

化学構造式を X^YM_TE_X で描く

藤田眞作

京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科物質工学部門

京都市左京区松ヶ崎御所海道町

1 はじめに

筆者は、この 20 年余りの間、有機化学 (情報記録材料の有機合成化学)、情報学、数学の境界領域で仕事をしている。この仕事を始めた当初は、数式をタイプライターで書いていたが、そのうちに T_EX/L^AT_EX が普及しはじめたので、1980 代の終わりごろにのりかえた。数理化学 (化学と数学の接点) の分野での仕事が進捗したので、成果をまとめて、モノグラフ [1] を 1991 年に出版した。この種の書籍出版はリスクが大きいので、著者の側で T_EX/L^AT_EX によるカメラレディ原稿を提供するという条件がなければ、出版を引き受けてくれる出版社はなかったであろう。T_EX/L^AT_EX によるカメラレディ原稿の作成過程で、地の文と数式の部分は十分な品質がえられたが、困ったのは化学構造式の部分である。当時は、T_EX/L^AT_EX と併用できる構造式描画ソフトウェア (安価なもの) がなかったので、化学構造式をロットリングペンで製図し、これを原稿に貼り付けた。この出版の経験を踏まえ、T_EX/L^AT_EX を化学の分野で普及させることをめざして、入門書 [2] を 1993 年に出版した。しかし、化学構造式の T_EX/L^AT_EX 文書への組み込みについては、効率的な方法がないままであった。

化学、とくに有機化学では、化学構造式を文書に含めることは必須のことなので、この入門書の執筆が終わってから、化学構造式を T_EX/L^AT_EX 文書に組み込むシステムの作成を本格的に考えることにした。いくつかの試行錯誤ののち、原型ができたのが 1993 年の夏であった。システム名を X^YM_TE_X (キウムテック) として、その年に公開した。そののち、数回のバージョンアップを経て、現在バージョン 4.03 まで無償で公開している。その間、1997 年に付属のマニュアル類を書き直して、使用手引きとして刊行した [3]。また、2004 年には、写真の有機化学に関し

て 600 ページ弱の単行本 [4] を出版したが、ほとんど全ページに出現する構造式をすべて X^YM_TE_X で作成し、T_EX/L^AT_EX による原稿に直接に取り込むことができた。このことにより、X^YM_TE_X が出版に十分に使えることが実証できたと考えている。

X^YM_TE_X の基本的な機能の説明は拙著 [5] に譲り、本稿では、X^YM_TE_X のやや高度なテクニックを紹介したのち、化学構造式を実際に論文原稿に取り込む方法を述べることにする。X^YM_TE_X による化学構造式の描画が、T_EX/L^AT_EX の豊富な機能と併用できることを、筆者の経験を踏まえて解説する。

2 X^YM_TE_X を使うには

2.1 X^YM_TE_X の入手

最新版が筆者のホームページ:

<http://imt.chem.kit.ac.jp/fujita/fujitas/fujita.html>

からダウンロードできる。これは圧縮ファイル (.lzh) になっているので、解凍ソフトウェア (たとえば「解凍レンジ」など) をインターネットから入手して解凍する。解凍後に発生する xymtex フォルダにシステム一式が格納されているので、T_EX/L^AT_EX のシステムから読めるフォルダ、たとえば、

```
c:\usr\local\share\texmf\tex\latex
```

の配下に置く。これで、X^YM_TE_X が使えるようになる。

この解説では、X^YM_TE_X を PostScript 対応モードで使用するので、dvi ファイルを PostScript ファイルに変換するためのシステム (たとえば dvipsk、これは標準の T_EX/L^AT_EX 配布物に付属している) および生じた PostScript ファイルを画面表示および印刷する

ためのシステム (たとえば, GhostScript, GSview) が必要である. これらのシステムの入手およびインストールについては, インターネットで検索すると解説サイトが見つかるので, 参照していただきたい.

