

## Στοιχειοθεσία στοιχείων και άλλων... χημικών

**Δημήτριος Α. Φιλίππου**

*Κάτω Γατζέα*

*373 00 Αγριά Βόλου*

*H/T: dimitrios dot ap dot filippou at gmail dot com*

Ἡ Διεθνής Ἐνωση Καθαρῆς και Ἐφαρμοσμένης Χημείας IUPAC ἔχει ἐκδόσει πολλές ὁδηγίες γιὰ τὴν ὀνοματολογία χημικῶν οὐσιῶν, ἀλλὰ και γιὰ τὸ πῶς πρέπει νὰ παρουσιάζονται τὰ σύμβολα χημικῶν στοιχείων, ἐνώσεων, φυσικο-χημικῶν μεταβλητῶν, μονάδων, κ.λπ. Τὸ  $\TeX$  ἔχει φτιαχτεῖ γιὰ τὴν στοιχειοθεσία μαθηματικῶν τύπων. Ἐν τούτοις, μὲ κάποια προσπάθεια, ἡ μηχανὴ τοῦ  $\TeX$  μπορεῖ νὰ προσαρμοστεῖ γιὰ τὴν στοιχειοθεσία χημικῶν τύπων. Πακέτα ὅπως τὰ `chemmacros`, `mchem`, `chemfig` και `xymtex`, δίνουν μὲ τὸ  $\LaTeX$  (ἢ και μὲ τὸ ἀπλὸ  $\TeX$ ) ἐξαιρετικὰ ἀποτελέσματα γιὰ κείμενα μὲ χημικὰ σύμβολα.

**Typesetting elements and other... chemicals**, by *Dimitrios Filippou* — The International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) has produced several guidelines for the nomenclature of chemicals, and also for the appearance of chemical elements, compounds, physical/chemical variables, units, etc.  $\TeX$  was made for typesetting mathematical formulæ. Nonetheless, with some effort,  $\TeX$ 's machine can be twicked for typesetting chemical formulæ as well. Packages like `chemmacros`, `mchem`, `chemfig` and `xymtex`, give with  $\LaTeX$  (or even with plain  $\TeX$ ) excellent results for documents with chemical symbols.

### Εἰσαγωγή

Τὸ  $\TeX$  δημιουργήθηκε γιὰ τὴν εὐκόλη στοιχειοθεσία κειμένων ποὺ περιέχουν πολλοὺς μαθηματικοὺς τύπους. Ἀλλὰ τὰ μαθηματικὰ δὲν ἀπέχουν πολὺ ἀπὸ τὴν φυσική, τὴν χημεία, τὴν βιολογία και τὶς ἄλλες φυσικὲς ἢ θετικὲς ἐπιστῆμες.

Γιὰ τὴν περίπτωση τῶν χημικῶν τύπων, ὁ ἴδιος ὁ Knuth δίνει στὸ  *$\TeX$ book* ἓνα παράδειγμα στοιχειοθεσίας [1, σ. 179]: πῶς νὰ εὐθυγραμμιστοῦν οἱ δείκτες στὸ μεικτὸ ὀξειδιο  $\text{Fe}_2^{+2}\text{Cr}_2\text{O}_4$ . Ὁ συγκεκριμένος χημικὸς τύπος, ποὺ ἀνήκει στὸ ὀρυκτὸ χρωμίτης, ἔχει ἓνα μικρὸ λάθος στὸν συμβολισμό. Ὅπως ἐξηγεῖται παρακάτω, κανονικὰ τὸ ἰὸν τοῦ δισθενοῦς σιδήρου γράφεται  $\text{Fe}^{2+}$  και ὄχι  $\text{Fe}^{+2}$ .

Τὸ παράδειγμα τοῦ χρωμίτη εἶναι ἡ μοναδικὴ ἀναφορὰ τοῦ Knuth στὴν στοιχειοθεσία χημικῶν παραστάσεων. Ὅμως ἤδη ἀπὸ τὸ 1987, ὁ Michael Ramek εἶχε

δημιουργήσει ένα πακέτο μακροεντολών για δημιουργία χημικών συντακτικών τύπων με τὸ ἀπλὸ  $\text{T}\text{E}\text{X}$  [2]. Σχεδὸν ταυτόχρονα, οἱ Haas καὶ Ο’Kane [3] ἔδειξαν τὶς δυνατότητες τοῦ  $\text{T}\text{E}\text{X}$  γιὰ τὴν στοιχειοθεσία χημικῶν τύπων, ἢ γιὰ τὴν ἀκρίβεια τὶς δυνατότητες ποὺ παρέχει τὸ  $\text{E}\text{T}\text{E}\text{X}$  γιὰ τὴν στοιχειοθεσία χημικῶν συντακτικῶν τύπων μέσω τοῦ περιβάλλοντος *picture*.

Ἀπὸ τὸ 1987 μέχρι σήμερα ἔχουν περάσει περισσότερα ἀπὸ τριάντα χρόνια. Ὅπως ἦταν φυσικὸ, σ’ αὐτὸ τὸ μεγάλο χρονικὸ διάστημα, παρουσιάστηκαν πολλὰ ἄλλα ἐργαλεῖα ποὺ διευκολύνουν τὴν στοιχειοθεσία χημικῶν τύπων με τὸ  $\text{T}\text{E}\text{X}$  καὶ τὸ  $\text{E}\text{T}\text{E}\text{X}$ . Στὸ παρὸν ἄρθρο, γίνεται μιὰ σύντομη παρουσίαση τῶν πιὸ ἐξελιγμένων ἐργαλείων γιὰ τὴν στοιχειοθεσία χημικῶν τύπων με τὸ  $\text{T}\text{E}\text{X}$  καὶ τὸ  $\text{E}\text{T}\text{E}\text{X}$ . Τὸ ἄρθρο στηρίζεται σὲ σημαντικὸ βαθμὸ σὲ προηγούμενη δημοσίευση τοῦ Clemens Niederberger στὸ περιοδικὸ *TUGboat* τὸ 2015 [4].

## Μερικοὶ βασικοὶ κανόνες

Ἡ Διεθνὴς Ἑνωσις Καθαρῆς καὶ Ἐφαρμοσμένης Χημείας (International Union of Pure and Applied Chemistry, γνωστὴ καὶ με τὸ ἀκρωνύμιο IUPAC) ἔχει ὀρίσει πολλοὺς κανόνες γιὰ τὴν ὀρολογία, τὰ σύμβολα καὶ τὴν τυπογραφικὴ ἐμφάνιση φυσικῶν καὶ χημικῶν τύπων [5]. Πιὸ συγκεκριμένα, οἱ ὀδηγίες τῆς IUPAC γιὰ τὴν τυπογραφία μποροῦν νὰ συνοψιστοῦν στὰ ἀκόλουθα βασικὰ σημεῖα [6, σσ. 7–9 καὶ 103–104]:

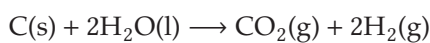
- Σύμβολα ποὺ ἀντιπροσωπεύουν φυσικὲς ποσότητες ἢ μεταβλητὲς τυπώνονται με πλάγια στοιχεῖα: π.χ.  $E = mc^2$ . Σύμβολα ποὺ δηλώνουν διανύσματα, τανυστὲς καὶ πίνακες τυπώνονται με ἔντονα (μαῦρα) στοιχεῖα, ποὺ πρέπει νὰ εἶναι καὶ πλάγια, διότι πρόκειται γιὰ ποσότητες: π.χ.  $\sigma = [T^{e_1}, T^{e_2}, T^{e_3}]$ .
- Οἱ ἀριθμοὶ τυπώνονται με ὄρθια στοιχεῖα. Ἐπίσης με ὄρθια στοιχεῖα τυπώνονται τὰ σύμβολα ποὺ ἀντιπροσωπεύουν μονάδες ( $\mu\text{m}$ ,  $\text{mg}$ ,  $\text{s}$ ,  $\text{kA}$ , κ.λπ.), μαθηματικὲς σταθερὲς ( $\pi = 3,141 \dots$ ,  $e = 2,718 \dots$ ), συναρτήσεις ( $\log$ ,  $\arctan$ , κ.λπ.) ἢ τελεστὲς ( $\nabla$ ,  $\Delta$ ,  $\Sigma$ , κ.ἄ.).
- Τὰ χημικὰ στοιχεῖα τοῦ περιοδικοῦ συστήματος τυπώνονται με ὄρθια στοιχεῖα:  $\text{Fe}$ ,  $\text{Cu}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ , κ.ἄ. Παρομοίως, τὰ σύμβολα ποὺ χρησιμοποιοῦνται γιὰ στοιχειώδη σωματίδια εἶναι πάντα ὄρθια:  $e^-$  (ἠλεκτρόνιο),  $\mu^+$  (ἀντιμυόνιο),  ${}^{14}_6\text{C} \rightarrow {}^{14}_6\text{N} + e^- + \bar{\nu}_e$ , κ.λπ.
- Με πλάγια τυπώνονται οἱ διάφορες φυσικὲς σταθερὲς ποὺ ἔχουν συγκεκριμένες διαστάσεις, ὅπως π.χ.  $\hbar = 1,055 \times 10^{-34} \text{ J s}$ . (Κατὰ συνέπεια, τὸ στοιχειώδες ἠλεκτρικὸ φορτίο σημειώνεται με πλάγια:  $e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$ , ἐνῶ ὁ δείκτης « $e$ » στὸ σύμβολο τῆς μάζας τοῦ ἠλεκτρονίου πρέπει νὰ σημειώνεται με ὄρθιο γράμμα:  $m_e = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ .)

