

## X<sup>Y</sup>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub>/L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X による学際的書籍 「Mathematical Stereochemistry」の出版

○ 藤田 眞作 (湘南情報数理化学研究所)

[はじめに] L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 用の構造式描画ソフト X<sup>Y</sup>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub> (キムテック) を大幅に拡充して, Version 5.01 をリリースした [1]. これにより, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 本来の数式組版に加えて, 化学構造式の組版も統合的におこなえるようになった. 今回, 学際的書籍「Mathematical Stereochemistry」[2] の出版に適用し, 高品質の組版結果をうることができたので報告する.

[X<sup>Y</sup>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub> 開発と書籍出版] 演者は, 1980 年代後半から, 有機化学と数学との境界領域の研究をおこなっている. この研究結果を公表する際には, 有機化合物の構造式と数式の両方を取り扱えるようなソフトウェアが必要であるが, 当時はこのような要求に合致するものは存在しなかった (当時, 構造式描画ソフトとして ChemDraw が発売されていたが, 個人研究者にとっては高嶺の花であった). 数式に限っても, 当時は, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X を使う以外の選択肢はなかったので, 最初の学際的著書 [3] も, 数式は L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X で組版し, 構造式は手で描いたものを貼り付けという方法で出版した. この経験をもとに, 化学者向けの L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X の入門書 [4] を執筆したが, 構造式の描画については, 不十分な記述しかできなかった.

これらの出版のあと, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X システムと併用できる構造式描画ソフトウェアの開発を目論み, ほどなく X<sup>Y</sup>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub> システムをリリースすることができた [5, 6, 7]. 何回かのバージョンアップ [8, 9] により, システムの機能的な面での進歩はある程度達成された. また, X<sup>Y</sup>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub> の入力コードをインターネットに適合するように, 線型記法 X<sup>Y</sup>M notation [10] として整備し, Java による実装 [11] をおこなった. また, マークアップ言語として, X<sup>Y</sup>MML [12, 13] を開発した. これらの機能面, 応用面の進歩はあったものの, 印刷された構造式の品質の面からは, まだまだ不十分であった.

21 世紀に入って, PostScript 言語による高品質な印刷が主流になってきた. そこで, 構造式の印刷品質の向上を目差して, PostScript 対応としたバージョンの開発をおこなった [14]. これにより, カラー写真用の有機化合物の構造式を多数含む著書 [15] を上梓することができた.

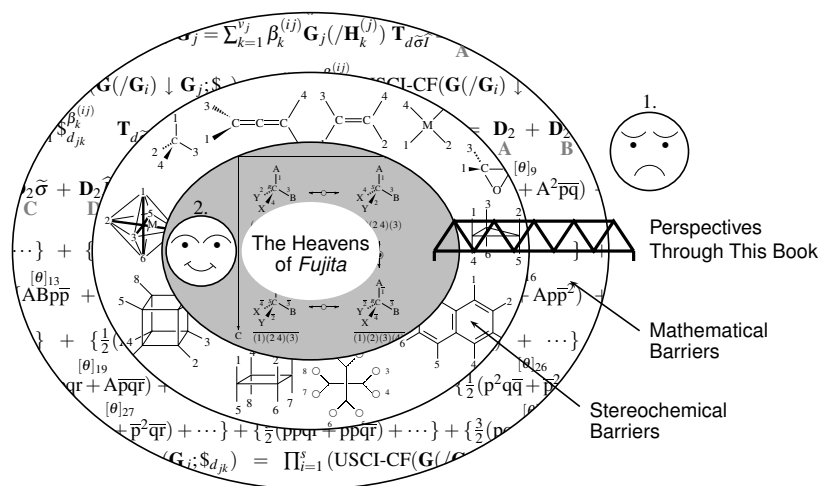
さらに, 近年, PDF が主流になってきたので, PostScript にも PDF にも対応したバージョンをリリースした [16]. これにより, 数理化学分野の著書 [17, 18] を出版することができた. この経験をもとに, 化学と数学との学際分野に関する出版について, X<sup>Y</sup>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub> 利用の立場から論じた [1]. また, 著書 [18] の執筆の際に, X<sup>Y</sup>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub> のマニュアル (780 ページ) を整備し, インターネットからダウンロードできるようにした [19].

[学際的書籍「Mathematical Stereochemistry」の出版] 演者は, 化学と数学との学際分野「数理立体化学 (Mathematical Stereochemistry)」の確立を目差している. これまでに, 著書 [3] において, USCI アプローチなる新手法 (有機化合物を 3 次元構造として, 対称性を加味して数え上げる方法) を開発した. 著書 [17] において, 「mandala (曼荼羅)」なる概念を提案し, 有機化合物の対称性を一般的に論じた. 著書 [18] において, プロリガンド法という便利な数え上げ法を開発した.

