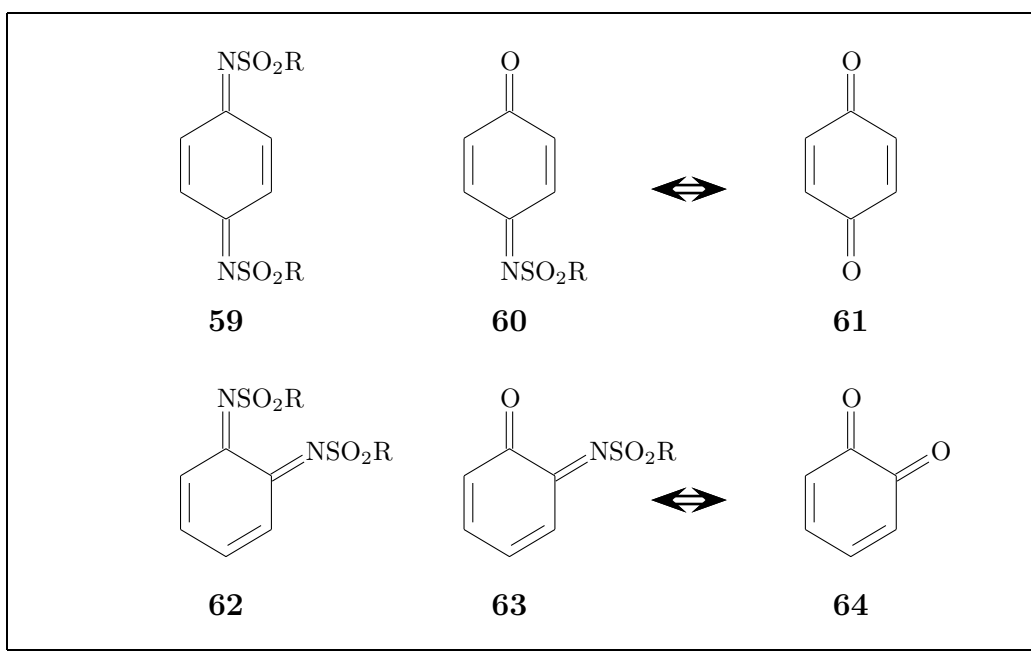
```

\cdtwocell{0pt}{100pt}{\bzdrrv[oa]{1D==0;2D==NSO$_2R}\vskip-20pt}%
{\compd¥label{cmk05}}
\schemelrarrow{0pt}{1cm}{-}{-}
\cdtwocell{0pt}{80pt}{\bzdrrv[oa]{1D==0;2D==0}\vskip-20pt}%
{\compd¥label{cmk06}} ¥par ¥vspace*{10pt}
\end{center}
\end{grshfboxit}

```

4.12.2 出力

キノン-ジスルホンイミド (59 および 62) およびキノン-モノスルホンイミド (60 および 63) の化学は、カルボニル基 (C=O) とスルホンイミド基 (C=N-SO₂R) の類似性によって、キノン (61 および 64) の化学と対比して理解することができる。



4.13 例文 13

この例文の題材は、*Bull. Chem. Soc. Jpn.*¹²から採ったものです。

4.13.1 ソースリスト

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
\def¥bmC{\mbox{\boldmath $C$}}
\def¥bmD{\mbox{\boldmath $D$}}
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
First, we shall clarify the pseudo-point group that
characterizes the symmetry of the pair

```

¹²S. Fujita, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **67**, 2935 (1994).

($\text{\cref{cf:01a}}$ $\xrightarrow{\text{\text{Opt}}}$ $\text{\cref{cf:01b}}$).

The pair coincides with itself on the action of the twelve symmetry operations of the group $\text{\text{\textit{D}}}_{3d}$, (i.e.),

$$\text{\textit{D}}_{3d} = \{I, C_3, C_3^2, S_6, i, S_6^5, C_2(1), C_2(2), C_2(3), \sigma_v(1), \sigma_v(2), \sigma_v(3)\},$$

where each symmetry operation is considered to act on each conformer (A or B) of the pair. However, additional operations should be introduced to treat conformational changes of cyclohexane. For the purpose of exchanging axial and equatorial positions, we introduce a pseudo-dihedral rotation (\widehat{C}_2 -operation), which is a combination of flipping and exchange ($A \xrightarrow{\text{\text{Opt}}} B$), as shown in Fig. $\text{\textit{ff:01}}$.

