

Il bundle chemmacros

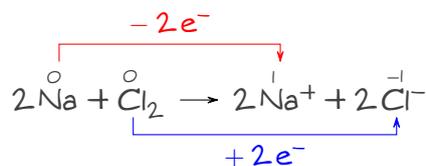
v3.3c 2012/05/18

I pacchetti `chemmacros`, `chemformula` e `ghsystem`

Clemens NIEDERBERGER

<https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/>
contact@mychemistry.eu

documentazione in italiano



| | | |
|--|---|-----------|
| Indice | II. chemmacros | 9 |
| | 8. Particelle, ioni e simboli | 9 |
| 1. Prima di cominciare | 8.1. Predefiniti | 9 |
| | 8.2. Definire particelle proprie . . . | 11 |
| 1. Licenza, requisiti e LEGGIMI | 9. Nomenclatura, stereodescrittori e termini in latino | 11 |
| 2. Motivazioni e ragioni | 9.1. Nomi IUPAC | 11 |
| 3. Installazione e caricamento del bundle | 9.1.1. Comandi predefiniti . . | 12 |
| | 9.1.2. Comandi di nomenclatura propri | 15 |
| 4. Opzioni globali | 9.2. Termini in latino | 16 |
| 5. Setup | 10. Unità di misura per l'impiego con siunitx | 17 |
| 6. Impostazioni di lingua | 11. Acidi/basi | 17 |
| 6.1. Lingue supportate | 12. Numeri di ossidazione, cariche reali e formali | 18 |
| 6.2. Particolarità | 12.1. Cariche ioniche | 18 |
| 6.2.1. Tedesco | 12.2. Numeri di ossidazione | 19 |
| 6.2.2. Italiano | 12.3. Cariche parziali e simili | 20 |
| 7. Novità | 13. Meccanismi di reazione | 21 |
| 7.1. Versione 3.3 | | |
| 7.2. Version 3.3a | | |

| | | | |
|---|-----------|---|-----------|
| 14. Reazioni redox | 22 | 25.4. Cariche ed altri apici | 47 |
| 15. Stati (standard), termodinamica | 25 | 25.5. Legami | 48 |
| 15.1. Grandezze termodinamiche . . . | 25 | 25.6. Personalizzazione | 48 |
| 15.1.1. Definizione di nuove grandezze | 26 | 26. Tipi speciali di input | 50 |
| 15.1.2. Ridefinire grandezze . . | 26 | 26.1. Token a input singolo | 50 |
| 15.2. Grandezze di stato | 27 | 26.2. Input di opzioni | 51 |
| 16. Spettroscopia e valori sperimentali | 27 | 27. Input protetto | 51 |
| 16.1. Il comando \NMR | 27 | 27.1. Testo | 51 |
| 16.2. Abbreviazioni | 28 | 27.2. Matematica | 52 |
| 16.3. Un ambiente per elencare valori sperimentali | 28 | 28. Freccce | 52 |
| 16.4. Personalizzazione | 29 | 28.1. Tipi di frecce | 52 |
| 16.5. Esempio di applicazione | 30 | 28.2. Etichettazione | 53 |
| 16.5.1. Quasi standard | 31 | 28.3. Adattamento | 54 |
| 16.5.2. Lista formattata | 31 | 28.4. Adattare i tipi di frecce | 55 |
| 16.5.3. Buffo | 32 | 29. Didascalie di formule | 56 |
| 17. Comandi per mhchem | 33 | 29.1. Sintassi | 56 |
| 18. Ambienti di reazione | 33 | 29.2. Personalizzazione | 56 |
| 18.1. Definiti da CHEMMACROS | 33 | 30. Formato e carattere | 57 |
| 18.2. Reazioni proprie | 35 | 31. Utilizzo in ambienti matematici | 59 |
| 18.3. Lista delle reazioni | 36 | 32. Ulteriori esempi | 59 |
| 19. Fasi | 37 | IV. ghsystem | 61 |
| 19.1. Basi | 37 | 33. Setup | 61 |
| 19.2. Definire fasi proprie | 38 | 34. Richiamare le frasi di rischio (H) e sicurezza (P) | 62 |
| 20. Proiezioni di Newman | 39 | 34.1. Chiamata semplice | 62 |
| 21. Orbitali s, p e ibridi | 40 | 34.2. Frasi con segnaposto | 62 |
| III. chemformula | 42 | 34.3. Frasi con buchi | 63 |
| 22. Impostazioni | 42 | 34.4. Frasi combinate | 64 |
| 23. Principio di base | 42 | 35. Pittogrammi | 64 |
| 24. Fattori stechiometrici | 44 | 35.1. Le immagini | 64 |
| 25. Formule brute | 45 | 35.2. Il tipo dell'immagine dipende dall'engine | 67 |
| 25.1. Addotti | 45 | 36. Lingue disponibili | 67 |
| 25.2. Pedici | 46 | 37. Lista delle frasi | 68 |
| 25.3. Comandi | 46 | | |

| | | | |
|---|-----------|-------------------------------------|-----------|
| V. Appendice | 77 | Suggerimenti e avvisi di bug | 80 |
| | | Bibliografia | 81 |
| Panoramica delle opzioni e modalità di adattamento | 77 | Indice analitico | 82 |

Parte I.

Prima di cominciare

1. Licenza, requisiti e LEGGIMI

Il bundle `CHEMMACROS` è pubblicato sotto la \LaTeX Project Public License (LPPL) versione 1.3 o successive (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>) ed ha lo stato «maintained».

Il bundle `CHEMMACROS` richiede versioni attuali dei bundle `l3kernel`¹ e `l3packages`.² Inoltre sono richiesti i pacchetti `siunitx`,³ `mathtools`,⁴ `bm`,⁵ `nicefrac`⁶ ed `environ`⁷ come anche `tikz`⁸ e le sue librerie `calc` e `arrows`.

L'opzione globale del pacchetto (d'ora in poi indicata come «opzione globale») `bpchem` (paragrafo 4) richiede `bpchem`,⁹ l'opzione globale `xspace` richiede `xspace`¹⁰ e l'opzione globale `method = mhchem` richiede `mhchem`.¹¹

Dalla v3.0 il pacchetto `CHEMMACROS` è stato riunito con i nuovi pacchetti `CHEMFORMULA` e `GHSYSTEM`. `CHEMFORMULA` è un'alternativa a `mhchem`. Questo ha portato ad alcuni cambiamenti interni a `CHEMMACROS`. Contemporaneamente è stato completamente rielaborato questo manuale.

Forse l'utente ricorderà che le opzioni di `CHEMMACROS` appartengono tutte a moduli diversi (per ulteriori informazioni a riguardo vedi il paragrafo 5). Queste vengono poste nel margine sinistro quando l'opzione viene citata per la prima volta. Il paragrafo V elenca tutte le opzioni di `CHEMMACROS` e i rispettivi moduli. In questo documento le opzioni sono contrassegnate dal colore verde e i moduli dal colore rosso.

Il pacchetto `GHSYSTEM` richiede i pacchetti `CHEMMACROS`, `tabu`,¹² `longtable`,¹³ `ifpdf`¹⁴ e `graphicx`.¹⁵

Il pacchetto riconosce alcuni comandi e opzioni obsolete, che non vengono più descritti in questo manuale; sono ancora definiti per garantire la compatibilità con documenti meno recenti. Questi comandi restituiscono un avviso; in futuro potrebbero non essere più definiti.

