

DEBRECENI EGYETEM ◦ INFORMATIKAI KAR

Kémiai szerkezeti képletek megjelenítése
T_EX-el

DIPLOMAMUNKA

KÉSZÍTETTE:

Nagy Noémi Júlia
programtervező matematikus

TÉMAVEZETŐ:

Bujdosó Gyöngyi

DEBRECEN, 2006

Tartalomjegyzék

1. Előszó	4
2. Bevezetés	7
2.1. Történeti áttekintés	7
2.2. A csomag installálása	8
2.3. A csomag használata	8
3. Hattagú karbociklusok	10
3.1. Benzolszármazékok rajzolása	10
3.1.1. Függőleges benzolszármazékok	10
3.1.2. Vízszintes benzolszármazékok	12
3.2. Ciklohexán származékok rajzolása	13
3.2.1. Függőleges ciklohexán származékok	13
3.2.2. Vízszintes ciklohexán származékok	14
4. Hattagú heterociklusok	16
4.1. Függőleges hattagú heterociklusok rajzolása	16
4.2. Vízszintes hattagú heterociklusok rajzolása	20
5. Öt-, illetve kevesebb tagú heterociklusok	23
5.1. Függőleges öttagú heterociklusok rajzolása	23
5.2. Vízszintes öttagú heterociklusok rajzolása	25
5.3. Négytagú heterociklusok rajzolása	26
5.4. Háromtagú heterociklusok rajzolása	28
6. Két hattagú heterociklusból álló gyűrűk	30
6.1. Függőleges alakzatok rajzolása	30
6.2. Vízszintes alakzatok rajzolása	32
7. Hat- és öttagú heterociklusokból összekapcsolt gyűrűk	35
7.1. Függőleges alakzatok rajzolása	35
7.2. Vízszintes alakzatok rajzolása	37
8. További ciklikus vegyületek	40
8.1. Szék formájú ciklohexán rajzolása	40
8.1.1. Szabályos képlet	40
8.1.2. Inverz képlet	41
8.2. Furanózik és piranózik rajzolása	42
9. Alifás vegyületek	45
9.1. Tetrahedrális egységek rajzolása	45
9.2. Trigonális egységek rajzolása	46
9.3. Etilén származékok rajzolása	48

10. Polimerek	51
10.1. Szubsztituens listán megadható határolójelek	51
10.2. Külön megadható polimer határolójelek	53
10.3. Polietilén egységek	54
10.4. Polisztirén egységek	55
11. Összegzés	57

1. Előszó

Korosztályom számára már természetes, hétköznapi dolog a számítógép jelenléte a mindennapokban, így az is, hogy dokumentumainkat szövegszerkesztő programok segítségével hozzuk létre. Egyetemi tanulmányaim előtt fel sem merült, hogy az általam ismert szövegszerkesztőkkel ne tudnám megvalósítani az elképzeléseimet. Az egyetemen találkoztam először a $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ kiadványszerkesztővel és rádöbbentem, hogy mennyire komplex ez a terület.

Mivel egy egyszerűbb program nem képes bonyolultabb szerkesztési feladatok megvalósítására, elkezdtem feltérképezni, mi mindenre használható ez a program. Meglepően sok területen kiválóan alkalmazható, és egyre több magyar nyelvű szakirodalom is található hozzá. Rátaláltam azonban egy magyar nyelven igen szegényesen feldolgozott témára, a kémiai szerkezeti képletek megjelenítésére. Mivel ilyen képletek más programokkal történő megrajzolása a szakemberek és diákok számára egyaránt kihívás, és a $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -ben létrehozott kémiai csomagokhoz többnyire csak angol nyelvű dokumentumok léteznek, úgy döntöttem, dolgozatom témájaként egy ilyen csomag, a $\text{X}_{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ általános parancsainak bemutatását választom. A csomagot Shinsaku Fujita dolgozta ki.

Több kémiai csomag létezik a $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -ben, melyek közül talán a legismertebb a *chemtex*. Ez a csomag akkor készült, amikor a $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -et még nem használták grafikus elemek szerkesztéséhez, így mára elavultnak tekinthető. Ezzel szemben a $\text{X}_{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ csomag az utóbbi 13 évben többször is frissítésre került a szerzője által, aki még több, még praktikus paranccsal egészítette ki azt. A makróknak léteznek általános és speciális változatuk is. A speciálisak azért lehetnek hasznosak a felhasználók számára, mert ezek a parancsok adott vegyületet jelenítenek meg, míg az általános makróknál az alapvegyületet kell úgy kiegészíteniük heteroatomokkal és szubsztituensekkel, ahogy szeretnék. E csomag használata mellett szól még az, hogy nagyméretű szubsztituensek rajzolására is kiválóan alkalmas. Összehasonlítva a *chemtex* csomaggal, a $\text{X}_{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -et sokkal kidolgozottabbnak, és használatát tekintve egyszerűbbnek találtam. Átöleli a kémia összes területét, mivel magában foglalja mind a szerves, mind a szervetlen vegyületek szerkezeti képleteinek, illetve azok reakcióegyenleteinek kiíratására használható utasításokat.

A $\text{X}_{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ csomagban tehát olyan makrók vannak definiálva [10], melyek segítségével nagyon egyszerű a különféle vegyületek képleteinek megjelenítése. Továbbá a csomag használatát az is megkönnyíti,

hogy a parancsok nevei rendkívül „beszédesek”. Az összes bemutatása meghaladná egy dolgozat kereteit, ezért közülük az általános használatra szánt parancsok mellett döntöttem. Ezekkel az utasításokkal – azok paraméterlistáit felhasználva – minden vegyület megrajzolása lehetséges. A kémiai szakkifejezések magyarázatát nem szerepeltetem, mivel ez a dolgozat leginkább vegyészek, vegyészhallgatók számára lehet hasznos útmutató.

Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani elsősorban Bujdosó Gyöngyi tanárnőnek, amiért elvállalta és munkájával segítette dolgozatom elkészülését.

Továbbá köszönöm barátnőmnek, Magyar Ágnesnek is a segítségét és támogatását.

2. Bevezetés

A \TeX nyomdai minőségű dokumentumok előállítására alkalmas szedő- és tördelő-program. Lelke a dokumentumok leírását szolgáló programnyelv, melyet a híres stanfordi matematikus, Donald E. Knuth tervezett és hozott létre. A \TeX -el minden tipográfiai feladat megoldható, de gyakran csak fáradságos programozói munkával.

A \TeX -ben makrók is írhatók, ez viszont lehetővé teszi, hogy arra egy magasabb szintű, barátságosabb programnyelv épüljön. Egy ilyen nyelv a \LaTeX , melyet Leslie Lamport fejlesztett ki. Tulajdonképpen a \LaTeX leginkább egy makrócsomag, \TeX parancsok gyűjteménye. Mára e program a tudományos, műszaki szövegszerkesztésben meghatározóvá vált: többszáz folyóiratot \LaTeX -ben készítenek, évente több ezer könyv és megszámlálhatatlan mennyiségű kiadvány, dolgozat, egyetemi jegyzet, beszámoló készül a segítségével, de használata a tipográfia egyéb területein is igen elterjedt. Az olyan bonyolult tipográfiai feladatok nyomdai minőségű megoldásában, mint amit a matematikai formulák szedése jelent, a $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ -rendszereknek máig sincs komoly versenytársuk a számítógépes programok között.

A \TeX és a \LaTeX szinte minden számítógépen és operációs rendszeren használható. A különböző gépeken futó \TeX változatok ugyanabból a kéziratból ugyanazt a dokumentumot állítják elő. Az előállított dokumentum bármilyen számítógépen, bármilyen operációs rendszeren, bármilyen nyomtatón kinyomtatható.

A \XyMTeX egy kémiai csomag, mely segítségével kémiai szerkezeti képleteket tudunk nagyon egyszerűen megrajzolni. A csomagot és annak összes verzióját is Shinsaku Fujita hozta létre.

2.1. Történeti áttekintés

1.00 verzió (1993)

A \XyMTeX rendszer első verziója egy részletes on-line kézikönyvvel kiegészítve a szerző, Shinsaku Fujita [1] által került a NIFTY-Serve archívumba (7. számú FPRINT könyvtár), majd önkéntesek által a CTAN-re [2]. A \XyMTeX felépítéséről és használatáról szóló cikkek referenciái a bibliográfia [3] és [4] pontjaiban olvashatók. Annak ellenére, hogy a \XyMTeX rendszer csomagjai (stílus fájlok) eredetileg a $\text{\LaTeX}2.09$ rendszerhez készültek, a $\text{\LaTeX}2_{\epsilon}$ rendszerben [5, 6] is működnek bármiféle változtatás nélkül. Az egyetlen különbség, hogy a $\text{\LaTeX}2.09$ -ben a dokumentumnak a

```
\documentstyle[epic,carom,hetarom]{article}
```

paranccsal kell kezdődnie, míg a $\text{\LaTeX}2_{\epsilon}$ -ban például a

```
\documentclass{article}
\usepackage{epic,carom,hetarom}
```

parancsokkal.

1.01 verzió (1996)

A $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ rendszer 1.01-es verziója 1996-ban jelent meg, amit a szerző [7] helyezett el részletes on-line kézikönyvvel együtt a NIFTY-Serve archívumba (7. számú FPRINT könyvtár). A rendszer elérhető interneten keresztül Fujita honlapján [8], illetve megtalálható az 1997-ben megjelent referenciakézikönyv [9] CD mellékletén.

Az 1.01 verzió azért jött létre, hogy a $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ kompatibilitását a $\text{\L}\text{\T}\text{\E}\text{\X} 2_{\varepsilon}$ -hoz tökéletesítsék (stílus fájlok opció).

1.02 verzió (1998, nem jelent meg)

A $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ 1.02 verziója kifejezetten a beágyazott szubsztitúciós eljárás számára készült, melyben a $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ parancsok kódjai jóval egyszerűbbek. Az 1.01-es verzióban a szubsztitúciós listán (SUBSLIST) csak viszonylag kisméretű szubsztitúciós listákat lehet megadni.

2.00 verzió (1998)

Az 1.02 $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ verzióban létrehozott „yl”-függvény nem más, mint a szubsztitúciós lista (SUBSLIST) módosítása. Ezen gondolat mentén a kötéslisták (BONDLIST) is módosíthatók, amivel a gyűrűkapcsolás kezelhető, mivel mindegyik gyűrű fel fogható egy kötésen található valamiféle szubsztitúcióként. Továbbá az atomlista (ATOMLIST) szintén úgy kezelendő, mint spirángyűrű, mivel minden spirán egyfajta atomhelyettesítés a megfelelő csúcsban. A $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ rendszer kibővítéseként sok új függvény jelent meg.

A $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ rendszer (2.00 verzió) csomagjainak listája az 1. táblázatban olvasható. A `chemstr.sty` az az alap állomány, melyet a $\text{\X}\text{\M}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ minden további csomagja automatikusan használ. Ez a csomag általános belső makrókat tartalmaz, például a kötések vagy az atomok szedéséhez. A többi csomag tartalmazza a felhasználók által alkalmazható makrókat. Ezek az állományok nemcsak a $\text{\L}\text{\T}\text{\E}\text{\X} 2_{\varepsilon}$ -ban, hanem a $\text{\L}\text{\T}\text{\E}\text{\X} 2.09$ -ben (natív mód) is használhatók opcionálisan (stílusfájlokként).

2.2. A csomag installálása

Windows operációs rendszer alatt $\text{\Mik}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ disztribúcióval dolgozó felhasználóknak nincs szükségük a csomag installálására, mivel az a $\text{\Mik}\text{\T}\text{\E}\text{\X}$ része.

2.3. A csomag használata

A dokumentumunk elején az általános `\usepackage[opciók]{csomagnév}` parancsot használva tudunk csomagot importálni. Például, ha alifás vegyületek képleteit szeretnénk megrajzolni, az `aliphath.sty` stílusfájlt kell importálnunk a következőképpen:

```
\usepackage{aliphath}
```


1. táblázat. A $\text{\XMT}_{\text{E}}\text{X}$ csomagjai

csomag név	tartalmazott függvények
<code>aliphat.sty</code>	makrók alifás vegyületekhez
<code>carom.sty</code>	makrók függőleges és vízszintes típusú karbociklusos vegyületekhez
<code>lowcycle.sty</code>	makrók 5, illetve kevesebb tagú karbociklusokhoz
<code>ccycle.sty</code>	makrók biciklusos vegyületekhez, stb.
<code>hetarom.sty</code>	makrók függőleges típusú heterociklusos vegyületekhez
<code>hetaromh.sty</code>	makrók vízszintes típusú heterociklusos vegyületekhez
<code>hcycle.sty</code>	makrók piranóz és furanóz vegyületekhez
<code>chemstr.sty</code>	alapvető parancsok az atom- és kötéstípusok szedéséhez
<code>locant.sty</code>	parancsok a helyzetszámok nyomtatásához
<code>polymers.sty</code>	parancsok a polimerekhez
<code>fusering.sty</code>	parancsok az elemek megjelenítéséhez gyűrű-összekapcsolásoknál
<code>methylen.sty</code>	parancsok a cikcakk formájú polimetilén láncokhoz
<code>xymtex.sty</code>	ezen a csomagon keresztül az összes csomag használható
<code>chemist.sty</code>	parancsok kémiai mód, illetve kémiai környezet használatához.

Ha a `xymtex.sty` csomagot adjuk meg paraméterként, tehát az összes fent felsorolt csomagot használni szeretnénk, előfordulhat, hogy a „ \TeX capacity exceeded” (\TeX kapacitás túllépés) hibaüzenetet kapjuk. Ilyen esetben érdemes a `\usepackage` paranccsal külön-külön, csak azokat a csomagokat meghívni, melyekre feltétlenül szükségünk van.

A következő fejezetekben minden egyes parancs bemutatásánál az őket tartalmazó stílusfájlok is meg vannak nevezve, a könnyebb felhasználás érdekében.

3. Hattagú karbociklusok

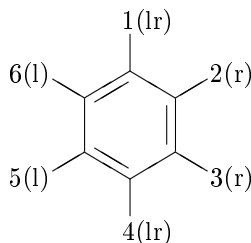
3.1. Benzolszármazékok rajzolása

3.1.1. Független benzolszármazékok

Benzolszármazékokat a `\bzdrv` makróval tudunk létrehozni függőleges formában (`carom.sty`). A parancs alakja a következő:

```
\bzdrv[kötéslista]{szubsztitúciós lista}
```

A szubsztitúciós pozíciókat jelölő helyezetszámokat, melyeket a szubsztitúciós listában használhatunk fel, az alábbi ábra szemlélteti, ahol a zárójelben lévő betű jelzi, hogy jobb, vagy bal oldali pozícióról van szó.