2.2 文書の作成

X_YTeX の命令は, 描く化合物群に分けて, パッケージとして格納されているので, 該当のパッケージファイルを文書 (tex ファイル) の中に `\usepackage` 命令で読み込む. `.xymtexp`s を指定すると, PostScript 対応の X_YTeX のパッケージファイルがすべて読み込まれる. パソコンの能力が高度になってきたので, 通常はこの指定で X_YTeX のすべてを読み込んでも処理できる. ついでに `chemist` および `chmst-ps` パッケージも読み込んでおくと, 化学文書に必要な便利な機能が使えるようになる. `\begin{document}` と `\end{document}` の間に, X_YTeX の命令を他の文書要素 (地の文, 数式, その他) とともに書き込む. 下の例では, 簡単のため, 2-chlorohydroquinone の構造式を描くための X_YTeX 命令のみを書いている.

```
%XyMTeXtest.tex
\documentclass{jarticle}
\usepackage{xymtexp}
\usepackage{chemist, chmst-ps}
\begin{document}
\bzdrv{1==OH; 2==Cl; 4==OH}
\end{document}
```

2.3 T_EX/L^AT_EX 処理

X_YTeX の命令を含んだ文書ファイルは, 通常の tex ファイルであるので, 通常の T_EX/L^AT_EX 処理をおこなう. Windows XP のコマンドプロンプト上で使っている場合は, 文書を含むフォルダー内 (たとえば `c:\fujita`) に移ってから, 次の命令をコマンドラインに入力する (上記文書のファイル名を `XyM-TeXtest.tex` とする).

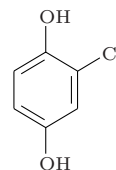
```
c:\fujita>latex XyMTeXtest
```

エンターキーを押して実行すると, `XyMTeXtest.dvi` ファイルが発生する. しかし, そのままでは画面表示できない (これは, PostScript 互換モードで使っているため. T_EX/L^AT_EX モードを使うときは `dviout` などの表示ソフトウェアにより画面表示できる). この

ファイルを変換して, PostScript ファイルにするには, 次の命令を実行する.

```
c:\fujita>dvipsk -D2400 -Pd1 XyMTeXtest
```

この結果, `XyMTeXtest.ps` ファイルが発生するので, GSview システムにより画面表示する. 必要ならば, 表示画面から印刷することもできる. 表示された化学構造式は, 次のようになる.



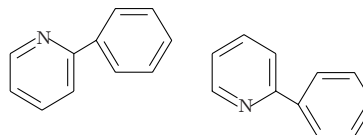
3 X_YTeX の機能

本稿では, X_YTeX の命令を組み合わせて複雑な化合物を描く方法を中心に述べることにする. 例示したコードを実際に試すには, 上記の `XyMTeXtest.tex` 中の `\begin{document}` と `\end{document}` の間に書き込めばよい.

3.1 置換基の入れ子

X_YTeX 命令の置換基リストのなかに (y1) を宣言すると, その位置で結合する置換基を作成することができる. たとえば, `\bzdrh{1==(y1)}` は 1 位で置換するフェニル基をあらわす (位置番号は固定である). これをピリジン環の 2 位に置換させるには, 置換すべき環を出力する命令 (次の例では `\pyridine` など) の置換基リストの中に入れ子にする.

```
\pyridinev{2==\bzdrh{1==(y1)}}\quad
\pyridinevi{2==\bzdrh{1==(y1)}}
```

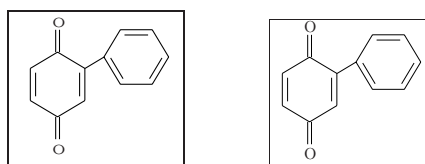


接尾辞の `v` と `vi` とを区別することによって, 上下をひっくり返したピリジン環を出力していることに注意.

入れ子の置換基は, 幅なし高さなしで出力される. このため, `center` 環境で中央揃えにしたとき, 必ず

しも出力位置が中心にこない．出力範囲を調整するためには，chemist パッケージに XyMcompd 環境が用意されているのでこれを用いる．

```
{%changeunitlength{0.06pt}%\fbox{%
\begin{XyMcompd}(800,800)(240,50){}
\bzdrv[p]{1D==0;2==\bzdrh{1==(y1)};4D==0}
\end{XyMcompd}} \hskip1cm
\scalebox{0.6}{\fbox{%
\begin{XyMcompd}(800,800)(240,50){}
\cyclohexanev[be]{1D==0;%
2==\bzdrh{1==(y1)};4D==0}
\end{XyMcompd}}}
```