2. Motivazioni e ragioni

`CHEMMACROS` nacque qualche anno fa come una lista di macro che usavo frequentemente. Non mi ricordo più il momento e le ragioni che mi spinsero a pubblicarle come pacchetto. Ora lo avete davanti a voi – spero che riusciate a trarne qualche beneficio.

¹ CTAN: `l3kernel` ² CTAN: `l3packages` ³ CTAN: `siunitx` ⁴ CTAN: `mathtools` ⁵ CTAN: `bm` ⁶ CTAN: `nicefrac`
⁷ CTAN: `environ` ⁸ CTAN: `pgf` ⁹ CTAN: `bpchem` ¹⁰ CTAN: `xspace` ¹¹ CTAN: `mhchem` ¹² CTAN: `tabu`
¹³ CTAN: `longtable` ¹⁴ CTAN: `ifpdf` ¹⁵ CTAN: `graphicx`

Nel corso del tempo le macro ed il loro funzionamento sono leggermente variati, e se ne sono aggiunte di nuove. Al passare del tempo molte cose si sono unificate, introducendo sempre più possibilità di apportare personalizzazioni.

Ogni chimico che usi \LaTeX per la compilazione dei propri documenti conoscerà il meraviglioso pacchetto mhchem di Martin Hensel. Fin dall'inizio vi sono state delle difficoltà a fare cooperare mhchem e CHEMMACROS. Alcune particolarità di mhchem non mi hanno mai convinto completamente, ma non sembravano essere sufficienti per un nuovo pacchetto, nemmeno per inviare un «feature request» all'autore di mhchem. La sfida e il divertimento nel creare un pacchetto nuovo, nonché il desiderio di raggiungere una flessibilità massima hanno infine portato a CHEMFORMULA.

CHEMFORMULA funziona in modo analogo a mhchem, ma è più severo per quanto riguarda l'input dei composti, dei fattori stechiometrici e delle frecce di reazione. Contemporaneamente CHEMFORMULA offre qualche possibilità di adattare l'output che mhchem non ha. Dato che CHEMFORMULA nasce come alternativa a mhchem, CHEMMACROS offre un'opzione per selezionare uno tra mhchem e CHEMFORMULA.

Il lettore di formazione chimica probabilmente sarà a conoscenza che le NAZIONI UNITE hanno introdotto il «Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals» (GHS) come sostituto di validità globale per i numerosi sistemi dei diversi paesi, simili ma non unitari. Nonostante non sia ancora stato adottato da tutti i paesi [Eur12], questo avverrà ben presto. Il pacchetto GHSYSTEM offre la possibilità di introdurre e richiamare in modo semplice tutti gli «hazard and precautionary statements». Le frasi sono tratte dal regolamento (?) CE 1272/2008 [The08].

Con questo bundle spero di essere riuscito a realizzare i seguenti quattro punti:

- un utilizzo intuitivo, soprattutto per quanto riguarda la sintassi dei comandi
- i comandi non vogliono semplificare solo la stesura ma anche la lettura del codice, migliorandone la semantica e rendendola più logica (`\ortho-diclorobenzene` è più leggibile e più comprensibile di `\textsl{o}-diclorobenzene`)
- introdurre più flessibilità possibile e più possibilità di adattamento, in modo che ogni utente possa adattare i comandi alle proprie necessità.
- impostazioni predefinite conformi alle norme e le indicazioni IUPAC

L'ultimo punto in particolare ha richiesto qualche incitamento da parte degli utenti¹⁶ per applicare le impostazioni giuste in numerosi punti. Se l'utente dovesse notare qualcosa che non corrisponde ai consigli IUPAC,¹⁷ sarei molto grato di una notifica via e-mail!

In un pacchetto di questa mole comprendente parti meno e più recenti (che debbono essere considerate ancora in fase beta) non è possibile evitare la presenza di errori o bug. Ho grande interesse a correggere e migliorare questo pacchetto, e quindi prego gli utenti che notino un funzionamento imprevisto o indesiderato (anche se apparentemente insignificante) di mandarmi un'e-mail, e vedrò di fare quel che posso. Sono particolarmente interessato a feedback riguardante CHEMFORMULA (vedi parte III) e GHSYSTEM (vedi parte IV), ma sono felice di ricevere feedback anche su qualunque altra parte del bundle.

¹⁶ Ringrazio particolarmente il Dr. Paul King! ¹⁷ Questo non vale per il comando `\ox`. La versione IUPAC è `\ox*`.

3. Installazione e caricamento del bundle

Il bundle contiene tre fogli di stile,¹⁸ una cartella di nome `language/` che contiene i file di definizione di lingua per il GHS (estensione `def`), e una cartella di nome `pictures/` che contiene immagini di tipo `eps`, `jpg` e `png` (i pittogrammi GHS). Nel caso di un'installazione manuale è *necessario copiare le cartelle `language/` e `pictures/` nella stessa cartella dei fogli di stile.*

Il caricamento di `CHEMMACROS` via

```
1 \usepackage{chemmacros} % 'chemmacros', 'chemformula' and 'ghsystem' are
   loaded
```

carica anche `CHEMFORMULA` e `GHSYSTEM`. È tuttavia possibile impedire a `CHEMMACROS` di caricare `GHSYSTEM`:

```
1 \usepackage[ghsystem=false]{chemmacros} % 'chemmacros' and 'chemformula' are
   loaded
```

Il caricamento di `CHEMFORMULA` non può essere evitato a causa dell'interazione di `CHEMMACROS` e `CHEMFORMULA`.

Il caricamento esplicito di `CHEMFORMULA` o `GHSYSTEM` è possibile e carica contemporaneamente anche `CHEMMACROS`, se non ancora caricato; implicitamente quindi si caricano a vicenda.

```
1 \usepackage{chemformula} % 'chemmacros', 'chemformula' and 'ghsystem' are
   loaded
2 or
3 \usepackage[ghsystem=false]{chemformula} % 'chemmacros' and 'chemformula'
   are loaded
```

Si consiglia tuttavia di utilizzare solamente `\usepackage{chemmacros}` e di applicare le opzioni desiderate con `\chemsetup` (confronta il paragrafo 5).

4. Opzioni globali

`CHEMMACROS` ha diverse opzioni; queste seguono tutte un principio del tipo chiave/valore:

```
1 \usepackage[option1 = <value1>, option2 = <value2>]{chemmacros}
```

La maggior parte può essere utilizzata anche senza specificare un valore (`\usepackage[option]{chemmacros}`); in questo caso richiamano il valore sottolineato.