```

\begin{figure}[h]
\begin{center}
\fbbox{
\begin{picture}(4100,3700)(0,0)
\put(0,2600){\chairi{1Sa==7;1Se==1;2Sa==12;2Se==6;3Sa==11;3Se==5;%
4Sa==10;4Se==4;5Sa==9;5Se==3;6Sa==8;6Se==2}}
\put(800,2970){\small A}
\nocompd
\put(700,2600){\derivlabel{cf:01a}}
\put(1750,3000){\vector(1,0){500}}
\put(2250,2950){\vector(-1,0){500}}
\put(2400,2600){\chair{1Se==7;1Sa==1;2Se==12;2Sa==6;3Se==11;3Sa==5;%
4Se==10;4Sa==4;5Se==9;5Sa==3;6Se==8;6Sa==2}}
\put(3200,2970){\small B}
\put(3200,2600){\derivlabel{cf:01b}}
%
\put(2000,2500){\vector(0,-1){300}}
\put(2050,2350){rotation}
%
\put(0,1300){\chair{1Sa==7;1Se==1;6Sa==12;6Se==6;5Sa==11;5Se==5;%
4Sa==10;4Se==4;3Sa==9;3Se==3;2Sa==8;2Se==2}}
\put(800,1670){\small A}
\nocompd
\put(800,1300){\derivlabel{cf:02a}}
\put(1750,1300){\reactrarrow{40pt}{2cm}{flipping}{\strut}}
\put(1750,1700){\vector(1,0){500}}
\put(2250,1650){\vector(-1,0){500}}
\put(1800,1750){}
\put(2400,1300){\chairi{1Se==7;1Sa==1;6Se==12;6Sa==6;5Se==11;5Sa==5;%
4Se==10;4Sa==4;3Se==9;3Sa==3;2Se==8;2Sa==2}}
\put(3200,1670){\small B}
\put(3100,1300){\derivlabel{cf:02b}}
%
\put(2000,1200){\vector(0,-1){300}}
\put(2050,1050){exchange}
\put(2050,1050){A\xrightarrow{\text{\text{Opt}}}B}

```



```

%
\put(0,0){\chairi{1Se==7;1Sa==1;6Se==12;6Sa==6;5Se==11;5Sa==5;%
4Se==10;4Sa==4;3Se==9;3Sa==3;2Se==8;2Sa==2}}
\put(800,370){\small B}}
\nocompd
\put(700,0){\derivlabel{cf:03a}}
\put(1750,400){\vector(1,0){500}}
\put(2250,350){\vector(-1,0){500}}
\put(2400,0){\chair{1Sa==7;1Se==1;6Sa==12;6Se==6;5Sa==11;5Se==5;%
4Sa==10;4Se==4;3Sa==9;3Se==3;2Sa==8;2Se==2}}
\put(3200,370){\small A}}
\put(3200,0){\derivlabel{cf:03b}}
\end{picture}%
%}
\end{center}
\caption{The Definition of the Operation  $\widehat{C}_2^{\prime}$ }}
\label{ff:01}
\end{figure}