Mindez összhangban van a `\bzdrv` parancs alapértelmezett definíciójával, a jobb oldali pozíciók mindegyike (2-es és 3-as) csak egy jobb oldali szubsztituenset fogad, míg minden bal oldali pozíció (5-ös és 6-os) csak egy bal oldali szubsztituenset. Az ilyen pozíciókat – amelyeket 'r', illetve 'l' betűvel jelölünk – „irányított” pozícióknak nevezzük. Ezzel szemben egy benzolgyűrű felső és alsó pozíciója – melyeket 'lr' betűkkel jelölünk – képes mindkét oldali szubsztituenset befogadni. Ezeket kétoldalú pozícióknak hívjuk. Bár alapértelmezés szerint az ilyen pozíciókon elhelyezett szubsztituensek jobb oldalon jelennek meg, de balra igazíthatjuk őket az `\lmoiety` makró segítségével.

A kötéslista egy opcionális argumentum, amely egy kötésmintát határoz meg a 2. táblázatban leírtak szerint. Ennek következtében a kötésmódoknak sokféle változata lerajzolható.

A szubsztitúciós listán minden szubsztituens egy helyezetszámmal és egy kötés-módosítóval adható meg. Ehhez a 5. táblázat nyújt segítséget, ahol n egy 1 és 6 közötti egész szám.

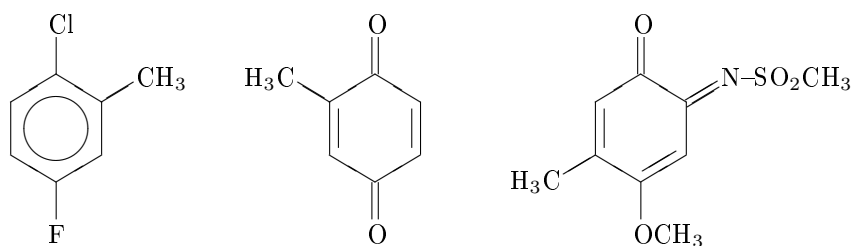
Példaként tekintsük a következő utasításokat,

```
\bzdrv{1==C1;2==F}  
\bzdrv[c]{1==C1;4==F;2==CH$_{3}$}\quad  
\bzdrv[pa]{1D==0;4D==0;6==H$_{3}$C}  
\bzdrv[oa]{1D==0;2D==N--S0$_{2}$CH$_{3}$;4==OCH$_{3}$;5==H$_{3}$C}
```

melyek az alábbi szerkezeteket állítják elő:

2. táblázat. A `\bzdrv` és `\bzdrh` kötéslista-argumentumai

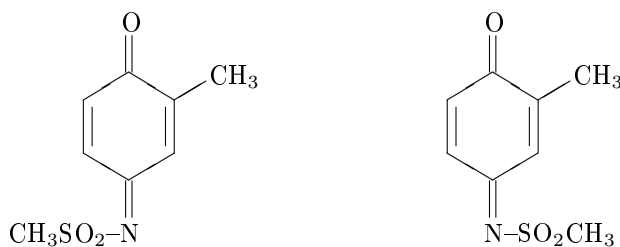
Karakter	Megjelenített szerkezet
semmi vagy r	jobb oldali atom
l	bal oldali atom
c	aromás gyűrű
p vagy pa	<i>p</i> -benzokinon (A)(Oxigén atomok az 1, 4 pozíciónál)
pb	<i>p</i> -benzokinon (B)(Oxigén atomok a 2, 5 pozíciónál)
pc	<i>p</i> -benzokinon (C)(Oxigén atomok a 3, 6 pozíciónál)
o vagy oa	<i>o</i> -benzokinon (A)(Oxigén atomok az 1, 2 pozíciónál)
ob	<i>o</i> -benzokinon (B)(Oxigén atomok a 2, 3 pozíciónál)
oc	<i>o</i> -benzokinon (C)(Oxigén atomok a 3, 4 pozíciónál)
od	<i>o</i> -benzokinon (D)(Oxigén atomok a 4, 5 pozíciónál)
oe	<i>o</i> -benzokinon (E)(Oxigén atomok az 5, 6 pozíciónál)
of	<i>o</i> -benzokinon (F)(Oxigén atomok az 1, 6 pozíciónál)



Ha a szubsztituenseket balra, vagy jobbra szeretnénk igazítani, az `\lmoiety` és az `\rmoiety` makrókkal tehetjük meg. Például a

```
\bzdrv[pa]{1D==0;4D==\lmoiety{CH$_{3}$SO$_{2}$--N};2==CH$_{3}$}
\bzdrv[pa]{1D==\rmoiety{0};4D==\rmoiety{N--SO$_{2}$}CH$_{3}$};2==CH$_{3}$}
```

utasítások egy bal oldali, illetve egy jobb oldali metánszulfonimido csoportot hoznak létre.

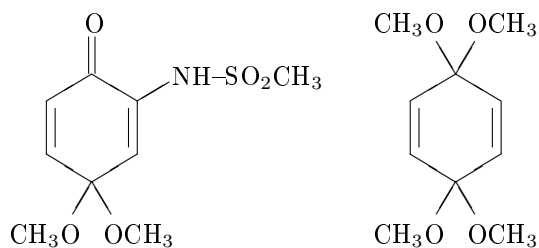


A `\bzdrv` makró benzokinon félacetálok és acetálok rajzolására is alkalmas. Az ábrán látható pozíciók kapcsolt szubsztituensek bal, és jobb oldali elhelyezését a kémiai konvencióknak megfelelően adhatjuk meg.

Például, a

```
\bzdrv[pa]{1D==0;4Sb==CH$_{3}$0;4Sa==OCH$_{3}$;2==NH--SO$_{2}$CH$_{3}$}
\bzdrv[pa]{1Sb==CH$_{3}$0;1Sa==OCH$_{3}$;4Sb==CH$_{3}$0;4Sa==OCH$_{3}$}
```

parancsok az alábbi szerkezeteket hozzák létre:

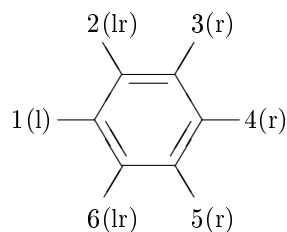


3.1.2. Vízszintes benzolszármazékok

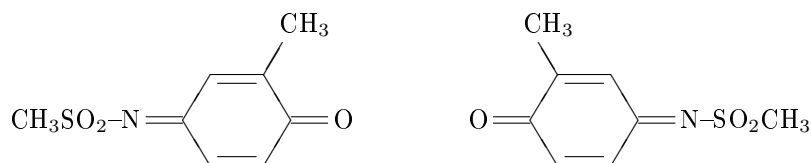
A `\bzdrh` makrót használhatjuk benzolszármazékok vízszintes megjelenítéséhez (carom.sty). Formája:

```
\bzdrh[kötélista]{szubsztitúciós lista}
```

Az argumentumait a `\bzdrv` argumentumaihoz hasonlóan adhatjuk meg (5. és 2. táblázat). A helyzetszámokat és azt, hogy a szubsztituens jobb, vagy bal oldali, a következő ábrán láthatjuk:



Például az alábbi ábrák,



ezen utasítások által jöttek létre:

```
\bzdrh[pa]{4D==0;1D==CH$_{3}$S0$_{2}$--N;3==CH$_{3}$}
\bzdrh[pa]{1D==0;4D==N--SO$_{2}$CH$_{3}$;2==CH$_{3}$}
```

Itt meg kell említeni, hogy a `\bzdrv` és a `\bzdrh` a parancsok külön-külön a `\cyclohexanev` és a `\cyclohexaneh` makróra épülnek, melyek a következő bekezdés témái lesznek. Tehát azok a szerkezetek, amelyeket az előbbi parancsok jelenítettek meg, szintén megrajzolhatók az utóbbiakkal.

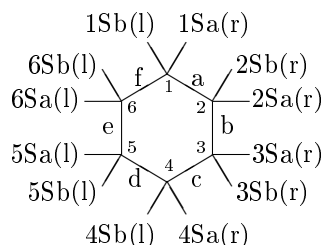
3.2. Ciklohexán származékok rajzolása

3.2.1. Függőleges ciklohexán származékok

Ciklohexán származékok függőleges kiírásához a `\cyclohexanev` makró áll rendelkezésünkre (`carom.sty`). A parancs formája:

```
\cyclohexanev[kötéslista]{szubsztitúciós lista}
```

A helyettesítési pozíciók jelölésére használt helyzetszámok (1-6) és a kettős kötéseket jelölő karakterek az alábbi ábrán láthatóak:



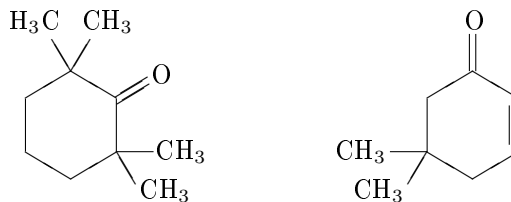
A zárójelek között szereplő betű azt jelzi, hogy az adott pozíció jobb, vagy bal oldalon helyezkedik el. Az ilyen típusú makrókban ez rögzítve van.

A kötéslista egy opcionális argumentum, amely egy zárójelek között lévő karakterlánc. Benne minden egyes karakter egy kettős kötés előfordulását jelzi az általa jelölt élnél. A kötés leírás néhány esetben tetszőleges, ha viszont olyan szabályok fordulnak elő, mint a 3. táblázatban szereplők, akkor a kémiai konvenciókhoz híven alkalmazkodik.

A szubsztitúciós listában használható módosítókat a 5. táblázat tartalmazza. Példaként tekintsük a következő parancsokat:

```
\cyclohexanev{2D==0;1Sb==H$_{3}$C;1Sa==CH$_{3}$};%
3Sb==CH$_{3}$;3Sa==CH$_{3}$}
\cyclohexanev[b]{1D==0;5Sb==CH$_{3}$;5Sa==CH$_{3}$}
```

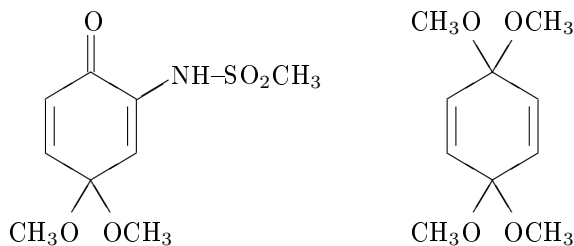
Az első példa azt az esetet illusztrálja, amikor a `\cyclohexanev` parancsot nem követi opcionális argumentum. Ezzel szemben a második példában `[b]` szerepel opcionális kötéslistaként, mely a 2-es és 3-as pozíciók között egy belső kötést helyez el. Így az alábbi ábrákat kapjuk:



Mivel a `\cyclohexanev` makró a `\bzdrv` alapját képezi, az utóbbival megrajzolt szerkezeti képletek az előbbivel is megjeleníthetők. Például a korábban rajzolt kinon acetálok a következő utasításokkal is létrehozhatók.

```
\cyclohexanev[be]{1D==0;4Sb==CH$_{3}$0;4Sa==OCH$_{3}$};%
2==NH--SO$_{2}$CH$_{3}$}
\cyclohexanev[be]{1Sb==CH$_{3}$0;1Sa==OCH$_{3}$};%
4Sb==CH$_{3}$0;4Sa==OCH$_{3}$}
```

Ezek a parancsok teljesen azonosak az említett utasításokkal és ugyanazok az általuk előállított szerkezetek is.



Ha a cél egy ciklohexán gyűrű sztereokémiájának megrajzolása, a következőket használhatjuk fel:

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

Ily módon hozzájuthatunk a



szerkezetekhez.

3.2.2. Vízszintes ciklohexán származékok

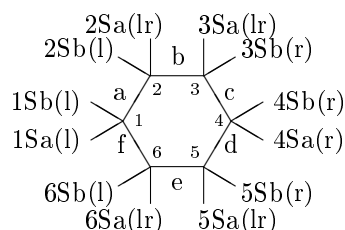
Ciklohexán származékok vízszintes rajzolásához a `\cyclohexaneh` makrót használhatjuk (`carom.sty`). A parancs alakja:

3. táblázat. A `\cyclohexanev` és `\cyclohexaneh` kötélista-argumentumai

Karakter	Megjelenített szerkezet
semmi	ciklohexán
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	4,3-kettős kötés
d	4,5-kettős kötés
e	5,6-kettős kötés
f	6,1-kettős kötés
A	aromás gyűrű

`\cyclohexaneh[kötélista]{szubsztitúciós lista}`

A szubsztitúciós pozíciókat jelölő helyzetszámokat a következő ábra reprezentálja:

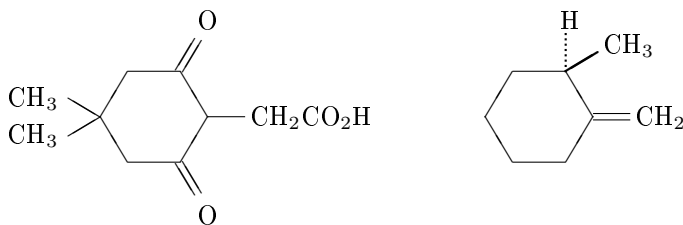


Azt, hogy jobb, vagy bal oldali egy pozíció, a zárójelben lévő betű jelzi. A szubsztitúciós listában és a kötélistában felhasználható elemek a 5. és a 3. táblázatban tekinthetők meg.