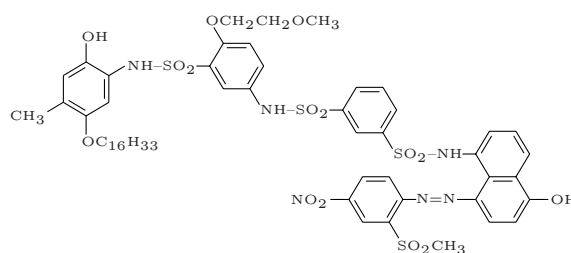


このコードの中で使われている XyMcompd 環境の第一引数 (800,800) は出力範囲，第二引数 (240,50) は，左右・上下の移動距離を指定する．残りの二つの引数は，化合物番号を出力するためのものであるが，ここでは使用しない．出力範囲を明示するため \fbox で囲っている．なお， \LaTeX の単位長は 0.1pt である．これを \changiunitlength で変更すれば縮小拡大ができる．縮小拡大は，graphicx パッケージを読み込んでいれば，\scalebox 命令によりおこなうこともできる．なお，上記コードでは，\bzdrv と \cyclohexanev を使っているが，内部では同じ下位命令を用いているので，出力される化学構造式は同じである．

入れ子は， \TeX / \LaTeX システムが許す限り何重でも重ねることができる．たとえば，次に示すコードでは，(y1) 機能，\ryl 命令，\lyl 命令により入れ子を重ねている．

```
{%changeunitlength{0.05pt}
\begin{XyMcompd}(3950,1800)(-50,-750){}
\bzdrv{1==OH;5==CH$_{3}$;%
4==OC$_{16}$H$_{33}$;%
2==\ryl(4==NH--SO$_{2}$){4==\bzdrh{1==(y1)};%
2==OCH$_{2}$CH$_{2}$OCH$_{3}$;%
5==\ryl(2==NH--SO$_{2}$){4==\bzdrh{1==(y1)};%
5==\ryl(2==SO$_{2}$--NH){%
4==\naphdrh{1==(y1);5==OH;%
8==\lyl(4==N=N){4==\bzdrh{4==(y1)};%
1==NO$_{2}$;5==SO$_{2}$CH$_{3}$}}}}}}
\end{XyMcompd}}
```

出力は次の通りである．

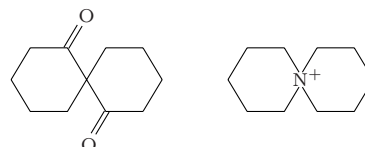


3.2 置換基の入れ子—スピロ化合物

(y1) 機能で作成した置換基を，原子リストの中に入れ子にすると，スピロ化合物を描くことができる．この機能は，入れ子を受ける側が引数として原子リストをもつ命令でなければならない (\LaTeX 命令の種類については，オンラインマニュアルを参照)．次にスピロ位置にヘテロ原子の有無でどうなるか，例をあげよう．

```
{%changeunitlength{0.07pt}
\sixheteroh{4s==\cyclohexaneh{1==(y1)};%
6D==0}{3D==0} \quad
\sixheteroh{4h==\sixheteroh{1==\null}}%
{1==(y1)};4==N^{+}}}
```

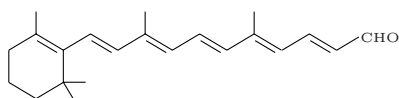
スピロ位置にヘテロ原子のない場合は 4s==... と指定し，ある場合 4h==... と指定していることに注意．また，一方の環でヘテロ原子の入る余地を作るために \null を指定している．出力は次のようになる．



入れ子は， \TeX / \LaTeX システムが許す限り何重でも重ねることができる．

(y1) 機能で作成した置換基を，原子リストの中に入れ子にするテクニックは，スピロ化合物以外にも利用できる．メチレン鎖の出力命令は，\decamethylene までしか用意されていないので，それ以上は，このテクニックで適当な部品をつなぐ．例として，retinal を描いてみよう．

```
{%changeunitlength{0.06pt}
\begin{XyMcompd}(2200,500)(-50,-100){}
\nonamethylene[bdfh]{%
1s==\cyclohexanev[a]{2==(y1);1==\null;%
3Sa==\null;3Sb==\null};%
9s==\trimethylene[b]{1==(y1);3W==CHO}
{4==\null;8==\null}
\end{XyMcompd}}
```

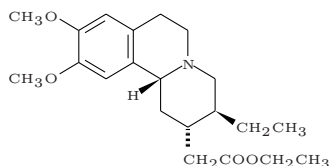


3.3 環の入れ子—縮合環化合物

簡単な縮合環は、`\decaheterov` や `\nonaheterov` などの単一の命令で描くことができる。単一命令が用意されていない縮合環は、結合リストに縮合ユニットを入れ子にして描く。6-6 縮合環にさらに 6 員環の縮合ユニットを縮合させる場合を次に例示する。

```
{\changeunitlength{0.06pt}
\begin{XyMcompd}(1750,950)(-100,-250){}
\decaheterov[fhk%
{c\sixfusev[1==\null]}%
{3B==CH$_{2}$CH$_{3}$;%
4A==CH$_{2}$COOCH$_{2}$CH$_{3}$;%
{F}}]{3=N}{6==CH$_{3}$O;%
7==CH$_{3}$O;4GB==H}
\end{XyMcompd}}
```

