

La chimica con L^AT_EX 2_ε

Un esame dei pacchetti esistenti e delle possibilità*

Clemens Niederberger

Sommario

Questo articolo espone un esame dei pacchetti più utili e conosciuti per scrivere di chimica con L^AT_EX 2_ε. Si basa su una serie di messaggi scritti dall'autore sul proprio blog (in tedesco): <http://texwelt.de/blog>.

Abstract

This article provides an overview of the most useful and popular packages for writing chemistry-related material with L^AT_EX 2_ε. It is based upon a series of blog posts written by the author on the (German-language) blog <http://texwelt.de/blog>.

1 Introduzione

Circa due anni fa, sul mio blog ho cominciato a scrivere una serie di messaggi sui pacchetti di L^AT_EX adatti alla chimica. I lettori interessati e che conoscono il tedesco possono trovarli all'indirizzo <http://texwelt.de/blog/tag.chemie>. Questo articolo è grosso modo una traduzione dal tedesco di quei contributi e segue la stessa struttura.

1. I fondamenti mediante l'uso del pacchetto `chemmacros` (paragrafo 2).
2. Le formule molecolari e le equazioni di equilibrio chimico (paragrafo 3).
3. Le formule di struttura con il pacchetto `chemfig` (paragrafo 4).
4. I dati di sicurezza e il GHS con il pacchetto `ghsystem` (paragrafo 5).
5. La numerazione dei composti con il pacchetto `chemnum` (paragrafo 6).
6. I pacchetti per applicazioni specialistiche (paragrafo 7).

Devo spiegare che sono l'autore della maggior parte dei pacchetti descritti. Tutti i pacchetti citati in questo articolo si trovano in CTAN (<http://ctan.org/pkg/⟨nome-del-pacchetto⟩>) e sono contenuti nelle due maggiori distribuzioni del sistema T_EX: MiK_TE_X e T_EX Live. Chiunque disponga di una distribuzione aggiornata può consultare i rispettivi manuali semplicemente eseguendo in un terminale il comando `texdoc⟨nome-del-pacchetto⟩`.

*Questo articolo è la traduzione in italiano di quanto ha pubblicato l'autore in inglese (NIEDERBERGER, 2015c). Eventuali errori sono da attribuire ai traduttori C. Beccari e T. Gordini. (N.d.T.)

2 I fondamenti con il pacchetto `chemmacros`

Il pacchetto `chemmacros` (scusatemi: l'ho scritto io) mette a disposizione una varietà di macro per diverse applicazioni in chimica: permette di scrivere i nomi dei composti secondo le regole della IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry), consente di trattare cariche e numeri di ossidazione, di mostrare i dati spettroscopici e molto altro. Recentemente (fine agosto 2015) `chemmacros` è stato aggiornato alla versione 5.0, che contiene importanti innovazioni (NIEDERBERGER, 2015a). In questo articolo si fa riferimento alla versione 5.0.

A partire dalla versione 5.0 `chemmacros` presenta una struttura modulare. Alcuni moduli sono caricati per impostazione predefinita, mentre altri devono essere caricati dall'utente. Questo articolo carica un solo modulo addizionale:

```
\usechemmodule{redox}
```

2.1 Nomi

I nomi IUPAC possono essere piuttosto lunghi e difficili da leggere. Inoltre, dividerli in righe diventa spesso problematico. Trattandoli come testo normale è improbabile che si ottengano buoni risultati tipografici:

```
(4-(4,4'-Bis(dimethylaminophenyl)benz%
hydryliden)cyclohexa-2,5-dien-1-yliden)%
dimethylammoniumchlorid
```

```
(4-(4,4'-
Bis(dimethylaminophenyl)benzhydryliden)cyclohexa-
2,5-dien-1-yliden)dimethylammoniumchlorid
```

`chemmacros` mette a disposizione la macro `\iupac` per facilitare sia l'immissione del nome, sia la sua composizione. Nell'argomento di questo comando, '-' produce un trattino che permette la cesura in fine di riga, in modo simile a quanto fa `\babelhyphen`. 'l' inserisce un punto di cesura insieme a un piccolo spazio che può essere personalizzato.

```
\iupac{(4-(4,4'-Bis(di|methyl|amino|
phenyl)benz|hydryliden)cyclo|hexa%
-2,5-dien-1-yliden)di|methyl|
ammonium|chlorid}
```