Nézzünk néhány példát ezen listák megadására:

```
\cyclohexaneh{3D==0;5D==0;1Sb==CH$_{3}$;1Sa==CH$_{3}$;%
4==CH$_{2}$CO$_{2}$H}
\cyclohexaneh{4D==CH$_{2}$;3SB==CH$_{3}$;3SA==H}
```

A parancsok az alábbi szerkezeteket eredményezik:



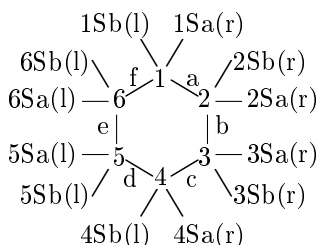
4. Hattagú heterociklusok

4.1. Függőleges hattagú heterociklusok rajzolása

A `\sixheterov` parancs egy általános makró a hattagú heterociklusos származékok függőleges megjelenítéséhez (`hetarom.sty`). Főként olyan heterociklusos vegyületek rajzolására használható, melyek vázában egy másik atom is szerepel, mint például a nitrogén atom. A parancs formája a következő:

```
\sixheterov[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A szubsztitúciós pozíciók jelölésére szolgáló helyzetszámok és a kötésfajtákhoz tartozó betűk az alábbi ábrán láthatók:



A zárójelekben szereplő karakterek azt jelzik, hogy jobb, vagy bal oldali pozícióról van szó.

Az opcionális kötéslista argumentum egy zárójelek között lévő karakterlánc, melyben minden egyes karakter egy kettős kötés előfordulását jelzi a betűk által meghatározott éleknél. A kötésleírás néhány esetben tetszőleges, ha viszont olyan szabályok fordulnak elő, mint a 4. táblázatban szereplők, akkor a kémiai konvenciókhoz híven alkalmazkodik. Mivel az alapértelmezett kiíratás egy teljesen telítetlen formát eredményez, ezért egy opcionális [H] argumentumot kell használnunk telített alakzat megjelenítésére.

Az atomlista argumentum a heteroatomok listája, pl.: `1==N` azt jelenti, hogy az 1. pozíción egy nitrogén atom szerepel. Ennek meghatározottnak kell lenni azért, hogy a parancs heteroatomot helyezhessen az adott pozícióba, és a heteroatomokhoz kapcsolódó élek automatikusan csönkuljanak, ezzel helyet biztosítva az atom kiíratásához.

A szubsztitúciós listán adhatjuk meg a szubsztitueneket és kötéseiket. Az ide vonatkozó kötésmódosítókat az 5. táblázat tartalmazza.

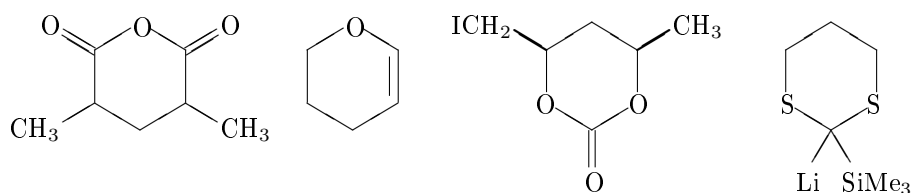
Példák, melyeket a

```
\sixheterov[H]{1==0}{2D==0;6D==0;3==CH$_{3}$;5==CH$_{3}$}  
\sixheterov[b]{1==0}{}  
\sixheterov[H]{3==0;5==0}{4D==0;6B==ICH$_{2}$;2B==CH$_{3}$}  
\sixheterov[H]{3==S;5==S}{4Sa==SiMe$_{3}$;4Sb==Li}
```

parancsok állítanak elő:

4. táblázat. A `\sixheterov` és `\sixheterovi` kötéslista-argumentumai

Karakterek	Megjelenített szerkezet
semmi vagy <code>r</code>	jobb oldali atom
<code>l</code>	bal oldali atom
<code>H</code> vagy <code>[]</code>	teljesen telített alak
<code>a</code>	1,2-kettős kötés
<code>b</code>	2,3-kettős kötés
<code>c</code>	4,3-kettős kötés
<code>d</code>	4,5-kettős kötés
<code>e</code>	5,6-kettős kötés
<code>f</code>	6,1-kettős kötés
<code>A</code>	aromás gyűrű
<code>{n+}</code>	+ jel az n . nitrogén atomnál ($n = 1 \dots 6$)



Meg kell említeni, hogy ugyanezeket a vegyületeket másféleképpen is meg lehet rajzolni. A `\pyridinev`, `\pyrazinev`, `\pyrimidinev`, `\pyridazinev`, és `\triazinev` parancsok a `\sixheterov` makrón alapulnak. Ezek a parancsok anynyiban különböznek, hogy a nevüknek megfelelő vázhoz kapcsolhatunk szubsztituenseket, és nem rendelkeznek atomlistával.

Például, az alábbi parancsok

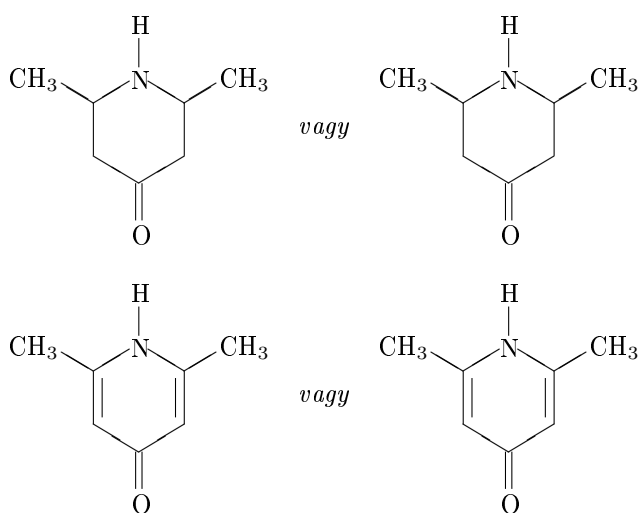
```
\pyridinev[H]{1==H;4D==0;2==CH$_{3}$;6==CH$_{3}$}
\sixheterov[H]{1==N}{1==H;4D==0;2==CH$_{3}$;6==CH$_{3}$}

\pyridinev[be]{1==H;4D==0;2==CH$_{3}$;6==CH$_{3}$}
\sixheterov[be]{1==N}{1==H;4D==0;2==CH$_{3}$;6==CH$_{3}$}
```

a következő szerkezeteket eredményezik:

5. táblázat. Helyzetszámok és kötés módosítók a szubsztitúciós listában

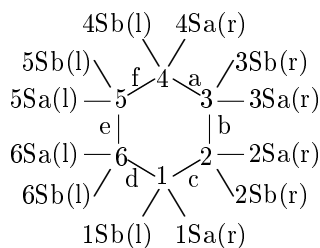
Kötés módosítók	Megjelenített szerkezetek
n vagy nS	exociklikus egyszeres kötés az n . atomnál
nD	exociklikus kettős kötés az n . atomnál
nA	egyszeres alfa kötés az n . atomnál
nB	egyszeres béta kötés az n . atomnál
nSa	egyszeres alfa kötés az n . atomnál
nSb	egyszeres béta kötés az n . atomnál
nSA	egyszeres alfa kötés az n . atomnál (pontosított vonalakkal)
nSB	egyszeres béta kötés az n . atomnál (vastag vonalakkal)



A `\sixheterovi` makró hattagú heterociklusos származékok függőleges, inverz rajzolására használható (`hetarom.sty`). Ezen parancs formája a következő:

```
\sixheterovi[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A helyettesítési pozíciók jelölésére szolgáló helyzetszámok (1-6) és a kötésleírók (a-f) az alábbi ábrán láthatók:

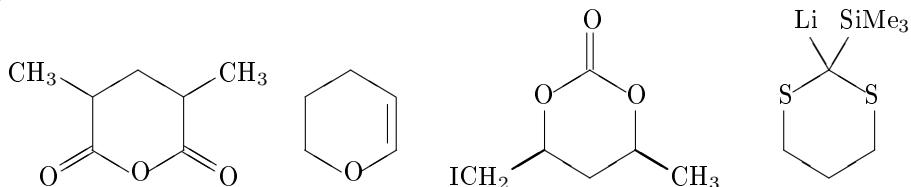


A következő struktúrákat nyerjük, ha fõnt bemutatott példákban szereplõ `\sixheterov` parancsot a `\sixheterovi` parancsra cseréljük.

Például a

```
\sixheterovi [H]{1==0}{2D==0;6D==0;3==CH$_{3}$;5==CH$_{3}$}
\sixheterovi [b]{1==0}{
\sixheterovi [H]{3==0;5==0}{4D==0;6B==ICH$_{2}$;2B==CH$_{3}$}
\sixheterovi [H]{3==S;5==S}{4Sa==SiMe$_{3}$;4Sb==Li}
```

parancsok

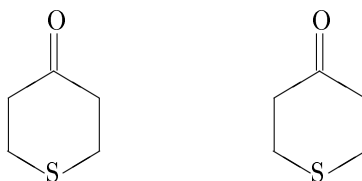


formulákat hozzák létre.

A `\sixheterov` és `\sixheterovi` parancsok ekvivalens eredményt adnak, ha az atomlistában és a szubsztitúciós listában a számozás módját megváltoztatjuk. Tekintsük példaként a

```
\sixheterov [H]{4==S}{1D==0}
\sixheterovi [H]{1==S}{4D==0}
```

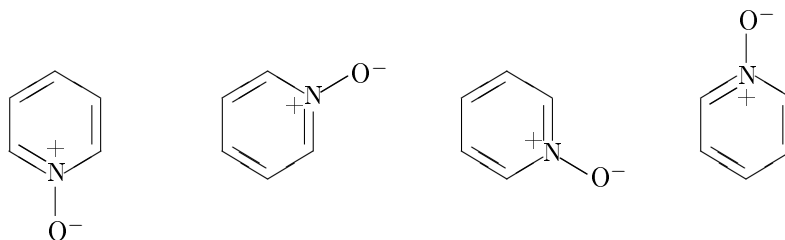
parancsokat, melyek ugyanazt a szerkezetet állítják elő:



Viszont az utóbbit részesítjük előnyben, mert a gyűrű atomjainak sorrendje megegyezik a gyakorlatban használttal. Ez indokolja az ilyen típusú makrók inverz változatának meglétét.

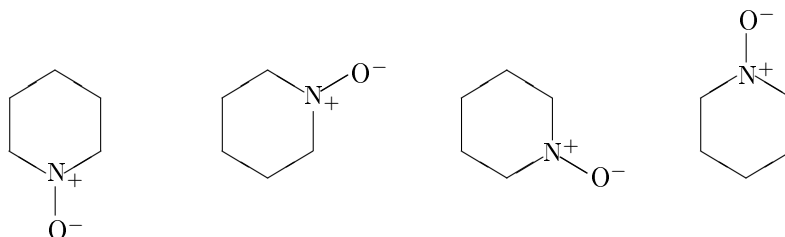
A `\pyridinev` (vagy `\pyridinevi`) parancs egy nitrogén atomot helyez egy piridin gyűrű rögzített pozíciójába. Nitrogén atom más helyen történő megjelenítéséhez a `\sixheterov` parancs használható, mint ahogy azt a következő példa is szemlélteti, melyben piridin N-oxid különböző képletei vannak ábrázolva.

```
\pyridinevi[r{1+}]{1==O$^{-}}$
\sixheterov[r{2+}]{2==N}{2==O$^{-}}$
\sixheterov[r{3+}]{3==N}{3==O$^{-}}$
\pyridinev[r{1+}]{1==O$^{-}}$
```



Egy belső nitrogén atom töltésének helyzetét többféleképpen megadhatjuk. Ha a `\sixheterov` atomlistájában töltött atomot adunk meg, akkor a töltés helyzetét is befolyásolhatjuk:

```
\sixheterov{4==N$_{+}$}{4==O$^{-}}$
\sixheterov{2==N$_{+}$}{2==O$^{-}}$
\sixheterov{3==N$^{+}$}{3==O$^{-}}$
\sixheterov{1==N$^{+}$}{1==O$^{-}}$
```

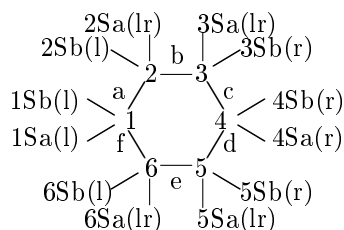


4.2. Vízszintes hattagú heterociklusok rajzolása

A `\sixheteroh` makró egy általános parancs a hattagú heterociklusok horizontális típusú rajzolásához (`hetaromh.sty`). Formája:

```
\sixheteroh[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A szubsztitúciós pozíciók jelölésére szolgáló helyzetszámok, valamint a kötésleírók jól láthatók a következő grafikonon:

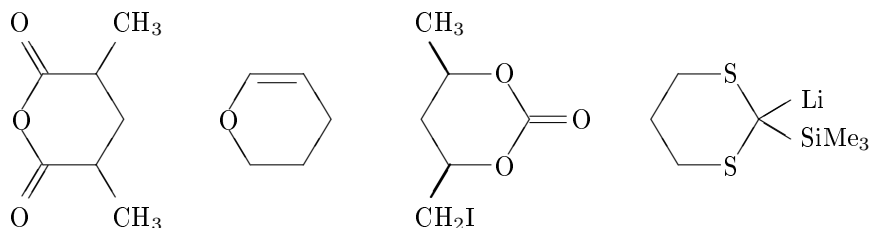


Minden egyes zárójelben szereplő karakter azt jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó. A szubsztitúciós lista és kötéslista argumentumok az 5. és 4. táblázatban találhatóak.

Tekintsük az alábbi példákat, ahol a

```
\sixheteroh[H]{1==0}{2D==0;6D==0;3==CH$_{3}$;5==CH$_{3}$}
\sixheteroh[b]{1==0}{ }
\sixheteroh[H]{3==0;5==0}{4D==0;6B==CH$_{2}$I;2B==CH$_{3}$}
\sixheteroh[H]{3==S;5==S}{4Sa==SiMe$_{3}$;4Sb==Li}
```

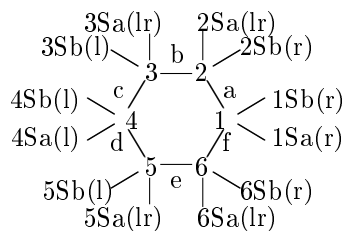
parancsok a következő struktúrákat eredményezik:



A `\sixheterohi` makró a `hetaromh.sty` csomagban van definiálva, mely hattagú heterociklusok vízszintes, inverz formában történő kirajzolására alkalmazható. Ez a parancs a következőképpen néz ki:

```
\sixheterohi[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

Az alábbi diagram mutatja a helyzetszámokat (1-6) a szubsztitúciós pozíciók jelöléséhez, valamint a kötésleírókat (a-f) a kettős kötések elhelyezéséhez:



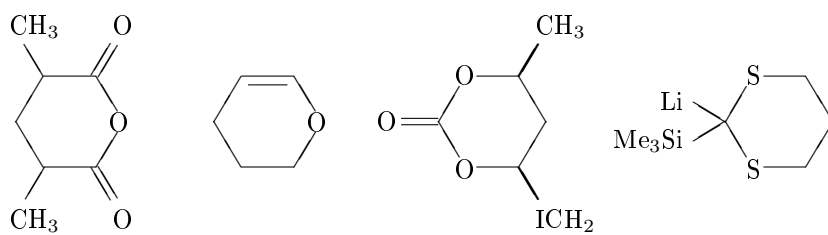
A zárójelben lévő betű jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó. A szubsztitúciós lista és kötéslista-argumentumok az 5. és 4. táblázatban tekinthetők

meg.