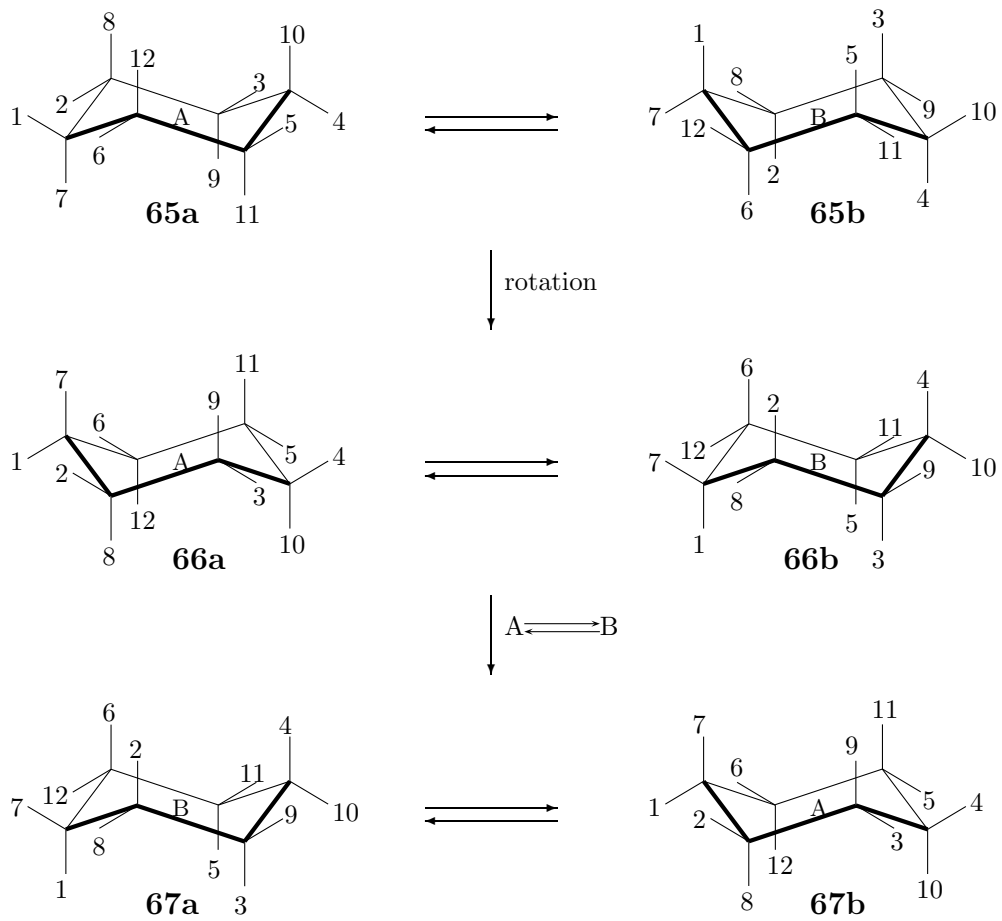
```

4.13.2 出力

First, we shall clarify the pseudo-point group that characterizes the symmetry of the pair (**65a** \rightleftharpoons **65b**). The pair coincides with itself on the action of the twelve symmetry operations of the group D_{3d} , *i.e.*,

$$D_{3d} = \{I, C_3, C_3^2, S_6, i, S_6^5, C'_{2(1)}, C'_{2(2)}, C'_{2(3)}\sigma_{v(1)}, \sigma_{v(2)}, \sigma_{v(3)}\}, \quad (4.5)$$

where each symmetry operation is considered to act on each conformer (A or B) of the pair. However, additional operations should be introduced to treat conformational changes of cyclohexane. For the purpose of exchanging axial and equatorial positions, we introduce a pseudo-dihedral rotation (\widehat{C}'_2 -operation), which is a combination of flipping and exchange (A \rightleftharpoons B), as shown in Fig. 4.2.



⊗ 4.2: The Definition of the Operation \hat{C}'_2

第5章 $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ 互換モードと \PostScript 互換モード

$\text{\X}\text{\M}\text{\TeX}$ の \PostScript 互換モードでは、切り替えによって $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ モードの出力ができるようになっています。本章では、この切り替えをおこないながら、両モードの違いを示すことにします。

5.1 \PostScript 互換モードにおける立体化学表示

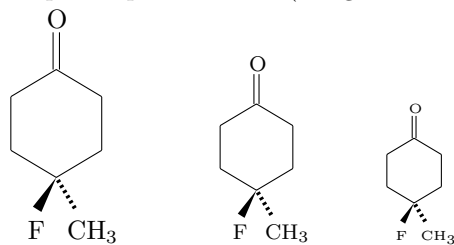
有機立体化学では、立体配置を示すために、楔形の結合が使われます。IUPAC 勧告では、楔形と太い破線の組み合わせが推奨されていますが、楔形と楔形破線の組み合わせ、太線と太い破線の組み合わせも使われます。 $\text{\X}\text{\M}\text{\TeX}$ の \PostScript 互換モードでは、これらの組み合わせを切り替えて使用できます (図 5.1)。標準 (デフォルト) は、楔形と太い破線の組み合わせ (\wedgehasheddash の宣言による出力) です。切り替えのやり方は、次に図 5.1 を組版したソースリストを示しますので、参照してください。

```

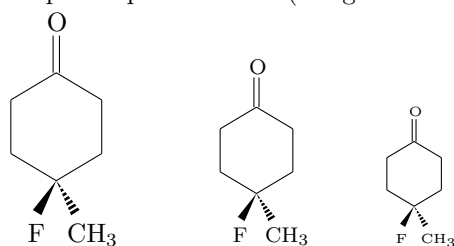
\begin{tabular}{l}
PostScript compatible mode (wedge and hashed dash): \wedge
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F}
\changeunitlength{0.08pt}
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F}
\changeunitlength{0.06pt}
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F} \wedge
\noalign{\vskip10pt}
PostScript compatible mode (wedge and hashed wedge): \wedge
\wedgehashedwedge
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F}
\changeunitlength{0.08pt}
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F}
\changeunitlength{0.06pt}
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F} \wedge
\noalign{\vskip10pt}
PostScript compatible mode (dash and hashed dash): \dash
\dashhasheddash
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F}
\changeunitlength{0.08pt}
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F}
\changeunitlength{0.06pt}
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F} \dash
\noalign{\vskip10pt}
TeX/LaTeX compatible mode: \dash
\reducedsizepicture
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F}
\changeunitlength{0.08pt}
\cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F}
\changeunitlength{0.06pt}

```

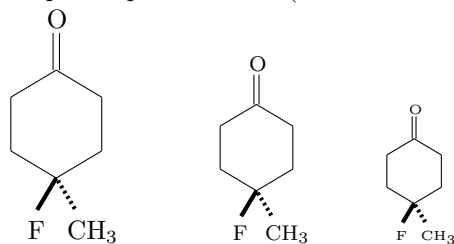
PostScript compatible mode (wedge and hashed dash):



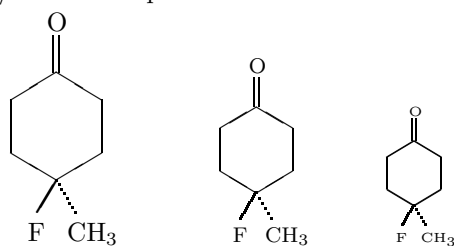
PostScript compatible mode (wedge and hashed wedge):



PostScript compatible mode (dash and hashed dash):



TeX/LaTeX compatible mode:



☒ 5.1: PostScript Compatible Mode vs. \TeX / \LaTeX Compatible Mode