Sia `CHEMFORMULA` che `GHSYSTEM` non hanno opzioni proprie; se caricati esplicitamente, accettano le opzioni di `CHEMMACROS`, che vengono passate a `CHEMMACROS`.

option ► `bpchem = true/false` → Questa opzione carica `bpchem` e adatta il layout di `\NMR` ai comandi propri

¹⁸ Con l'estensione `sty`.

di `bpchem \HNMR` e `\CNMR`. Default = false

- option** ▶ `circled` = `formal/all/none` → `CHEMMACROS` distingue due tipi di cariche:¹⁹ le cariche reali (+/−) e quelle formali (\oplus/\ominus). L'opzione `formal` fa distinzione tra i due tipi, `none` le rappresenta tutte senza cerchio, `all` tutte cerchiato. Default = `formal`
- option** ▶ `circletype` = `chem/math` → Questa opzione varia tra due rappresentazioni per le cariche formali: `\fplus` \oplus e `\oplus` \oplus . Default = `chem`
- option** ▶ `cmversion` = `1/2/bundle` → Questa opzione ripristina le definizioni di alcuni comandi, in modo da compilare correttamente documenti composti utilizzando v1.*. Default = `bundle`. In realtà `2` e `bundle` sono equivalenti. Questa opzione può essere impostata solamente nel preambolo.
- option** ▶ `ghsystem` = `true/false` → Disattiva il pacchetto `GHSYSTEM`. L'impostazione `ghs = false` sopprime il caricamento di `GHSYSTEM`. Default = `true`
- option** ▶ `greek` = `math/textgreek/upgreek` → Questa opzione determina come vengono rappresentate le lettere `\Chemalpha` e le sue simili, vedi a pagina 10 per ulteriori informazioni. Questa opzione può essere impostata solo nel preambolo. Default = `upgreek`
- option** ▶ `iupac` = `auto/restricted/strict` → Determina le impostazioni dei comandi di nomenclatura, vedi a pagina 12. Default = `auto`
- option** ▶ `language` = `american/british/english/french/german/italian/ngerman` → Carica impostazioni specifiche per una lingua. `english`, `american` e `british` sono equivalenti, come `german` e `ngerman`. Questa opzione può essere impostata solo nel preambolo. Default = `english`
- option** ▶ `method` = `chemformula/mhchem` → È possibile scegliere tra `mhchem` e `CHEMFORMULA` per gli ambienti di reazione di `CHEMMACROS` (vedi il paragrafo 18) e per le particelle (vedi il paragrafo 8). Default = `chemformula`. Questa opzione può essere impostata solo nel preambolo.
- option** ▶ `Nu` = `chemmacros/mathspec` → Anche il pacchetto `mathspec`²⁰ definisce una macro `\Nu`. Questa opzione decide quale definizione verrà applicata, vedi a pagina 9. Default = `chemmacros`. Questa opzione può essere impostata solo nel preambolo.
- option** ▶ `strict` = `true/false` → L'impostazione `strict = true` trasforma tutti gli avvisi in messaggi di errore. Default = `false`
- option** ▶ `synchronize` = `true/false` → Impostando `true`, `CHEMMACROS` adotta le impostazioni di carattere di `CHEMFORMULA`, se `CHEMFORMULA` è stato scelto come metodo. Default = `false`. Per dimostrare il funzionamento di questa opzione, il documento è stato compilato con `synchronize = true` e l'impostazione di `CHEMFORMULA \chemsetup[chemformula]{font-spec={[[Color=darkgray]Latin Modern Sans}}`.
- option** ▶ `xspace` = `true/false` → Con questa opzione la maggior parte delle macro comprende un `\xspace`. Default = `true`

¹⁹ Ringrazio Christoph Schäfer per avermi fatto notare che la v1.1 trattava le cariche in modo poco coerente! ²⁰ CTAN: `mathspec`

5. Setup

Numerosi comandi di **CHEMMACROS**, **CHEMFORMULA** e **GHSYSTEM** hanno come opzioni delle copie del tipo chiave/valore attraverso le quali possono essere adattate. Tipicamente possono essere utilizzate come argomento (opzionale) del comando, e in genere anche con il comando `\chemsetup`.

- ▶ `\chemsetup[<module>]{<key> = <value>}` oppure
- ▶ `\chemsetup{<module>/<key> = <value>}`

Le opzioni appartengono tutte ad un modulo, che indica quale comando vanno ad influenzare. Quando viene presentata un'opzione, il suo modulo di appartenenza viene segnato nel margine sinistro. Con il comando `\chemsetup` è possibile utilizzare le opzioni in due modalità diverse, come mostrato sopra.

Le opzioni globali possono essere considerate anche come opzioni appartenenti al modulo **option**. Possono essere quindi richiamate anche da `\chemsetup`.

```
1 \chemsetup[option]{circled=none}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \\  
2 \chemsetup[option]{circled=formal}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \\  
3 \chemsetup[option]{circletype=math}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \\  
4 \chemsetup{option/circletype=chem,option/circled=all}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \  
   el\ \prt \\  
5 \chemsetup{option/circletype=math}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt
```

- + - + e⁻ p⁺
- + ⊖ ⊕ e⁻ p⁺
- + ⊕ ⊖ e⁻ p⁺
⊖ ⊕ ⊖ ⊕ e[⊖] p[⊕]
⊕ ⊖ ⊕ ⊖ e[⊖] p[⊕]

Le opzioni che non appartengono a *nessun* modulo *non possono essere utilizzate* con `\chemsetup`!

Tutte le opzioni di **CHEMFORMULA** appartengono al modulo **chemformula**, e tutte le opzioni di **GHSYSTEM** appartengono al modulo **ghs**.

6. Impostazioni di lingua

6.1. Lingue supportate

Selezionando l'opzione

```
1 \chemsetup[option]{language=<language>}
```

può essere selezionata una delle lingue seguenti: *american/british/english/french/german/italian/ngerman*. Le lingue *american/british/english* sono alias, come anche le lingue *german/ngerman*.

Vengono tradotti

- Il titolo della lista delle reazioni.

- Le voci della lista delle reazioni.
- Le frasi H e P.

Attenzione: le frasi GHS non sono disponibili in tutte le lingue; vedi anche nel paragrafo 36.

6.2. Particolarità

6.2.1. Tedesco

Selezionando come lingua `german/ngerman` vengono tradotti i comandi di fase `\sld`, `\lqd` nonché `\pKa`.

6.2.2. Italiano

Selezionando come lingua `italian` vengono definiti ulteriori comandi IUPAC:

- ▶ `\ter` → *ter*
- ▶ `\sin` → *sin*

7. Novità

7.1. Versione 3.3

- Dalla versione 3.3 è disponibile l'ambiente `\begin{experimental} \end{experimental}`, vedi il paragrafo 16, che può essere impiegato con alcuni nuovi comandi e opzioni per riportare dati sperimentali in modo consistente.
- L'ambiente `\begin{reaction} \end{reaction}` e i suoi simili sanno utilizzare `\label`, `\ref` e `\intertext`, vedi il paragrafo 18.
- Le opzioni globali `german` e `ngerman` vengono sostituite dall'opzione `language`, vedi la pagina 6 e il paragrafo 6 da pagina 7.
- L'opzione `upgreek` è stata rinominata a `greek`.
- Ai comandi del tipo `\Chem<greekletter>` sono state aggiunte alcune lettere, vedi il paragrafo 8.

7.2. Version 3.3a

- I comandi IUPAC `\hapto` e `\bridge` sono nuovi.
- Le frasi H e P sono ora disponibili anche in italiano.