Σύμφωνα με τούς παραπάνω κανόνες, στὸν κώδικα  $\LaTeX$  πρέπει νὰ γράψουμε  $\text{\mathcode{C0}_2}$ , γιὰ νὰ λάβουμε  $\text{CO}_2$ , καὶ ὄχι  $\text{\code{C0}_2}$  ποὺ θὰ μᾶς δώσει τὸ μὴ ἀποδεκτὸ  $\text{CO}_2$ .

Ὅμως ὅλοι οἱ κανόνες ἔχουν καὶ τὶς ἐξαιρέσεις τους. Γιὰ παράδειγμα, ὁ γνωστὸς δείκτης ὀξύτητας pH τυπώνεται πάντα με ὄρθια στοιχεῖα παρότι πρόκειται γιὰ μία μεταβλητὴ. Ἐπιπλέον, οἱ κανόνες τῆς IUPAC στηρίζονται στὴν ἀγγλοαμερικανικὴ τυπογραφικὴ παράδοση καὶ δὲν τηροῦνται παντοῦ καὶ πάντα στὴν ἴδια ἔκταση. Στὴν Γαλλία, συχνά (ἀλλὰ ὄχι πάντα) οἱ φυσικὲς καὶ μαθηματικὲς μεταβλητὲς ποὺ συμβολίζονται με κεφαλαῖα λατινικὰ γράμματα ἢ με μικρὰ ἑλληνικὰ γράμματα τυπώνονται με ὄρθια στοιχεῖα. Ἀκόμα καὶ μέσα στὸν ἀγγλόφωνο κόσμος, ὀρισμένοι κανόνες τῆς IUPAC δὲν τηροῦνται· π.χ., ἡ σταθερὰ  $\pi$  τυπώνεται συνήθως με πλάγιο στοιχεῖο.

Ἡ IUPAC ἔχει ὀρίσει ἐπίσης κανόνες γιὰ τὴν ἐμφάνιση χημικῶν ἐνώσεων, ἰόντων, ἀντιδράσεων, κ.λπ. Τὰ φορτία ἐνὸς ἰόντος πρέπει νὰ ἀναγράφονται ὡς ἐκθέτης με πρῶτο τὸν ἀριθμὸ καὶ μετὰ τὸ πρόσημο (θετικὸ ἢ ἀρνητικὸ) τῶν φορτίων. Σὲ πολυατομικὰ ἰόντα (ρίζες), ὁ ἐκθέτης τῶν φορτίων πρέπει ἐπίσης νὰ μπαίνει λίγο πρὸς τὰ δεξιά, π.χ.,  $\text{SO}_4^{2-}$  καὶ ὄχι  $\text{SO}_4^{-2}$ .

Στὶς ἀντιδράσεις, οἱ δείκτες φάσεων, ὅπως s (στερεό), l (ύγρο), g (ἀέριο), aq (ὕδατικὸ ἰόν), κ.ἄ., μπαίνουν ἐντὸς παρενθέσεως στὰ δεξιά τοῦ κάθε ἀντιδρώντος ἢ προϊόντος — καὶ ὄχι ὡς δείκτες κ.λπ. — ὅπως στὸ παράδειγμα:

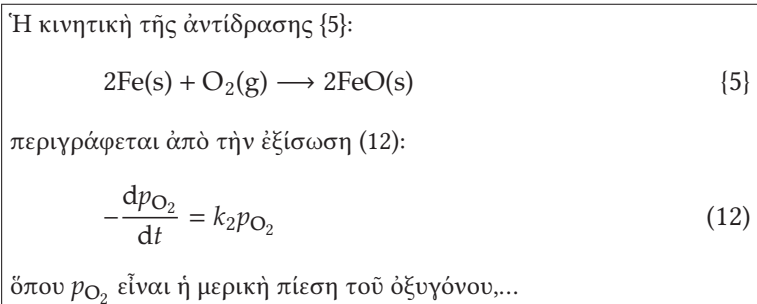


Ὅσον ἀφορᾷ τούς συντακτικὸς τύπους, ἡ IUPAC συνιστᾷ, μεταξὺ ἄλλων, τὰ ἑξῆς [7]:

- Οἱ γραμμὲς ποὺ ἀναπαριστοῦν δεσμοὺς εἶναι τοῦ ἴδιου πάχους καὶ λεπτές, ἀλλὰ ὄχι λεπτότερες ἀπὸ 0,5 mm.
- Τὸ μήκος τῶν δεσμῶν μπορεῖ μεταβάλλεται (ἂν καὶ κάτι τέτοιο δὲν συνιστᾶται), ἀλλὰ οἱ γωνίες ποὺ σχηματίζουν οἱ δεσμοὶ εἶναι τυποποιημένες γιὰ κάθε χημικὴ ἔνωση.
- Τὸ χρῶμα ἐπιτρέπεται με φειδῶ καὶ μόνο γιὰ ἔμφαση, δηλαδή γιὰ νὰ τονιστεῖ κάποιος στοιχεῖο ἢ κάποιος δεσμὸς.

Σχετικὰ με τὶς μονάδες, οἱ κανόνες τῆς IUPAC εἶναι οὐσιαστικὰ οἱ κανόνες τοῦ Διεθοῦς Γραφείου Μέτρων καὶ Σταθμῶν γιὰ τὸ Διεθνὲς Σύστημα Μονάδων (SI) [8]. Πέρα ἀπὸ τὸ ὅτι οἱ μονάδες πρέπει νὰ εἶναι με ὄρθια στοιχεῖα, οἱ κανόνες τοῦ SI ἀναφέρουν ὅτι ἀνάμεσα στὸν ἀριθμὸ καὶ στὴν μονάδα, πρέπει νὰ μεσολαβεῖ ἓνα κενὸ διάστημα. Μοναδικὴ ἐξαίρεση ἀποτελοῦν οἱ μοῖρες, τὰ πρῶτα καὶ τὰ δευτέρτα γιὰ γωνίες ποὺ μπαίνουν κολλητὰ στὸν ἀριθμὸ. (Δηλαδή, γιὰ κάποια γωνία πρέπει νὰ γράψουμε  $30^\circ 33' 36'' = 30,56^\circ$ , ἀλλὰ γιὰ τὴν θερμοκρασία ἐνὸς ἀρρώστου πρέπει νὰ γράψουμε  $37,9^\circ\text{C}$ , ἀφήνοντας ἓνα κενὸ διάστημα πρὶν ἀπὸ τὸ σύμβολο  $^\circ\text{C}$ .)

Τέλος, μιὰ καλή συνήθεια, πού δὲν ἀποτελεῖ ὀδηγία ἢ κανόνα τῆς IUPAC, εἶναι νὰ ἀριθμοῦμε τὶς ἀντιδράσεις διαφορετικὰ ἀπὸ τοὺς μαθηματικοὺς τύπους. Π.χ., μποροῦμε νὰ χρησιμοποιοῦμε ἄγκιστρα {} στὴν ἀρίθμηση τῶν ἀντιδράσεων καὶ παρενθέσεις () στὴν ἀρίθμηση τῶν μαθηματικῶν σχέσεων, ὅπως στὸ παρακάτω παράδειγμα:

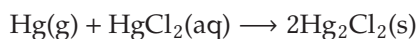


## Ἀπὸ τοὺς κανόνες στὴν πράξη

Ὁ πιὸ εὐκόλος τρόπος στοιχειοθεσίας ἀπλῶν χημικῶν ἐνώσεων καὶ ἀντιδράσεων μὲ τὸ  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  εἶναι μὲ τὴν χρῆση μαθηματικῶν ἐντολῶν. Μόνον πού θὰ πρέπει νὰ προσέχουμε τὰ χημικὰ στοιχεῖα νὰ βγαίνουν μὲ ὄρθια στοιχεῖα καὶ ὄχι μὲ πλάγια ὅπως συμβαίνει στὰ μαθηματικά. Ὅριστε ἓνα σχετικὸ παράδειγμα:

```

1  $$
2  \mathrm{
3  Hg(g) + HgCl_2(aq)
4  \longrightarrow
5  2Hg_2Cl_2(s)
6  }
7  $$
```



Τὰ πράγματα γίνονται λίγο πολὺπλοκα ὅταν πρέπει νὰ προσθέσουμε βέλη καὶ ἄλλα σύμβολα, πού ἴσως νὰ μὴν ὑπάρχουν στὶς ἐπιλογές τοῦ βασικοῦ  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ . Γιὰ νὰ λάβουμε, π.χ., ἓνα μακρὺ βέλος μὲ κάποιες πληροφορίες ἐπάνω καὶ κάτω ἀπ’ αὐτό, θὰ πρέπει νὰ δουλέψουμε μὲ τὸ περιβάλλον `array` καὶ νὰ φτιάξουμε ἓνα ψεύτικο μακρὺ βέλος πρὸς τὰ δεξιά, μὲ τὸν ἐξῆς κώδικα:

```

1  \renewcommand\arraystretch{.5}           % γιὰ σύμβολα πάνω/κάτω ἀπὸ βέλη
2  $$
3  \mathrm{
4  Hg^{\theta} + Hg^{\{2+\}} + 2Cl^{\wedge-}
```

```
5 \begin{array}{c}
6 \mbox{\tiny 80\,$}^{\circ}\text{C} \ \ \
7 \rightarrow \ \ \ % ψεύτικο μακρὺ βέλος
8 \mbox{\tiny $H_{20}$}
9 \end{array}
10 2\text{Hg}_2\text{Cl}_2\downarrow
11 }
12 $$$
```



Στὸ παραπάνω παράδειγμα, ἀντὶ γιὰ τὸ ψεύτικο μακρὺ βέλος, θὰ μπορούσαμε νὰ εἶχαμε φορτώσει τὸ πακέτο `amsmath`, καὶ μετὰ νὰ χρησιμοποιήσουμε τὴν ἐντολὴ

```
\xrightarrow{\mbox{\tiny $80^{\circ}\text{C}$}}[\mbox{\tiny $H_{20}$}]
```

γιὰ νὰ λάβουμε τὸ ἐπιθυμητὸ ἀποτέλεσμα.