Például, a

```
\sixheterohi [H]{1==0}{2D==0;6D==0;3==CH$_{3}$;5==CH$_{3}$}$  
\sixheterohi [b]{1==0}{}  
\sixheterohi [H]{3==0;5==0}{4D==0;6B==ICH$_{2}$;2B==CH$_{3}$}$  
\sixheterohi [H]{3==S;5==S}{4Sa==Me$_{3}$Si;4Sb==Li}
```

parancsok



vegyületeket rajzolják ki.

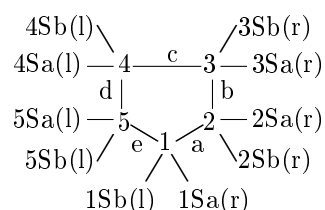
5. Öt-, illetve kevesebb tagú heterociklusok

5.1. Független öttagú heterociklusok rajzolása

A `\fiveheterov` parancs egy általános makró az öttagú heterociklusos származékok független megjelenítéséhez (`hetarom.sty`). Alakja a következő:

```
\fiveheterov[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A helyettesítési pozíciókat jelölő helyzetszámok, és kötésmódosítók a kettős kötések beállításához az alábbi ábrán láthatók:



Minden egyes zárójelben szereplő betű azt jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó.

Az opcionális kötéslista argumentum egy zárójel között lévő karakterlánc, melyben minden egyes karakter egy kettős kötés előfordulását jelzi a betűk által meghatározott éleknél. (6. táblázat).

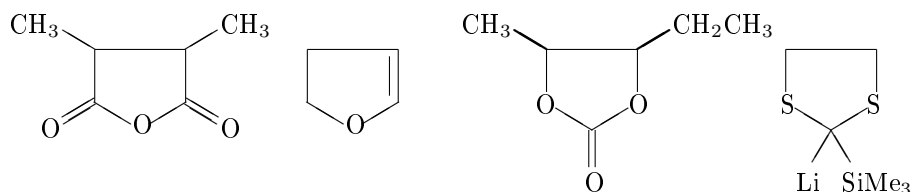
Mivel az alapértelmezett kötéslista egy teljesen telített alakzatot ír ki, a `\fiveheterov` nem igényli az opcionális `[H]` argumentumot, ellentétben a `\sixheterov` parancssal.

A szubsztitúciós listán adhatjuk meg a szubsztituenseket és kötéseiket. Az ide vonatkozó kötésmódosítókat a 5. táblázat tartalmazza.

Példák, melyeket a

```
\fiveheterov [H]{1==0}{2D==0;6D==0;3==CH$_{3}$;4==CH$_{3}$}
\fiveheterov [b]{1==0}{-}
\fiveheterov [H]{2==0;5==0}{1D==0;3B==CH$_{2}$I;4B==CH$_{3}$}
\fiveheterov [H]{2==S;5==S}{1Sa==SiMe$_{3}$;1Sb==Li}
```

parancsok állítanak elő:



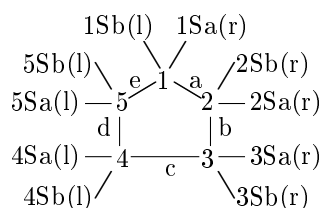
6. táblázat. A `\fiveheterov` és `\fiveheterovi` kötéslista-argumentumai

Karakterek	Megjelenített szerkezet
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	4,3-kettős kötés
d	4,5-kettős kötés
e	5,1-kettős kötés
A	aromás gyűrű
{n+}	pozitív töltés az <i>n.</i> nitrogén atomnál (<i>n</i> = 1...6)
{0+}	+ (vagy -) jel közepén

Öttagú heterociklusos vegyületek függőleges, inverz rajzolásához a `\fiveheterovi` makrót használhatjuk (`hetarom.sty`). Ezen parancs alakja:

`\fiveheterovi[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}`

Az alábbi ábrán látható a szubsztitúciós pozíciók számozása:



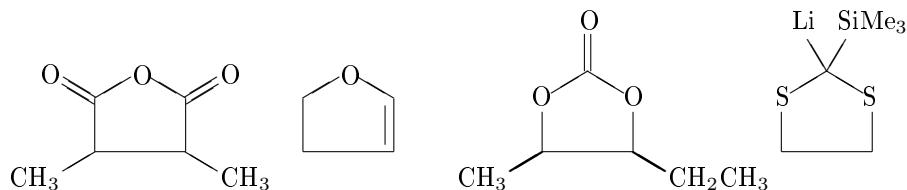
Az opcionális kötéslista argumentum a kettős kötések határozza meg a 6. táblában leírtak segítségével. A karakterek (a-e) bármely kombinációját a kötéslistában alkalmazva képesek vagyunk mind telített, mind telítetlen származékok rajzolására.

A szubsztitúciós lista minden egyes szubsztituenst egy helyzetszámmal és egy kötés módosítóval nevez meg (5. tábla, ahol az *n* egy egész számot jelöl 1 és 5 között).

Példák, melyeket a

```
\fiveheterovi[H]{1==0}{2D==0;6D==0;3==CH$_{3}$;4==CH$_{3}$}
\fiveheterovi[b]{1==0}{}
\fiveheterovi[H]{2==0;5==0}{1D==0;3B==CH$_{2}$I;4B==CH$_{3}$}
\fiveheterovi[H]{2==S;5==S}{1Sa==SiMe$_{3}$;1Sb==Li}
```

parancsok állítanak elő:

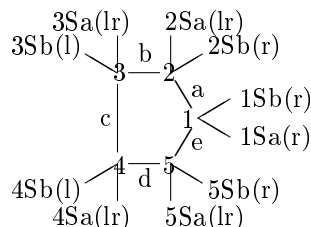


5.2. Vízszintes öttagú heterociklusok rajzolása

Az öttagú heterociklusos származékok vízszintes rajzolásához a `\fiveheteroh` makró áll rendelkezésünkre. (hetaromh.sty). A parancs a következő:

```
\fiveheteroh[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A helyettesítési pozíciókat jelölő helyetszámokat az alábbi ábra szemlélteti:



Azt, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó, a zárójelben szereplő betű jelzi.

Az opcionális kötéslista argumentum egy zárójelek között lévő karakterlánc, melyben minden egyes karakter egy kettős kötés előfordulását jelzi a betűk által meghatározott éleknél. (6. tábla).

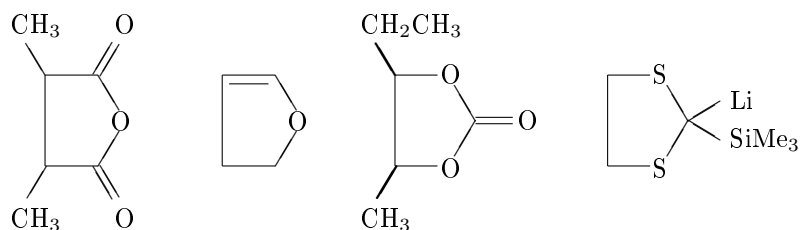
Az atomlistában tudjuk megadni azokat az atomokat, amelyeket a csúcsokba szeretnénk helyezni.

A szubsztitúciós listán a szubsztituenseket sorolhatjuk fel, melyhez a 5. táblázatban szereplő kötémódosítók nyújtanak segítséget.

Néhány példa a parancs használatára:

```
\fiveheteroh{1==0}{2D==0;5D==0;3==CH$_{3}$;4==CH$_{3}$}
\fiveheteroh[b]{1==0}{
\fiveheteroh{2==0;5==0}{1D==0;3B==CH$_{2}$CH$_{3}$;4B==CH$_{3}$}
\fiveheteroh{2==S;5==S}{1Sa==SiMe$_{3}$;1Sb==Li}
```

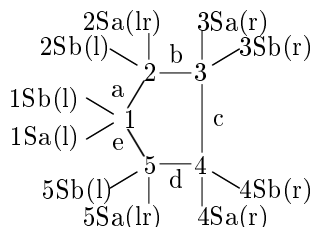
melyek a következő szerkezeteket eredményezik:



Ennek a makrónak is létezik inverz változata, a `\fiveheterohi`, mely öttagú heterociklusos származékok vízszintes, inverz rajzolását teszi lehetővé (`hetaromh.sty`). Alakja:

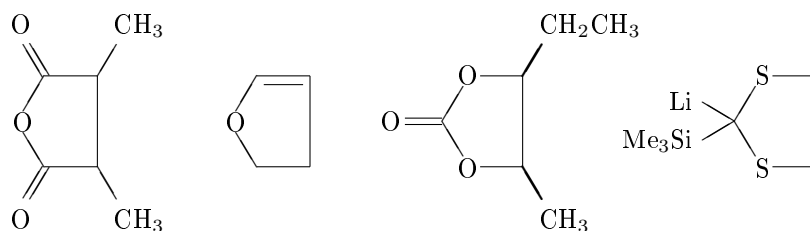
`\fiveheterohi[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}`

A következő diagram ábrázolja a szubsztitúciós pozíciókat jelölő helyetszámokat, valamint a kötés specifikációkat a kettős kötések megfelelő elhelyezéséhez.



Az alábbi példákban jól látható, hogyan valósíthatók meg a következő alakzatok.

```
\fiveheterohi{1==0}{2D==0;5D==0;3==CH$_{3}$;4==CH$_{3}$}
\fiveheterohi[b]{1==0}{ }
\fiveheterohi{2==0;5==0}{1D==0;3B==CH$_{2}$CH$_{3}$;4B==CH$_{3}$}
\fiveheterohi{2==S;5==S}{1Sa==Me$_{3}$Si;1Sb==Li}
```



5.3. Négytagú heterociklusok rajzolása

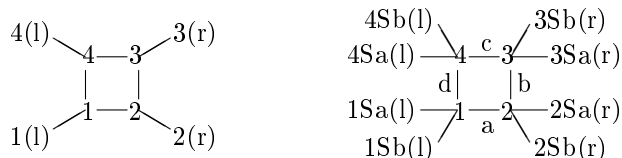
A `\fourhetero` makrót a négytagú heterociklusok megjelenítésére hozták létre a következő formában (`hetarom.sty`):

`\fourhetero[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}`

7. táblázat. A `\fourhetero` parancs kötéslista-argumentumai

Karakter	Megjelenített szerkezet
none	alapvegyület (teljesen telített)
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	3,4-kettős kötés
d	4,1-kettős kötés
{n+}	pozitív töltés az n . nitrogén atomnál ($n = 1 \dots 4$)

A helyeztszámok jelölése a szokott módon történik, amint az a következő ábrán is látható:



A zárójelben szereplő betű jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó, mind a szimpla, mind a dupla oldalú pozícióknál.

A kötéslista egy opcionális argumentum, melyben a kötésleírókat adhatjuk meg. Ezek a specifikációk a 7. táblázatban találhatóak.

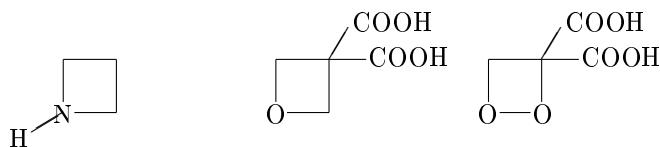
Az atomlista argumentum megadása a szokásos az n . pozícióhoz kapcsolt heteroatomokat illetően. Például, az `1==N` azt jelenti, hogy az 1. pozícióba egy nitrogén atom kerül. ($n = 1 \dots 4$)

Minden egyes szubsztituens egy helyeztszámmal és egy kötésmódosítóval adható meg a szubsztitúciós listán. Ebben segítségünkre lehet a 5. táblázat, ahol n egy számot jelöl, amelyre $n = 1 \dots 4$ igaz.

Példák,

```
\fourhetero{1==N}{1==H}
\fourhetero{1==O}{3Sa==COOH;3Sb==COOH}
\fourhetero{1==O;2==O}{3Sa==COOH;3Sb==COOH}
```

melyek az alábbi szerkezeteket állítják elő:



8. táblázat. A `\threehetero` parancs kötéslista-argumentumai

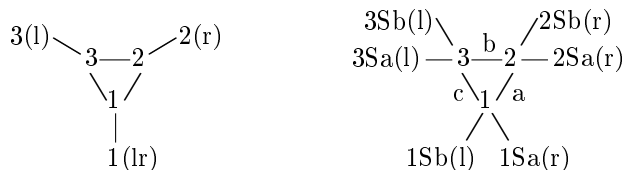
Karakter	Megjelenített szerkezet
none	telített vegyület
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	3,1-kettős kötés
A	aromás gyűrű
{n+}	pozitív töltés az n . heteroatomnál ($n = 1 \dots 3$) $n = 4$ – külső pozitív töltés az 1. pozíciónál $n = 5$ – külső pozitív töltés az 2. pozíciónál $n = 6$ – külső pozitív töltés az 3. pozíciónál
{0+}	pozitív töltés a ciklopropán gyűrű közepén

5.4. Háromtagú heterociklusok rajzolása

A `\threehetero` makrót a `hetarom.sty` fájlban háromtagú heterociklusok szerkesztésére definiálták a következőképpen :

```
\threehetero[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

Az alábbi ábrák a megszokott módon jelölik a helyzetszámokat:



A szimpla, illetve a dupla oldalú pozícióknál a zárójelben szereplő betű azt jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó.

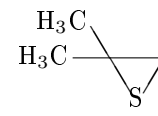
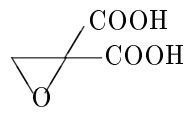
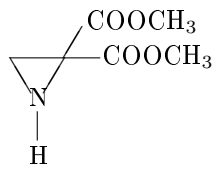
Az opcionális kötéslista argumentum a kettős kötések meghatározására szolgál a 8. táblázat alapján.

Az atomlista argumentum megadása a szokásos az n . pozícióhoz kapcsolt heteroatomokat illetően ($n = 1 \dots 3$). Például, az `1==N` azt jelenti, hogy az 1. pozícióba egy nitrogén atom kerül.

Minden szubsztituens egy helyzetszámmal és egy kötésmódosítóval írható le a szubsztitúciós listán. Az ide vonatkozó specifikációk a 5. táblázatban találhatóak, amelyben n számra $n = 1 \dots 3$ igaz.

A példák szemléltetik, hogyan rajzolhatók meg az alábbi szerkezetek.