TABELLA 1: Casi di base per mhchem e chemformula

mhchem		chemformula	
<code>\ce{H2O}</code>	H ₂ O	<code>\ch{H2O}</code>	H ₂ O
<code>\ce{Sb2O3}</code>	Sb ₂ O ₃	<code>\ch{Sb2O3}</code>	Sb ₂ O ₃
<code>\ce{H+}</code>	H ⁺	<code>\ch{H+}</code>	H ⁺
<code>\ce{[AgCl2]-}</code>	[AgCl ₂] ⁻	<code>\ch{[AgCl2]-}</code>	[AgCl ₂] ⁻
<code>\ce{^227_90Th+}</code>	²²⁷ Th ⁺	<code>\ch{^227_90Th+}</code>	²²⁷ Th ⁺
<code>\ce{SO4^2-}</code>	SO ₄ ²⁻	<code>\ch{SO4^2-}</code>	SO ₄ ²⁻
<code>\ce{KCr(SO4)2 * 12H2O}</code>	KCr(SO ₄) ₂ · 12 H ₂ O	<code>\ch{KCr(SO4)2 * 12 H2O}</code>	KCr(SO ₄) ₂ · 12 H ₂ O

(4-(4,4'-Bis(dimethylaminophenyl)benzhydryliden)cyclohexa-2,5-dien-1-yliden)dimethylammoniumchlorid

Se fosse solo per la cesura in fine di riga, una soluzione più semplice potrebbe essere quella di usare le scorciatoie di `babel`. Ma `\iupac` fa di più: dentro molte macro per comuni compiti di composizione, i nomi IUPAC sono già definiti, per esempio:

```
\iupac{\nitrogen-methyl|benz|amide} \\  
\iupac{\cip{2S,3S}-Wein|s|"aure} \\  
\iupac{\zusammen-2-Butene}
```

N-methylbenzamide
(2*S*,3*S*)-Weinsäure
(*Z*)-2-Butene

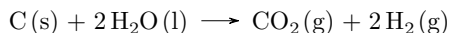
2.2 Descrittori di fase

`chemmacros` tenta di seguire il più possibile le raccomandazioni IUPAC. Per quanto riguarda i descrittori di fase, IUPAC richiede quanto segue:

I [...] simboli sono usati per rappresentare gli stati di aggregazione delle specie chimiche. Le lettere vengono messe accanto fra parentesi e sono composte in tondo (diritto) senza nessun punto finale. (COHAN *et al.*, 2008, p. 54)

Per i descrittori di fase più comuni, `chemmacros` mette a disposizione alcune macro pronte all'uso che seguono esattamente quelle raccomandazioni:

```
\ch{  
  C\sld{} + 2 H2O\lqd{  
  ->  
  CO2\gas{} + 2 H2\gas  
}
```



Tuttavia, in quasi tutte le impostazioni `chemmacros` permette di personalizzare la composizione. La formula precedente con l'impostazione

```
\chemsetup{phases/pos=sub}
```

produce un altro modo molto frequente per indicare le fasi:

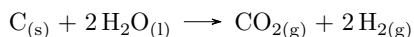


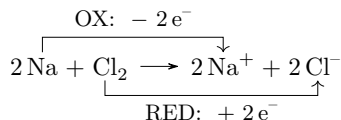
TABELLA 2: Le frecce di mhchem e chemformula

mhchem		chemformula	
<code>\ce{->}</code>	→	<code>\ch{->}</code>	→
<code>\ce{<-}</code>	←	<code>\ch{<-}</code>	←
<code>\ce{<->}</code>	↔	<code>\ch{<->}</code>	↔
		<code>\ch{<>}</code>	↔
<code>\ce{<=>}</code>	⇌	<code>\ch{<=>}</code>	⇌
<code>\ce{<=>}</code>	⇌	<code>\ch{<=>}</code>	⇌
<code>\ce{<=>}</code>	⇌	<code>\ch{<=>}</code>	⇌
		<code>\ch{-/>}</code>	→
		<code>\ch{</-}</code>	←
<code>\ce{=}</code>	=	<code>\ch{==}</code>	=
		<code>\ch{<o>}</code>	↔

2.3 E molto di più

Siccome descrivere tutto quello che `chemmacros` può fare sarebbe piuttosto inutile (visto che è tutto descritto nella sua documentazione) e farebbe superare i limiti imposti alla lunghezza di questo articolo, darò solo un altro esempio ancora prima di passare all'argomento successivo. Si tratta di un'equazione di ossidoriduzione:

```
\ch{  
  2 "\OX{o1,Na}" + "\OX{r1,Cl}" {}2  
  ->  
  2 "\OX{o2,Na}" {}+ + 2 "\OX{r2,Cl}" {}-  
}  
\redox{o1,o2}[->]{\small OX: \ch{- 2 e-}}  
\redox{r1,r2}[->]{-1}{\small RED: \ch{+ 2 e-}}
```



3 Formule molecolari ed equazioni di reazione – i pacchetti mhchem e chemformula

Qui bisogna citare due pacchetti: `mhchem` di Martin Hensel e il mio `chemformula`. Il primo è disponibile da più tempo e quindi è meglio conosciuto e più usato.