縮合を受ける側の結合リストの指定は小文字(ここでは 6-6 縮合環の c の結合)でおこなう。縮合ユニットの位置は、結合に振られたアルファベットを指定する(ここでは、結合の二つの端点のうち順番のあとのものとして F を指定。小文字の f は、順番の先のもの)。出力結果は次の通りである。



縮合の具合がどうなっているかは、結合リスト[...] 中の `{c\sixfusev...{F}}` を % でコメントアウトしてみると理解できよう。

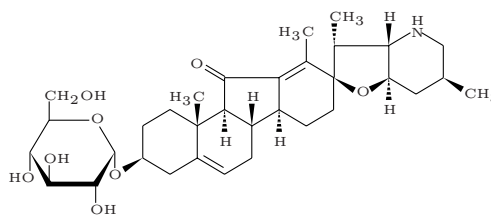
3.4 3 種の入れ子の組み合わせ

以上の 3 種の入れ子は、自由に組み合わせることができる。例として pseudojervine の化学構造式を描いてみよう。次のコードに示すように、括弧の対応に注意しながら、実直に入れ子を重ねてゆく。

```
{\changeunitlength{0.06pt}\wedgehashedwedge
\begin{XyMcompd}(2800,1200)(-500,50){}
\decaheterov[d{a\fivefusev[
{b\sixfusev[f]{2s==\fiveheterov[
{b\sixfusev[1==\upnobond{N}{H}}%
```

```
{3B==CH$_{3}$}{e}}%
]{1==0;5s==\WedgeAsSubst(0,0)(5,-3){130};%
2s==\WedgeAsSubst(0,0)(-5,-3){120}%
}{5==(y1);2GA==H;4GA==CH$_{3}$;3FB==H}[ae]%
}{1==\lmoiety{H$_{3}$C}{e}}%
}{5FA==H;4D==0;2GA==H}{e}}%
]{}{{10}B==\lmoiety{H$_{3}$C};2FB==H;%
6B==\lyl(3==0){0==\sixsugarh(6==0;%
1s==\WedgeAsSubst(0,0)(-3,-5){120};%
4s==\WedgeAsSubst(0,0)(3,-5){120};%
3s==\psline[linewidth=30\unitlength,%
linestyle=solid,linecolor=black]%
(-17,0)(307,0)%
}{1==(y1);2Sa==OH;3Sb==OH;4Sa==HO;%
5Sb==CH$_{2}$OH}[abc]}%
\end{XyMcompd}}
```

`\wedgehashedwedge` は、 α 結合(紙面の裏方向への結合)を破線の楔形結合で出力するためのスイッチである。ピラノース環とテトラヒドロフラン環の環内楔形結合の出力には、`\WedgeAsSubst` 命令と `PSTricks` パッケージの命令 `\psline` を併用している。このテクニックの詳細については、バージョン 4.02 のマニュアルを参照されたい。出力は次の通りである。



4 EPS ファイルの利用

4.1 昨今の論文投稿の状況

世の趨勢に押されて、化学分野の論文投稿も、次第にオンライン投稿に移行しつつある。このときに、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ による論文が受け入れられるかが問題である。広く化学全般をカバーする学会では、数式を含んだ化学論文も取り扱う必要から、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ による論文の受け入れ態勢を整えつつある。その中でも、アメリカ化学会の ACS Paragon Plus Environment システム (ACS-PPE) は、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ による論文の受け入れ態勢を整えた、先駆的なシステムといえる。詳しいことは、次のホームページを参照されたい。

<http://pubs.acs.org/paragonplus/splash/index.html>

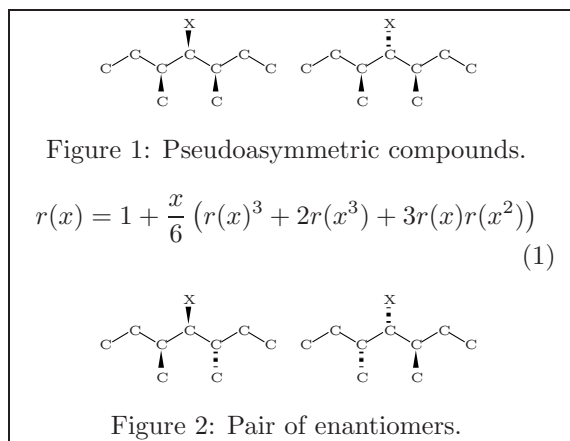
このシステムでは、野放図なカスタマイズを防ぐため、 $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\epsilon}$ のパッケージ群を推奨し、使えるフ