```
\threehetero{1==N}{1==H;2Sa==COOCH$_{3}$;2Sb==COOCH$_{3}$}
\threehetero{1==O}{2Sa==COOH;2Sb==COOH}
\threehetero{1==S}{3Sa==H$_{3}$C;3Sb==H$_{3}$C}
```



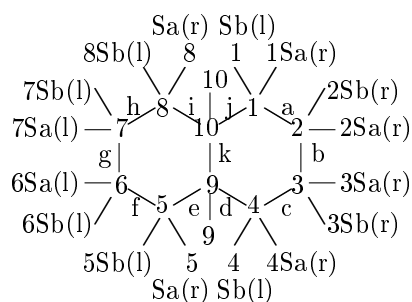
6. Két hattagú heterociklusból álló gyűrűk

6.1. Függőleges alakzatok rajzolása

Két hattagú heterociklusból álló gyűrűt a `\decaheterov` paranccsal tudunk függőleges alakban megjeleníteni. (`hetarom.sty`)

```
\decaheterov[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A helyettesítési pozíciókat jelölő helyezetszámok, valamint a kettős kötések jelölésére szolgáló karakterek az alábbi grafikonon láthatók:



A szimpla, illetve dupla oldalú pozícióknál a zárójelben szereplő betű jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó.

Az opcionális kötéslista argumentum egy kötésminta leírására szolgál, melyhez a 9. táblázat nyújt segítséget. Itt kell megjegyezni, hogy az alapértelmezett szerkezet telítetlen.

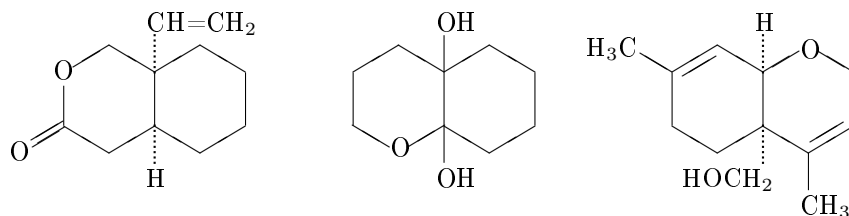
Az atomlista az $n = 1 \dots 8$ pozíciókat illetően az eddigiekhez hasonló formát mutat, viszont a 4a pozíción egy heteroatom úgy adható meg, hogy $4a==N$ vagy $9==N$, a 8a pozíción pedig úgy, hogy $8a==N$ vagy $\{10\}==N$.

A szubsztitúciós listán sorolhatjuk fel a szubsztituenseket. Ehhez a 5. táblázatban lévő módosítókat használhatjuk fel.

A

```
\decaheterov[H]{7==0}{6D==0;9A==H;{\10}A}==CH=CH$_{2}$}
\decaheterov[H]{5==0}{9==OH;{\10}}==OH}
\decaheterov[ch]{1==0}{9A==\lmoiety{HOCH$_{2}$}};{\10}A}==H;%
4==CH$_{3}$;7==H$_{3}$C}
```

parancsok a következő alakzatokat eredményezik:



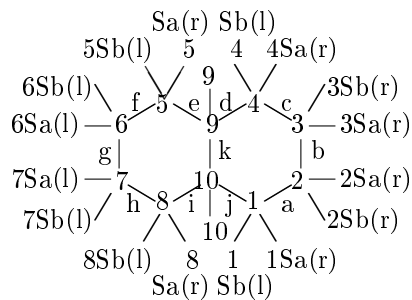
9. táblázat. A `\decaheterov` parancs kötéslista-argumentumai

Karakter	Megjelenített szerkezet
semmi vagy r	decahetero (jobb oldali)
l	decahetero (bal oldali)
H or []	teljesen telített forma
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	4,3-kettős kötés
d	4,4a-kettős kötés
e	4a,5-kettős kötés
f	5,6-kettős kötés
g	6,7-kettős kötés
h	7,8-kettős kötés
i	8,8a-kettős kötés
j	1,8a-kettős kötés
k	4a,8a-kettős kötés
A	aromás gyűrű (jobb oldali)
B	aromás gyűrű (bal oldali)
{n+}	pozitív töltés az n . nitrogén atomnál ($n = 1 \dots 10$)

A `hetarom.sty` fájlban definiált `\decaheterovi` parancs a `\decaheterov` inverz változata.

`\decaheterovi [kötéslista] {atomlista} {szubsztitúciós lista}`

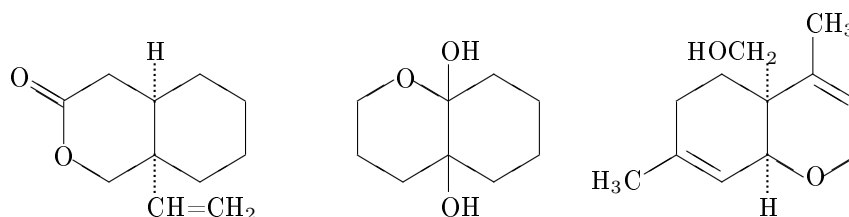
A szubsztitúciós pozíciókat jelölő helyzetszámokat (1-10), és a kettős kötések jelölésére szolgáló kötésleírókat (a-k) a következő ábra reprezentálja:



A zárójelben lévő karakter azt jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó a szimpla, illetve dupla oldalú pozíciónál. Az argumentumait ugyanolyan módon adhatjuk meg, mint azt a `\decaheterov` parancsnál láthattuk.

Példák az inverz makró használatára:

```
\decaheterov [H]{7==0}{6D==0;9A==H;{\10}A}==CH=CH$_{2}$}
\decaheterov [H]{5==0}{9==OH;{\10}}==OH}
\decaheterov [ch]{1==0}{9A==\lmoiety{HOCH$_{2}$}};{\10}A}==H;%
4==CH$_{3}$;7==H$_{3}$}C}
```

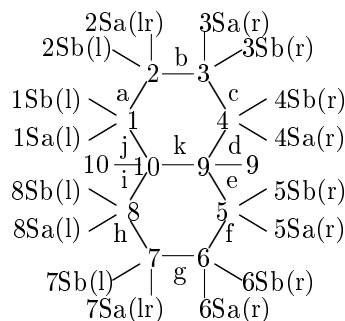


6.2. Vízszintes alakzatok rajzolása

A `\decaheteroh` parancs (`carom.sty`) a `\decaheterov` vízszintes megfelelője. A kötés- és a szubsztitúciós lista alakja és felsorolásuk a korábbi makrókhoz hasonlóak, és a listákhoz kapcsolódó táblázatok is ugyanazok. (5. és 9. táblázat)

```
\decaheteroh [kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A szubsztitúciós pozíciókat jelölő helyzettszámokat és a kettős kötések megadásához szükséges kötésleírókat a következő ábra mutatja be:

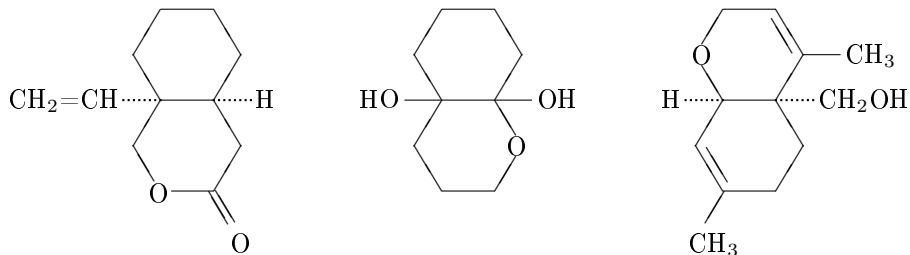


A zárójelben lévő karakter (r, l, vagy lr) azt jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó az egy-, és kétoldalú pozícióknál. A kötéslista opcionális argumentum, mely egy, a 9. táblázatból választott betűkből alkotott karakterláncot tartalmaz.

Példák a makró használatára:

```
\decaheteroh [H]{7==0}{6D==0;9A==H;{\10}A}==CH$_{2}$}CH}
\decaheteroh [H]{5==0}{9==OH;{\10}}==HO}
\decaheteroh [ch]{1==0}{9A==CH$_{2}$}OH;{\10}A}==H;%
4==CH$_{3}$;7==CH$_{3}$}
```

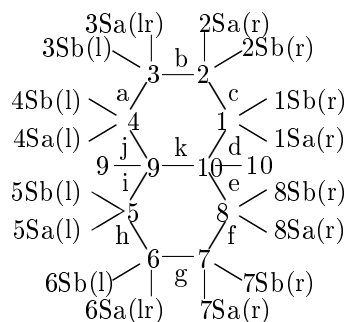

Az általuk megjelenített vegyületek:



A `\decaheterohi` parancs (`carom.sty`) a `\decaheteroh` inverz párja. A kötési- és a szubsztitúciós lista alakja és felsorolásuk a korábbi makrókhoz hasonlóak, és ugyanazok a táblázatok érvényesek. (5. és 9. táblázat)

`\decaheterohi [kötéslista] {atomlista} {szubsztitúciós lista}`

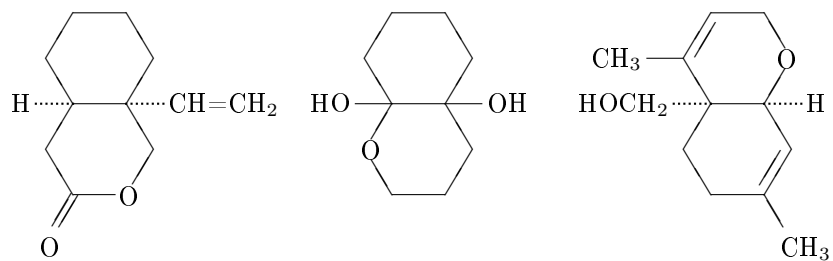
A helyettesítési pozíciókat jelölő helyzetszámokat és a kettős kötések megadásához szükséges kötésiírókat az alábbi diagram reprezentálja:



Például, a

```
\decaheterohi [H] {7==0}{6D==0;9A==H;{{10}A}==CH=CH$_{2}$}
\decaheterohi [H] {5==0}{9==HO;{{10}}==OH}
\decaheterohi [ch] {1==0}{9A==HOCH$_{2}$};{{10}A}==H;%
4==CH$_{3}$;7==CH$_{3}$}
```

utasítások



szervezeteket valósítják meg.

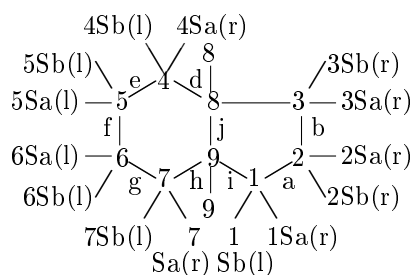
7. Hat- és öttagú heterociklusokból összekapcsolt gyűrűk

7.1. Független alakzatok rajzolása

A `\nonaheterov` parancs heterociklusos vegyületek egy újabb változatának megjelenítését teszi lehetővé. Definícióját a `hetarom.sty` fájl tartalmazza. Alakja:

```
\nonaheterov[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A helyezetszámok (1-9) és a kötéseleírók (a-j) ezen az ábrán láthatók:



A zárójelben lévő karakter azt jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó szimpla, és dupla oldalú pozíció esetében.

A kötéslista opcionális argumentum, melyben a kettős kötéseket tudjuk felsorolni a 10. táblázat alapján.

Az atomlista megadása a szokásos az n . pozícióhoz kapcsolt heteroatomokat illetően ($n = 1 \dots 7$). Például, az $1==N$ azt jelenti, hogy az 1. pozícióba egy nitrogén atom kerül. Eltérés a 3a és 7a pozícióknál figyelhető meg. Az előbbi pozícióba heteroatomot például így helyezhetünk: $3a==N$, vagy $8==N$; az utóbbiba pedig a következőképpen: $7a==N$, vagy $9==N$.

A szubsztitúciós lista alakja a szokásos, kivéve hogy a 3a és 7a helyezetszámok 8-ra és 9-re cserélődtek ki.

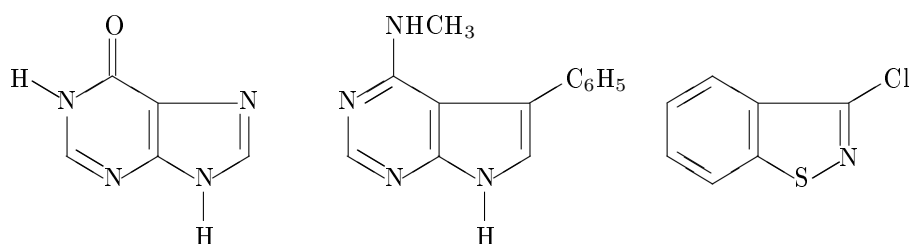
Az alábbi példák

```
\nonaheterov[bjg]{1==N;3==N;5==N;7==N}{1==H;5==H;4D==0}
\nonaheterov[bjge]{1==N;5==N;7==N}{1==H;3==C$_{6}$H$_{5}$;4==NHCH$_{3}$}
\nonaheterov[bjge]{1==S;2==N}{3==Cl}
```

a következő alakzatokat hozzák létre:

10. táblázat. A \nonaheterov parancs kötéslista-argumentumai

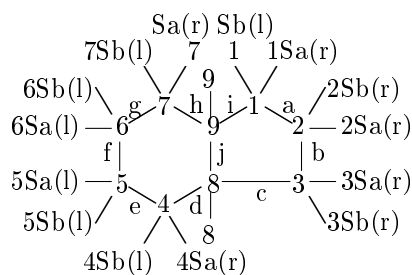
Karakter	Megjelenített szerkezet
semmi vagy r	aromás hattagú gyűrű
H vagy []	teljesen telített forma
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	3,3a-kettős kötés
d	4,3a-kettős kötés
e	4,5-kettős kötés
f	5,6-kettős kötés
g	6,7-kettős kötés
h	7,7a-kettős kötés
i	1,7a-kettős kötés
j	3a,4a-kettős kötés
A	aromás gyűrű (hattagú gyűrű)
B	aromás gyűrű (öttagú gyűrű)
{n+}	pozitív töltés az n . nitrogén atomnál ($n = 1 \dots 9$)



A parancs inverz megfelelője a \nonaheterovi makró, mely alakja a következő:

\nonaheterovi [kötéslista] {atomlista} {szubsztitúciós lista}

A helyzetszámok a már ismert módon vannak definiálva:

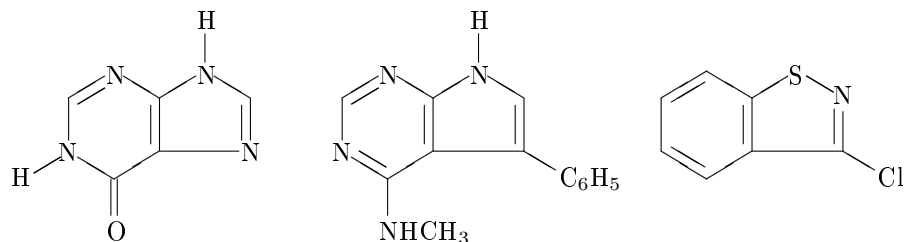


Azt, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó, a zárójelben szereplő betű jelzi

egy-, és kétoldalú pozíció esetében egyaránt. A kötéslista opcionális, használatakor a 10. táblázat nyújt segítséget.