```

%cyclohexanev{1D==0;4SA==CH$_{3}$;4SB==F} %%
%end{tabular}

```

図 5.1 の最後の例が $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ モードの出力です。 `\reducedsizepicture` を宣言することにより、 $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ の `picture` 環境に基づいた $\text{X}_{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ バージョン 3.00 に切り替わります。このときも、図 5.1 でわかるように、`sizederc` パッケージによって拡大縮小が可能です。

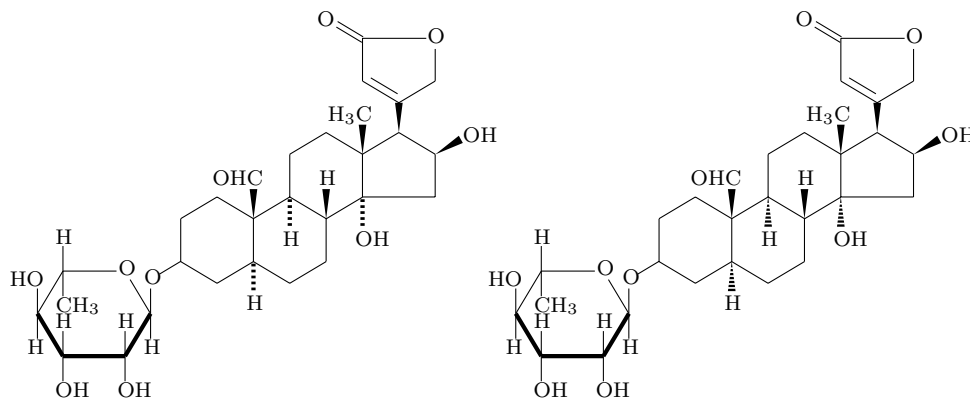
アドニトキシ (adonitoxin) の構造式は、ピラノースを母核とし、ステロイド部分を置換させる方法で描くことができます。 `\yl` 機能と `\ryl` 命令を組み合わせ、 `\adonitoxin` 命令を作成してから、出力様式を変えて、描画します。

```

%def\adonitoxin{%
%begin{XyMcompd}(2100,1800)(200,0){-}{-}
%pyranose{1Sa==H;2Sb==H;2Sa==OH;3Sb==H;3Sa==OH;4Sb==HO;%
4Sa==H;5Sb==H;5Sa==CH$_{3}$;%
1Sb==\ryl(8==0){3==%
%steroid{3==(y1);5A==H;8B==H;9A==H;{{10}B}==\lmoiety{OHC};{{14}A}==OH;%
{{13}B}==\lmoiety{H$_{3}$C};{{16}B}==OH;%
{{17}B}==\fiveheterov[e]{3==0}{4D==0;1==(y1)}}}
%end{XyMcompd}
%begin{center}
%changeunitlength{0.08pt}
%adonitoxin
{\%wedgehashedwedge
%adonitoxin}

```

この入力コードによる出力は次の通りです。 α 結合の出力様式の違いに注目してください。



5.2 フィッシャー投影図

立体配置をあらわす約束ごととして、フィッシャー投影図があります。たとえば、2,3,4-trihydroxyglutaric acids (1 and 2) は、 `\tetrahedral` 命令を入れ子にして描きます。

```

%def\cRS#1#2{\%mbox{\%lower0.3ex\%hbox to0pt{\%hss$_{#2}$}%
C\%raise0.5ex\%hbox to0pt{\%#1\%hss}}}
%begin{XyMcompd}(650,1000)(0,-200){cpd:FA1a}{-}
%tetrahedral{0==\cRS{(r)}{3};2==H;4==OH;%
1==\tetrahedral{0==\cRS{R}{2};3==(y1);1==COOH;2==H;4==OH};%
3==\tetrahedral{0==\cRS{S}{4};1==(y1);3==COOH;4==OH;2==H}}
%end{XyMcompd}