`chemformula` è nato come parte di `chemmacros` nel gennaio del 2012 ed è stato pubblicato come pacchetto indipendente nel luglio del 2013. È ancora strettamente collegato a `chemmacros` nel senso

che quest'ultimo lo usa piuttosto ampiamente. Perciò, coloro che usano `chemmacros` dovrebbero usare `chemformula` al posto di `mhchem` in modo da avere input e output coerenti.

Nonostante i due pacchetti siano molto simili per quanto riguarda ingresso e uscita, presentano importanti differenze in entrambi i casi.

Martin Hensel, l'autore di `mhchem`, una volta descrisse le differenze in questo modo (HENSEL, 2015):

La filosofia [di `chemformula`] è il *controllo in mano all'utente*. [...] la filosofia di `mhchem`, invece, è la *facilità d'uso*.

Entrambi i pacchetti offrono principalmente una sola macro per comporre formule e reazioni chimiche:

- `mhchem` ha `\ce{⟨formula⟩}`, e
- `chemformula` ha `\ch{⟨formula⟩}`.

La tabella 1 mostra un breve confronto dei casi d'uso più comuni.

Le differenze sono più visibili quando si compongono reazioni:

```
\ce{4 Na + 2 H2SO4 -> 2 Na2SO4 + 2 H2 ~} \\\ch{4 Na + 2 H2SO4 -> 2 Na2SO4 + 2 H2 ~}
```

$$4\text{Na} + 2\text{H}_2\text{SO}_4 \longrightarrow 2\text{Na}_2\text{SO}_4 + 2\text{H}_2\uparrow$$

$$4\text{Na} + 2\text{H}_2\text{SO}_4 \longrightarrow 2\text{Na}_2\text{SO}_4 + 2\text{H}_2\uparrow$$

Si noteranno differenze nelle spaziature (personalizzabili con `chemformula`) e naturalmente il diverso aspetto delle frecce. La tabella 2 mostra i vari tipi di frecce disponibili con i due pacchetti.

Ci sarebbe molto altro da dire su entrambi i pacchetti, ma di nuovo devo accontentarmi di questa introduzione e rimandare alle rispettive documentazioni per i dettagli.

4 Formule di struttura – il pacchetto `chemfig`

Sia `mhchem` sia `chemformula` non forniscono alcun supporto per mostrare la complessità dei composti organici. Per comporre le formule di struttura, la strada più battuta è probabilmente quella di ricorrere a programmi esterni come `ChemDraw`, esportarne i risultati come immagini e includerle nel documento LATEX. Tuttavia, esistono i metodi per creare formule e diagrammi di questo tipo all'interno di LATEX. Per quanto ne so esistono cinque pacchetti per farlo. I lettori interessati possono riferirsi a RAKE (2012). In questo articolo ne prenderò in esame solo uno: `chemfig` di Christian Tellechea. E di nuovo sarà solo una breve introduzione, perché il manuale ammonta a di più di 80 pagine.

Prima di tutto: `chemfig` è un pacchetto generico (è l'unico di questo tipo fra quelli descritti in questo articolo); può essere usato con LATEX, ConTEXt e plain TEX.

TABELLA 3: Tipi di legami di `chemfig`

Input	Output
<code>\chemfig{A-B}</code>	A — B
<code>\chemfig{A=B}</code>	A == B
<code>\chemfig{A~B}</code>	A ≡ B
<code>\chemfig{A>B}</code>	A ► B
<code>\chemfig{A<B}</code>	A ◄ B
<code>\chemfig{A> B}</code>	A B
<code>\chemfig{A< B}</code>	A ··· B
<code>\chemfig{A> B}</code>	A ▷ B
<code>\chemfig{A< B}</code>	A ◁ B

```
\input chemfig.tex % plain TeX
\usepackage{chemfig} % LaTeX
\usemodule[chemfig] % ConTeXt
```

`chemfig` si serve di PGF (TikZ) per disegnare le formule. Il comando più importante è

```
\chemfig{⟨formula⟩}
```

