

立体化学表記法の混乱について

Complication of Graphic Representation of Three-Dimensional Structure

桐原 正之*、望月 友裕**

Masayuki KIRIHARA and Tomohiro MOCHIDUKI

Abstract: Structural diagrams which depict stereochemistry have been used in the structural drawings for organic chemistry. In general, plain lines depict bonds approximately in the plane of the drawing; bonds to atoms above the plane are shown with a bold wedge (starting from an atom in the plane of the drawing at the narrow end of the wedge); and bonds to atoms below the plane are shown by broken lines. In the cases of the broken lines, they are typically used in three different ways. 1. Narrow end as being in the plane of the drawing (Method A). 2. Short parallel lines (Method B). 3. Narrow end as furthest from the viewer (Method C). We investigated which method has been mainly used. Although IUPAC recommends Method B, most chemists have recently used Method A in the chemical journals.

1. はじめに

化学者、特に有機化学者が化学構造式を書く場合、立体化学を明示するためにそれらの表記法が工夫されている。しかしながら、この立体化学表記法には後述するように不統一の部分がある。今回我々は、それらについて調査を行い、極めて興味深い知見を得たので報告する。

2. 立体化学表記法

化学が取り扱う分子の世界は、言うまでもなく三次元の世界である。例えば、一番簡単な有機化合物である CH_4 (メタン) の炭素は sp^3 混成軌道をとるので正四面体構造をとる。すなわち、正四面体の中心に炭素があり、水素は正四面体の各頂点に位置している (Fig. 1)。

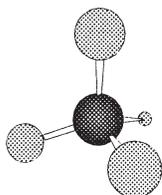


Fig. 1 Molecular model of methane

しかしながら、我々が記録に使う代表的な手段の紙は二次元 (平面) である。そこで、二次元の紙上で分子の構造式を、わかりやすく立体表記するための立体表示法が工夫されている。たとえば、正四面体構造をとるメタンを例にとると、いずれか 2 個の水素原子と炭素原子とが 1 つの平面を作り、これが残り 2 個の水素と炭素とからつくられる別の平面を垂直に二等分しているので、実線 —— で描かれた結合は紙面上にあり、破線 ||||| で描かれた結合は紙面の裏側へ伸び、実線のくさび形 ▲ で描かれた結合は紙面から手前に向かって出ていると定義される (Fig 2)。

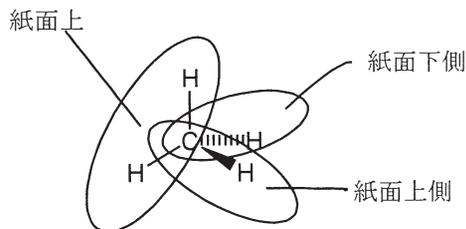


Fig. 2 3D structure of methane

3. 破線の描き方の混乱

しかし、立体化学表記法において破線の書き方が統一されておらず、化学者によって書き方が異なるという問題が存在している。具体的には、末広がり型の破線表記 (A)、破線の太さが変わらない表記 (B)、尻すぼみ型の破線表記 (C) の主に 3 種類の描き方が存在する (Fig. 3)。これら以外にも、破線を細い線で表記する場合 (B') があるが、この場合は破線の太さが変わらない表記といえるので、今後はこれらも B 表記として取り扱うことにする。



Fig. 3

A 表記は実線のくさび形表記と類似の破線のくさび型表記といえよう。一方 C 表記の場合は、破線は紙面の反対側に行くのだから、始点から遠ざかるにつれて線の太さが細くなるべきであるという、「遠近法」の考えに基づくものである。

破線の太さを変えると A 表記と C 表記の二通りがあり、まぎらわしいので、破線の太さを変えるべきではないという考えに基づくものが B 表記である。あまり知られていないようであるが、IUPAC (国際純正および応用化学連

2009年3月1日受理

* 理工学部 物質生命科学科

**理工学部 物質生命科学科 卒業生

合)ではB表示を推奨している¹⁾。

なお、破線の太さを変えないだけでなく、紙面の手前にくる線の太さも変えるべきではないと考え、くさび型の実線ではなく、太い実線を用いる化学者も存在する(D表記)。IUPACではD表記も推奨している。