イルの種類を絞っている。本文は、tex ファイルとして、代表的なクラスファイルである article.cls などを使い、文献リストは本文ファイルに組み込むことが推奨されている。このため、作成マクロは最小限とし、たとえば TempStyle.sty に格納することが必要である。さらに、グラフィックスは EPS ファイルで添付しなければならない。用意したファイルをオンラインで投稿すると、ACS-PPE は T_EX/L^AT_EX 処理と PDF ファイルへの変換をおこなう。変換した PDF ファイルはオンラインで見ることができるので、著者のチェックののち、間違なく変換されていれば、原稿が受理されることになる。

以上のような制限から、X_yM_TeX で描いた構造式を含んだ tex ファイルは、そのままでは ACS-PPE に投稿することはできない。このため、X_yM_TeX で描いた図ごとに、EPS ファイルに変換する必要がある。ここでは、ACS-PPE での論文投稿を念頭において、その方法を概説する。

4.2 EPS ファイルの作成

これまでの説明にのっとして、XyMTeXtest2.tex から、次のような原稿ができたとする。ここでは、簡単のため、説明に必要な部分のみを抜き取っている。



図に含まれる構造式を EPS ファイルにするには、さらに余分な箇所を取り除く必要がある。もとの XyMTeXtest2.tex ファイルをコピーして、ファイルの名称を、たとえば XyMTeXtest2Fig.tex とする。その上で、図のキャプションや数式などすべて%を付けてコメントアウトする。¥pagestyle{empty}をプリアンブルに記入し、ページ番号やヘッダーが出力されないようにする。さらに¥clearpage を挿入して、

一つの図が 1 ページに収まるようにする。ここでは不要の行を、実際に取り除いたものを示す。

```
%XyMTeXtest2Fig.tex
¥documentclass{article}
¥usepackage{xymtexp}
¥usepackage{chemist, chmst-ps}
¥pagestyle{empty}%この宣言が必須
¥begin{document}
  {¥changeunitlength{0.06pt}
  ¥begin{XyMcompd}(1000,500)(200,0){}{}
  ¥heptamethylene{1==C;2==C;3==C;4==C;%
  5==C;6==C;7==C}{4B==X;3B==C;5B==C}
  ¥end{XyMcompd}
  ¥begin{XyMcompd}(1000,500)(200,0){}{}
  ¥heptamethylene{1==C;2==C;3==C;4==C;%
  5==C;6==C;7==C}{4A==X;3B==C;5B==C}
  ¥end{XyMcompd}
  ¥clearpage%ページを分けることが必須
  {¥changeunitlength{0.06pt}
  ¥begin{XyMcompd}(1000,500)(200,0){}{}
  ¥heptamethylene{1==C;2==C;3==C;4==C;%
  5==C;6==C;7==C}{4B==X;3B==C;5A==C}
  ¥end{XyMcompd}
  ¥begin{XyMcompd}(1000,500)(200,0){}{}
  ¥heptamethylene{1==C;2==C;3==C;4==C;%
  5==C;6==C;7==C}{4A==X;3A==C;5B==C}
  ¥end{XyMcompd}
  ¥end{document}
```

T_EX/L^AT_EX の通常処理をおこなう。すなわち、次の命令:

```
c:¥fujita>latex XyMTeXtest2Fig
```

をコマンドラインに入力して、エンターキーを押して実行すると、XyMTeXtest2Fig.dvi ファイルが発生する。ファイルを変換して、PostScript ファイルにするには、次の命令を実行する。

```
c:¥fujita>dvi2ps -D2400 -Pd1 XyMTeXtest2Fig
```

これを GSview で閲覧して、正しく変換されているか調べる。この場合は、仕上がりは 2 ページで、上記枠の中の二つの図が別々に 1 ページずつ出力されている。次に述べるように、この変換は必ずしも必要ないが、多くの図を変換する場合はまとめて変換して、間違いがないか確かめることを勧める。