Le regole di base sono semplici: le lettere sono atomi e i legami sono inseriti come `-`, `=`, eccetera. Gli atomi sono composti in modo matematico (più precisamente con `\printatom` che si espande in `\ensuremath{\mathrm{#1}}`), cosicché si possono inserire i pedici come si fa scrivendo la matematica:

```
\chemfig{H-CH_3}
```

H — CH₃

Esistono molti tipi di legame, come mostra la tabella 3. Il loro aspetto può essere personalizzato con un certo numero di parametri. Tutti i comandi dei legami hanno un argomento facoltativo che può ricevere un lista di 5 parametri, separati da una virgola, in quest'ordine:

1. l'angolo del legame;
2. un fattore di scala;
3. il numero dell'atomo di partenza;
4. il numero dell'atomo di arrivo;
5. le opzioni grafiche di TikZ per personalizzare il legame.

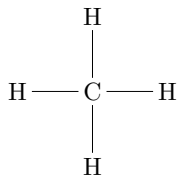
L'angolo può essere immesso in tre modi diversi:

1. `<intero>` — denota un angolo in multipli di 45°.
2. `:<reale>` — denota l'angolo (in gradi) del legame: il verso è antiorario se il valore è positivo e orario se è negativo.
3. `::<reale>` — denota un angolo (in gradi) antiorario se positivo, orario se negativo, relativo all'angolo specificato in precedenza.

Perciò, ciascuna delle seguenti linee di codice:

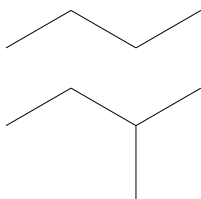
```
\chemfig{H-C(-[2]H)(-[6]H)-H}
\chemfig{H-C(-[:90]H)(-[:-90]H)-H}
\chemfig{H-C(-[:90]H)(-[:-90]H)-H}
```

produce lo stesso risultato:



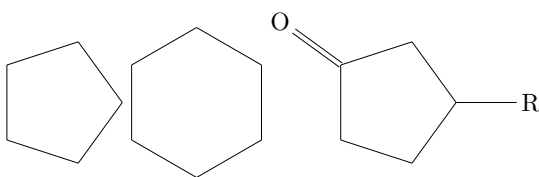
L'ultimo esempio mostra anche come si eseguono le diramazioni: basta mettere la specifica per la diramazione fra parentesi.

```
\chemfig{-[:30]-[::-60]-[::60]}
\par\bigskip
\chemfig{-[:30]-[::-60](-[::-60])-[::60]}
```



Anche creare gli anelli è piuttosto semplice:

```
\chemfig{*5(-----)}
\chemfig{*6(-----)}
\chemfig{*5(--(-R)--(=O)-)}
```



Personalmente ritengo che questa sintassi sia piuttosto intuitiva — certamente molto di più di quella di alcuni degli altri pacchetti menzionati in [RAKE \(2012\)](#) — e la può essere appresa molto in fretta.

Spero che gli esempi che ho mostrato diano una idea di base dell'uso di `chemfig`. Per concludere questo paragrafo, la figura 1 mostra un esempio di uno schema più complesso creato appositamente con `chemfig` per offrire una visione più ampia delle sue funzionalità. Il codice per l'esempio è riportato in [NIEDERBERGER \(2015b\)](#).

5 Informazioni sulla sicurezza — i pacchetti `rsphrase`, `hpstatement` e `ghsystem`

Ogni studente di chimica conosce le frasi di sicurezza armonizzate nel sistema *Globally Harmonized System and Labelling of Chemicals*, in breve GHS. Questo definisce le dichiarazioni dei tipi H (*hazard*, “pericolo”) e P (*precaution*, “attenzione”). Prima di questo standard c'erano i tipi R (*risk*, “rischio”) e S (*safety*, “sicurezza”). Le dichiarazioni di tipo R

e S sono disponibili mediante il pacchetto `rsphrase` di Martin Hensel¹:

```
The statement \rsnumber{R34}
is ‘\rsphrase{R34}’
```

The statement R34 is ‘Provoca ustioni.’

L'uso di questo pacchetto è descritto nel manuale di `mhchem`.

Nello stesso manuale è descritto anche l'uso del pacchetto `hpstatement` dello stesso autore. Questo pacchetto fornisce il supporto per le dichiarazioni H e P come specificate dal GHS. È un peccato che il pacchetto contenga la specificazione

```
\RequirePackage{babel}
```

che obbliga l'utente a servirsi del pacchetto `babel` e a specificare una lingua come opzione².

```
\selectlanguage{english}%
The statement \hpnumber{H200}
is ‘\hpstatement{H200}’
```

The statement H200 is “Unstable explosives.”