Ὅσον ἀφορᾷ τὶς μονάδες, ὁ ἴδιος ὁ Knuth συνιστᾷ οἱ φυσικὲς μονάδες «νὰ στοιχειοθετοῦνται μὲ ὀρθία στοιχεῖα καὶ νὰ διαχωρίζονται ἀπὸ τὸ προηγούμενο ὑλικὸ μὲ ἕνα λεπτὸ διάστημα» μὲ τὴν ἐντολὴ `\,` [1, σελ. 169]. Στὸ ἀπλὸ `TEX`, μπορούμε νὰ γράψουμε:

```
1 $$$
2 E = \rm 2{,}54 \ , J =
3 2{,}54 \times 10^7 \ , erg =
4 1{,}58 \times 10^{19} \ , eV .
5 $$$
```

γιὰ νὰ λάβουμε:

$$E = 2,54\text{J} = 2,54 \times 10^7 \text{erg} = 1,58 \times 10^{19} \text{eV}.$$

Στὸ `LATEX` μπορούμε νὰ χρησιμοποιήσουμε τὴν ἐντολὴ `\mathrm{...}` ἀντὶ γιὰ τὴν ἐντολὴ `\rm`, ἂν καὶ ἡ τελευταία εἶναι πιὸ οἰκονομικὴ στὰ χτυπήματα στὸ πληκτρολόγιο. (Καὶ ἂν δουλεύουμε μὲ τὸ `XYLATEX` καὶ τὸ πακέτο `unicode-math`, τότε καλύτερα εἶναι νὰ χρησιμοποιοῦμε τὴν ἐντολὴ `\symrm{...}`, κ.ἄ.ῶ., ἀντὶ γιὰ τὴν ἐντολὴ `\mathrm{...}`). Γιὰ περισσότερα, βλ. στήλῃ *T<sub>E</sub>X*νικὲς, σελ. 35.)

Ἄλλὰ τὰ μαθηματικὰ πακέτα δὲν ἐπαρκοῦν πάντα. Λύσεις σὰν τὶς προηγούμενες δίνουν ἱκανοποιητικὰ ἀποτελέσματα μόνον ὅταν ἔχουμε ἀπλὲς ἐνώσεις καὶ ἀντιδράσεις τῆς ἀνόργανης καὶ σπανιότερα τῆς ὀργανικῆς χημείας. Γιὰ ἀντιδράσεις μὲ πολὺπλοκα σύμβολα, εἴμαστε ἀναγκασμένοι νὰ χρησιμοποιήσουμε ἐξειδικευμένα πακέτα, ὅπως τὸ `xymtex` [9, 10], τὸ `chemfig` [11], τὸ `mhchem` [12] καὶ τὸ `chemmacros` [4, 13]. Τὸ πακέτο `siunitsx` [14] εἶναι ἐπίσης χρήσιμο, ἀλλὰ ὄχι τελειῶς ἀπαραίτητο, γιὰ τὴν σωστὴ ἐμφάνιση μονάδων.

### Για σχετικά άπλους τύπους

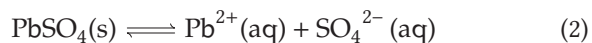
Για τύπους της ανόργανης ή και της οργανικής χημείας που δέν περιέχουν συντακτικούς τύπους, τὰ πακέτα mhchem [12] και chemmacros [4, 13] προσφέρουν αρκετές λύσεις.

Όριστε ο κώδικας  $\LaTeX$  για δύο απλές αντιδράσεις στοιχειοθετημένες με την βοήθεια της έντολης `\ce{}` του πακέτου mhchem:

```

1 \documentclass{article}
2 \usepackage{mhchem}
3 \begin{document}
4 \begin{align}
5 \ce{H2SO4(aq) + CaCl2(aq) + 2H2O(l)} & \&
6 \ce{<=> 2HCl(aq) + CaSO4*2H2O(s)} & \\\
7 \ce{PbSO4(s)} & \&
8 \ce{<=> Pb^{2+}(aq) + SO4^{2-}(aq)} &
9 \end{align}
10 \end{document}

```

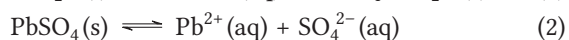
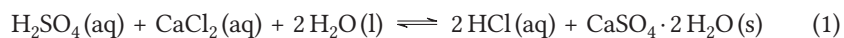


Και όριστε ο κώδικας  $\LaTeX$  για τις ίδιες αντιδράσεις στοιχειοθετημένες με την αντίστοιχη έντολη `\ce{}` του πακέτου chemmacros:

```

1 \documentclass{article}
2 \usepackage{chemmacros}
3 \begin{document}
4 \begin{align}
5 \ch{H2SO4 \aq{}} + \ch{CaCl2 \aq{}} + 2 \ch{H2O \lqd{}} & \&
6 \ch{<=> 2 HCl \aq{}} + \ch{CaSO4 * 2 H2O \sld{}} & \\\
7 \ch{PbSO4 \sld{}} & \&
8 \ch{<=> Pb^{2+} \aq{}} + \ch{SO4^{2-} \aq{}} &
9 \end{align}
10 \end{document}

```



Οι έντολές `\ce{...}` και `\ch{...}` είναι κατά βάση τὸ μαθηματικὸ περιβάλλον τοῦ  $\TeX$  `$. . . $` (`\begin{math} . . . \end{math}`). Όμως, ἔχουν κάποιες ιδιαιτερότητες σὲ ὄ,τι ἀφορᾷ τοὺς χαρακτήρες και τὰ διαστήματα.

Χημικός τύπος	Κώδικας	
	mhchem	chemmacros
$C_4H_{10}(g)$	<code>\ce{C4H10(g)}</code>	<code>\ch{C4H10 \gas}</code>
$^{238}_{92}U$	<code>\ce{^{238}_{92}U}</code>	<code>\ch{^{238}_{92}U}</code>
$NH_4^+$	<code>\ce{NH4+}</code>	<code>\ch{NH4+}</code>
$HPO_4^{2-}(aq)$	<code>\ce{HP04^2-(aq)}</code>	<code>\ch{HP04^2- \aq}</code>
$Fe_2(SO_4)_3 \cdot 7H_2O$	<code>\ce{Fe2(S04)3*7H2O}</code>	<code>\ch{Fe2(S04)3 * 7 H2O}</code>

**Πίνακας 1:** Τύποι τής ανόργανης χημείας στοιχειοθετημένοι με τις βασικές εντολές `\ce` του πακέτου `mhchem` και `\ch` του πακέτου `chemmacros`. Τα κενά διαστήματα έχουν περισσότερη σημασία για το πακέτο `chemmacros`, και γι' αυτό χρειάζεται μεγαλύτερη προσοχή στην χρήση τους.

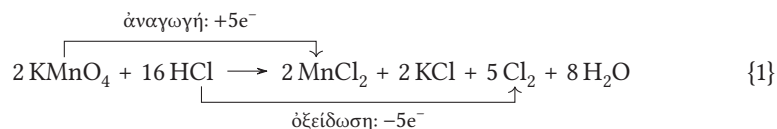
Στην εντολή `\ch{...}`, ό,τι είναι γράμμα του αλφαβήτου θεωρείται χημικό στοιχείο και βγαίνει με ὄρθιους χαρακτήρες. Ὅποιος ἀριθμὸς ἀκολουθεῖ ἀμέσως μετὰ ἀπὸ κάποιο χημικὸ στοιχείο *χωρὶς νὰ παραμβάλλεται κενὸ διάστημα*, ἐκλαμβάνεται ὡς ὁ στοιχειομετρικὸς ἀριθμὸς τοῦ ἀτόμου (ἢ τῆς ρίζας) σὲ κάποιο μόριο καὶ βγαίνει ὡς δείκτης. Ἄν ἀμέσως μετὰ ἀπὸ ἓνα χημικὸ στοιχείο ἀκολουθεῖ ἓνα ἀπὸ τὰ σύν (+) ἢ πλὴν (−) *χωρὶς νὰ παραμβάλλεται κενὸ διάστημα*, τότε τὰ πρόσημα αὐτὰ ἐκλαμβάνονται γιὰ ἠλεκτρικὰ φορτία καὶ βγαίνουν ἐκθέτες. Ἄν μετὰ τοῦ χημικοῦ στοιχείου καὶ τοῦ ἀριθμοῦ ἢ τοῦ προσήμου παρεμβάλλεται κενὸ διάστημα, τότε ὁ ἀριθμὸς ἢ τὸ πρόσημο βγαίνει ὡς ἔχει, δηλαδὴ οὔτε δείκτης οὔτε ἐκθέτης. Οἱ λεπτομέρειες αὐτὲς τῆς ἐντολῆς `\ch{...}` τοῦ `chemmacros` καὶ τῆς ἀντίστοιχης ἐντολῆς `\ce{...}` τοῦ `mhchem` ἐξηγοῦνται καλύτερα μὲ τὰ παραδείγματα τοῦ Πίνακα 1.