Példák az inverz makró használatára:

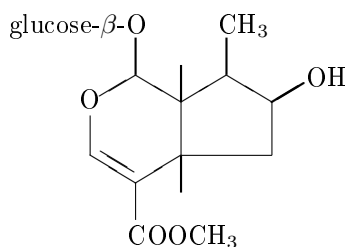
```
\nonaheterovi[bjg]{1==N;3==N;5==N;7==N}{1==H;5==H;4D==0}
\nonaheterovi[bjge]{1==N;5==N;7==N}{1==H;3==C$_{6}$H$_{5}$;4==NHCH$_{3}$}
\nonaheterovi[bjge]{1==S;2==N}{3==Cl}
```



A `\nonaheterovi` (vagy a `\nonaheterov`) parancs szubsztitúciós listájában egy szubsztituens megadható egy hídfő pozíción is.

```
\nonaheterovi[e]{6==0}{1B==CH$_{3}$;2B==OH;4==COOCH$_{3}$;%
7B==\lmoiety{glucose-$\beta$-0};8B==;9B==}
```

Így áll elő a loganin szerkezeti képlete:

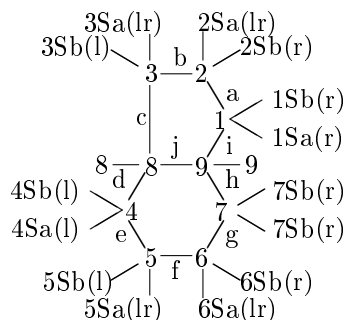


7.2. Vízszintes alakzatok rajzolása

A `\nonaheteroh` parancs heterociklusos vegyületek újabb változatának megjelenítését teszi lehetővé. A makró a `hetaromh.sty` fájl tartalmazza.

```
\nonaheteroh[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

Az eddigiekhez hasonló módon történik a helyzetszámok jelölése, kivéve azok irányát, amint az az ábrán látható:



A zárójelben lévő karakter (r, l, vagy lr) azt jelzi, hogy jobb vagy bal oldali pozícióról van szó egy-, illetve kétoldalú pozíciónál. A 10. táblázatban felsorolt karakterek kettős a kötések kötéslisában való leírására használhatók. A kötéslis itt is opcionális argumentum.

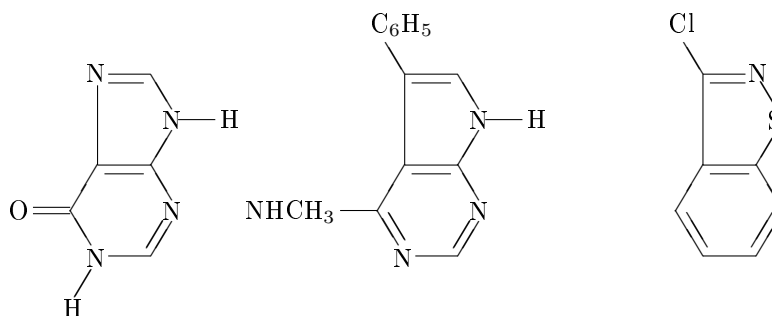
Az atomlistát a szokásos alak jellemzi az n . pozícióhoz kapcsolt heteroatomokat illetően ($n = 1 \dots 7$) Például, az $1==N$ azt jelenti, hogy egy nitrogén atom kerül az 1. pozícióba. Eltérés a 3a és 7a pozíciónál van. Az előbbi pozícióba heteroatomot például így helyezhetünk: $3a==N$, vagy $8==N$; az utóbbiba pedig a következőképpen: $7a==N$, vagy $9==N$.

A szubsztitúciós lista alakja annyiban lesz más, hogy a 3a és 7a helyzetsszámok 8-ra és 9-re cserélődtek ki.

Példák:

```
\nonaheteroh[bjg]{1==N;3==N;5==N;7==N}{1==H;5==H;4D==0}
\nonaheteroh[bjge]{1==N;5==N;7==N}{1==H;3==C$_{6}$H$_{5}$;4==NHCH$_{3}$}
\nonaheteroh[bjge]{1==S;2==N}{3==Cl}
```

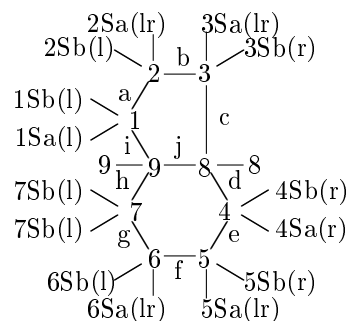
Az utasítások eredményei:



A parancs inverz megfelelője, a `\nonaheterohi` makró szintén a `hetaromh.sty` fájlból érhető el. Alakja a következő:

```
\nonaheterohi[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

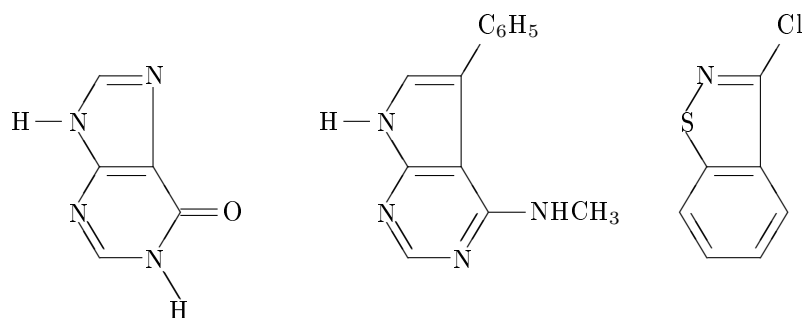
A pozícióinak számozása megegyezik a parancs eredeti párjánál bemutatottal:



A zárójelben szereplő karakter jelzi, hogy melyik oldali pozícióról van szó szimpla, illetve dupla oldalú pozíció esetén. Az opcionális kötéslista a 10. táblázatban felsorolt karaktereket használja a kettős kötések meghatározásához.

Példák az inverz makró használatára:

```
\nonaheterohi[bjg]{1==N;3==N;5==N;7==N}{1==H;5==H;4D==0}
\nonaheterohi[bjge]{1==N;5==N;7==N}{1==H;3==C$_{6}$H$_{5}$;4==NHCH$_{3}$}
\nonaheterohi[bjge]{1==S;2==N}{3==Cl}
```



8. További ciklikus vegyületek

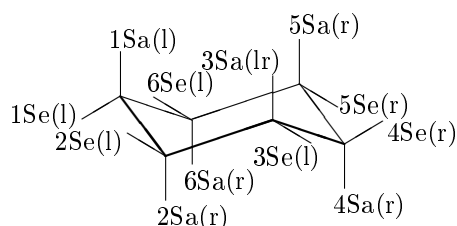
8.1. Szék formájú ciklohexán rajzolása

8.1.1. Szabályos képlet

A `\chair` makró szék formájú ciklohexán származékok rajzolása szolgál (`ccycle.sty`). A parancsnak az alakja a következő:

```
\chair[kötéslista]{szubsztitúciós lista}
```

A szubsztitúciós pozíciók jelölésére használt helyeztszámokat az alábbi ábra szemlélteti:



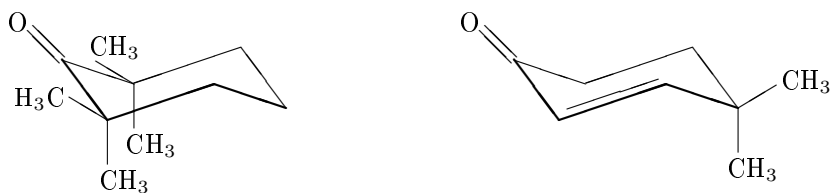
A zárójelben lévő karakter jelzi, hogy egy pozíció melyik oldalon helyezkedik el. Az ilyen típusú makrókban ez mindig rögzített.

Az opcionális kötéslista argumentum egy zárójelek között lévő karakterlánc, melyben minden egyes karakter egy kettős kötés előfordulását jelzi a betűk által meghatározott éleknél. A kötésleírás néhány esetben tetszőleges, ha viszont a 11. táblázatban előírt betűk szerepelnek benne, akkor a kémiai konvenciókhoz hűen alkalmazkodik.

A szubsztitúciós listát a megszokott módon adhatjuk meg, kivéve a módosítókat, melyeket tengelyirányú szubsztituenseknél 'Sa'-val, egyenlítő körüli szubsztituenseknél 'Se'-vel jelöljük, és 'D'-vel írhatjuk elő egy szubsztituens kettős kötéssel való kapcsolódását.

Példák szék formájú vegyületekre:

```
\chair{1D==0;2Se==H$_{3}$C;2Sa==CH$_{3}$;6Se==CH$_{3}$;6Sa==CH$_{3}$}  
\chair[b]{1D==0;4Se==CH$_{3}$;4Sa==CH$_{3}$}
```



11. táblázat. A `\chair` és a `\chairi` kötéslista-argumentumai

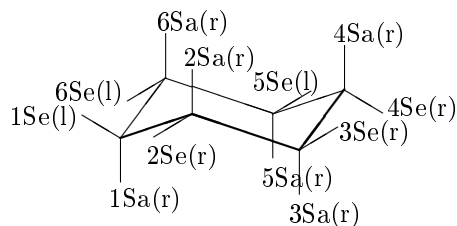
Karakter	Megjelenített szerkezet
semmi	ciklohexán
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	4,3-kettős kötés
d	4,5-kettős kötés
e	5,6-kettős kötés
f	6,1-kettős kötés

8.1.2. Inverz képlet

A `\chairi` inverz, székes formájú ciklohexán származékok megjelenítésére alkalmas makró (`ccycle.sty`). A parancs:

`\chairi[kötéslista]{szubsztitúciós lista}`

A helyettesítési pozíciókat jelölő helyzetszámokat az alábbi grafikonon ábrázolja:



A zárójelben lévő karakter jelzi, hogy egy pozíció jobb, vagy bal oldalon helyezkedik el.

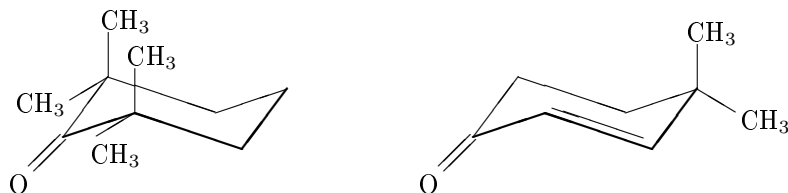
A kötéslista opcionális argumentum, melyre ugyanazok érvényesek, mint a `\chair` parancsnál leírtak (11. táblázat).

A szubsztitúciós lista megadása is a makró párjánál említett módon történik, tehát itt is 'Sa', 'Se' és 'D' módosítók használhatók.

Például, a

```
\chairi{1D==0;2Se==CH$_{3}$;2Sa==CH$_{3}$;6Se==CH$_{3}$;6Sa==CH$_{3}$}
\chairi[b]{1D==0;4Se==CH$_{3}$;4Sa==CH$_{3}$}
```

utasítások az alábbi szerkezeteket eredményezik:

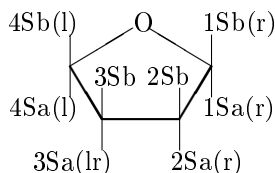


8.2. Furanózok és piranózok rajzolása

Furanózokat a `\furanose` paranccsal tudunk kirajzolni (`hcycle.sty`). Alakja a következő:

```
\furanose[kötéslista]{szubsztitúciós lista}
```

A szubsztitúciós pozíciókat jelölő helyeztszámokat és a kötésleírókat az alábbi ábra reprezentálja:



A zárójelben lévő karakter jelzi, hogy egy pozíció melyik oldalon helyezkedik el. Az ilyen típusú makrókban ez mindig rögzített.

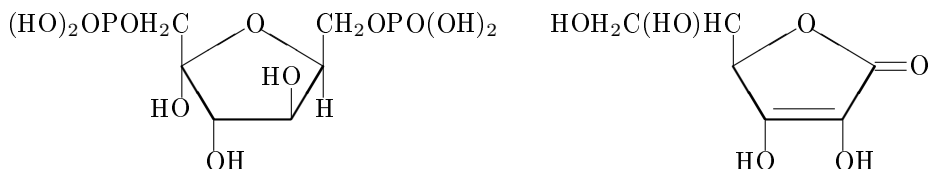
Az opcionális kötéslista argumentum egy zárójel között lévő karakterlánc, melyben minden egyes karakter egy kettős kötés előfordulását jelzi a betűkkel megegyező éleknél (12. táblázat).

A szubsztitúciós listán a szubsztituenseket a már ismert módon adhatjuk meg, felhasználva a 5. táblázat tartalmát.