Esiste un altro pacchetto per le frasi GHS, il mio `ghsystem`, leggermente anteriore a `hpstatement`. Anch'esso fornisce un'interfaccia per gestire le frasi per numero.

```
The statement \ghs[hide]{h}{200}
is ‘\ghs*{h}{200}’: \par
\ghs{h}{200}
```

The statement H200 is “Esplosivo instabile.”
H200: Esplosivo instabile.

Questo pacchetto permette anche di inserire i pittogrammi GHS:

```
\ghspic{skull}
\ghspic{flame}
\ghspic{aqpol}
```



I pittogrammi sono disponibili nei formati JPG, EPS, PNG E PDF. Avrei in programma di fornire questi pittogrammi anche come codici TikZ.

1. Volutamente non si è tradotto in italiano il testo sorgente, in modo da evidenziare che il pacchetto, almeno per alcune lingue fra cui l'italiano, compone le frasi nella lingua predefinita o in una lingua definita mediante un'opzione. (*N.d.T.*)

2. Attualmente, con il pacchetto `hpstatement` le frasi sono disponibili solo in inglese e in tedesco. Poiché in questo articolo la lingua principale è l'italiano, si è dovuta specificare la lingua inglese, altrimenti il pacchetto produce un avviso d'errore, ben comprensibile perché non dispone della macro che contiene la frase in italiano. La documentazione di `hpstatement`, contenuta in quella di `mhchem`, invita gli utenti chimici a contribuire con le traduzioni nella propria lingua madre. (*N.d.T.*)

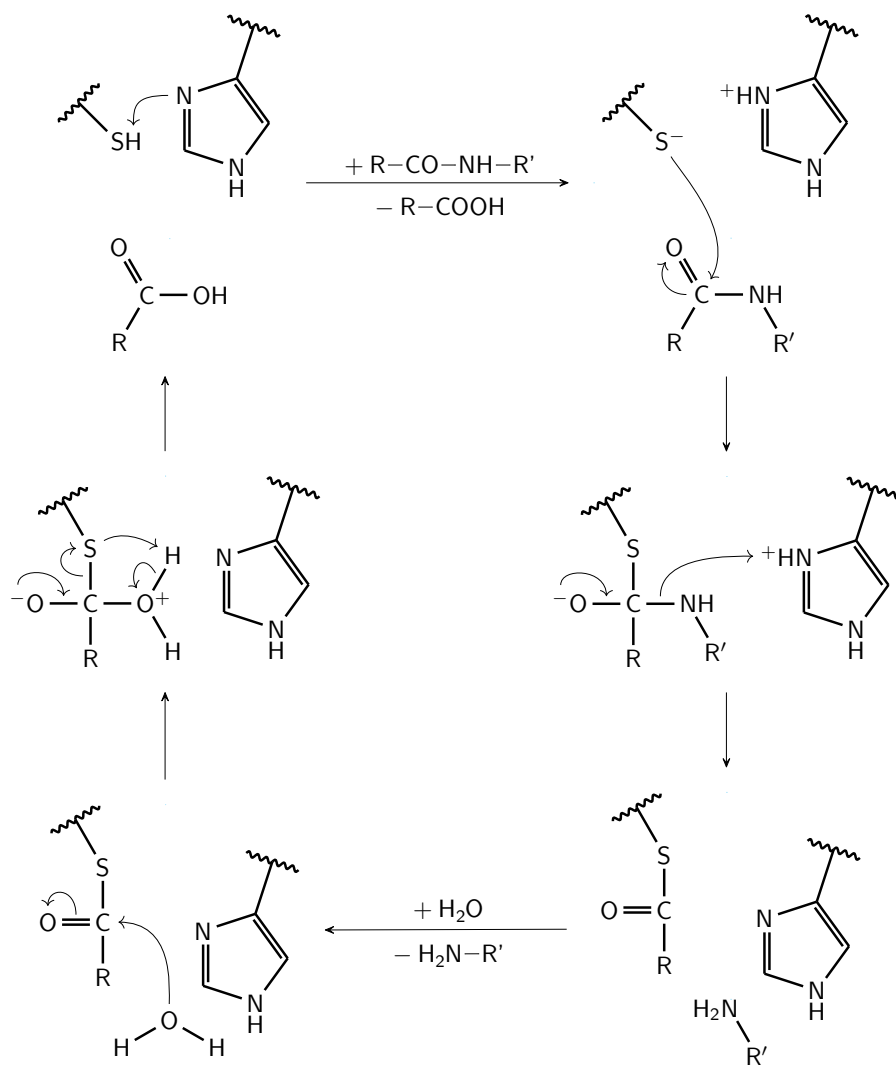


FIGURA 1: Uno schema complesso costruito con chemfig

6 La numerazione dei composti – il pacchetto chemnum

Per i chimici, riferirsi ai composti mediante dei numeri è un compito normale. Esistono alcuni pacchetti che permettono di farlo, ma quello più flessibile è il mio chemnum.