Γενικότερα, τὸ πακέτο `chemmacros` προσφέρει περισσότερες ἐπιλογὲς καὶ περισσότερες δυνατότητες στὸν χρήστη ἀπὸ τὸ πακέτο `mhchem`. Τὸ παρακάτω παράδειγμα δείχνει πῶς μποροῦμε νὰ στοιχειοθετήσουμε μίαν ὀξειδοαναγωγικὴ ἀντίδραση μὲ τὰ `module redox` καὶ `reactions` τοῦ πακέτου `chemmacros`:

```

1 \documentclass{article}
2 \usepackage{xltextra}
3 \setmainfont[Mapping=tex-text]{Linux Libertine 0}
4 \usepackage{chemmacros}
5 \usechemmodule{redox} % γιὰ ἀντιδρ. ὀξειδωσης-ἀναγωγῆς
6 \usechemmodule{reactions} % γιὰ κεντραρισμένες, ἀριθμημένες ἀντιδρ.
7 \begin{document}
8 \begin{reaction}
9   2 K "\OX{r1,Mn}" O4 + 16 H "\OX{o1,Cl}" ->
10  2 "\OX{r2,Mn}" Cl2 + 2 KCl + 5 "\OX{o2,Cl}" {}2 + 8 H2O
11 "\redox(o1,o2)[->][-1]{\footnotesize ὀξείδωση:\: $\- 5\el$}"
12 "\redox(r1,r2)[->]{\footnotesize ἀναγωγή:\: $+ 5\el$}"
13 \end{reaction}
14 \end{document}

```



Ἡ ἐντολή `\OX` στὶς γραμμὲς 9 καὶ 10, δέχεται δύο ὀρίσματα. Τὸ πρῶτο εἶναι ἓνα σημάδι ποὺ χρησιμεύει κατόπιν γιὰ τὴν χάραξη τῆς γραμμῶν μὲ τὴν ἐντολή `\redox` (γραμμὲς 11 καὶ 12). Τὸ δεῦτερο ὀρισμα τῆς ἐντολῆς `\OX` εἶναι τὸ χημικὸ σύμβολο ποὺ ἀντιστοιχεῖ στὸ σημάδι τοῦ πρῶτου ὀρίσματος. Ὅσο γιὰ τὴν ἐντολή `\el` (γραμμὲς 11 καὶ 12), αὐτὴ παράγει μόνον τὸ σύμβολο τοῦ ἠλεκτρονίου.

Ἄς σημειωθεῖ ὅτι τὸ παραπάνω παραδειγμα θὰ βγεῖ σωστὰ ἐφόσον τρέξουμε τὸν κώδικα μὲ τὸ `XεLaTeX`. Ἄν θέλουμε νὰ τρέξουμε τὸν κώδικα μὲ τὸ `LaTeX`, τότε θὰ πρέπει στὸ προοίμιο τοῦ κώδικα νὰ ἀντικαταστήσουμε τὶς γραμμὲς 2 καὶ 3 μὲ τὶς ἐξῆς:

```

2 \usepackage[utf8x]{inputenc}
3 \usepackage[polutonikogreek,english]{babel}

```

Ἔτσι τὸ `LaTeX` θὰ διαβάσει σωστὰ τοὺς ἑλληνικοὺς χαρακτήρες σὲ κωδικοποίηση Unicode. Ἐπιπλέον, στὶς γραμμὲς 11 καὶ 12, οἱ δύο ἑλληνικὲς λέξεις ἀναγωγή καὶ ὀξειδωση θὰ πρέπει νὰ μποῦν ὡς ὀρίσματα στὴν ἐντολή `\textgreek`:

```

11 "\redox(o1,o2)[->][-1]{\footnotesize\textgreek{ὀξειδωση}:\: $- 5\el$}"
12 "\redox(r1,r2)[->][-1]{\footnotesize\textgreek{ἀναγωγή}:\: $+ 5\el$}"

```

Ἐπίσης, ἀξίζει νὰ παρατηρήσουμε πῶς στὸν κώδικα τοῦ τελευταίου παραδείγματος χρησιμοποίησαμε τὸ περιβάλλον `reaction`. Τὸ περιβάλλον αὐτὸ μοιάζει μὲ τὸ περιβάλλον `equation` τῶν `LaTeX/XεLaTeX`, ἀφοῦ δίνει ἀντιδράσεις ἀριθμημένες διαφορητικὰ ἀπὸ τοὺς μαθηματικοὺς τύπους. Ἐντὸς τοῦ περιβάλλοντος `reaction`, ἀντιδρῶντα καὶ προϊόντα μπαίνουν ὅπως καὶ μὲ τὴν ἐντολή `\ch` μὲ ὄρθιους χαρακτήρες. Ὅ,τι ὀρίζεται ἐντὸς εἰσαγωγικῶν στὶς γραμμὲς 9–12 εἶναι ἐντολὲς τοῦ `tikz` [15], τὸ ὁποῖο καλεῖται ἀπὸ τὸ `chemmacros` καὶ μὲ βάση αὐτὲς τὶς ἐντολὲς μπαίνουν οἱ γραμμὲς μὲ τὰ βέλη.

Ἐνα σημεῖο ποὺ πρέπει νὰ προσέξουμε εἶναι ὅτι τὰ πακέτα `mhchem` καὶ `chemmacros` καλοῦν ἐπίσης τὸ πακέτο `amsmath`. Ἄν χρησιμοποιοῦμε καὶ τὸ πακέτο `unicode-math` (πράγμα πολὺ πιθανό), τότε θὰ πρέπει νὰ φορτώσουμε τὰ `mhchem` καὶ `chemmacros` πρὶν ἀπὸ τὸ `unicode-math` στὸ προοίμιο τοῦ κώδικα. Εἰδάλλως τὸ `XεLaTeX` θὰ βγάλει λάθη γιὰ ἐντολὲς ποὺ ἔχουν ἤδη ὀριστεῖ.

## Πολύπλοκοι χημικοὶ συμβολισμοὶ

Γιὰ πολύπλοκους χημικοὺς συμβολισμοὺς, ὅπως π.χ. ἀντιδράσεις μὲ συντακτικοὺς τύπους, κ.ἄ., ἡ λύση δίνεται μὲ πακέτα ποὺ δημιουργοῦν γραφικὲς παραστάσεις. Τέτοια πακέτα εἶναι τὰ `xymtex` καὶ `chemfig`.



Τὸ `xymtex` [9, 10] εἶναι ἓνα πακέτο μακροεντολῶν γιὰ σχέδια PostScript, ποὺ δημιουργοῦνται μὲ τὸ `pstricks`, ἢ γιὰ σχέδια PDF, ποὺ δημιουργοῦνται μὲ τὸ `tikz` [15]. Γιὰ κάθε κύρια χημικὴ δομὴ, τὸ `xymtex` ὀρίζει καὶ μία βασικὴ ἐντολὴ ποὺ σχετίζεται κάπως μὲ τοὺς κανόνες ὀνοματολογίας τῆς IUPAC. Ὁ χρήστης μπορεῖ μετὰ νὰ τροποποιήσῃ τὴν βασικὴ ἐντολὴ καὶ νὰ προσθέσῃ ἄτομα, δεσμούς, κ.λπ. μὲ διάφορες ἐπιλογές στὰ ὀρίσματα τῆς κύριας ἐντολῆς. Μπορεῖ ἀκόμα νὰ χρησιμοποιήσῃ τὸ περιβάλλον `picture` τοῦ  $\LaTeX$  γιὰ νὰ συνδυάσῃ πολύπλοκους δεσμούς.

Ὅριστε ἓνα ἀπλὸ παράδειγμα: Ἡ ἐντολὴ `benzenev{}` τοῦ `xymtex` δίνει τὸ ἐξάγωνο τοῦ βενζολίου, ὅπως φαίνεται στὴν Εἰκόνα 1(α). Ὅταν ὅμως προσθέσουμε στὴν ἴδια ἐντολὴ τὸ ὄρισμα `{2==Cl;3==F}`, τότε στὴν ἐπάνω δεξιὰ κορυφὴ τοῦ ἐξαγώνου, ποὺ ἀντιστοιχεῖ στὸν ἀριθμὸ 2, προστίθεται ἓνας δεσμὸς μὲ ἓνα ἄτομο χλωρίου καὶ στὴν κάτω δεξιὰ κορυφὴ τοῦ ἐξαγώνου, ποὺ ἀντιστοιχεῖ στὸν ἀριθμὸ 3, προστίθεται ἓνας δεσμὸς μὲ ἓνα ἄτομο φθορίου, γιὰ νὰ λάβουμε τὸ 1-χλωρο-2-φθοροβενζόλιο τῆς Εἰκόνας 1(β). (Ἡ ἀρίθμηση τῶν κορυφῶν τοῦ βενζολίου καὶ ἄλλων ὀργανικῶν ἐνώσεων ἀπὸ τὸ `xymtex` δὲν ταυτίζεται μὲ τὴν τυπικὴ ἀρίθμηση κατὰ IUPAC.) Τὸ ἐγχειρίδιο ποὺ συνοδεύει τὸ πακέτο `xymtex` εἶναι ὀγκῶδες (760 σελίδες!) καὶ περιέχει παραδείγματα μὲ ἐντολές γιὰ πάρα πολλές ἐνώσεις: ἀλειφατικές, ἀλεικυκλικές, ἑτεροκυκλικές, κ.λπ. [10].