Parte II.

chemmacros

8. Particelle, ioni e simboli

8.1. Predefiniti

`CHEMMACROS` definisce alcune semplici macro per raffigurare particelle e simboli comuni. Si noti che questi possono essere rappresentati in modo diverso a seconda delle opzioni globali utilizzate. I comandi possono essere utilizzati anche in modalità matematica.

- ▶ `\Hp1` → H^+ (protone)
- ▶ `\Hyd` → OH^- (idrossido)
- ▶ `\HtO` → H_3O^+ (ione ossonio) (H three O)
- ▶ `\water` → H_2O
- ▶ `\e1` → e^- (elettrone)
- ▶ `\prt` → p^+ (proton)
- ▶ `\ntr` → n^0 (neutrone)
- ▶ `\Nu` → Nu^- (nucleofilo). Anche il pacchetto `mathspec` definisce una macro di nome `\Nu`. Selezionando l'opzione globale `Nu = mathspec`, `CHEMMACROS` definisce una macro sostitutiva `\Nuc`.
- ▶ `\E1` → E^+ (elettrofilo)
- ▶ `\ba` → ba^- (base)
- ▶ `\fplus` → \oplus
- ▶ `\fminus` → \ominus
- ▶ `\transitionstatesymbol` → \ddagger
- ▶ `\standardstate` → \ominus . Questo simbolo viene reso da `CHEMMACROS` solamente se non è caricato il pacchetto `chemstyle`.²¹ L'idea proviene proprio da questo pacchetto.²²
- ▶ `\Chemalpha` → α
- ▶ `\Chembeta` → β
- ▶ `\Chemgamma` → γ
- ▶ `\Chemdelta` → δ
- ▶ `\Chemepsilon` → ϵ

²¹ CTAN: `chemstyle` ²² Molte grazie al suo autore Joseph Wright.

- ▶ `\Chemeta` → η
- ▶ `\Chemkappa` → κ
- ▶ `\Chemmu` → μ
- ▶ `\Chemnu` → ν
- ▶ `\Chemrho` → ρ
- ▶ `\Chempi` → π
- ▶ `\Chemsigma` → σ
- ▶ `\Chemomega` → ω
- ▶ `\ChemDelta` → Δ

Il comando `\Rad` non è più disponibile!

Entrambe le particelle `\Nu` e `\ba` possono essere adattate. Per farlo si impiega l'opzione

`particle` ▶ `elpair = false/dots/dash`

Questa ha effetto solo quando è caricato il pacchetto `chemfig`,²³ da cui prende il comando `\Lewis`.

```

1 % needs package 'chemfig'
2 \ba[elpair] \Nu[elpair=dash]          ba:~ Nu|~
3                                     ba:~ Nu:~
4 \chemsetup[particle]{elpair}
5 \ba \Nu

```

Le lettere greche non sono comandi nuovi; la loro definizione dipende dai pacchetti caricati. La loro versione predefinita corrisponde alle lettere greche corsive proprie del modo matematico. Se è caricato il pacchetto `textgreek`,²⁴ vengono utilizzate le sue lettere; se è caricato il pacchetto `upgreek`,²⁵ vengono utilizzate le lettere di quest'ultimo. Questo manuale impiega `upgreek`. Quando sono caricati entrambi `textgreek` e `upgreek`, viene impiegato automaticamente `upgreek`.

Nel caso in cui l'utente non voglia adattarsi alla selezione automatica di `CHEMMACROS`, per scegliere autonomamente va impiegata l'opzione globale `greek`. Tabella 1 mostra le diverse varianti di alcune lettere.

Tabella 1: Le lettere greche

| | math | upgreek | textgreek |
|-------------------------|----------|----------|-----------|
| <code>\Chemalpha</code> | α | α | α |
| <code>\Chembeta</code> | β | β | β |
| <code>\ChemDelta</code> | Δ | Δ | Δ |

La ragione per cui `CHEMMACROS` definisce queste macro è per conformarsi alle regole IUPAC. IUPAC consiglia di utilizzare lettere greche tonde nella nomenclatura.

²³ CTAN: `chemfig` ²⁴ CTAN: `textgreek` ²⁵ CTAN: `upgreek`

Greek letters are used in systematic organic, inorganic, macromolecular and biochemical nomenclature. These should be roman (upright), since they are not symbols for physical quantities.

IUPAC Green Book [Coh+08, p. 9]

CHEMMACROS impiega questi comandi per definire comandi di nomenclatura, vedi anche a pagina 12.

8.2. Definire particelle proprie

Talvolta può essere utile avere a disposizione particelle ulteriori come macro, ad esempio `\positron` oppure `\photon`. È possibile svolgere agevolmente queste definizioni con questo comando:

- ▶ `\DeclareChemParticle{<cmd>}{<definition>}`
- ▶ `\RenewChemParticle{<cmd>}{<definition>}`

A seconda del `method` scelto come opzione, la `<definition>` viene svolta alternativamente con `mhchem` o con `CHEMFORMULA`. La particella si comporta come quelle predefinite, tranne che per un'eccezione: la particella così definita obbedisce all'opzione `circled` solamente se è stato selezionato `method = chemformula`. Se si desiderano cariche formali con `method = mhchem`, è necessario richiamare i comandi di CHEMMACROS in modo esplicito (vedi il paragrafo 12).

```
1 % uses the 'upgreek' package
2 \DeclareChemParticle{\positron}{${\upbeta}^{+}}
3 \DeclareChemParticle{\photon}{${\upgamma}}
4 \RenewChemParticle{\e1}{${\upbeta}^{-}}
5 \positron\ \photon\ \e1
```

`\DeclareChemParticle` definisce la particella solamente se `<cmd>` non esiste ancora. In caso diverso CHEMMACROS restituisce un avvertimento oppure un errore, dipendentemente dall'opzione `strict`. `\RenewChemParticle` definisce una particella *solamente*, se `<cmd>` è già esistente, e restituisce un avvertimento o un errore in caso contrario.

9. Nomenclatura, stereodescrittori e termini in latino

9.1. Nomi IUPAC

Analogamente al pacchetto `bpchem` anche CHEMMACROS mette a disposizione un comando²⁶ per inserire nomi IUPAC. La sua utilità deriva da un motivo molto semplice: i nomi IUPAC possono diventare particolarmente lunghi, così lunghi da riempire anche più di due righe, particolarmente all'interno di documenti in due colonne. Ciò significa che devono poter essere divisi più di una volta. Per metterlo in pratica si utilizza il seguente comando:

- ▶ `\iupac{<IUPAC name>}` → All'interno di questo comando vengono impiegati `\|` e `\-` per segnare punti di divisione oppure un trattino separatore. `\^` può essere utilizzato come abbreviazione per `\textsuperscript`.²⁷

²⁶ L'idea e la realizzazione provengono dal pacchetto `bpchem` di Bjørn Pedersen. ²⁷ In realtà viene impiegato un meccanismo diverso, anche se il risultato è praticamente lo stesso.

```

1 \begin{minipage}{.4\linewidth}
2 \iupac{Tetra\|ciclo[2.2.2.1^{1,4}]\-un\|decano-2\|-dodecil\|-5\|-(epta\|decil\|
  iso\|dodecil\|tio\|estere)}
3 \end{minipage}

```

Tetraciclo[2.2.2.1^{1,4}]-undecano-2-do-
decil-5-(eptadecilisododeciltioestere)

Nonostante ciò, il comando `\iupac` è più che altro un comando semantico. Nella maggior parte dei casi si può raggiungere un risultato (quasi) identico utilizzando `\-` anziché `\|`, `-` anziché `\-` e `\textsuperscript` anziché `\^`.