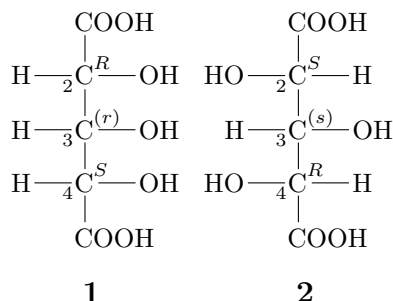
```

```

\begin{XyMcompd}(650,1000)(0,-200){cpd:FA1b}{-}
\ytetrahedral{0==\cRS{(s)}{3};2==H;4==OH;%
1==\ytetrahedral{0==\cRS{S}{2};3==(y1);1==COOH;2==HO;4==H};%
3==\ytetrahedral{0==\cRS{R}{4};;1==(y1);3==COOH;4==H;2==HO}}
\end{XyMcompd}

```

この入力コードから，次の構造式が得られます．



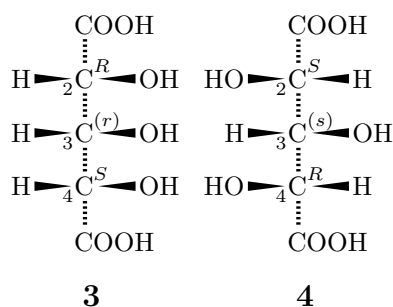
ロカント番号と *RS* 記号を出力するために，`\cRS` 命令を作成して使用しました．定義と出力とを比較すると，働きがわかるはずです．

楔形の結合を使うと，イメージがつかみやすくなります．同じ化合物を，楔形結合を使って描くと次のようになります．

```

\def\cRS#1#2{\mbox{\rlap{\lower0.3ex\hbox to0pt{\hss$_{#2}$}}%
C\raise0.5ex\hbox to0pt{\hss^{#1}\hss}}}
\begin{XyMcompd}(650,1000)(0,-200){cpd:FA1c}{-}
\ytetrahedral{0==\cRS{(r)}{3};2B==H;4B==OH;%
1A==\ytetrahedral{0==\cRS{R}{2};3==(y1);1A==COOH;2B==H;4B==OH};%
3A==\ytetrahedral{0==\cRS{S}{4};1==(y1);3A==COOH;4B==OH;2B==H}}
\end{XyMcompd}
%
\begin{XyMcompd}(650,1000)(0,-200){cpd:FA1d}{-}
\ytetrahedral{0==\cRS{(s)}{3};2B==H;4B==OH;%
1A==\ytetrahedral{0==\cRS{S}{2};3==(y1);1A==COOH;2B==HO;4B==H};%
3A==\ytetrahedral{0==\cRS{R}{4};;1==(y1);3A==COOH;4B==H;2B==HO}}
\end{XyMcompd}

```



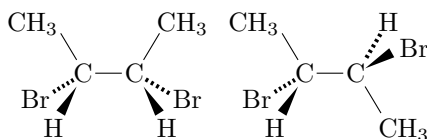
ただし，3位の炭素から出る α 結合と2,4位の炭素から出る α 結合は，合理的にあらわすことはできませんので，多少妥協しています．

5.3 立体配座の表示

有機立体化学では、通常、直線は紙面に含まれる結合、楔形は紙面から前面に飛び出した結合、太破線は紙面から後方に引っ込んだ結合と約束されています。この方式で固定した立体配座 (コンフォメーション) を表示することが広くおこなわれています。重なり型 (eclipsed) とねじれ型 (staggered) の配座異性体 (コンフォーマー) は、`\ltetrahedrals`、`\rtetrahedrals` などの命令を組み合わせて描きます。

```
\ltetrahedrals{0==C;1==\rtetrahedrals{1==(y1);0==C;2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H};%
2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H}
\qqquad
\ltetrahedrals{0==C;1==\rtetrahedrals{1==(y1);0==C;2==CH$_{3}$;3A==H;4B==Br};%
2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H}
```

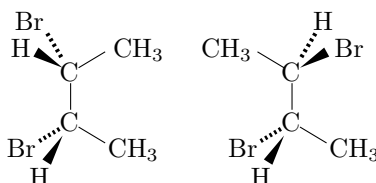
この入力コードからは、次の出力が得られます。



縦方向にしたものも同様です。

```
\utetrahedrals{0==C;1==\dtetrahedrals{1==(y1);0==C;2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H};%
2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H}
\qqquad
\utetrahedrals{0==C;1==\dtetrahedrals{1==(y1);0==C;2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H};%
2==CH$_{3}$;3A==H;4B==Br}
```

この入力コードからは、次の出力が得られます。



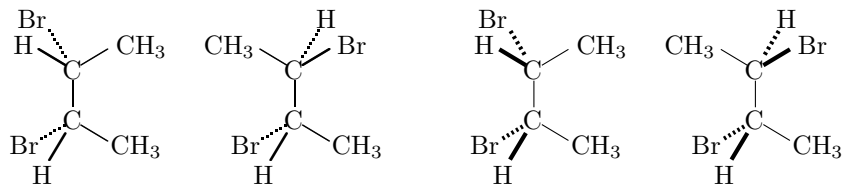
$\text{T}_\text{E}\text{X}/\text{L}\text{A}\text{T}_\text{E}\text{X}$ 互換モードでは、同じ入力コードから次の出力がえられます。PostScript モードから $\text{T}_\text{E}\text{X}/\text{L}\text{A}\text{T}_\text{E}\text{X}$ モードへの切り替えのため、`\reducedsizepicture` を宣言しています。ついでに、`\dashhasheddash` を宣言したものも示します。