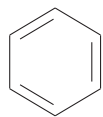
Τὸ πακέτο `chemfig` [11] διέπεται ἀπὸ διαφορετικὴ νοοτροπία. Μὲ τὸ πακέτο αὐτό, ὁ χρήστης δὲν εἶναι ἀναγκασμένος νὰ ἀναζητᾷ ἐντολές γιὰ συγκεκριμένες ἐνώσεις, ἀλλὰ *σχεδιάζει* τὴν ἔνωση μὲ τὴν ἐντολὴ `\chemfig{...}` καὶ χαρακτηρῆς ποὺ ἀντιστοιχοῦν σὲ ἐντολές τοῦ σχεδιαστικοῦ πακέτου `tikz` [15]. Π.χ., ὁ χαρακτηρῆς `-` (ἀπλὴ παύλα) σημαίνει «σχεδίασε ἓναν ἀπλὸ δεσμό», ὁ χαρακτηρῆς `=` (ἴσον) σημαίνει «σχεδίασε ἓναν διπλὸ δεσμό», ὁ χαρακτηρῆς `~` (περισπωμένη) σημαίνει «σχεδίασε ἓναν τριπλὸ δεσμό», κ.ἄ.ῶ.

Μετὰ τὸ σύμβολο τοῦ δεσμοῦ, μποροῦμε νὰ βάλουμε ἐντὸς ἀγκυλῶν ὀρισμένες ἐπιλογές, γιὰ νὰ ἀλλάξουμε τὴν μορφή τοῦ δεσμοῦ:

[<γωνία>, <μῆκος>, <ἄτομο ἀρχῆς>, <ἄτομο τέλους>, <κώδικας `tikz`>]

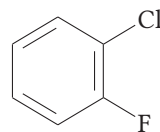
Στὴν θέση τῆς παραμέτρου <γωνία>, μποροῦμε νὰ βάλουμε ἓναν ἀκέραιο ἀριθμὸ ἀπὸ τὸ 0 μέχρι τὸ 7, π.χ. 3, ὡς πολλαπλάσιο μιᾶς βασικῆς γωνίας, ποὺ εἶναι ἐξ ὀρισμοῦ  $45^\circ$ . Ὄποτε τὸ 3 ἀντιστοιχεῖ σὲ  $3 \times 45^\circ = 135^\circ$ . Μποροῦμε ἐπίσης νὰ γράψουμε π.χ. `:135` γιὰ νὰ ὀρίσουμε γωνία  $135^\circ$  μοῖρες ἀριστερόστροφα ἀπὸ τὴν νοτιῆ ὀριζόντια γραμμὴ, ἢ π.χ. `::75` γιὰ νὰ ὀρίσουμε γωνία  $75^\circ$  μοῖρες ἀριστερόστροφα ἀπὸ τὸν ἄξονα τοῦ ἀμέσως προηγούμενου δεσμοῦ. Μποροῦμε ἀκόμα νὰ βάλουμε ἀρνητικὲς τιμές στὶς μοῖρες, π.χ. `:-30` ἢ `::-80`, γιὰ νὰ ὀρίσουμε γωνίες δεξιόστροφες ὡς πρὸς τὴν νοτιῆ ὀριζόντια γραμμὴ ἢ ὡς πρὸς ἄξονα τοῦ ἀμέσως προηγούμενου δεσμοῦ.

Τὸ <μῆκος> εἶναι ἓνα πολλαπλάσιο τοῦ βασικοῦ μήκους τῶν δεσμῶν, ποὺ εἶναι ἐξ ὀρισμοῦ ἴσο μὲ 3 em. Ἄν βάλουμε 0.5, τότε τὸ μήκος τῶν δεσμῶν θὰ γίνῃ  $0,5 \times 3 \text{ em} = 1,5 \text{ em}$ . (Προσοχή: Στὸν κώδικα πρέπει νὰ βάλουμε τελεία (.) γιὰ δεκαδικὴ ὑποδιαστολή.)



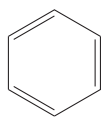
`\benzenev{}`

(α)



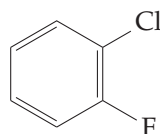
`\benzenev{2==Cl;3==F}`

(β)



`\setchemfig{atom sep=2em}`  
`\chemfig{*6(=---=)}`

(γ)



`\setchemfig{atom sep=2em}`  
`\chemfig{*6(= (-[:30]F)=(-[:30]Cl)-=)}`

(δ)

**Εικόνα 1:** Δύο απλοί συντακτικοί τύποι σχεδιασμένοι με το πακέτο `xymtex` (α, β) και το πακέτο `chemfig` (γ, δ). Παρότι τα αποτελέσματα μοιάζουν, έν τούτοις υπάρχουν μικρές διαφορές, π.χ. στην εμφάνιση των διπλών δεσμών του βενζολίου.

Το <άτομο αρχής> και το <άτομο τέλους> είναι δύο ακέραιοι αριθμοί που καθορίζουν σε δύο σειρές στοιχείων (π.χ.  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{CH}_2$ , κ.λπ.), από ποιο άτομο της πρώτης σειράς θα ξεκινάει ο δεσμός και σε ποιο άτομο της δεύτερης σειράς θα καταλήγει.

Τέλος ο <κώδικας tikz> μάς επιτρέπει να αλλάξουμε την εμφάνιση του δεσμού με την χρήση εντολών του `tikz`.

Τα άτομα σχεδιάζονται αυτόμάτως με ὀρθιους χαρακτήρες. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι μέσα στην εντολή `\chemfig{...}`, το  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  κάνει στοιχειοθεσία μαθηματικών, ὅποτε δὲν είναι απαραίτητο να βάζουμε τούς δείκτες μέσα σε  $\$...\$$ . Γράφουμε λοιπόν τὸν κώδικα `\chemfig{CH-COO^{-}}` και παίρνουμε τὴν λειτουργική ὁμάδα τοῦ προπινικοῦ ὀξέος:  $\text{CH}\equiv\text{COO}^-$ . Ἦ γράφουμε `\chemfig{CH_{2}|\phantom{H}=[,0.5]CH_2}` και παίρνουμε:  $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ , με μῆκος δεσμοῦ μισὸ ἀπὸ τὸ κανονικό.

Στὴν περίπτωση τοῦ `chemfig`, τὰ παραδείγματα ποὺ εἶδαμε γιὰ τὸ `xymtex` ἀλλάζουν ὡς ἑξῆς: Μὲ τὴν εντολή `\chemfig{*6(=---=)}`, λαβαίνουμε ἕνα ἑξάγωνο (\*6) ποὺ περιέχει τρεῖς ἀπλούς δεσμούς (-) ἐναλλασσόμενους μεῖς ἰσάριθμους διπλούς (=), δηλαδή τὸ βενζόλιο. Γιὰ νὰ λάβουμε τὸ 1-χλωρο-2-φθοροβενζόλιο, μετὰ τὸν δεῦτερο δεσμὸ τοῦ βενζολίου, βάζουμε ἐντὸς παρενθέσεων ἕναν ἀπλὸ δεσμὸ (-) ὑπὸ γωνία

$-30^\circ$  ([: -30]) ὡς πρὸς τὴν νοητὴ ὀριζόντια γραμμὴ μὲ ἓνα ἄτομο φθορίου (F) στὴν ἄκρη τοῦ δεσμοῦ, καὶ μετὰ τὸν τρίτο δεσμὸ τοῦ βενζολίου, βάζουμε ἐντὸς παρενθέσεων ἓναν ἀπλὸ δεσμὸ (-) ὑπὸ γωνία  $30^\circ$  ([: -30]) μὲ ἓνα ἄτομο χλωρίου (Cl) στὴν ἄκρη τοῦ δεσμοῦ:

```
\chemfig{*6(= (-[: -30]F)=(-[:30]Cl)-=)}
```

Οἱ Εἰκόνες 1(γ) καὶ (δ) δίνουν τὸ ἀποτέλεσμα αὐτῶν τῶν ἐντολῶν. Περισσότερα παραδείγματα δίνονται στὸ ἐγχειρίδιο τοῦ chemfig [17] καθὼς καὶ στὸ Παράρτημα τοῦ παρόντος ἄρθρου.

Συνοψίζοντας, τὸ πακέτο chemfig δίνει λύσεις σχεδιαστικές, δηλαδή μὲ βάση τὴν γεωμετρία τῶν χημικῶν τύπων, ἐνῶ τὸ πακέτο xymtex δίνει λύσεις εἰδολογικές, δηλαδή μὲ βάση τὴν κατηγορία τῶν χημικῶν τύπων. Τὸ πακέτο chemfig ἀνήκει στὰ λεγόμενα «κοινόχρηστα πακέτα» (generic packages) καὶ μπορεῖ νὰ χρησιμοποιηθεῖ ἀκόμα καὶ μὲ τὸ ἀπλὸ  $\TeX$ , ἐνῶ τὸ xymtex χρησιμοποιεῖται μόνον μὲσφ τοῦ  $\LaTeX$ . Ἕνα ἐπιπλέον πλεονέκτημα τοῦ πακέτου chemfig εἶναι ἡ δυνατότητα αὐτόματης μετατροπῆς ἐνὸς χημικοῦ τύπου ἀπὸ τὸν κώδικα SMILES [16] σὲ κώδικα `\chemfig{...}` μὲ τὸ πρόγραμμα mol2chemfig [17, 18]. Μάλιστα, ὑπάρχει καὶ ἴστοχώρος γιὰ τὴν μετατροπὴ χημικῶν τύπων ἀπὸ τὸν κώδικα SMILES σὲ κώδικα `\chemfig{...}` μὲ τὸ mol2chemfig [19].