D

Fig. 4

我々はこれら様々の立体化学表記法(A~D表記)のうち、どの表記法がどれくらい使われているのか調査してみた。

4. 各種破線の描き方使用状況・教科書類

立体化学表記法は、大学学部レベル初級の有機化学講義で教えられるのが一般的である。そこでまず、静岡理工科大学の附属図書館に所蔵されている、大学の有機化学講義教科書として使用されることを想定して書かれたと我々が判断した書籍類を調査してみた。その結果を下のTable 1に示した。23種類中、A表記採用が6種類、B表記採用が10種類、C表記採用が6種類、D表記採用が1種類という結果になった。

Table 1 教科書類

 A
ブルース有機化学 第4版 上下
ジョーンズ有機化学 上下 第3版
第5版 バイン有機化学 I・II
クラム 有機化学 I II 第4版
ソロモンの新有機化学 上下 第3版
ケンブ 有機化学 上 中 下
 B
ウォーレン有機化学 上下
マクマリー有機化学 上 中 下 第6版
フォックスホワイトセル 有機化学 I II III
第4版 ボルハルト・ショアー現代有機化学 上下
ブルースター 有機化学 上下
ロバーツ 有機化学 概論 上下
アリンジャー有機化学 上 中 下
ベイラー有機化学 基礎と応用
グリッシュ有機化学
バーゴイン有機化学

 C
ウェイド有機化学 I II III
ハート基礎有機化学
ゲーチェ バスト 有機化学 上、中、下
ケアリー有機化学 上 中 下
モリソン ボイド 有機化学 上、中、下
フェッセンデン有機化学 上下 第5版
 D
大学院講義 有機化学 I II

IUPACがB表記を推奨しているためか、B表記を用いる教科書が多かった。しかし、A表記やC表記もよく使われていることが判った。

5. 各種破線の描き方使用状況・学術専門雑誌

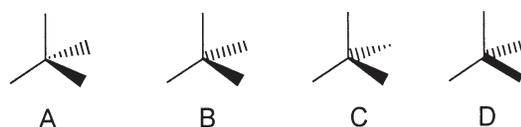
次に化学の学術専門雑誌での各種表記の使われ方について調査した。学術専門雑誌としては、

- ① アメリカ化学会発行の Journal of American Chemical Society (J. Am. Chem. Soc.) の、1962年、1980年、1990年、2003年
- ② 日本化学会発行の Bulletin of Chemical Society of Japan (Bull. Chem. Soc. Jpn.) の、1962年、1980年、1990年、2003年
- ③ 日本化学会発行の Chemistry Letters (Chem. Lett.) の、1980年、1990年、2003年
- ④ Elsevier 社発行の Tetrahedron Letters (Tetrahedron Lett.) の、1980年、1990年、2003年

を選び、立体表記を用いている論文では、どの表記法がどれくらい用いられているか調べた。なお、どの雑誌も投稿規定には、立体表示法の規定は書かれていなかった。

調査の結果、各年代によって使用状況は大きく変化しているが、いずれの年代においても、全ての雑誌が同じような傾向を示した。

まず J. Am. Chem. Soc. の結果を、Fig. 5 と Table 1 に示した。



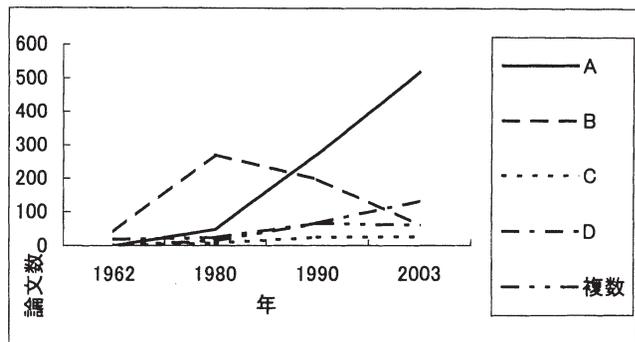


Fig. 5 J. Am. Chem. Soc.

Table 1 J. Am. Chem. Soc.