Esistono delle sottili differenze: `\-` inserisce un sottile spazio prima del trattino e rimuove un sottile spazio dopo. Il comando `\|` non evita solo le legature, bensì inserisce anche un sottile spazio.

```

1 \huge\iupac{2,4-di\|cloro\|pentano} \|
2 2,4-dicloropentano

```

2,4-dicloropentano
2,4-dicloropentano

Gli spazi inseriti possono essere adattati:

`iupac` ► `hyphen-pre-space` = <dim> → default = .01em

`iupac` ► `hyphen-post-space` = <dim> → default = -.03em

`iupac` ► `break-space` = <dim> → default = .01em

Il comando `\iupac` serve anche ad un altro scopo. Indipendentemente dall'opzione globale `iupac` tutti i comandi presentati in questo paragrafo sono sempre definiti *all'interno* di `\iupac`. Tutta una serie di comandi di nomenclatura ha nomi molto generici come `\meta`, `\D`, `\E`, `\L`, `\R`, `\S`, `\trans` e così via. Ne segue che sono già predefiniti (`\L L`) oppure sono facilmente modificati da altri pacchetti o altre classi (ad esempio, il pacchetto `cool`²⁸ definisce sia `\D` che `\E`). Per potere controllare quali comandi sono definiti e come, esiste l'opzione globale `iupac`, con tre modalità di utilizzo:

- `iupac` = `auto`: se il comando *non è definito* all'interno di un pacchetto o una classe in uso, è disponibile generalmente, altrimenti solo *all'interno* di `\iupac`.
- `iupac` = `restricted`: tutti i comandi di nomenclatura sono definiti *solo* internamente a `\iupac`. Sono disponibili esternamente solo se definiti da un'altro pacchetto.
- `iupac` = `strict`: `CHEMMACROS` sovrascrive ogni definizione preesistente e rende disponibili i comandi in tutto il documento. Possono essere ridefiniti (solo dopo a `\begin{document}`). Mantengono il significato di nomenclatura all'interno di `\iupac`.

Nella tabella [Tabella 2](#) è dimostrato il funzionamento delle diverse modalità.

9.1.1. Comandi predefiniti

Caratteri greci Le lettere greche all'interno dei nomi di composti sono in carattere tondo. Per realizzarlo sono impiegati i pacchetti `upgreek` e `textgreek`. Quando viene caricato uno dei due, sono scritti in tondo i seguenti caratteri:

²⁸ CTAN: `cool`

Tabella 2: Esempio dimostrativo del funzionamento delle diverse modalità di `iupac`.

| | auto | restricted | strict |
|-------------------------|------|------------|--------|
| <code>\L</code> | Ł | Ł | L |
| <code>\iupac{\L}</code> | L | L | L |
| <code>\D</code> | D | – | D |
| <code>\iupac{\D}</code> | D | D | D |

- ▶ `\a` → α
- ▶ `\b` → β
- ▶ `\g` → γ
- ▶ `\d` → δ
- ▶ `\k` → κ
- ▶ `\m` → μ
- ▶ `\n` → η
- ▶ `\w` → ω

```

1 \iupac{5\a\androstano-3\b\olo} \
2 \iupac{\a-(tri\cloro\metil)\w-cloro\poli(1,4-fenilene\metilene)}

```

5 α -androstano-3 β -olo
 α -(triclorometil)- ω -cloropoli(1,4-fenilenemetilene)

Eteroatomi e idrogeno aggiunto I legami ad eteroatomi e gli idrogeni aggiunti sono rappresentati da caratteri corsivi [Coh+08]. `CHEMMACROS` definisce alcune abbreviazioni:

- ▶ `\H` → *H*
- ▶ `\O` → *O*
- ▶ `\N` → *N*
- ▶ `\Sf` → *S*
- ▶ `\P` → *P*

| | | |
|---|---|-------------------------------|
| 1 | <code>\iupac{\N\methyl\benz\amide}</code> | <i>N</i> -methylbenzamide |
| 2 | <code>\iupac{3\H\pyrrole}</code> | <i>3H</i> -pyrrole |
| 3 | <code>\iupac{\O\ethyl hexanethioate}</code> | <i>O</i> -ethyl hexanethioate |

Cahn-Ingold-Prelog

- ▶ `\cip{<conf>}` → z. B.: `\cip{R,S}` (*R,S*)
- ▶ `\R` → (*R*)
- ▶ `\S` → (*S*)

Dato che il comando `\S` ha già un altro significato (§) come impostazione di default è disponibile solo all'interno di `\iupac`.

Fischer

- ▶ `\D` → *D*
- ▶ `\L` → *L*

Dato che il comando `\L` ha già un altro significato (Ł) come impostazione di default è disponibile solo all'interno di `\iupac`.

cis/trans, zusammen/entgegen, sin/anti & tert

- ▶ `\cis` → *cis*
- ▶ `\trans` → *trans*
- ▶ `\Z` → (*Z*)
- ▶ `\E` → (*E*)
- ▶ `\syn` → *syn*
- ▶ `\anti` → *anti*
- ▶ `\tert` → *tert*

Anche il pacchetto `cool` definisce i comandi `\E` e `\D`. Quando viene caricato, la versione di `CHEM-MACROS` come impostazione predefinita è disponibile solo all'interno di `\iupac`.

orto/meta/para

- ▶ `\ortho` → *o*
- ▶ `\meta` → *m*
- ▶ `\para` → *p*

Configurazione assoluta (utilizza TikZ)

- ▶ `\Rconf[<letter>]` → `\Rconf:`  `\Rconf[]:` 
- ▶ `\Sconf[<letter>]` → `\Sconf:`  `\Sconf[]:` 

Esempi:

```

1 \iupac{acido \D\tartar\|ico} =
2 \iupac{acido \cip{2S,3S}\-tartar\|ico} \\\
3 \iupac{\D-(-)\-treosio} =
4 \iupac{\cip{2S,3R}\-(-)\-2,3,4-Tri\|idrossi\|butanale} \\\
5 \iupac{\cis\2\butene} =
6 \iupac{\Z\2\butene}, \\\
7 \iupac{\cip{2E,4Z}\-esa\|diene} \\\
8 \iupac{\meta\Xilene} =
9 \iupac{1,3\di\metil\|benzene}

```

acido D-tartarico = acido (2S,3S)-tartarico
D-(–)-treosio = (2S,3R)-(–)-2,3,4-Triidrossibutanale
cis-2-butene = (Z)-2-butene,
(2E,4Z)-esadiene
m-xilene = 1,3-dimetilbenzene

Chimica di coordinazione CHEMMACROS mette a disposizione due comandi che possono essere utili in chimica di coordinazione:

- ▶ `\bridge{<num>}` → μ_3 -
- ▶ `\hapto{<num>}` → η^5 -

```

1 Ferrocene = \iupac{bis(\hapto{5}cyclo\|penta\|dienyl)iron} \\\
2 \iupac{tetra\-\bridge{3}iodido\-\tetrakis[tri\|methyl\|platinum(IV)]}