Példaként tekintsük következő utasításokat:

```
\furanose{1Sa==H;1Sb==CH$_{2}$OPO(OH)$_{2}$;2Sb==\lmoiety{HO};3Sa==OH;%
6Sb==(OH)$_{2}$OPOH$_{2}$C;4Sa==HO}
\furanose[b]{1D==O;2Sa==OH;3Sa==\lmoiety{HO};aSb==HOH$_{2}$C(HO)HC}
```

melyek az alábbi ábrákat állítják elő:



12. táblázat. A `\furanose` kötéslista-argumentumai

Karakter	Megjelenített szerkezet
semmi	alapszerkezet
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	4,3-kettős kötés
d	4,5-kettős kötés
e	5,1-kettős kötés

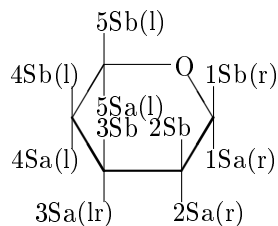
13. táblázat. A `\pyranose` kötéslista-argumentumai

Karakter	Megjelenített szerkezet
semmi	alapszerkezet
a	1,2-kettős kötés
b	2,3-kettős kötés
c	4,3-kettős kötés
d	4,5-kettős kötés
e	5,6-kettős kötés
f	6,1-kettős kötés

Piranózokat a `\pyranose` paranccsal tudunk létrehozni (`hcycle.sty`). Alakja:

`\pyranose[kötéslista]{szubsztitúciós lista}`

Az alábbi ábra szemlélteti a helyettesítési pozíciók jelölésére szolgáló helyzetszámokat:



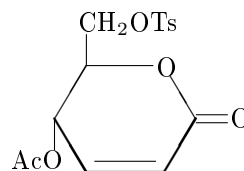
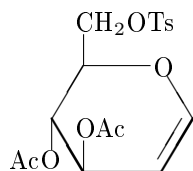
Azt, hogy egy pozíció jobb, vagy bal oldalon helyezkedik el, a zárójelben lévő karakter jelzi. Az opcionális kötéslista argumentum egy zárójel között álló karakterlánc, melyben minden karakter egy kettős kötés előfordulását jelzi a betűk által jelölt éleknél (13. táblázat).

A szubsztitúciós listán a szubsztituenseket adhatjuk meg, amihez felhasználhatjuk a 5. táblázatban leírtakat.

Példák piranóz rajzolására:

```
\pyranose[a]{3Sb==OAc;4Sa==AcO;5Sb==CH$_{2}$OTs}
```

```
\pyranose[b]{1D==O;4Sa==AcO;5Sb==CH$_{2}$OTs}
```



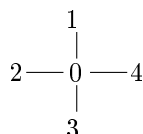
9. Alifás vegyületek

9.1. Tetrahedrális egységek rajzolása

A `\tetrahedral` makrót tetrahedrális egységek megjelenítésére használhatjuk (aliphat.sty). A parancs a következőképpen néz ki:

```
\tetrahedral[kiegészítő lista]{szubsztitúciós lista}
```

Az alábbi ábrán a szubsztitúciós pozíciókat jelölő számozást láthatjuk:



Ugyanezt a makrót használhatjuk tetített és telítetlen származékok kiírásakor is.

A kiegészítő lista opcionális argumentum, melyben egy töltést adhatunk a központi atomnak, pl.: `{0+}` jelölést használva egy pozitív töltés (vagy egy másik karakter) kerül középre.

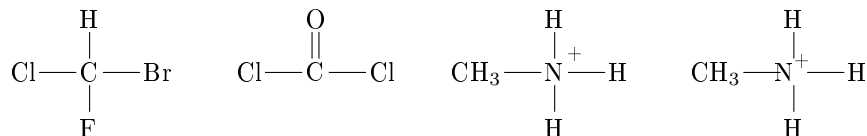
A szubsztitúciós listán minden szubsztituens egy helyzetszámmal és egy kötőmódosítóval adható meg, amiket a 14. táblázatban találunk, ahol n egy 1 és 4 közötti egész szám.

A `0=C` kifejezéssel határozható meg a szubsztitúciós listán, hogy a központi atom szénatom legyen. De a paranccsal az ammónium ion szerkezeti képletét is megkaphatjuk.

Például a

```
\tetrahedral{0==C;1==H;2==Cl;3==F;4==Br}
\tetrahedral{0==C;1D==O;2==Cl;4==Cl}
\tetrahedral[{}]{0+}{0==N;1==H;2==CH$_{3}$;3==H;4==H}
\tetrahedral{0==N^{\raise.5ex\hbox{\scriptsize +}};
1==H;2==CH$_{3}$;3==H;4==H}
```

parancsok a következő szerkezeti képleteket valósítják meg:



Itt meg kell jegyezni, hogy a harmadik képlet kiegészítő listája tartalmaz egy pár alárójelet, ami fontos a helyes működéshez.

14. táblázat. A `\tetrahedral` szubsztitúciós lista argumentumai

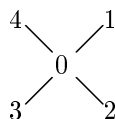
Karakter	Megjelenített szerkezetek
nT	háromas kötés az n . atomnál
nD	kettős kötés az n . atomnál
n vagy nS	egyszeres kötés az n . atomnál
nA	egyszeres alfa kötés az n . atomnál
nB	egyszeres béta kötés az n . atomnál

Ezzel szemben a negyedik képletnél ugyanannak az ammónia ionnak egy más-fajta megjelenítését láthatjuk, ahol a pozitív töltés a központi nitrogén atom indexeként úgy van megadva, hogy a függőleges igazítást végző `\raise` parancs után a betűméretet beállító `\scriptsize` parancsot írjuk.

A `\square` makró tetrahedrális egységek egy más típusú kiíratására használható (`aliphatic.sty`). A parancs alakja:

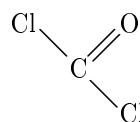
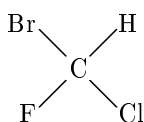
`\square[kiegészítő lista]{szubsztitúciós lista}`

A következő ábra mutatja be a helyettesítési pozíciók számozását:



Példák:

`\square{0==C;1==H;2==Cl;3==F;4==Br}`
`\square{0==C;1D==O;2==Cl;4==Cl}`



9.2. Trigonális egységek rajzolása

Az `\rtrigonal` és az `\ltrigonal` a jobbos, illetve a balos trigonális egységek megjelenítésére alkalmas makrók (`aliphatic.sty`). A két parancs alakja:

`\rtrigonal[kiegészítő lista]{szubsztitúciós lista}`
`\ltrigonal[kiegészítő lista]{szubsztitúciós lista}`

Ezekkel a parancsokkal nyomtatott trigonális egységekben a 2-0-3 pozíciók által bezárt szög 90°. A kiegészítő lista és a szubsztitúciós lista argumentumok megegyeznek a `\tetrahedral` argumentumaival.

A következő példák az alábbi képleteket állítják elő:

```
\rtrigonal{0==C;1D==O;2==Cl;3==F}
\ltrigonal{0==C;1D==O;2==Cl;3==F}
```



Az `\utrigo`nal és az `\Utrigo`nal makrókkal felfelé irányuló trigonális egységeket rajzolhatunk 90°-os, illetve 120°-os szöggel (`aliph`at.sty). Ezen parancsok alakja:

```
\utrigo
```

nal[*kiegészítő lista*]{*szubsztitúciós lista*}

```
\Utrigo
```

nal[*kiegészítő lista*]{*szubsztitúciós lista*}

A kiegészítő lista és a szubsztitúciós lista argumentumok megegyeznek a `\tetrahedral` argumentumaival.

Példák a felfelé irányuló alakzatokra:

```
\utrigo
```

nal{0==C;1D==O;2==Cl;3==F}

```
\Utrigo
```

nal{0==C;1D==O;2==Cl;3==F}

Ezzel szemben a `\dtrigo`nal és a `\Dtrigo`nal makrókkal lefelé irányuló trigonális egységeket rajzolhatunk 90°-os, illetve 120°-os szöggel (`aliph`at.sty). A két parancs alakja:

```
\dtrigo
```

nal[*kiegészítő lista*]{*szubsztitúciós lista*}

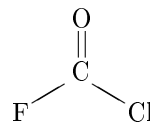
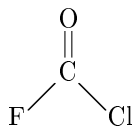
```
\Dtrigo
```

nal[*kiegészítő lista*]{*szubsztitúciós lista*}

A kiegészítő lista és a szubsztitúciós lista argumentumok megegyeznek a `\tetrahedral` argumentumaival.

Példák a lefelé irányuló alakzatokra:

```
\dtrigonal{O==C;1D==O;2==Cl;3==F}
\Dtrigonal{O==C;1D==O;2==Cl;3==F}
```

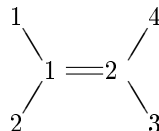


9.3. Etilén származékok rajzolása

Az `\ethylene` makróval etilén származékokat tudunk megjeleníteni 90°-os szöggel (`aliphatic.sty`). Alakja:

```
\ethylene[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}
```

A következő ábra szemlélteti a szubsztitúciós pozíciók számozását:

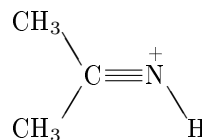
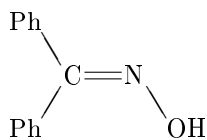
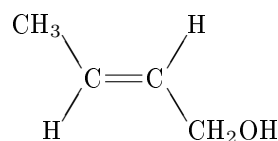
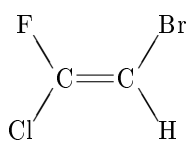


Az `atomlista` argumentum a központi atomok megnevezésére szolgál. A szubsztitúciós lista megegyezik a `\tetrahedral` argumentumával.

Példák,

```
\ethylene{1==C;2==C}{1==F;2==Cl;3==H;4==Br}
\ethylene{1==C;2==C}{1==CH$_{3}$;2==H;3==CH$_{2}$OH;4==H}
\ethylene{1==C;2==N}{1==Ph;2==Ph;3==OH}
\ethylene[t{2+}]{1==C;2==N}{1==CH$_{3}$;2==CH$_{3}$;3==H}
```

melyek a következő etilén származékokat állítják elő:



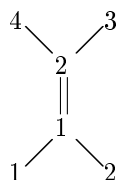
Az `\ethylenev` makróval, amely az `\ethylene` függőleges megfelelője, ugyancsak etilén származékokat tudunk kiírni 90°-os szöggel (`aliphatic.sty`). A parancs:

15. táblázat. A `\ethylene` kötéslista-argumentumai

Karakter	Megjelenített szerkezetek
<code>{n+}</code>	pozitív töltés (vagy egy másik karakter) az n. atomnál
d	belső kettős kötés (a központi 1-2 között)
t	belső hármas kötés (a központi 1-2 között)

`\ethylenev[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}`

A szubsztitúciós pozíciók számozását az alábbi ábra mutatja:



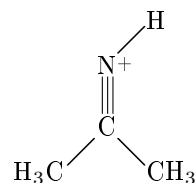
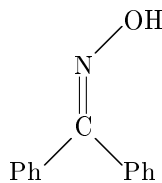
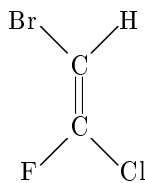
Például a

```
\ethylenev{1==C;2==C}{1==F;2==Cl;3==H;4==Br}
```

```
\ethylenev{1==C;2==N}{1==Ph;2==Ph;3==OH}
```

```
\ethylenev[t{2+}]{1==C;2==N}{1==H$_{3}$C;2==CH$_{3}$;3==H}
```

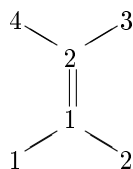
parancsok ilyen függőleges alakú etilén származékokat hoznak létre:



Az `\Ethylenev` 120°-os szöget bezáró etilén származékok létrehozására alkalmas (`aliphatic.sty`). Ez is az `\ethylene` parancs függőleges párja. Alakja:

`\Ethylenev[kötéslista]{atomlista}{szubsztitúciós lista}`

A következő ábrán a helyettesítési pozíciók számozását láthatjuk:

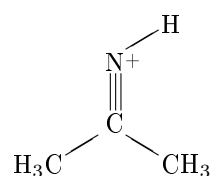
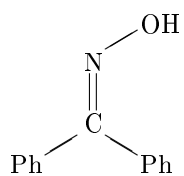
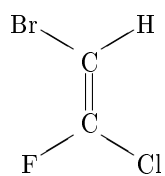


Példák a 120°-os szöget bezáró etilén származékokra:

```
\Ethylenev{1==C;2==C}{1==F;2==Cl;3==H;4==Br}
```

```
\Ethylenev{1==C;2==N}{1==Ph;2==Ph;3==OH}
```

```
\Ethylenev[t{2+}]{1==C;2==N}{1==H$_{3}$C;2==CH$_{3}$};3==H}
```

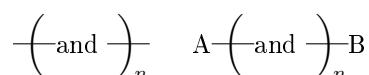


10. Polimerek

10.1. Szubsztituens listán megadható határolójelek

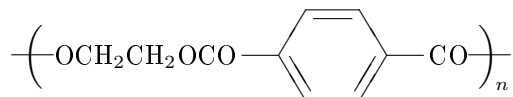
A `\leftpolymer` és a `\rightpolymer` parancsok kerek zárójeleket rajzolnak, ha egy \LaTeX parancs szubsztitúciós listájában szerepelnek. Ha valamelyiket az `\sbond` parancssal kombináljuk, akkor egy zárójellel áthúzott egyszeres kötést kapunk.

```
\leftpolymer{}\sbond and \sbond\rightpolymer(){n}
\leftpolymer{A}\sbond and \sbond\rightpolymer{B}{n}
```



Ha párban használjuk őket, egy polimer egységre utalnak. Ez jól megfigyelhető a következő kódban, ami polietilén-tereftalátot jelenít meg.

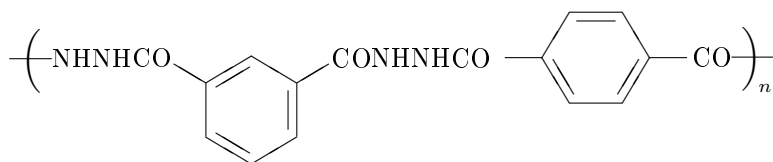
```
\hskip5cm
\bzdrh{1=={\leftpolymer{}\sbond OCH$_{2}$CH$_{2}$CO};%
4=={CO\sbond\rightpolymer(){n}}}
```



A polimer meghatározása egy szubsztituens `\bzdrh` parancssal történő leírásának tekinthető. Ebben a példában a bal oldalon megjelenő hosszú szubsztituens számára a parancs nem biztosít elég helyet, ezért szükséges a `\hskip5cm` utasítással történő igazítás.