L'uso di base è semplice: basta aggiungere `\cmpd{<id>}` dove si vuole indicare il numero:

```
This is about \ch{CH3-CH2-OH} (\cmpd{ethanol}).
\cmpd{ethanol} is used\ldots
```

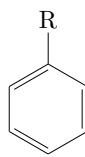
This is about CH₃-CH₂-OH (1). 1 is used...

La prima volta che si usa un ID `<id>` il comando crea un nuovo numero per il composto. Le occorrenze seguenti faranno riferimento a questo numero. Per l'uso nei titoli di sezione o nelle didascalie esiste una versione con un segno + facoltativo (`\cmpd+{<id>}`) che permette di riferirsi al composto senza creare il numero. C'è anche una versione asteriscata che invece crea il numero, ma non scrive nulla. Da questo punto di vista, la sintassi è la stessa del più anziano pacchetto chemcompounds di Stephan Schenck.

chemnum permette nativamente anche l'etichettatura subordinata: `\cmpd{<id>.<sub-id>}`.

Sia `<id>` sia `<sub-id>` possono essere liste di identificatori separati da virgole. Se `<sub-id>` è una lista, deve essere racchiuso tra graffe.

```
\setatomsep{2em}
\chemname
{\chemfig{*6(==(-R)-)}}
{\cmpd{benzene.{H,Me,OH,NH2}}}
\begin{tabular}{lll}
& \ch{-R} & \text{Name} \\
\midrule
\cmpd[sub-only]{benzene.H}
& \ch{-H} & \text{Benzene} \\
\cmpd[sub-only]{benzene.Me}
& \ch{-CH3} & \text{Toluene} \\
\cmpd[sub-only]{benzene.OH}
& \ch{-OH} & \text{Phenol} \\
\cmpd[sub-only]{benzene.NH2}
& \ch{-NH2} & \text{Phenylamine (Aniline)}
\end{tabular}
```

	R	-R	Name
	a	-H	Benzene
	b	-CH ₃	Toluene
	c	-OH	Phenol
2a-d	d	-NH ₂	Phenylamine (Aniline)

Questo esempio mostra che per impostazione predefinita le liste di sottoetichette sono compresse. Si può disabilitare questo comportamento mediante un'opzione.

```
\cmpd{benzene.{H,Me,OH,NH2}}
\setchemnum{compress=false}
\cmpd{benzene.{H,Me,OH,NH2}}
```

2a-d 2a,b,c,d

Quando si dispone di una lista di etichette che contengono un `<id>` più di una volta ma con sotto etichette diverse, ciascuna citazione verrà stampata per conto proprio:

```
\cmpd{a,b.{A},c,b.{B,C},a}
```

3, 4a, 5 e 4b,c

Tuttavia, esiste un'opzione per unire quelle citazioni in una sola:

```
\setchemnum{merge=true}
\cmpd{a,b.{A},c,b.{B,C},a}
```

3, 4a,b,c e 5

Va notato ancora un dettaglio che non emerge dagli esempi precedenti, cioè che le liste sono elencate in ordine alfabetico:

```
\cmpd{a,b,c,b,a,ethanol,benzene} vs. \@
\cmpd{a}, \cmpd{b}, \cmpd{c}, \cmpd{b},
\cmpd{a}, \cmpd{ethanol} and \cmpd{benzene}
```

1, 2, 3, 4 e 5 vs. 3, 4, 5, 4, 3, 1 and 2

7 Pacchetti per applicazioni specialistiche

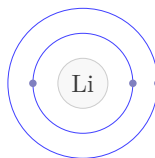
Il numero di pacchetti disponibili per gestire argomenti collegati alla chimica è piuttosto grande. Sia CTAN (<http://ctan.org/topic/chemistry>) sia il mio blog (<http://mychemistry.eu/known-packages>) ne mantengono un'elenco. Le due liste sono leggermente diverse, soprattutto perché nel mio blog includo anche argomenti di confine, per esempio pacchetti che possono essere legati più alla biologia che alla chimica. In questo paragrafo scelgo alcuni dei miei pacchetti e li descrivo molto brevemente:

- bohr,
- elements,
- endiagram,
- modigram, e
- chemgreek.