```

Ferrocene = bis(η^5 -cyclopentadienyl)iron
tetra- μ_3 -iodido-tetrakis[trimethylplatinum(IV)]

Sono disponibili due opzioni per l'adattamento:

- `iupac` ▶ `bridge-number` = sub/super → appende il numero come apice o pedice. IUPAC consiglia l'uso del pedice [Con+05]. Default = sub
- `iupac` ▶ `coord-use-hyphen` = true/false → appende un trattino a `\hapto` e `\bridge` quando true. Default = true

9.1.2. Comandi di nomenclatura propri

Se l'utente avesse bisogno di nuovi comandi è possibile definirli nel modo seguente:

- ▶ `\DeclareChemIUPAC{<cmd>}{<declaration>}`
- ▶ `\RenewChemIUPAC{<cmd>}{<declaration>}`

Un comando definito in questa maniera obbedisce all'opzione `iupac`. Eventuali comandi preesistenti vengono sostituiti solamente se è attiva l'opzione globale `iupac = strict`. `\DeclareChemIUPAC` non sostituisce una definizione di un comando di nomenclatura preesistente, bensì restituisce un'avvertimento o un errore (in base all'opzione globale `strict`).

10. Unità di misura per l'impiego con siunitx

In chimica sono largamente impiegate alcune unità non-SI. Il pacchetto siunitx mette a disposizione il comando `\DeclareSIUnit{<command>}{<unit>}` per definire unità arbitrarie. CHEMMACROS impiega questo comando per definire le unità elencate in seguito. Come tutte le unità di misura di siunitx, anche queste unità aggiuntive sono valide solamente all'interno di `\SI{<num>}{<unit>}` e `\si{<unit>}`.

- ▶ `\atmosphere` → atm
- ▶ `\atm` → atm
- ▶ `\calory` → cal
- ▶ `\cal` → cal
- ▶ `\cmc` → cm³ Le unità `\cmc`, `\molar` e `\Molar` sono definite anche dal pacchetto chemstyle. CHEMMACROS le definisce solo nel caso in cui chemstyle non sia stato caricato.
- ▶ `\molar` → mol dm⁻³
- ▶ `\moLar` → mol L⁻¹
- ▶ `\Molar` → M
- ▶ `\MolMass` → g mol⁻¹
- ▶ `\normal` → N
- ▶ `\torr` → torr

Nota bene: `\mmHg` mmHg è messo a disposizione da siunitx e chemstyle.

11. Acidi/basi

È possibile una semplice rappresentazione di pH, pK_A ... (il comando `\pKa` dipende dall'opzione globale `language`).

- ▶ `\pH` → pH
- ▶ `\pOH` → pOH
- ▶ `\Ka` → K_A
- ▶ `\Kb` → K_B
- ▶ `\Kw` → K_W
- ▶ `\pKa[<num>]` → `\pKa`: pK_A, `\pKa[1]`: pK_{A1}
- ▶ `\pKb[<num>]` → `\pKb`: pK_B, `\pKb[1]`: pK_{B1}
- ▶ `\p{<anything>}` → z. B.: `\p{\Kw}` pK_W

```
1 \Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]
```

$K_A K_B pK_A pK_{A1} pK_B pK_{B1}$

L'aspetto predefinito dei comandi di tipo p è stato modificato per accogliere l'indicazione IUPAC.

The operator p [...] shall be printed in Roman type.

IUPAC Green Book [Coh+08, p. 103]

Esiste un'opzione che varia lo stile di rappresentazione di p:

`acid-base` ► `p-style` = italics/slanted/upright → Default = upright

```
1 \pH, \pKa
2
3 \chemsetup[acid-base]{p-style=slanted} \pH, \pKa
4
5 \chemsetup[acid-base]{p-style=italics} \pH, \pKa
```

pH, pK_A
pH, pK_A
pH, pK_A

12. Numeri di ossidazione, cariche reali e formali

`CHEMMACROS` distingue tra simboli di cariche reali (+/−) e formali (⊕/⊖), vedi anche il paragrafo 4. Tutti i comandi che restituiscono cariche formali iniziano con la lettera f.

12.1. Cariche ioniche

Impiego facile di cariche (reali):

- `\pch[<number>]` → carica positiva (plus + charge)
- `\mch[<number>]` → carica negativa (minus + charge)

```
1 \pch, Na\pch, Ca\pch[2]\
2 \mch, F\mch, S\mch[2]
```

$+, Na^+, Ca^{2+}$
 $-, F^-, S^{2-}$

Altrettanto vale per le cariche formali:

- `\fpch[<number>]` → carica positiva
- `\fmch[<number>]` → carica negativa

```
1 \fpch\ \fmch\ \fpch[3] \fmch[3]
```

$\oplus \ominus 3\oplus 3\ominus$

Esiste un'opzione che influenza il comportamento delle cariche:

charges ► **append** = true/false → Quando è impostata a true, la carica viene appesa ad un gruppo vuoto.
Default = false

Questo ha le conseguenze seguenti:

```
1 % uses package 'mhchem'
2 \chemsetup{charges/append=false, phases/pos=sub}
3 \ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}
4
5 \chemsetup[charges]{append=true}
6 \ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}
```

$\text{H}_{(\text{aq})}^+ \text{H}_{(\text{aq})}^+$
 $\text{H}_{(\text{aq})}^+ \text{H}_{(\text{aq})}^+$

Nella maggior parte dei casi questo comportamento può essere indesiderato, anche se esistono occasioni dove può tornare utile:

```
1 \chemsetup{charges/append=false, phases/pos=sub}
2 \ce{\ox{1,H}\pch\aq}
3
4 \chemsetup[charges]{append=true}
5 \ce{\ox{1,H}\pch\aq}
```

$\overset{+}{\text{H}}_{(\text{aq})}$
 $\overset{+}{\text{H}}_{(\text{aq})}$

12.2. Numeri di ossidazione

Inserimento di numeri di ossidazione:

► **\ox**[<options>]{<number>, <atom>} → inserisce <number> al di sopra di <atom>; <number> deve essere un numero (razionale)!

```
1 \ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ox{-1,F} \overset{I}{Na}, \overset{II}{Ca}, \overset{-II}{S}, \overset{-I}{F}
```

Esiste una serie di opzioni con le quali è possibile adattare **\ox**.

ox ► **parse** = true/false → Quando vale false, può essere inserito un valore qualunque per <number>.
Default = true

ox ► **roman** = true/false → seleziona l'impiego di numeri romani o arabi. Default = true

ox ► **pos** = top/super/side →; top pone <number> al di sopra di <atom>, super come apice alla destra e side a destra tra parentesi. Default = top

ox ► **explicit-sign** = true/false → restituisce + per numeri positivi e ± per 0 aus. Default = false

ox ► **decimal-marker** = comma/point → Scegliere il tipo di segno decimale per i numeri di ossidazione $X^{1.2}$.
Default = point

| | | |
|---|---|---|
| 1 | <code>\ox[roman=false]{2,Ca} \ox{2,Ca} \\ </code> | $\overset{2}{\text{Ca}} \overset{\text{II}}{\text{Ca}}$ |
| 2 | <code>\ox[pos=super]{3,Fe}-Oxid \\ </code> | $\text{Fe}^{\text{III}}\text{-Oxid}$ |
| 3 | <code>\ox[pos=side]{3,Fe}-Oxid \\ </code> | $\text{Fe}(\text{III})\text{-Oxid}$ |
| 4 | <code>\ox[parse=false]{?,Mn}</code> | $\overset{?}{\text{Mn}}$ |