まとめて出力した XyMTeXtest2Fig.ps から一つずつ EPS ファイルに変換するのは、GSview でも可能である (Extract と PStoEPS の機能を使用) が、もっと簡単な方法がある。dvipsk の -E オプションを使う方法であり、次の命令を書き込んだバッチファイル (名称を EPSfig.bat としておく) を作っておき実行すればよい。

```
dvipsk -E -D2400 -Pd1 -p1 -n1
  XyMTeXtest2fig.dvi -o Test2Fig1.eps
dvipsk -E -D2400 -Pd1 -p2 -n1
  XyMTeXtest2fig.dvi -o Test2Fig2.eps
```

行幅の都合で折り返しているが、実際はそれぞれ 1 行に収める。コマンドプロンプトの画面で、

```
c:\%fujita>EPSfig
```

と入力し、リターンを押すと、二つの命令が実行され、Test2Fig1.eps と Test2Fig2.eps が発生する。

EPS ファイルの描画領域が正しく設定されているかは、これらのファイルを GSview で調べる。このとき、Options メニューの Show Bounding Box にチェックを入れておくと、領域が点線の枠で示される。図がこの中に収まっていれば成功である。

4.3 EPS ファイルの取り込み

もとの XyMTeXtest2.tex ファイルをコピーして、投稿用の処理のために XyMTeXtest2Final.tex ファイルを作成する。EPS ファイルを取り込むには、もとのファイルで \LaTeX の構造式描画を記述している箇所を `\includegraphics` 命令で置き換える。 \LaTeX や chemist などの読み込み部分は除去する (必要なら最小限のマクロを TempStyle.sty にコピーしておく)。具体的には、次のようなファイルとなる。

```
%XyMTeXtest2Final.tex
\documentclass{article}
\usepackage{TempStyle}%最小限のマクロ, 相互参照
\usepackage{graphicx}%この宣言が必要
\begin{document}
\begin{figure}[h] \begin{center}
\includegraphics[scale=1]{Test2Fig1.eps}
\caption{Pseudoasymmetric compounds.}
\label{fA1} \end{center} \end{figure}
\begin{equation}
r(x) = 1+\frac{x}{6}\left(r(x)^3+2r(x)^3
+ 3r(x)r(x^2)\right) \label{eA1}
\end{equation}
\begin{figure}[h] \begin{center}
\includegraphics[scale=1]{Test2Fig2.eps}
\caption{Pair of enantiomers.}
\label{fA2} \end{center} \end{figure}
\end{document}
```

この例では使用していないが、化合物に番号を付けて相互参照している場合には、`\newlabel` による参照キーを TempStyle.sty ファイルに格納しておく。参照キーのデータは、XyMTeXtest2Fig.tex を処理を

したときの補助ファイル XyMTeXtest2Fig.aux から抜き取ることができる。XyMTeXtest2Final.tex ファイルを \TeX / \LaTeX 処理および PostScript 変換をおこなった上で、GSview でうまくいっていることを確かめる (成功ならば、上記の枠内と同じ出力がえられるはずである)。なお、このとき中間で発生した dvi ファイルは dviout で閲覧することができる。

ACS-PPE システムによる投稿を目的とする場合は必ずしも必要がないが、生じた PostScript ファイルは、Acrobat Distiller などのソフトウェアで PDF に変換することができる。

4.4 オンライン投稿

このようにして作成したファイル (この例では、テキストファイル (XyMTeXtest2Final.tex)、補助ファイル (TempStyle.sty)、およびグラフィックファイル (Test2Fig1.eps および Test2Fig2.eps)) を ACS-PPE システムを通じてオンライン投稿する。手順は、オンライン画面の指示通りにすればよく、ファイルさえ揃っていればむずかしくない。

5 おわりに

\LaTeX による化学構造式描画の最大の特徴は、 \TeX / \LaTeX の豊富な機能、とくに数式に関する機能と併用できることにある。論文だけでなく、書籍の版下作成にも使えることも実証済みである。本稿を契機に使用者が増えることを期待している。

参考文献

- [1] S. Fujita, *Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry*, Springer-Verlag (1991).
- [2] 藤田 眞作, 「化学者・生化学者のための \LaTeX —パソコンによる論文作成の手引き」, 東京化学同人 (1993).
- [3] 藤田 眞作, *\LaTeX —Typesetting Chemical Structural Formulas*, アジソン・ウェスレイ・パブリッシャーズ・ジャパン (1997).
- [4] S. Fujita, *Organic Chemistry of Photography*, Springer-Verlag (2004).
- [5] 藤田 眞作, 「 \LaTeX 2_ε 階梯 (第 2 版)」, ピアソン・エデュケーション (2000).