7.1 Il pacchetto bohr

Il pacchetto bohr è stato creato in risposta a una domanda inviata a <http://tex.stackexchange.com>, (ANDREAS, 2012). Esso permette di disegnare in modo semplice gli orbitali atomici secondo il modello di Bohr:

```
\bohr{3}{Li}
```



7.2 Il pacchetto elements

Il pacchetto `elements` è piuttosto recente (pubblicato nel giugno 2015). Dal suo sommario:

Questo pacchetto fornisce i mezzi per gestire le proprietà degli elementi chimici come numero atomico, simbolo dell'elemento, nome dell'elemento, distribuzione degli elettroni, numero degli isotopi. Queste proprietà sono definite per gli elementi fino al numero atomico 112.

L'esempio seguente dà una rapida idea delle sue potenzialità³:

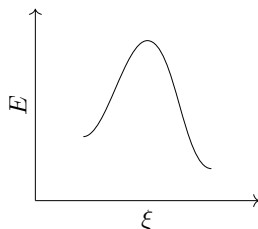
```
\elementname{Cu} \\
\elementname{11} \\
\atomicnumber{U} \\
\elconf{Cl} \\
\savemainelementisotope\foo{C}\foo
```

Copper
Sodium
92
1s²2s²2p⁶3s²3p⁵
12

7.3 Il pacchetto endiagram

Il pacchetto `endiagram` permette di creare diagrammi di curva dell'energia potenziale.

```
\begin{endiagram}
\ENcurve{1,4,0}
\end{endiagram}
```

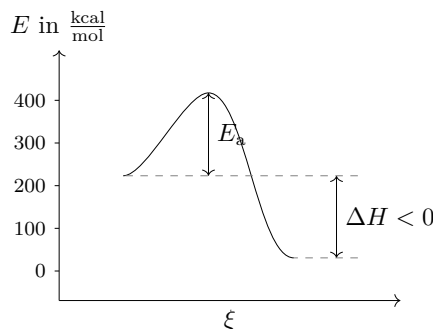


Un esempio un po' più complesso:

```
% preamble:
% uses 'siunitx' (loaded by 'endiagram')
\DeclareSIUnit{\calory}{cal}
\sisetup{per-mode = fraction}
% document:
\ENsetup{
y-label = above ,
energy-step = 100 ,
energy-unit = \kilo\calory\per\mole ,
energy-unit-separator = { in } ,
calculate = false ,
AddAxisLabel/font = \footnotesize
}
```

3. La stringa di controllo `\foo`, secondo la tradizione di D.E. Knuth, serve per designare una macro il cui nome è scelto dall'utente. (*N.d.T.*)

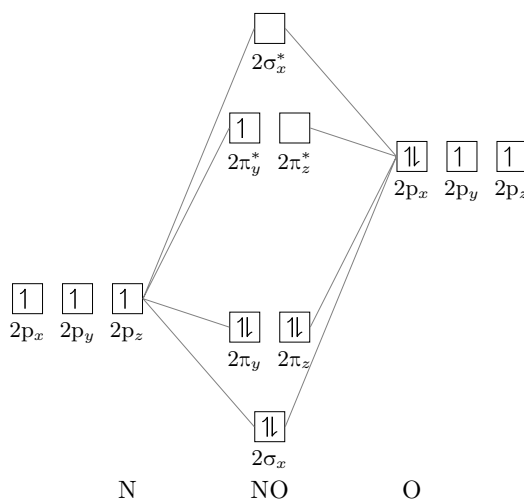
```
\begin{endiagram}[scale=1.2]
\ENcurve{2.232,4.174,0.308}
\AddAxisLabel*{0;1;2;3;4}
\ShowEa[label,connect={draw=none}]
\ShowGain[label]
\end{endiagram}
```



7.4 Il pacchetto modigram

Come il pacchetto `bohr`, il pacchetto `modigram` è stato creato in risposta a una domanda inviata a <http://tex.stackexchange.com>, (TERRETT, 2011). Esso offre un'interfaccia per disegnare diagrammi degli orbitali molecolari servendosi di `TikZ`.

```
\begin{Mdiagram}[labels,names,style=square]
\atom[N]{left}{
2p = {0;up,up,up}
}
\atom[O]{right}{
2p = {2;pair,up,up}
}
\molecule[NO]{
2pMO = {1.8,.4;pair,pair,pair,up}
}
\end{Mdiagram}
```