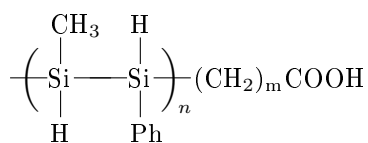
A következő kód a `\bzdrv` és `\bzdrh` parancsokat használja fel egy aromás polihidrazin megrajzolásához. Mivel a vegyületek elhelyezkedése különbözik egymástól, így a függőleges igazítást a `\raisebox` parancssal tehetjük meg, amely biztosítja a vegyület vízszintes kötésekkel egyvonalba állítását.

```
\bzdrv{6=={\leftpolymer{}\sbond NHNHCO};2==CONHNHCO}
\kern420\unitlength
\raisebox{24pt}{\bzdrh{4=={CO\sbond\rightpolymer(){n}};1==}}
```



A következő példa két `\tetrahedral` parancs alkalmazását mutatja be egy külső kép környezetben.

```
\begin{picture}(1000,600)(0,0)
\put(0,0){\tetrahedral{%
0==Si;1==CH$_3$;%
2=={\leftpolymer{}};% no terminal atoms
3==H;4==}}
\put(300,0){\tetrahedral{%
0==Si;1==H;%
4=={\rightpolymer{(CH$_2$)}$_n$COOH}{n}};%
2==;3==Ph}}
\end{picture}
```



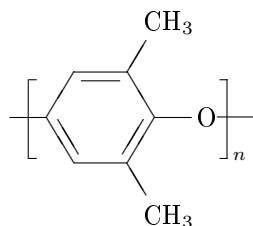
A zárójelek mérete megváltoztatható a `\leftPolymer` és a `\rightPolymer` alkalmazásával, melyekben a használni kívánt körülhatároló jel argumentumként fog szerepelni. Egy etilénimin-szukcinimid kopolimer a következőképpen jeleníthető meg.

```
\leftPolymer{({})\sbond CH$_2$CH$_2$CONHCH$_2$CH$_2$NH%
\sbond\rightPolymer{)}{n}
```



Ha kerek zárójelek helyett szögletes zárójeleket szeretnénk rajzolni, a `\leftsqrpolymer`, illetve a `\rightsqrpolymer` parancsokat használhatjuk fel.

```
\bzdrrh{%
1=={\leftsqrpolymer{}};%
3==CH$_3$;5==CH$_3$;%
4=={0\sbond\rightsqrpolymer{}}{n}}
```

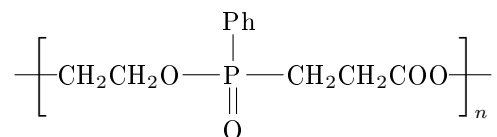


Az alábbi példa a `\tetrahedral` parancsot alkalmazza a fenil-diaxofoszfórán-akrilsav kopolimer megjelenítéséhez. A vékonyabb zárójeleket a `\leftSqrpolymer` és a `\rightSqrpolymer` alkalmazásával érjük el.

```

\tetrahedral{%
0==P;1==Ph;%
2=={\leftSqrpolymer{\sbond CH$_{2}$CH$_{2}$}$0};%
3D==0;%
4=={CH$_{2}$CH$_{2}$COO\sbond\rightSqrpolymer}{n}}

```



10.2. Külön megadható polimer határolójelek

Az `\mpolymer` parancsnak két argumentumot kell megadni; az első argumentum egy polimer egység, a második pedig az ismétlésre vonatkozó szám. A parancs megbecsüli a polimer nagyságát, és annak megfelelő méretű kerek zárójellel zárja körül az elemet.

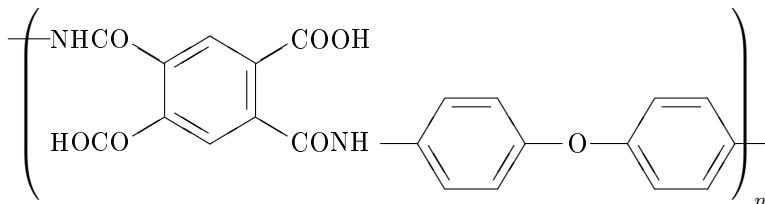
Például a

```

\mpolymer{%
\begin{picture}(2600,700)(-240,200)
\put(0,158){\bzdrv{2==COOH;3==CONH;5==HOCO;6=={\sbond NHC0}}}
\put(940,0){\bzdrh{1==;4==0}}
\put(1730,0){\bzdrh{1==;4==}}
\end{picture}}{n}

```

kód egy ilyen polimert hoz létre:

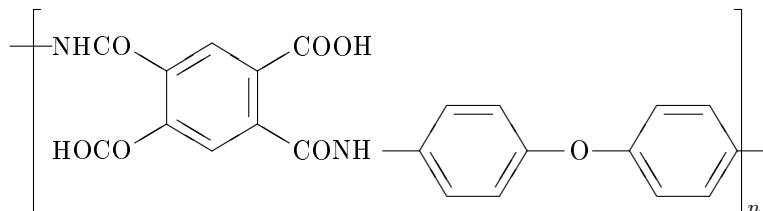


Az `\sqrpolymer` ugyanúgy működik, mint az `\mpolymer` parancs, kivéve hogy a polimer egységet vékony, szögletes zárójellel veszi körül, mint az az alábbi példában látható:

```

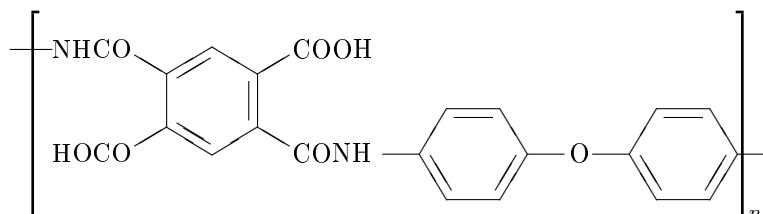
\sqrpolymer{%
\begin{picture}(2600,700)(-240,200)
\put(0,158){\bzdrv{2==COOH;3==CONH;5==HOCO;6=={\sbond NHC0}}}
\put(940,0){\bzdrh{1==;4==0}}
\put(1730,0){\bzdrh{1==;4==}}
\end{picture}}{n}

```



Ezzel szemben az `\Sqrpolymer` vastag, szögletes zárójellel zárja körül a polimer egységet.

```
\Sqrpolymer{%
\begin{picture}(2600,700)(-240,200)
\put(0,158){\bzdrv{2==COOH;3==CONH;5==HOCO;6=={\sbond NHC0}}}
\put(940,0){\bzdrh{1==;4==0}}
\put(1730,0){\bzdrh{1==;4==}}
\end{picture}}{n}
```

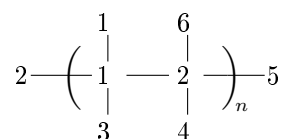


10.3. Polietilén egységek

Polietilén származékok rajzolására a `\polyethylene` makrót használhatjuk. A parancs alakja a következő:

```
\polyethylene[kiegészítő lista]{központi atom lista}{szubsztitúciós lista}
```

Az alábbi ábra szemlélteti a szubsztituensek számozását és a központi atomok pozícióját.



Ugyanezzel a makróval telített és telítetlen származékokat is ki tudunk írni.

A kiegészítő lista opcionális argumentum, egy töltés központi atomon való elhelyezését szolgálja. Például `{n+}` egy pozitív töltést (vagy egy másik karaktert) tesz az n . központi atomhoz.

16. táblázat. A `\polyethylene` szubsztitúciós lista argumentumai

Karakter	Megjelenített szerkezetek
nT	hármás kötés az n . atomnál
nD	kettős kötés az n . atomnál
n vagy nS	egyszeres kötés az n . atomnál
nA	egyszeres alfa kötés az n . atomnál
nB	egyszeres beta kötés az n . atomnál

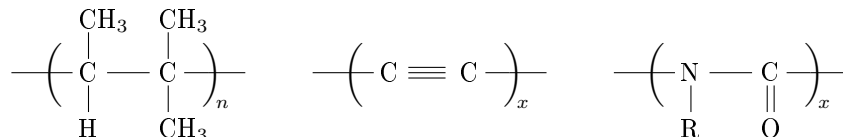
A központi atom listában az 1-es és 2-es központi atomokat határozhatjuk meg, pl.: $1==C$ és $2==Si$. A közöttük meglévő kettős kötést az $0D==$, a hármás kötést az $0T==$ kifejezéssel jelezhetjük.

A szubsztitúciós listában minden szubsztituens egy helyzetszámmal és egy kötésmódosítóval adható meg. Ehhez a 16. táblázat nyújt segítséget, ahol n egy szám 1 és 4 között.

Például, a

```
\polyethylene{1==C;2==C}%
{1==CH$_{3}$;2==;3==H;4==CH$_{3}$;5==;6==CH$_{3}$;0==n}
\polyethylene{1==C;2==C;0T==}{2==;5==}
\polyethylene{1==N;2==C}{2==;5==;3==R;4D==0}
```

utasítások



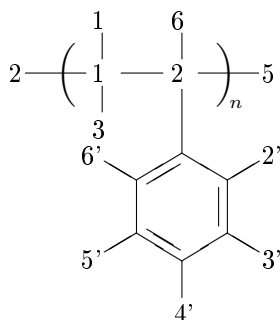
szerkezeteket eredményezik.

10.4. Polisztirén egységek

Polisztirén származékokat a `\polystyrene` parancs segítségével állíthatunk elő. Formája:

```
\polystyrene[kiegészítő lista]{központi atom lista}{szubsztitúciós lista}
{fenilcsoport szubsztitúciós lista}
```

A szubsztituensek számozását és a központi atomok pozícióját az alábbi ábrán tekinthetjük meg.



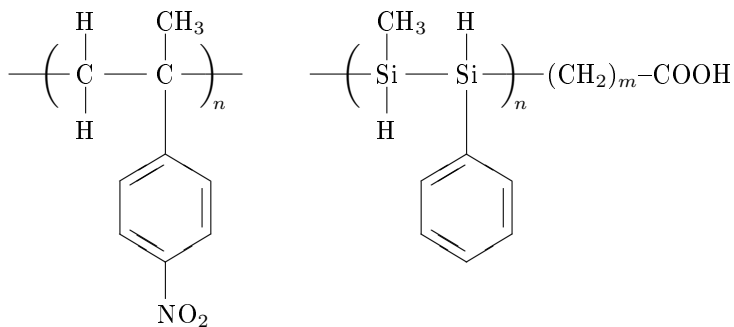
Ugyanezzel a makróval telített és telítetlen származékokat is tudunk rajzolni.

A kiegészítő lista, a központi atom lista és a szubsztitúciós lista ugyanazzal a jelentéssel bírnak, mint a `\polyethylene` parancs ugyanezen argumentumai (Lásd: 16. táblázat). A fenilcsoport szubsztitúciós lista a fenilcsoport szubsztituenseinek meghatározására alkalmas. Például, n vagy nS egy egyszeres kötés előfordulását jelzi a fenil n . atomjánál.

Tekintsük a következő utasításokat:

```
\polystyrene{}%
{1==H;2==;3==H;5==;6==CH$_{3}$;0==n}{4==NO$_{2}$}
\polystyrene{1==Si;2==Si}{6==H;2==;3==H;%
5=={(CH$_{2}$)$_{m}$--COOH};%
1==CH$_{3}$;0==n}{}
```

Az általuk előállított szerkezetek:



11. Összegzés

A $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ rendszerekben használható kémiai szerkezeti képletek megjelenítési lehetőségeinek egy alapját képező részét kívántam bemutatni dolgozatomban, melynek írását nehezítette a rendelkezésemre álló magyar nyelvű irodalom alacsony száma.

A $\text{X}_{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -el való első találkozásomkor meglepődve tapasztaltam, hogy a csomag logója az adott definícióval nem működik megfelelően, így annak kiírásához saját definíciót használtam, mint ahogy a logó kurzív változatához is. A dolgozatban szereplő utasításokat igyekeztem minél részletesebben bemutatni, nemcsak azok szintaktikájának leírásával, hanem a parancsok használatát szemléltető példákkal is. Bár ez a feladat kisebb nehézséget okozott, amikor a helyettesítési pozíciók jelölésére használt karaktereket írtam ki. Az eredeti definíciókban ugyanis nincs biztosítva elegendő hely a szubsztituensek megjelenítéséhez. A felhasználók számára az `\lmoiety` és az `\rmoiety` parancsok segíthetnek a balra, illetve jobbra történő igazításban.

A nehézségek ellenére örömmel töltött el, hogy elmélyedhettem egy olyan témában, mely talán segítséget nyújt vegyészek, kémiai tanulmányokat folytató diákok számára.

Az $\text{X}_{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ csomag célja, hogy minél egyszerűbben lehessen igényesen megrajzolt szerkezeti képleteket előállítani. A csomag nagyon sok speciális utasítást is tartalmaz, de az általam ismertetett általános parancsok segítségével az alapvető szerkezetek a lehető legegyszerűbb módon hozhatók létre.

A kémiai képletek ilyen irányból történő bemutatása, mely dolgozatom fő vezérvonala, mások számára és számomra is rendkívül érdekesnek tűnő téma.

Hivatkozások

- [1] NIFTY-Serve archives, FPRINT library No. 7, Item Nos. 201, 202, 204.
- [2] CTAN, tex-archive/macros/latex209/contrib/xymtex/.
- [3] Fujita S., „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] Fujita S., „ $\text{X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ for Drawing Chemical Structural Formulas”, *TUGboat*, **16** (1), 80 (1995).
- [5] Lamport L., *L^AT_EX. A document Preparation System*, 2nd ed. for $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}2_{\epsilon}$, Addison-Wesley, Reading (1994). See also Lamport L., *L^AT_EX. A document Preparation System*, Addison-Wesley, Reading (1986).
- [6] Goossens, M., Mittelbach, F., & Samarin, A., *The L^AT_EX Companion*, Addison-Wesley, Reading (1994).
- [7] NIFTY-Serve archives, FPRINT library No. 7, Item Nos. 385, 386.
- [8] <http://www.chem.kit.ac.jp/fujita/fujitas/fujita.html>
- [9] Fujita, S., *X^MT_EX – Typesetting Chemical Structural Formulas*, Addison-Wesley, Tokyo (1997). The book title is abbreviated as „ $\text{X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ book” in the present manual.
- [10] Shinsaku Fujita, „ $\text{X}^{\text{M}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$: A Macro Package Set for Typesetting Chemical Structural Formulas”, (1996)