今回, あらたに著書 [2] を刊行して, ステレオイソグラムアプローチを提案した. これは, 幾何学的な取扱い (点群に基づく) と立体異性的な取扱い (置換群に基づく) とを統合する試みである. 点群と置換群の相互作用を厳密に規定するため, RS-置換群という新概念を提案している. 点群がキラリティーに相当するのに対して, RS-置換群は, RS-ステレオジェニシティーに相当する. その上で, キラリティーと RS-ステレオジェニシティーを二種類の左右系 (handedness) とみなす. 点群と RS-置換群を統合したものを RS-立体異性群という. これに対応して, キラリティーと RS-ステレオジェニシティーが統合されて, RS-立体異性となる. RS-立体異性は, ステレオイソグラムという図形で表現される.

著書 [2] においては, 点群, RS-置換群, RS-立体異性群などの数学的な定式化を, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 本来の数式処理機能により記述し, 一方, キラリティー, RS-ステレオジェニシティー, RS-立体異性 (ステレオイソグラム) などの立体化学的・図形的な定式化を X<sup>Y</sup>M<sub>T</sub>E<sub>X</sub> による構造式処理機能により記述している.

演者のアプローチは, 立体化学的な障壁と数学的な障壁のために理解しがたいとされ, 「藤田の楽園 (The Heavens of Fujita)」と揶揄されている [20]. 著書 [2] によって, これらの障壁が克服され, 「藤田の楽園 (The



1. An organic chemist (or a mathematician) trying to make his way through!
2. He made it.

図 1: Mathematical barriers and stereochemical barriers [2, Fig. 15.2]. This figure is a revision of El-Basil's caricature [20, Fig. 35].

Heavens of Fujita」への堅固な橋を架けることができたといえる。すなわち、文献 [20] の戯画 (Fig. 35) に橋を加えて、図 1 [2, Fig. 15.2] と改変することができる。研究面の障碍だけでなく、実務面での障碍 (化学と数学の学際的書籍の出版おける構造式の描画と数式の記述) も、 $\text{\LaTeX}$ により描いた図 1 の構成要素の出力をみればわかるように、 $\text{\LaTeX}$ の開発により克服されたといえる。

#### [参考文献]

- [1] S. Fujita, *TUGboat*, **34** (3), 325–328 (2013).
- [2] S. Fujita, “Mathematical Stereochemistry,” De Gruyter, Berlin (2015).
- [3] S. Fujita, “Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry,” Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (1991).
- [4] 藤田 眞作, “化学者・生化学者のための  $\text{\LaTeX}$ —パソコンによる論文作成の手引き,” 東京化学同人, 東京 (1993).
- [5] S. Fujita, *Comput. Chem.*, **18**, 109–116 (1994).
- [6] S. Fujita, *TUGboat*, **16** (1), 80–88 (1995).
- [7] S. Fujita, “ $\text{\LaTeX}$ —Typesetting Chemical Structural Formulas,” Addison-Wesley Japan, Tokyo (1997).
- [8] S. Fujita and N. Tanaka, *TUGboat*, **21** (1), 7–14 (2000).
- [9] S. Fujita and N. Tanaka, *TUGboat*, **22** (4), 285–289 (2001).
- [10] S. Fujita and N. Tanaka, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **39**, 903–914 (1999).
- [11] N. Tanaka and S. Fujita, *J. Computer Aided Chem.*, **3**, 37–47 (2002).
- [12] S. Fujita and N. Tanaka, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **39**, 915–927 (1999).
- [13] N. Tanaka, T. Ishimaru, and S. Fujita, *J. Computer Aided Chem.*, **3**, 81–89 (2002).
- [14] S. Fujita, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **4**, 69–78 (2005).
- [15] S. Fujita, “Organic Chemistry of Photography,” Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (2004).
- [16] S. Fujita, *Asian J.  $\text{\TeX}$* , **3**, 89–108 (2009).
- [17] S. Fujita, “Diagrammatical Approach to Molecular Symmetry and Enumeration of Stereoisomers,” University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac (2007).
- [18] S. Fujita, “Combinatorial Enumeration of Graphs, Three-Dimensional Structures, and Chemical Compounds,” University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac (2013).
- [19] S. Fujita, “ $\text{\LaTeX}$ : Reliable Tool for Drawing Chemical Structural Formulas,” Shonan Institute of Chemoinformatics and Mathematical Chemistry, Kanagawa (2013), <http://xymtex.com/fujitas3/xymtex/indexe.html>.
- [20] S. El-Basil, “Combinatorial Organic Chemistry: An Educational Approach,” Nova Science, Huntington, New York (2000).