## Γιὰ ἀκόμα περισσότερα

Ὁ ἀναγνώστης μπορεῖ νὰ βρεῖ πολὺ περισσότερες πληροφορίες γιὰ τὰ πακέτα ποὺ περιγράψαμε πιὸ πάνω στὶς ὁδηγίες χρήσης τους. Ἐκτὸς ἀπὸ τὰ πακέτα αὐτά, ὑπάρχουν καὶ ὀρισμένα ἄλλα ποὺ εἶναι μᾶλλον ξεπερασμένα καὶ γι' αὐτὸ δὲν τὰ ἀναφέρουμε ἐδῶ. Ὑπάρχουν ἐπίσης μερικὰ ἀκόμα πακέτα ποὺ δημιούργησε ὁ Clemens Niederberger καὶ τὰ ὁποῖα διευκολύνουν τὴν δημιουργία διαφόρων χημικῶν παραστάσεων κατὰ περίσταση (Πίνακας 2).

Ἀξίζει ἀκόμα νὰ ἀναφέρουμε πὼς ὑπάρχουν καὶ πακέτα  $\LaTeX$  ποὺ δίνουν δεδομένα ἀσφαλοῦς χρήσης χημικῶν προϊόντων [4], σύμφωνα μὲ τὸ *Σύστημα Οικονομικῆς Ἐναρμόνισης γιὰ τὴν Ταξινόμηση καὶ τὴν Ἐπισήμανση τῶν Χημικῶν* (GHS) [21]. Δυστυχῶς τὰ πακέτα αὐτά δὲν βγάζουν — τουλάχιστον γιὰ τὴν ὥρα — ἐτικέτες σήμανσης στὰ Ἑλληνικά.

## Μερικὲς πρακτικὲς συμβουλὲς

Στὸ παρὸν ἄρθρο, εἶδαμε ἐν συντομίᾳ πὼς μὲ τὴν χρήση ἐξειδικευμένων πακέτων, μποροῦμε νὰ φτιάξουμε ὁμορφες διατριβές, βιβλία, παρουσιάσεις καὶ ἀφίσες μὲ χημικούς τύπους. Μιὰ καλὴ συμβουλὴ εἶναι νὰ σχεδιάζουμε πρῶτα στὸ χαρτὶ τὶς διαφορὲς χημικὲς παραστάσεις ποὺ μᾶς ἐνδιαφέρουν: μοριακοὺς τύπους, συντακτικοὺς τύπους, ἀντιδράσεις, κ.λπ., καὶ κατόπιν νὰ τὶς σχεδιάζουμε στὸ  $\TeX$ / $\LaTeX$  μὲ τὰ διάφορα πακέτα. Συχνὰ χρειάζεται μπόλικη ὑπομονὴ καὶ ἐπιμονὴ γιὰ νὰ πετύχουμε τὸ

Πακέτο	Χρήση
bohr	Εικόνες ατόμων κατά το πρότυπο Bohr
carbohydrates	Συντακτικοί τύποι ύδατανθράκων
chemnum	Άρίθμηση χημικών ενώσεων
elements	Παρουσίαση ιδιοτήτων ατόμων*
endiagram	Διαγράμματα δυναμικής ενέργειας
ghsystem	Σήμανση GHS για ασφαλή χρήση χημικών
modiagram	Διαγράμματα μοριακών τροχιακών
mychemistry	Πολύπλοκες χημικές αντιδράσεις

\* Δεν δίνει ιδιότητες στα Έλληνικά.

**Πίνακας 2:** Πακέτα που δημιούργησε ο Clemens Niederberger για διάφορες χημικές παραστάσεις [20].

έπιθυμητό αποτέλεσμα, γιατί το  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  έχει πολλά καλά, αλλά δεν είναι σχεδιαστικό πρόγραμμα WYSIWYG.

Για δημοσιεύσεις σε έπιστημονικά περιοδικά, καλύτερα να αποφεύγουμε την χρήση τέτοιων πακέτων, γιατί οι περισσότεροι διεθνείς εκδοτικοί οίκοι δεν δέχονται πολύπλοκο κώδικα  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ . Στην περίπτωση έπιστημονικών άρθρων, είναι καλύτερο να στοιχειοθετούμε το κείμενο σε κώδικα άπλου  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ , και τὰ διάφορα χημικά σχήματα να τὰ φτιάχνουμε ξεχωριστά — με το  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  ή με κάποιο άλλο πρόγραμμα [22] — και να τὰ υποβάλλουμε ως έπισηναπτόμενα αρχεία—εικόνες PDF ή PNG.

Και μία τελευταία παρατήρηση: Ό συγγραφέας του παρόντος άρθρου έχει πολύ μικρή γνώση οργανικής χημείας. Όποτε είναι πιθανό κάποιοι όροι και παραδείγματα να περιέχουν λάθη. Ό άναγνώστης άς δείξει επιείκεια.

## Παράρτημα

**Παράδειγμα Π.1: Λειτουργική ομάδα με δεσμό σε πολυμερές στερεό** Ό παρακάτω κώδικας όρίζει την έντολή `\setpolymerdelim` και `\makebraces` για μεγάλους όριοθέτες (παρενθέσεις, άγκύλες ή άγκιστρα) που δηλώνουν επανάληψη του ίδιου τύπου στην μοριακή δομή ενός πολυμερούς.

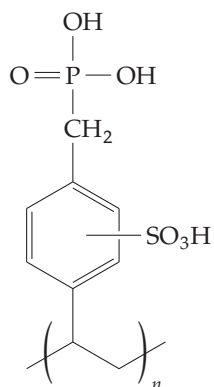
Ό κώδικας για τις παρενθέσεις προέρχεται από τις άναφορές [11] και [23], με μιά μικρή τροποποίηση: στην γραμμή 9 βάλαμε ένα `\rphantom{...}` για την εύθυγράμμιση τών παρενθέσεων.

Ό έντολή `\chemmove` (γραμμή 5) μπαίνει πάντα μετά το `\chemfig` για να τοποθετήσουμε άλλα σχεδιαστικά αντικείμενα επάνω από την εικόνα που έφτιαξε το `\chemfig`. Άκολουθεί ό πλήρης κώδικας:

```

1 \newcommand\setpolymerdelim[2]{\def\delimleft{#1}\def\delimright{#2}}
2 \def\makebraces(#1,#2)#3#4#5{%
3   \edef\delimhalfdim{\the\dimexpr(#1+#2)/2}%
4   \edef\delimvshift{\the\dimexpr(#1-#2)/2}%
5   \chemmove{%
6     \path let \p1=(#4), \p2=(#5) in
7       node[yshift=(\delimvshift)] at (\x1,0.5*\y1+0.5*\y2)
8         {$\left\delimleft\vrule height\delimhalfdim depth\delimhalfdim
9           width0pt\right._{\rlap{\phantom{$\scriptstyle#3$}}}$};
10    \path let \p1=(#4), \p2=(#5) in
11      node[yshift=(\delimvshift)] at (\x2,0.5*\y1+0.5*\y2)
12        {$\left.\vrule height\delimhalfdim depth\delimhalfdim
13          width0pt\right\delimright_{\rlap{$\scriptstyle#3$}}$};
14    }
15  }
16
17 \begin{center}
18 \setchemfig{atom sep=2em}
19 \setpolymerdelim()
20 \chemfig{%
21 *6(-[:-90](-[@{op},.5]:210))-[:-30]-[@{cl},.5]:30))
22   =[:-90,.425,,,]
23   -[:-90,,,draw=none](-[:-90,.425,,,])
24   =[:-90]CH_2-[:-90]P(=[:-180]O)(-[:-0]OH)-[:-90]OH)
25   -[:-30,,,draw=none]-[:-0,0.5,,,draw=none]-[:-0,.75]S0_3H)
26   =)
27 }
28 \makebraces(10pt,10pt){\,n}{op}{cl}
29 \end{center}

```

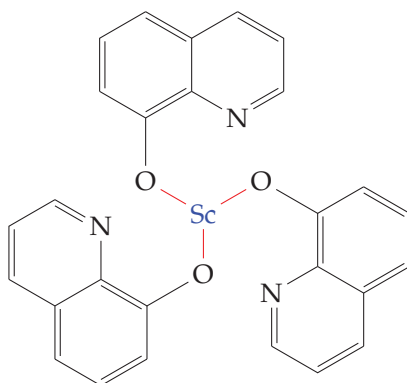


**Παράδειγμα Π.2: Χρωματιστά στοιχεία και χρωματιστοί δεσμοί σε οργανομεταλλικό σύμπλοκο** Ο επόμενος κώδικας δείχνει πώς χρωματίζονται στοιχεία και δεσμοί με το `\chemfig{...}`. Σημειώτεον πώς ή έντολή με άστερίσκο `\chemfig*{...}` μάς δίνει δεσμούς με το ίδιο μήκος γραμμών.

```

1 \begin{center}
2 \chemfig*{%
3 {\color{blue}Sc}
4 (-[:30,.75,,,red]O-[:30]([::-30]*6(=*6(-N=-)-=-)))
5 (-[:150,.75,,,red]O-[:90]([:90]*6(=*6(-N=-)-=-)))
6 -[:270,.75,,,red]O-[:210]([:210]*6(=*6(-N=-)-=-)))
7 }
8 \end{center}

```



**Παράδειγμα Π.3: Συντακτικά πολύεδρα** Τα συντακτικά πολύεδρα είναι άπεικονίσεις της τρισδιάστατης δομής χημικών ενώσεων ή ριζών. Στα συντακτικά πολύεδρα, χρησιμοποιούνται *σφήνες* αντί για εθύγραμμα τμήματα για την αναπαράσταση δεσμών που εκτείνονται πέρα από το βασικό επίπεδο της χημικής ένωσης ή της λειτουργικής ομάδας. Η γεμάτη ή μαύρη σφήνα χρησιμοποιείται για να δείξει δεσμό που εξέχει εμπρός από το επίπεδο σχεδίασης προς το μέρος του παρατηρητή. Η διακεκομμένη σφήνα δείχνει που δεσμό εκτείνεται πίσω από το επίπεδο σχεδίασης προς την αντίθετη πλευρά του παρατηρητή.

