

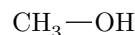
## ▶ せつめい

chemfig の仕様では、 $\text{CH}_3\text{-OH}$  のように書いたとき、「H 原子と O 原子を結合させる」という認識で、まず C と H の原子間距離が設定され、次に添字を打った上で結合が出力されます。

その結果、 $\text{CH-OH}$  のように添字がない場合と、 $\text{CH}_3\text{-OH}$  のように添字がある場合では、結合の長さが違ってしまいます。

それは chemfig の仕様上避けられないことのようなので、鉄 TeX では、やむなく !- および != という記号を定義してあります。これは、単結合及び二重結合の長さを 1.14 倍に伸ばして出力する記号と定義してあります。それにより、 $\text{CH}_3\text{-CH-OH}$  のように打ったときに、添字のある結合とない結合での長さがほぼ揃うようになります。

異なる長さが必要な場合には、一般には



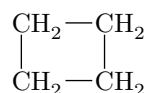
のように打つ必要があります。これは 1.4 倍に伸ばすという意味です。

一般に、結合の後には [ ] オプションで、最大 4 つのオプション引数を指定できます。

```
\chemfig{CH3 -[:90,1.5,2,1] OH}
```

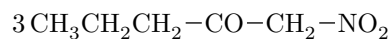
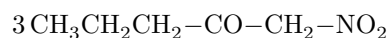
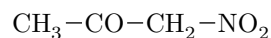
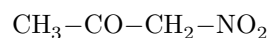
のように指定します。

- 第 1 引数の :90 は、90 度方向に結合を伸ばすという意味です。負の角度も含めて任意の角度が指定できます。
- 第 1 引数を : なしで書くと、45 度の倍数での指定を意味します。例えば、 $\text{CH}_3\text{-[3] OH}$  と指定すれば、135 度方向に  $\text{-OH}$  という結合が伸びます。ただし 0 ~ 7 の整数のみが認められ、負の値は指定できません。
- 第 2 引数の 1.5 は、結合の長さを 1.5 倍に引き伸ばすことを意味します。
- 第 3,4 引数の 2,1 の部分は、左の原子団 ( $\text{CH}_3$ ) の 2 つ目の原子 (H) と、右の原子団 ( $\text{OH}$ ) の 1 つ目の原子 (O) を結ぶ結合を作ることの意味します。これらのオプションは、特に斜めや上下方向に結合を伸ばすときに役立ちます。
- 後ろの方の不要なオプション引数は略せます。例えば角度のみが必要な場合は  $\text{-[:60]}$  のような指定で、角度と長さが必要な場合は  $\text{-[:90,1.5]}$  のように指定できます。
- 長さのみが必要な場合は、第 1 引数をスキップするために空のコンマを打ちます。  $\text{-[,1.5]}$  のようにします。
- 2 つの原子の後に ? を打っておくと、その 2 つの原子が結合されます。環構造を作るときに使います。例えばシクロブタンは

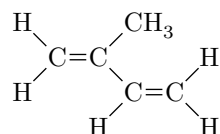
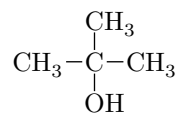
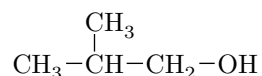
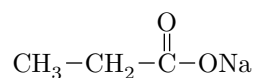
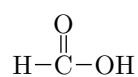
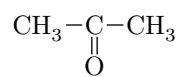
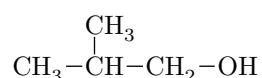
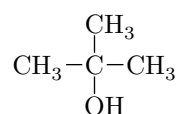
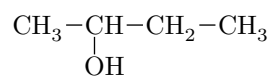
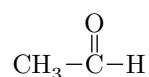
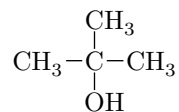
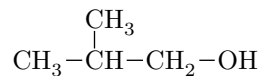
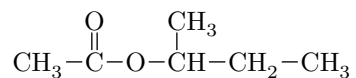
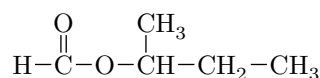


のように書けます。(結合の長さは全部 1.4 倍に引き伸ばしています。)