```
{
\reducedsizepicture
\utetrahedrals{0==C;1==\dtetrahedrals{1==(y1);0==C;2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H};%
2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H}
\qqquad
\Utetrahedrals{0==C;1==\dtetrahedrals{1==(y1);0==C;2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H};%
2==CH$_{3}$;3A==H;4B==Br}
}
\qqquad
{
\dashhasheddash
\utetrahedrals{0==C;1==\dtetrahedrals{1==(y1);0==C;2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H};%
```

```

2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H}
\quad
\Utetrahedrals{0==C;1==\dtetrahedrals{1==(y1);0==C;2==CH$_{3}$;3A==Br;4B==H};%
2==CH$_{3}$;3A==H;4B==Br}
}

```



第6章 POSTSCRIPT 機能の活用

PostScript 出力を前提にすると, graphicx パッケージや PSTricks 付属パッケージ (pstricks パッケージなど基本的なものは \TeX を読み込めば, 自動的に読み込まれる) に備わっている豊富な機能が使えるようになります.

```

\documentclass{article}
\usepackage{xymtexp}
\usepackage{chemist, chmst-ps}
\usepackage{graphicx}
\begin{document}
(formula)
\end{document}

```

6.1 拡大縮小

アドニトキシン (adonitoxin) の構造式を次のように定義しておきます.

```

\def\adonitoxin{%
\begin{XyMcompd}(2100,1800)(200,0){-}{-}
\pyranose{1Sa==H;2Sb==H;2Sa==OH;3Sb==H;3Sa==OH;4Sb==HO;%
4Sa==H;5Sb==H;5Sa==CH$_3$;%
1Sb==\ryl(8==0){3==%
\steroid{3==(y1);5A==H;8B==H;9A==H;{{10}B}==\lmoiety{OHC};{{14}A}==OH;%
{{13}B}==\lmoiety{H$_3$C};{{16}B}==OH;%
{{17}B}==\fiveheterov[e]{3==0}{4D==0;1==(y1)}}}
\end{XyMcompd}}

```

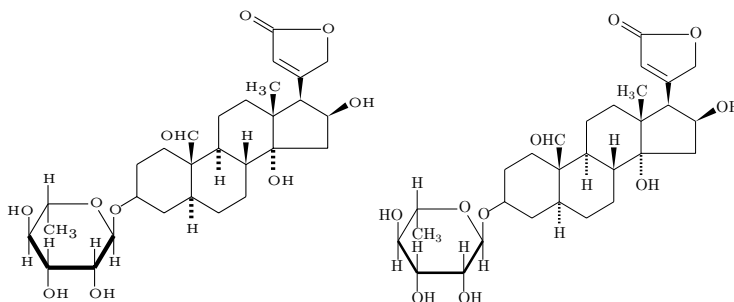
この命令を使って, 構造式を縮小してみましょう. \TeX の `\changeunitlength` 命令を使う例と, graphicx パッケージの `\scalebox` 命令を使う例です.

```

{\changeunitlength{0.06pt}\adonitoxin}
\scalebox{0.6}{\adonitoxin}

```

この入力コードからは次の出力が得られます.

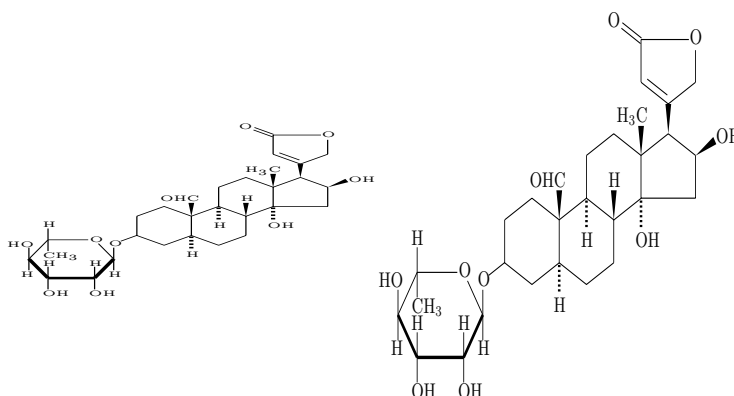


両者の大きさは、当然同じになりますが、フォントや結合線の太さが違うことがわかります。`\changeunitlength` 命令を使ったときは、 \LaTeX の内部で小さなフォントが自動的に選ばれて出力されます。`\scalebox` 命令を使った場合は、基準の大きさ (0.1pt) のときに選ばれたフォントが、`graphicx` パッケージの機能によって、そのままの形で縮小されます。

`\scalebox` 命令のオプション引数を指定すれば、縦横比を変更することができます。

