

演 題	Hyper XyMTeX—PostScriptおよびPDFに対応した構造式出力システム	
発 表 者 ( 所 属 )	○内山 克彦・藤田 眞作 (京都工繊大院工芸)	
連 絡 先	〒606-8585 京都市左京区松ヶ崎御所海道町 京都工芸繊維大学 物質工学科 記録材料学研究室 内山 克彦 電話番号：075-724-7543 E-mail：katsuhiko-uchiyama@mail.goo.ne.jp	
キーワード	XyMTeX, PostScript, LaTeX2e, 構造式	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など	XyMTeXは、化学構造式を描くためのマクロパッケージである。 これをPostScript対応とすることにより、6員環などの環系を正確に描けるようにした。また、置換基や二重結合などの出力位置を微調整して、印刷品質を大幅に改良した。 さらに文書全体をPostScriptに変換し、PDF変換することにより、インターネット配信および印刷を同時におこなう道を開いた。	
環 境	適 応 機 種 名	IBM PC/AT 互換機
	O S 名	Windows XP Professional
	ソース言語	TeX
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ○未定	具 体 的 方 法

## 1. はじめに

XyMTeX は、化学構造式を描くためのマクロパッケージである。これは、LaTeX2e用のパッケージファイル群から成り立っている。各ファイルには化学構造式を描くためのコマンドのマクロコードが含まれている。各コマンドは、広範囲の化合物の構造が描けるように、新しい構想のもとに作成したものである。LaTeX2eの picture 環境を前提にして、その範囲内（図形組版）で構造式が描けるようになっている。したがって、構造式出力のプリンターは（プリンタードライバーさえあれば）種類を選ばず、出力が可能である。

現在、XyMTeXはVersion 3.00まで公開済みである。Version2.00で線形表現（liner notation）としてXyM Notationの定式化をおこない、Version3.00で構造式の大きさを可変にできるように改良し

た。Version4.00 では新たにマクロファイルを追加することにより PostScript を利用することを可能にした。さらに 6 員環・5 員環の出力の微調整をおこない、審美的にも高度な出力を可能にした Hyper XyMTeX を開発した。今回の発表では、Version4.00 および Hyper XyMTeX の拡張分について報告する。

## 2. 方法

PostScript の LaTeX2e のマクロパッケージである PSTricks を使用し、LaTeX2e の  $\put$  と  $\line$  の定義を PSTricks の命令に変換した。とくに Hyper XyMTeX においては 6 員環のゆがみをなくし置換基や二重結合などの出力位置を調整する作業をおこなった。このことにより旧バージョンより図形的に正確な構造式が PostScript の環境の中で描画可能となった。

## 3. 結果

以下に Hyper XyMTeX のコマンドと表示例を示す。

```

\yzdrv{1==OH;5==CH$_{3}$;4==OC$_{16}$H$_{33}$;%
2==\ryl(4==NH\cdot SO$_{2}$){4==\yzdrh{1==(yl);2==OCH$_{2}$CH$_{2}$OCH$_{3}$;%
5==\ryl(2==NH\cdot SO$_{2}$){4==\yzdrh{1==(yl);%
5==\ryl(2==SO$_{2}$\cdot NH){4==\ynaphdrh{1==(yl);5==OH;%
8==\lyl(4==N=N){4==\yzdrh{4==(yl);1==O$_{2}$N;5==SO$_{2}$CH$_{3}$}}}}}}

```

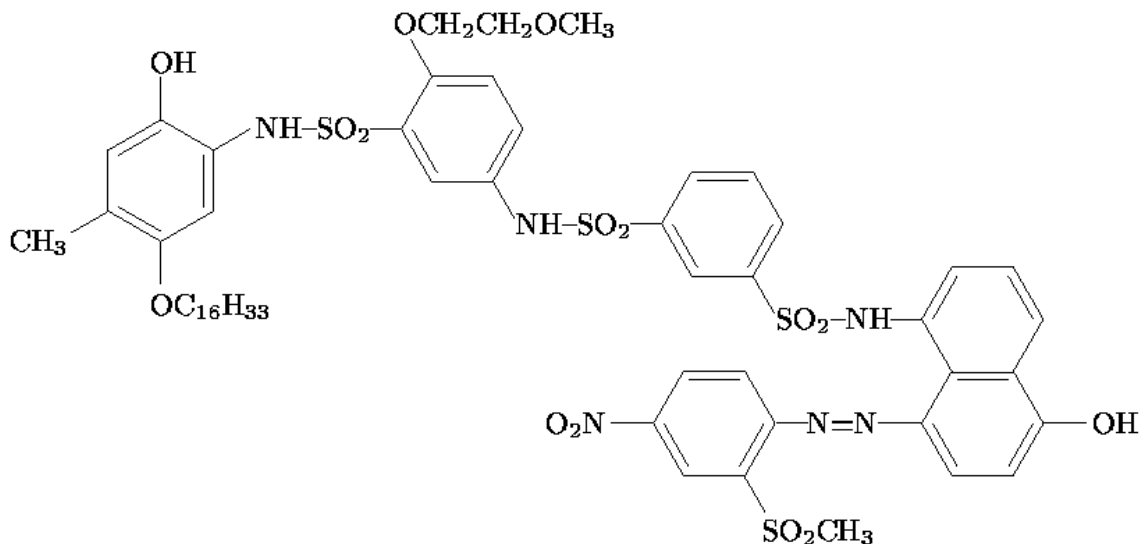


Fig. Hyper XyMTeX の例

## 4. おわりに

さらに文書全体を PostScript に変換し、PDF 変換することにより、インターネット配信および印刷を同時におこなうこともできるようになった。今後、最終調整をおこなった上で Version4.00 および Hyper XyMTeX を公開したいと考えている。