	1962		1980		1990		2003	
	論文数	割合	論文数	割合	論文数	割合	論文数	割合
A	0	0.0%	48	13.2%	272	43.2%	519	64.8%
B	42	67.7%	270	74.2%	197	31.3%	63	7.9%
C	0	0.0%	8	2.2%	25	4.0%	26	3.2%
D	9	30.6%	24	6.6%	68	10.8%	132	16.5%
複数	1	1.6%	14	3.8%	67	10.7%	61	7.6%
総数	62	100%	364	100%	629	100%	801	100%

1962年では、A表記と、C表記は、一つも無く、B表記が最も多く用いられていた。1980年になると、A表記とC表記が現れてくるが、いずれも少数派で、多くの場合はB表記が用いられていた。ところが、1990年、2003年と年を経るごとにA表記の論文が増え、B表記の論文が減っていることが判った。2003年では過半数がA表記を用いていた。C表記に関しては、用いられている論文は極めて少数で、その割合もほとんど変化していない。

次に、Bull. Chem. Soc. Jpn.、Chem. Lett.、Tetrahedron Lett.の結果を示す。興味深いことに、いずれの場合もJ. Am. Chem. Soc.とほとんど同様の傾向が見られ、2003年では大多数がA表記を採用していた。

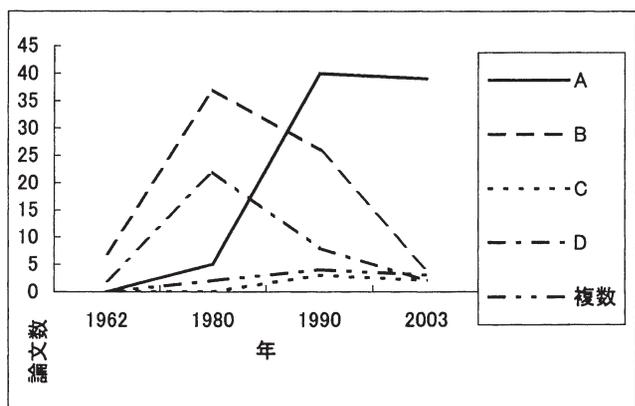


Fig. 6 Bull. Chem. Soc. Jpn.

Table 2 Bull. Chem. Soc. Jpn.

	1962		1980		1990		2003	
	論文数	割合	論文数	割合	論文数	割合	論文数	割合
A	0	0.0%	5	7.6%	40	49.4%	39	78.0%
B	7	77.8%	37	56.1%	26	32.1%	4	8.0%
C	0	0.0%	0	0.0%	3	3.7%	2	4.0%
D	2	22.2%	22	33.3%	8	9.9%	2	4.0%
複数	0	0.0%	2	3.0%	4	4.9%	3	6.0%
総数	9	100%	66	100%	81	100%	50	100%

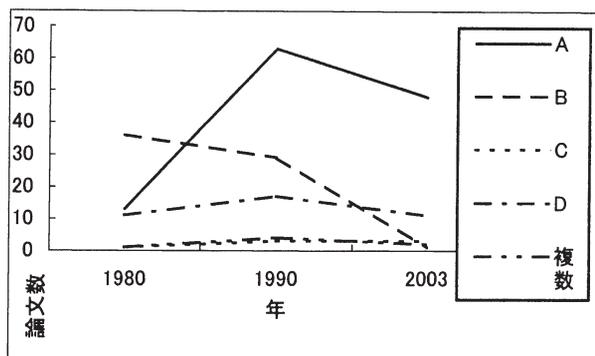


Fig. 7 Chem. Lett.

Table 3 Chem. Lett.