Ο παρακάτω κώδικας δίνει το συντακτικό πολύεδρο ενός συμπλόκου του καϊσίου. Όμως πρώτα ορίζουμε τον τετραπλό δεσμό `fourbond`, με δυο μικρές αλλαγές στον κώδικα `tikz` που δίνει ο οδηγός του `chemfig` [11]. Οι αλλαγές, οι οποίες σημειώνονται στις γραμμές 2 και 25, έγιναν μόνον για αισθητικούς λόγους:

```

1 \makeatletter
2 \def\fourbondsep{1.5pt} % αντί για 1.0pt
3 \pgfdeclaredecoration{dotted}{initial}{
4 \state{initial}[width=\pgfdecoratedremainingdistance]

```

```

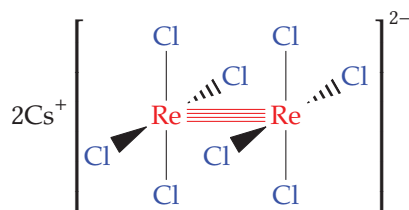
5     {\foreach\i in{1.5,0.5,-0.5,-1.5}{%
6         \pgfpathmoveto{\pgfpoint{0pt}{\i*\fourbondsep}}%
7         \pgfpathlineto{\pgfpoint{%
8             \pgfdecoratedremainingdistance}{\i*\fourbondsep}%
9             }
10        }
11    }
12    \state{final}
13    {}
14  }
15  \tikzset{fourbond/.style={decorate,decoration=ddddb}}
16
17  \tikzset{nbond/.style args={#1}{%
18      draw=none,%
19      decoration={%
20          markings,%
21          mark=at position 0 with {\coordinate (CFstart@) at (0,0)};},
22          mark=at position 1 with {%
23              \foreach\CF@i in{0,1,...,\number\numexpr#1-1}{%
24                  \pgfmathsetmacro\CF@nbondcoeff{\CF@i-0.5*(#1-1)}%
25                  \draw ([yshift=1.75* % yshift=1.75*..., άντι 1.5*...
26                      \CF@nbondcoeff\CF@double@sep]CFstart@)
27                      -- (0,1.75*\CF@nbondcoeff\CF@double@sep);
28                  }
29              }
30          },
31          postaction={decorate}
32      }
33  }
34  \makeatother
35
36  $$
37  2\mathrm{Cs}^+
38  \left[
39  \mbox{%
40  \chemfig{%
41      {\color{red}Re}}
42      (<[:30]{\color{blue}Cl})
43      (<[:210]{\color{blue}Cl})
44      (-[:90]{\color{blue}Cl})
45      (-[:270]{\color{blue}Cl})
46      -[1.5,,,red,fourbond]{\color{red}Re}}

```

```

47 (<[:30]{\color{blue}Cl})
48 (<[:210]{\color{blue}Cl})
49 (-[:90]{\color{blue}Cl})
50 (-[:270]{\color{blue}Cl})
51 }
52 }
53 \right]^{\,2-}
54 $$

```



**Παράδειγμα Π.4: Δεσμοί με επιφάνειες** Μία λειτουργική ομάδα ή ρίζα μπορεί να δημιουργήσει δεσμό και με επιφάνειες εξωτερικές, οι οποίες συνήθως σημειώνονται με κυματιστές γραμμές. Ο κώδικας που πρέπει να χρησιμοποιήσουμε για εξωτερικές επιφάνειες περιλαμβάνει τις εντολές του tikz decorate και

```

decoration={snake,
  amplitude=<πλάτος κύματος>,
  segment length=<μήκος κύματος>
}

```

όπως στο παρακάτω παράδειγμα:

```

1 \begin{center}
2 \setchemfig{atom sep=2em}
3 \chemfig{%
4 *6((-[:210](-[:120,.5,,,decorate,%
5 \qquad \qquad \qquad decoration={snake,
6 \qquad \qquad \qquad amplitude=0.5mm,
7 \qquad \qquad \qquad segment length=1.0mm
8 \qquad \qquad \qquad })
9 \qquad \qquad \qquad ])
10 \qquad \qquad \qquad )
11 \qquad \qquad \qquad (-[:300,.5,,,decorate,%
12 \qquad \qquad \qquad decoration={snake,
13 \qquad \qquad \qquad amplitude=0.5mm,
14 \qquad \qquad \qquad segment length=1.0mm
15 \qquad \qquad \qquad })

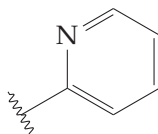
```



```

16 ]
17 )
18 )=--=N-
19 )
20 }
21 \end{center}

```



**Παράδειγμα Π.5: Άκόμα πιο παράξενες δομές** Ό κώδικας που ακολουθεί δείχνει πῶς μπορούμε νὰ συνδυάσουμε ἐντολὲς τοῦ `chemfig` μὲ ἐντολὲς τοῦ `tikz` γιὰ νὰ δημιουργήσουμε ἀκόμα πιο παράξενες δομές, ὅπως αὐτὴ τοῦ  $\text{Cr}(\eta\text{-C}_3\text{H}_5)_3$  (τρὶς(η<sup>3</sup>-αλλυλο)χρῶμιο).

Πρῶτα, ὀρίζουμε τὴν ἐντολὴ `\centerarc`, ἡ ἰδέα τῆς ὁποίας προέρχεται ἀπὸ τὴν ἀναφορὰ [24]. Ἡ ἐντολὴ αὐτὴ σχεδιάζει μὲ τὸ `tikz` ἓνα κυκλικὸ τόξο μὲ συγκεκριμένο κέντρο, ἀκτίνα, ἀρχὴ καὶ τέλος γωνίας:

```

1 \def\centerarc[#1](#2)(#3:#4:#5)%
2 % [draw options] (center) (initial angle:final angle:radius)
3 {\draw[#1] ($(#2)+({#5*cos(#3)},{#5*sin(#3)})$) arc (#3:#4:#5);}

```

Κατόπιν προχωροῦμε στὸν σχεδιασμὸ τῆς δομῆς, χρησιμοποιώντας καὶ μερικὸς ἀόρατους δεσμούς μὲ τὴν ἐντολὴ τοῦ `tikz` `draw=none`.

```

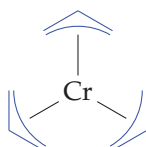
5 \begin{center}
6 \chemfig{
7 *6((-[: -30,.5,,,blue])(-[: +90,.5,,,blue])
8 -[,,,draw=none]
9 -[,,,draw=none](-[: -180,.5,,,blue])(-[: +60,.5,,,blue])
10 -[,,,draw=none]
11 -[,,,draw=none](-[: -180,.5,,,blue])(-[: +60,.5,,,blue])
12 (-[:270,,,draw=none]@{chromecenter}Cr
13 (-[:90,.7])
14 (-[:210,.7])
15 (-[:330,.7]))
16 -[,,,draw=none]
17 -[,,,draw=none]
18 )
19 }
20 \chemmove{
21 \centerarc [blue,-](chromecenter)(60:120:.85)

```

```

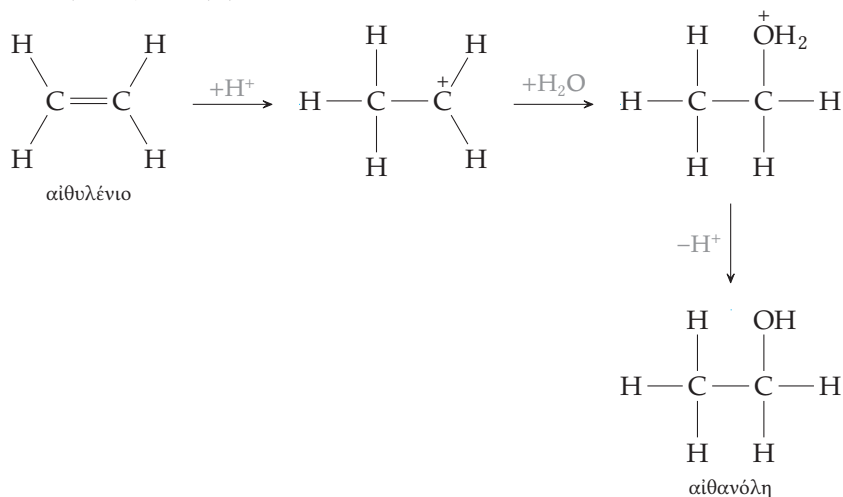
22 \centerarc [blue,-](chromecenter)(180:240:.85)
23 \centerarc [blue,-](chromecenter)(300:360:.85)
24 }
25 \end{center}

```



**Παράδειγμα Π.6: Αντιδράσεις με συντακτικούς τύπους** Όταν χρειάζεται να παρουσιάσουμε αντιδράσεις με συντακτικούς τύπους, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το περιβάλλον `\schemestart ... \schemestop` του `chemfig`, καθώς και την εντολή `\arrow` για τὰ διάφορα βέλη.