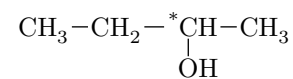
## ▶ 一行で書ける構造式の比較



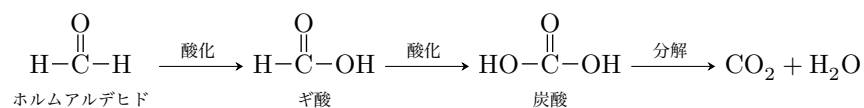
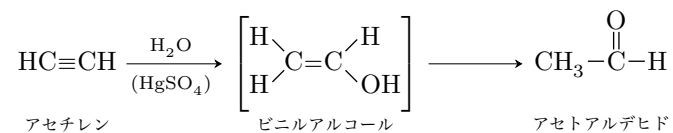
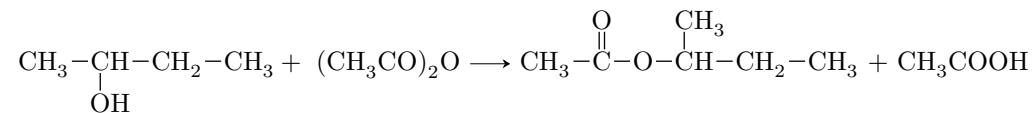
## ▶ 枝分かれのある構造式



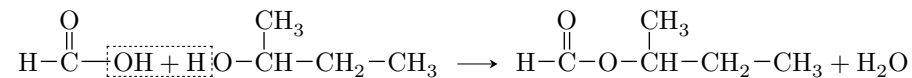
▶ 不斉炭素原子の表示



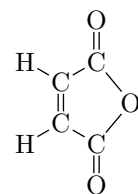
▶ 反応式



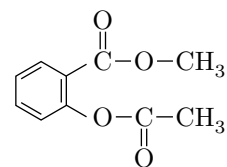
▶ エステル化



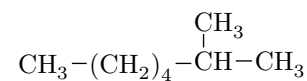
▶ 環状化合物



▶ ベンゼンの側鎖



▶ (CH2)4 など

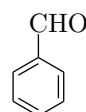
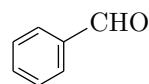


▶ 芳香族化合物

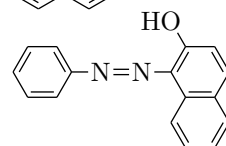
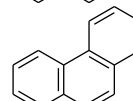
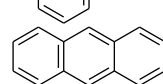
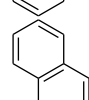
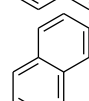
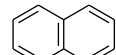
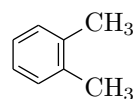
使い方：\benzenefig{\*6(====-)} でベンゼンが書けます。



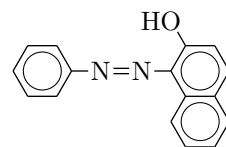
それに枝を付けることでどんどん伸ばしてゆけます。



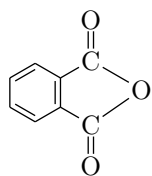
\benzenefig を使った場合は添字の上げ下げは自動ではなされないの、CH\_3 のように書く必要があります。



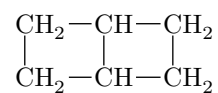
\*6 の部分を \*\*6 にすれば中が円のベンゼン環になります。



?を2箇所につけることで環をつなげます。

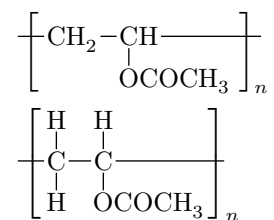


環状構造を2つ以上作りたい場合は、?[a]と?[b]のように、?にラベルを付けて、どこどこを結びたいのかを明示します。

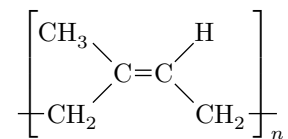


▶ 高分子

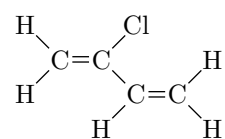
▷▷ ポリビニルアルコール



▷▷ ポリイソプレン

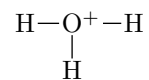


▷▷ クロロプレン

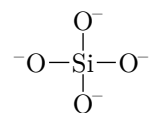


▶ イオン

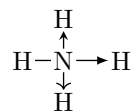
▷▷ オキシニウムイオン



▷▷ ケイ酸イオン



▶ 配位結合



▶ その他