La variante **pos** = super può essere selezionata anche tramite l'abbreviazione `\ox*`:

| | | |
|---|-----------------------------------|--|
| 1 | <code>\ox{3,Fe} \ox*{3,Fe}</code> | $\overset{\text{III}}{\text{Fe}} \text{Fe}^{\text{III}}$ |
|---|-----------------------------------|--|

Impiegando **explicit-sign** viene sempre mostrato il segno del numero di ossidazione:

| | | |
|---|--|--|
| 1 | <code>\chemsetup[ox]{explicit-sign = true}</code> | |
| 2 | <code>\ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ch{"\ox{0,F}" {}}{2}</code> | |
| | | $\overset{+1}{\text{Na}}, \overset{+2}{\text{Ca}}, \overset{-2}{\text{S}}, \overset{-1}{\text{F}_2}$ |

| | |
|---|--|
| 1 | Si confronti ad esempio <code>\ox{-1,\ch{O2^2-}}</code> con <code>\ch{"\ox{-1,O}" {}}{2^2-}</code> |
|---|--|

Si confronti ad esempio $\overset{-1}{\text{O}_2^{2-}}$ con $\overset{-1}{\text{O}_2^{2-}}$

Talvolta è necessario impiegare numeri d'ossidazione formali come 0.5 oppure $\frac{1}{3}$:

| | | |
|---|--|--|
| 1 | <code>\ox{.5,\ch{Br2}} \ch{"\ox{1/3,I}" {}}{3+}</code> | $\overset{0.5}{\text{Br}_2} \overset{\frac{1}{3}}{\text{I}_3^+}$ |
|---|--|--|

La frazione impiega il comando `\sfrac` del pacchetto `xfrac`.²⁹ A questo proposito è definita l'istanza `chemmacros-ox-frac`.

| | |
|---|--|
| 1 | <code>\DeclareInstance{xfrac}{chemmacros-ox-frac}{text}</code> |
| 2 | <code>{</code> |
| 3 | <code> scale-factor = 1.2 ,</code> |
| 4 | <code> denominator-bot-sep = -.5ex ,</code> |
| 5 | <code> numerator-top-sep = -.3ex ,</code> |
| 6 | <code> slash-left-kern = -.2em ,</code> |
| 7 | <code> slash-right-kern = -.2em ,</code> |
| 8 | <code> slash-symbol-font = lmr</code> |
| 9 | <code>}</code> |

Naturalmente può essere ridefinita a seconda dei propri gusti.

12.3. Cariche parziali e simili

Sono poco usati, ma possono risultare utili:

²⁹ CTAN: `xfrac`

- ▶ `\delp` → δ_+ (delta + plus)
- ▶ `\delm` → δ_- (delta + minus)
- ▶ `\fdelp` → δ_{\oplus}
- ▶ `\fdelm` → δ_{\ominus}

Un esempio con il comando `\ox` oppure con il pacchetto `chemfig`:

```

1 \chemsetup{
2   option/circled = all,
3   ox/parse      = false
4 }
5 \ce{\ox{\delp,H}-\ox{\delm,Cl}} \hspace*{1cm}
6 \chemfig{\chemabove[3pt]{\lewis{246,Br}}{\delm}-\chemabove[3pt]{H}{\delp}}

```

$$\overset{\delta_{\oplus}}{\text{H}} - \overset{\delta_{\ominus}}{\text{Cl}} \qquad \overset{\delta_{\ominus}}{\text{Br}} - \overset{\delta_{\oplus}}{\text{H}}$$

Anche queste macro possono essere utilizzate con `chemfig`.

- ▶ `\scrip` → + (scriptstyle + plus)
- ▶ `\scrm` → - (scriptstyle + minus)
- ▶ `\fscrip` → \oplus
- ▶ `\fscrm` → \ominus
- ▶ `\fsscrip` → \oplus (impiega `\scriptscriptstyle`)
- ▶ `\fsscrm` → \ominus

```

1 \setatomsep{1.8em}\chemfig{CH_3-\chemabove{C}{\scrip}(-[6]C|H_3)-\vphantom{H_3}CH
   _3}
2
3 \chemfig{\fmch{}}|O-\chemabove{N}{\fscrip}(-[1]O|\fmch)-[7]O|\fmch}

```

$$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \overset{+}{\text{C}} - \text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3 \\ \ominus \text{O} - \overset{\oplus}{\text{N}} \begin{array}{l} / \text{O}^{\ominus} \\ \backslash \text{O}^{\ominus} \end{array} \end{array}$$

13. Meccanismi di reazione

Con il comando

- ▶ `\mech[<type>]`

è possibile specificare i meccanismi di reazione più diffusi. <type> può assumere uno dei valori seguenti:

- ▶ `\mech` → (vuoto, nessun argomento opzionale) sostituzione nucleofila S_N
- ▶ `\mech[1]` → sostituzione nucleofila unimolecolare S_{N1}
- ▶ `\mech[2]` → sostituzione nucleofila bimolecolare S_{N2}
- ▶ `\mech[se]` → sostituzione elettrofila S_E
- ▶ `\mech[1e]` → sostituzione elettrofila unimolecolare S_{E1}
- ▶ `\mech[2e]` → sostituzione elettrofila bimolecolare S_{E2}
- ▶ `\mech[ar]` → sostituzione elettrofila aromatica $Ar-S_E$
- ▶ `\mech[e]` → eliminazione E
- ▶ `\mech[e1]` → eliminazione unimolecolare E1
- ▶ `\mech[e2]` → eliminazione bimolecolare E2
- ▶ `\mech[cb]` → eliminazione unimolecolare «conjugated base», cioè via carbanione $E1_{cb}$

14. Reazioni redox

`CHEMMACROS` mette a disposizione due comandi, con i quali può essere mostrato il trasferimento di elettroni nelle reazioni redox.³⁰ Entrambi i comandi utilizzano `TikZ`.

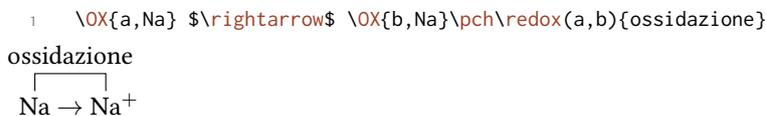
- ▶ `\OX{<name>, <atom>}`
- ▶ `\redox(<name1>, <name2>)[<tikz>][<num>]{<text>}` → È necessario solamente il primo argomento (<name1>, <name2>); gli altri due sono opzionali.