Τὸ παρακάτω σχῆμα δείχνει τὴν αντίδραση ἐνυδάτωσης τοῦ αἰθυλενίου πρὸς αἰθανόλη σὲ ὄξινο περιβάλλον.



Τὸ σχῆμα με τὶς αντιδράσεις δημιουργήθηκε με τὸν ἀκόλουθο κώδικα:

```

1 \begin{center}
2 \setatomsep{2.5em}
3 \schemestart
4 \chemname%
5 {\chemfig{C(-[:120]H)(-[:240]H)=C(-[:60]H)(-[:300]H)}}}
6 {\footnotesize αἰθυλένιο}
7 \arrow(.mid east--.mid west)
8 {->[\color{gray}{\small $\+\mathrm{H}^+$}][[]]}

```

```

9 \chemfig{H-C(-[:90]H)(-[:270]H)
10   -\chemabove{C}{\scriptstyle+}(-[:60]H)(-[:300]H)
11   }
12 \arrow(.mid east-- .mid west)
13   {->[\color{gray}\small $+\mathrm{H}_2\mathrm{H}_0$][[]]}
14 \chemfig{H-C(-[:90]H)(-[:270]H)
15   -C(-[:90]\chemabove{0}{\scriptstyle+}H_2)(-[:270]H)-H
16   }
17 \arrow(.south-- .north)
18   {->[[][*{0}\color{gray}\small $\mathrm{H}^+$][[]]}[-90]}
19 \chemname%
20   {\chemfig{H-C(-[:90]H)(-[:270]H)-C(-[:90]0H)(-[:270]H)-H}}
21   {\footnotesize αἰθανόλη}
22 \schemestop
23 \end{center}

```

Στὸν κώδικα, ἀξίζει νὰ παρατηρήσουμε τὴν χρῆση τῆς ἐντολῆς

$$\backslash\chemname{\langle\text{τύπος}\rangle}{\langle\text{ᾶνομα}\rangle},$$

μὲ τὴν ὁποία βάζουμε  $\langle\text{ᾶνομα}\rangle$  κάτω ἀπὸ κάποιον συντακτικὸ  $\langle\text{τύπος}\rangle$  (γραμμὲς 4 καὶ 19). Ἀξίζει ἐπίσης νὰ παρατηρήσουμε στὶς γραμμὲς 7, 12 καὶ 17 πῶς ὀρίζουμε τὴν μορφή καὶ τὴν διεύθυνση τῶν τόξων, καθὼς καὶ τὴν τοποθέτηση κειμένου ἐπάνω καὶ κάτω ἀπὸ κάθε τόξο. Ἡ ἐντολή  $\backslash\arrow$  λαμβάνει πολλὰ ὀρίσματα ὅπως:

```

\arrow(.<ἀρχὴ τόξου>--.<τέλος τόξου>)
  {<τύπος τόξου>
    [<κείμενο ἐπάνω ἀπὸ τὸ τόξο>]
    [<κείμενο κάτω ἀπὸ τὸ τόξο>]
    [<μετατόπιση τόξου ὡς πρὸς τὸν κατακόρυφο ᾶξονά του>]
  }
  [<ᾶζιμούθιο τόξου>]

```

Ὁ ἀναγνώστης θὰ βρεῖ περισσότερες πληροφορίες γιὰ τὴν ἐντολή  $\backslash\arrow$  καὶ ἄλλα πολλὰ στὸν ὁδηγὸ τοῦ  $\chemfig$  [11].

## Ἀναφορὲς

- [1] D. E. Knuth, *The TeXbook*, 17th printing, revised, 1990. The American Mathematical Society/Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, USA 1984.
- [2] M. Ramek, “chemstruct – Structural organic chemistry.” URL: <https://www.ctan.org/pkg/chemstruct>.

- [3] R. T. Haas and K. C. O’Kane, “Typesetting chemical structure formulas with the text formatter  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ .” *Computers & Chemistry*, vol. 11 (1987), no. 4, pp. 251–271.
- [4] C. Niederberger, “Chemistry in  $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\epsilon}$ —an overview of existing packages and possibilities.” *TUGboat*, vol. 36 (2015), no. 3, pp. 227–233.
- [5] International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), “Color books.” URL: <https://iupac.org/what-we-do/books/color-books/>.
- [6] E. R. Cohen, T. Cvitaš, J. G. Frey, B. Holmström, K. Kuchitsu, R. Marquardt, I. Mills, F. Pavese, M. Quack, J. Stohner, H. L. Strauss, M. Takami, A. J. Thor, *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry, IUPAC Green Book*, 3rd edition, 2nd printing. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, UK 2008.
- [7] J. Brecher, “Graphical representation standards for chemical structure diagrams (IUPAC recommendations 2008).” *Pure and Applied Chemistry*, vol. 80 (2008), no. 2, pp. 277–410.
- [8] Bureau International des Poids et Mesures (BIPM), *SI Brochure: The International System of Units (SI)*, 8th edition, 2006; updated in 2014. URL: <https://www.bipm.org/en/publications/si-brochure/>.
- [9] S. Fujita, “ $\text{XyM}_{\text{T}}\text{E}_{\text{X}}$  for drawing chemical structural formulas.” *TUGboat*, vol. 16 (1995), no. 1, pp. 80–88.
- [10] S. Fujita, “*xymttx* – Typesetting chemical structures,” version 5.06, Oct. 13, 2013. URL: <https://ctan.org/pkg/xymttx>.
- [11] C. Tellechea, “*chemfig* – draw molecules with easy syntax,” version 1.2d, Dec. 1, 2015. URL: <https://ctan.org/pkg/chemfig>.  
**Σημείωση:** ‘Ο οδηγός του *chemfig* στα Γαλλικά είναι πιό πλήρης από τόν αντίστοιχο οδηγό στα Άγγλικά.
- [12] M. Hensel, “*mhchem* – Typeset chemical formulæ/equations and Risk and Safety phrases,” version 4.07, July 24, 2017. URL: <https://ctan.org/pkg/mhchem>.
- [13] C. Niederberger, “*chemmacros* – A collection of macros to support typesetting chemistry documents,” version 5.8b, Aug. 28, 2017. URL: <https://ctan.org/pkg/chemmacros>.
- [14] J. Wright, “*siunitx* – A comprehensive (SI) units package,” version 2.7, Nov. 24, 2016. URL: <https://ctan.org/pkg/siunitx>.
- [15] C. Feuersänger, T. Tantau, “*pgf* – Create PostScript and PDF graphics in  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ ,” version 3.0.1a, Aug. 29, 2015. URL: <https://www.ctan.org/pkg/pgf>.

- [16] D. Weininger, “SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules.” *Journal of Chemical Information & Computer Sciences*, vol. 28 (1988), pp. 31–36.
- [17] M. Palmer, “mol2chemfig – Convert chemical structures from MDL molfile format to chemfig source code,” version 1.4, Mar. 24, 2014. URL: <https://ctan.org/pkg/mol2chemfig>.
- [18] E.K. Brefo-Mensah, M. Palmer, “mol2chemfig, a tool for rendering chemical structures from molfile or SMILES format to  $\text{\LaTeX}$  code.” *Journal of Cheminformatics*, vol. 4 (2012), art. 24, 7 pp. (doi:10.1186/1758-2946-4-24).
- [19] V. Coltuclu, “Mol2chemfig Web,” c. 2017. URL: [http://py-chemist.com/mol\\_2\\_chemfig](http://py-chemist.com/mol_2_chemfig). (Ανακτήθηκε στις 20 Ὀκτωβρίου 2017.)
- [20] CTAN, “Clemens Niederberger.” URL: <https://ctan.org/author/niederberger>.
- [21] United Nations, *Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS)*, 4th revised edition. New York and Geneva, 2011. URL: [https://www.unece.org/fileadmin/DAM/trans/danger/publi/ghs/ghs\\_rev04/English/ST-SG-AC10-30-Rev4e.pdf](https://www.unece.org/fileadmin/DAM/trans/danger/publi/ghs/ghs_rev04/English/ST-SG-AC10-30-Rev4e.pdf)
- [22] S. Pirhadi, J. Sunseri, D.R. Koes, “Open source molecular modeling.” *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, vol. 69 (2016), pp. 127-143.
- [23] Guho, “Parentheses within chemfig are shifted in height.” URL: <https://tex.stackexchange.com/questions/288128/parentheses-within-chemfig-are-shifted-in-height>, Jan. 18, 2016.
- [24] cmhughes, T. Bombadil, “Draw arc in tikz when center of circle is specified.” URL: <https://tex.stackexchange.com/questions/66216/draw-arc-in-tikz-when-center-of-circle-is-specified>, Aug. 21, 2012.

**Σημείωση:** Οι διαδικτυακοί σύνδεσμοι ὄλων τῶν ἀναφορῶν ἀνακτήθηκαν και ἐπιβεβαιώθηκαν στις 20 Ὀκτωβρίου 2017.