```
\scalebox{1}[0.6]{\changeunitlength{0.06pt}\adonitoxin}
\scalebox{0.6}[0.8]{\adonitoxin}
```

この入力コードからは次の出力が得られます。

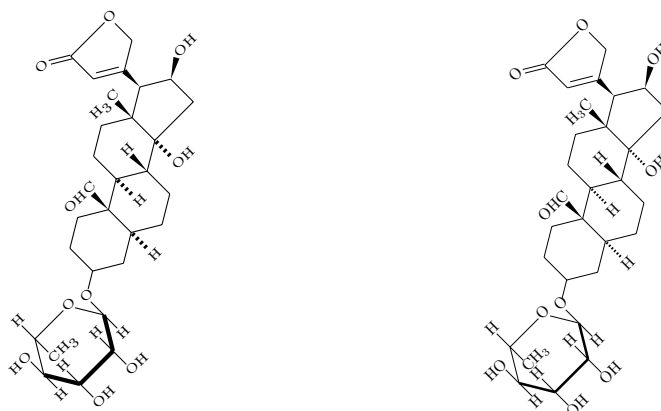


6.2 回転

`graphicx` パッケージの `\rotatebox` 命令を使えば、 \LaTeX で描いた構造式を回転することができます。

```
\rotatebox{45}{\changeunitlength{0.06pt}\adonitoxin}
\rotatebox{45}{\scalebox{0.6}{\adonitoxin}}
```

この入力コードからは次の出力が得られます。



6.3 網掛け

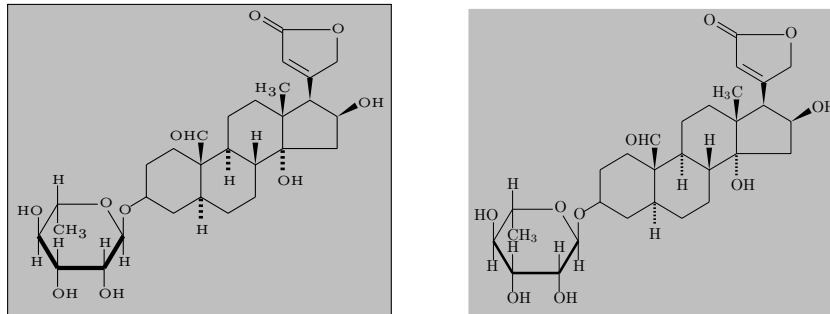
PSTricks (`pstricks` パッケージ) の `\psframebox` を使えば、網掛けができます。

```

%psframebox[fillstyle=solid,fillcolor=lightgray,linewidth=0.4pt]
{%changeunitlength{0.06pt}%adonitoxin}%hskip1cm
%psframebox[fillstyle=solid,fillcolor=lightgray,linestyle=none]
{%scalebox{0.6}{%adonitoxin}}

```

この入力コードからは次の出力が得られます。



構造式の部分 (置換基など) に網掛けを入れるには、次のような命令を作成して使います。

```

%def%amisubst#1{%
%psframebox[fillstyle=solid,fillcolor=lightgray,linestyle=none]{#1}}

```

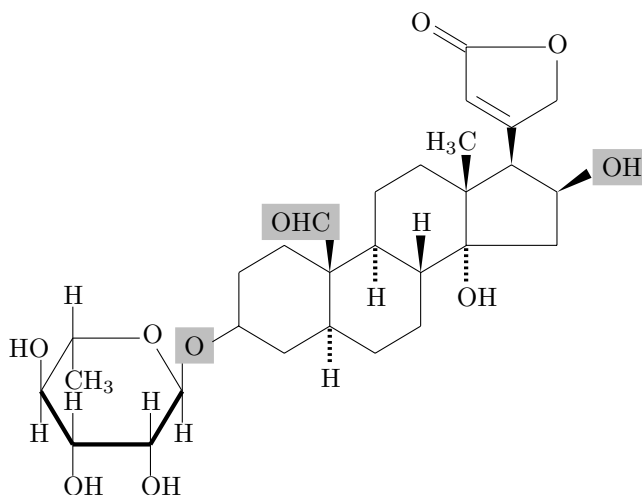
網掛けをしたい置換基や原子に%amisubst 命令をかぶせます。ただし、置換基や原子は、文字であらわされているものに限ります。入れ子の置換基は大きさなしで出力されているのでうまくゆきません。