	1980		1990		2003	
	論文数	割合	論文数	割合	論文数	割合
A	13	21.0%	63	54.3%	48	73.8%
B	36	58.1%	29	25.0%	1	1.5%
C	1	1.6%	3	2.6%	3	4.6%
D	11	17.7%	17	14.7%	11	16.9%
複数	1	1.6%	4	3.4%	2	3.1%
総数	62	100%	116	100%	65	100%

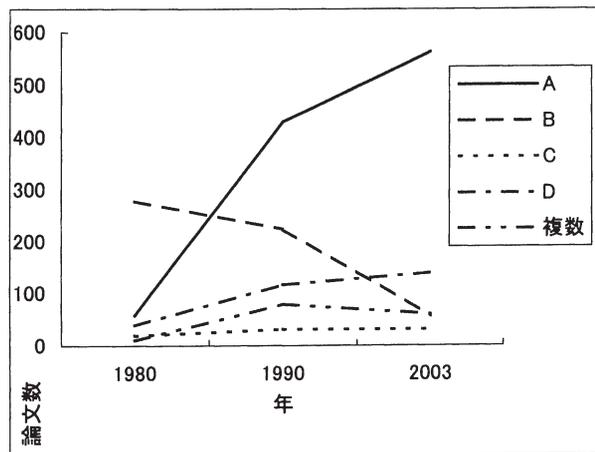


Fig. 8 Tetrahedron Lett.

Table4 Tetrahedron Lett.

	1980		1990		2003	
	論文数	割合	論文数	割合	論文数	割合
A	58	14.4%	430	48.9%	563	66.3%
B	278	68.8%	224	25.5%	56	6.6%
C	19	4.7%	31	3.5%	31	3.7%
D	39	9.7%	116	13.2%	139	16.4%
複数	10	2.5%	79	9.0%	60	7.1%
総数	404	100%	880	100%	849	100%

6. 各種破線の描き方使用状況・その他

公定書である日本薬局方では、最新版の第15改正版と第10改正版（1981年）のいずれもB'表記が用いられていた。代表的なオンライン化学検索システムの、SciFinderでもB'表記が用いられていた。



Fig. 9 日本薬局方およびSciFinderの立体表示

代表的な化学構造式作成ソフトウェアである、Chem Drawでは、いずれの表記法でも構造式が書けるようになっていたが、Toolsボックス中のStereocentersを使って自動的に立体表記をさせると、A表示のものがあらわれるようになっていた（Fig. 10）。



Fig. 10 Chem DrawのStereocenters表示

7. まとめ

専門雑誌に関しては、今回調査したのはわずか4雑誌で、各4つの年代から1年ずつピックアップしたに過ぎない。しかしながら、どの雑誌も年代ごとの表記方法の使用状況は似通っており、近年は大多数の化学者がA表記を使用していることが判った。また、各年代にわたって、C表記を用いている化学者は極めて少ないことも明らかとなった。今後、さらなる調査が必要ではあるが、今回の調査でおおよその傾向は把握できたと思っている。

なぜ、近年は大多数の化学者がA表記を用いるようになったかについては、化学構造式作成ソフトウェア

Chem Drawの普及のせいではないかと考えている。

現在のようにコンピューターが普及するまでは、化学者は構造式を、製図用の定規とペンを用いて手書きで書いていた。その場合は線の太さを変化させるのは手間がかかる（特に破線の場合はそれが顕著）。したがって、線の太さを変えない、BやDの表記が好まれたのではないだろうか。

実用的な最初の化学構造式作成ソフトウェアであるChem Drawは、1980年代後半から1990年代にかけて爆発的に普及し、現在ではほとんどの有機化学者は化学構造式をChem Drawで書いている。化学構造式作成ソフトウェアはChem Draw以外にも開発されてきているが、Chem Drawを使用する有機化学者が多い。Fig. 10にも示したように、Chem DrawがA表示を採用しているため、その影響で多くの化学者（有機化学者）がA表記を使うようになったのであろう。

破線の書き方が複数あるのは決して望ましい状況であるとは言えない。IUPACではB表示が推奨されているのであるから、教科書の著者はB表示を用いるべきであろう。また、各専門雑誌は投稿規定に破線の書き方はB表示にするように明記した方が良いのではないだろうか。

ただ、これだけ多数の化学者がA表記を使用していることから、IUPACでA表示を推奨するように検討してみる事も必要であろう。

参考文献

- 1) <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/stereo/intro.html>; K.L. Loening, in *Chemical Structures* edited W.A. Warr, 1988, Springer Verlag, pp. 413-423.