7.5 Il pacchetto chemgreek

Il pacchetto `chemgreek` è un pacchetto da usare più come supporto che in modo autonomo. Attualmente si servono delle sue funzionalità i pacchetti

chemmacros, chemnum e mhchem. Lo scopo di chemgreek è quello di fornire un'interfaccia unificata per le lettere greche diritte, indipendentemente da quale pacchetto per la matematica o per i font le fornisca e da come vi si acceda. La cosa è importante in chimica, poiché le lettere greche diritte sono usate in una moltitudine di circostanze:⁴

```
\iupac{a-\D-glucopyranose}
```

α -D-glucopyranose

Il pacchetto chemgreek conosce un certo numero di pacchetti che forniscono queste lettere. È in grado di determinare se uno di quei pacchetti è già stato caricato e, se è possibile farlo in modo univoco, definisce le macro per accedere a ciascuna delle 24 lettere minuscole e delle corrispondenti maiuscole. Se la cosa non è possibile, si rifà a una configurazione predefinita e gli utenti devono provvedere da soli ad eseguire una scelta. Il pacchetto chemgreek ha una comoda interfaccia allo scopo:

```
\selectchemgreekmapping{<mapping>}
```

Ora altri pacchetti possono usare quelle macro per definirne altre per conto proprio.

Si noti che il pacchetto riconosce i `<mapping>` con i nomi dei pacchetti che forniscono quelle lettere, per esempio `newtx` per usare i font greci diritti della collezione `newtxmath`; `textalpha` per usare (anche) in matematica i font greci testuali diritti predefiniti per la lingua greca, eccetera. È opportuno riferirsi alla documentazione del pacchetto chemgreek.⁵

Se un documento richiede un pacchetto che contiene lettere greche diritte di cui chemgreek non sa nulla, gli utenti possono definirsi un nuovo `<mampping>` da soli e (per esempio) attivarlo con l'interfaccia di chemmacros e poi usare i comandi di nomenclatura di chemmacros per usare il nuovo mapping.

8 Conclusioni

In questo articolo si sono descritti brevemente i pacchetti chemmacros, mhchem, chemformula, chemfig,

4. Si noti che nella formula seguente la lettera 'D', codificata con `\D`, non è una 'D' maiuscola, ma è maiuscolotta, perché questo simbolo per IUPAC rappresenta il nome *dexter*. (N.d.T.)

5. Questo capoverso è stato aggiunto dai traduttori, che ritengono che la parola *mapping* non sia abbastanza chiara per i lettori italiani in questo contesto. (N.d.T.)

rsphrase, hpstatement, endiagram, modigram e chemgreek. Si è dimostrato che oggi esiste un grande supporto per i diversi compiti di composizione richiesti in chimica e si è vista una serie di possibilità d'uso dei pacchetti citati.

Riferimenti bibliografici

ANDREAS (2012). «Draw Bohr atomic model with electron shells in T_EX». URL <http://tex.stackexchange.com/questions/73410/>.

COHAN, E. R., CVITAŠ, T., FREY, J. G., HOLMSTRÖM, B., KUCHITSU, K., MARQUARDT, R., MILLS, I., PAVESE, F., QUACK, M., STOHNER, J., STRAUSS, H. L., TAKAMI, M. e THOR, A. J. (2008). *Quantities, Symbols, and Units in Physical Chemistry*. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 3^a edizione.

HENSEL, M. (2015). «On mhchem vs. chemformula». URL http://tex.stackexchange.com/q/237946#comment565361_238214.

NIEDERBERGER, C. (2015a). «A new chemmacros – but how?». URL <http://www.mychemistry.eu/2015/07/a-new-chemmacros-but-how/>.

— (2015b). «A seemingly complex example for the usage of chemfig». URL <https://www.overleaf.com/read/nhbyvqvrqffj>.

— (2015c). «Chemistry in L^AT_EX 2_ε – an overview of existing packages and possibilities». *TUGboat*, **36** (3), pp. 227–234.

RAKE (2012). «Can you make chemical structure diagrams in L^AT_EX?». URL <http://tex.stackexchange.com/questions/52722>.

TERRETT, R. (2011). «Molecular orbital diagrams in L^AT_EX». URL <http://tex.stackexchange.com/questions/13863>.

▷ Clemens Niederberger
Herrenberg DE
contact (at) mychemistry (dot)
eu