```

%begin{XyMcompd}(2100,1800)(200,0){-}{-}
%pyranose{1Sa==H;2Sb==H;2Sa==OH;3Sb==H;3Sa==OH;4Sb==HO;%
4Sa==H;5Sb==H;5Sa==CH$_{3}$;%
1Sb==%ryl(8==%amisubst{0}){3==%
%steroid{3==(y1);5A==H;8B==H;9A==H;{{10}B}==%lmoiety{%amisubst{OHC}};{{14}A}==OH;%
{{13}B}==%lmoiety{H$_{3}$C};{{16}B}==%amisubst{OH}};%
{{17}B}==%fiveheterov[e]{3==0}{4D==0;1==(y1)}}}
%end{XyMcompd}

```

この入力コードからは次の出力が得られます。



六角形の部分の網掛けには、一般的な方法はありません。強引におこなうには、次のような命令をつくります。

```

\def\amihexagon{%
\pspolygon[unit=0.99\unitlength,fillstyle=solid,fillcolor=lightgray,linestyle=none]%
(0,2)(171,103)(171,303)(0,408)(-171,303)(-171,103)}

```

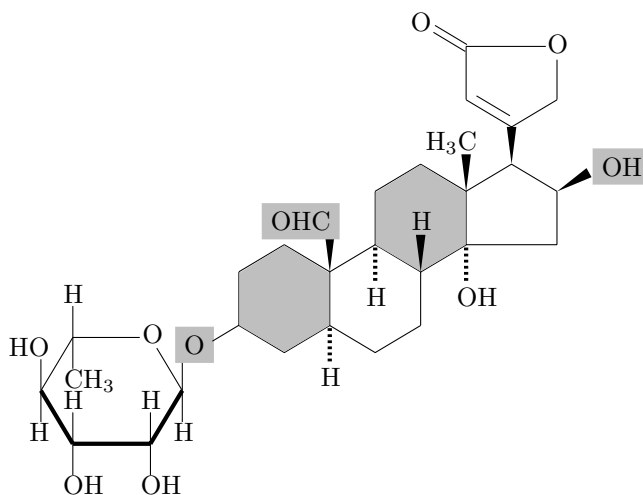
この命令を縮合環を縮合させる要領でつぎのように記述します .

```

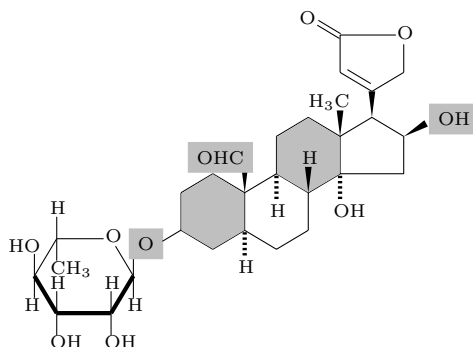
\begin{XyMcompd}(2100,1800)(200,0){-}{-}
\pyranose{1Sa==H;2Sb==H;2Sa==OH;3Sb==H;3Sa==OH;4Sb==HO;%
4Sa==H;5Sb==H;5Sa==CH$_{3}$;%
1Sb==\ryl(8==\amisubst{0}){3==%
\steroid[{D\amihexagon}{H\amihexagon}]%
{3==(y1);5A==H;8B==H;9A==H;{{10}B}==\lmoiety{\amisubst{OHC}};{{14}A}==OH;%
{{13}B}==\lmoiety{H$_{3}$C};{{16}B}==\amisubst{OH};%
{{17}B}==\fiveheterov[e]{3==0}{4D==0;1==(y1)}}}
\end{XyMcompd}

```

この入力コードからは次の出力が得られます .



\amihexagon の定義の中で , 寸法を \unitlength の倍数で定義してあるので , 縮小しても網の大きさは追従して小さくなります . 同じ入力コードで $\changeunitlength{0.07pt}$ とした場合の出力を次に示します .



関連図書

- [1] 藤田 眞作, “xymtex.lzh for drawing chem. sturcture”, NIFTY-Serve, FPRINT, LIB 7, No. 201 (1993); CTAN, tex-archive/macros/latex209/contrib/xymtex/.
- [2] Shinsaku Fujita, “ $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$: A Macro Package for Typesetting Chemical Structural Formulas”, On-line Manual for $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ (1993).
- [3] Shinsaku Fujita, “Typesetting structural formulas with the text formatter $\text{\T}\text{\E}\text{\X}/\text{\L}\text{\A}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ ”, *Comput. Chem.*, **18**, 109 (1994).
- [4] Shinsaku Fujita, “ $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ for drawing chemical structural formulas”, *TUGboats*, **16**(1), 80 (1995).
- [5] Shinsaku Fujita, “ $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$: A Macro Package Set for Typesetting Chemical Structural Formulas”, On-line Manual for $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ (1996).
- [6] 藤田 眞作, “化学者・生化学者のための $\text{\L}\text{\A}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ — パソコンによる論文作成の手引”, 東京化学同人 (1993).
- [7] Fujita, S., *$\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ —Typesetting Chemical Structural Formulas*, Addison-Wesley, Tokyo (1997).