`\OX` pone <atom> in un nodo (un «Node») dal nome <name>. Una volta impiegati due `\OX`, questi possono essere collegati tramite `\redox`. I nomi dei nodi da collegare vanno posti tra parentesi tonde. Dato che `\redox` crea una `Tikzpicture` con le opzioni `remember picture`, `overlay`, il documento deve essere compilato *almeno due volte*.

```

1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b){ossidazione}

```



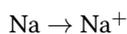
Questa linea può essere adattata con chiavi `TikZ` in [`<tikz>`]:

```

1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}

```

³⁰ Ringrazio [Peter Cao](#), che ha proposto questa funzione.

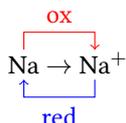


Con l'argomento [`<num>`] può essere adattata la lunghezza delle linee verticali. L'impostazione predefinita vale `.6em`. Questa lunghezza viene moltiplicata per `<num>`. Un valore negativo pone la linea *sotto* il testo.

```

1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch
2 \redox(a,b)[->,red]{ox}
3 \redox(a,b)[<-,blue][-1]{red}
4 \vspace{7mm}

```



Con la chiave

`redox ▶ dist = <dim> → Default = .6em`

è possibile aggiustare il valore predefinito delle linee verticali:

```

1 \chemsetup{redox/dist=1em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}

```



Inoltre l'opzione

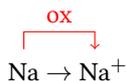
`redox ▶ sep = <dim> → Default = .2em`

permette di variare la distanza tra atomo e inizio della linea.

```

1 \chemsetup{redox/sep=.5em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}

```

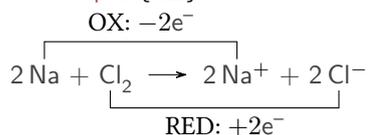


Esempi:

```

1 \ch{ 2 "\OX{o1,Na}" + "\OX{r1,Cl}" }{2} -> 2 "\OX{o2,Na}" \pch{} + 2
2 "\OX{r2,Cl}" \mch {}
3 \redox(o1,o2){\small OX: $- 2\el$}
4 \redox(r1,r2)[-1]{\small RED: $+ 2\el$}
5 \vspace{7mm}

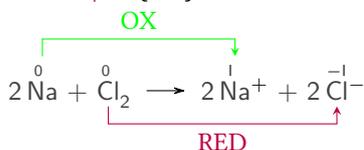
```




```

1 \ch{ 2 "\OX{o1,\ox{0,Na}}" + "\OX{r1,\ox{0,Cl}}" {2} -> 2 "\OX{o2,\ox{+1,Na}}"
2 \pch{} + 2 "\OX{r2,\ox{-1,Cl}}" \mch }
3 \redox(o1,o2)[green,-stealth]{\small OX}
4 \redox(r1,r2)[purple,-stealth][-1]{\small RED}
5 \vspace{7mm}

```



15. Stati (standard), termodinamica

15.1. Grandezze termodinamiche

I comandi seguenti impiegano siunitx:

- ▶ `\Enthalpy[<options>](<subscript>){<value>}`
- ▶ `\Entropy[<options>](<subscript>){<value>}`
- ▶ `\Gibbs[<options>](<subscript>){<value>}`

Il loro utilizzo si spiega da sé:

| | | |
|---|---------------------------------|---|
| 1 | <code>\Enthalpy{123} \\\</code> | $\Delta H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$ |
| 2 | <code>\Entropy{123} \\\</code> | $S^\ominus = 123 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ |
| 3 | <code>\Gibbs{123}</code> | $\Delta G^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$ |

L'argomento (<subscript>) inserisce un pedice descrittivo: `\Enthalpy(r){123}` $\Delta_r H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Questi comandi possono essere adattati tramite diverse opzioni:

- none- ▶ `exponent = <anything>`
- none- ▶ `delta = <anything>/false`
- none- ▶ `subscript = left/right`
- none- ▶ `unit = <unit>`

Il valore predefinito dipende dal relativo comando:

| | | |
|---|---|---|
| 1 | <code>\Enthalpy[unit=\kilo\joule]{-285} \\\</code> | $\Delta H^\ominus = -285 \text{ kJ}$ |
| 2 | <code>\Gibbs[delta=false]{0} \\\</code> | $G^\ominus = 0 \text{ kJ mol}^{-1}$ |
| 3 | <code>\Entropy[delta=\Delta,exponent=]{56.7}</code> | $\Delta S = 56.7 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ |

Numero e unità vengono composti secondo le regole di siunitx, e dipendono dalle sue impostazioni:

```

1 \Enthalpy{-1234.56e3} \\
2 \sisetup{per-mode=symbol,exponent-product=\cdot,output-decimal-marker={,},group-
  four-digits=true}
3 \Enthalpy{-1234.56e3}

```

$$\Delta H^\ominus = -1234.56 \times 10^3 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta H^\ominus = -1\,234,56 \cdot 10^3 \text{ kJ/mol}$$

15.1.1. Definizione di nuove grandezze

Con il comando

► `\DeclareChemState[<options>]{<name>}{<symbol>}{<unit>}`

è possibile definire nuove grandezze.

```

1 \DeclareChemState{Helmholtz}{A}{\kilojoule\per\mole}
2 \DeclareChemState[subscript-left=false,exponent=]{ElPot}{E}{\volt}
3 \Helmholtz{123.4} \\
4 \ElPot{-1.1} \\
5 \ElPot[exponent=0]{$\ch{Sn}|\ch{Sn^2+}||\ch{Pb^2+}|\ch{Pb}$}{0.01}

```

$$\Delta A^\ominus = 123.4 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta E = -1.1 \text{ V}$$

$$\Delta E_{\text{Sn}|\text{Sn}^{2+}||\text{Pb}^{2+}|\text{Pb}}^0 = 0.01 \text{ V}$$

Questo comando ha opzioni quasi identiche a quelle delle grandezze stesse, con le quali possono essere variate le impostazioni predefinite delle nuove grandezze.

► `exponent = <anything>`

► `delta = <anything>/false`

~~►~~ `subscript-left = true/false`

► `subscript = <anything>`

15.1.2. Ridefinire grandezze

Con

► `\RenewChemState[<options>]{<name>}{<symbol>}{<unit>}`

è possibile ridefinire grandezze preesistenti:

```

1 \RenewChemState{Enthalpy}{h}{\joule}
2 \Enthalpy(f){12.5}

```

$$\Delta_f h^\ominus = 12.5 \text{ J}$$

Il comando è analogo a `\DeclareChemState`, cioè ha le stesse opzioni.

Sarebbe quindi possibile – seguendo le convenzioni termodinamiche – definire una grandezza molare ed una assoluta:

```

1 \DeclareChemState[exponent=]{enthalpy}{h}{\kilo\joule\per\mole}% molar
2 \RenewChemState[exponent=]{Enthalpy}{H}{\kilo\joule}% absolute
3 \enthalpy{-12.3} \Enthalpy{-12.3}

```

$$\Delta h = -12.3 \text{ kJ mol}^{-1} \quad \Delta H = -12.3 \text{ kJ}$$

15.2. Grandezze di stato

I comandi presentati nel paragrafo 15.1 internamente impiegano il comando³¹

► `\State[<options>]{<symbol>}{<subscript>}`

Questi può essere utilizzato per scrivere le grandezze senza valore e unità.

Esempi:

```

1 \State{A}, \State{G}{f}, \State[subscript-left=false]{E}{\ch{Na}}, \State[
  exponent=\SI{1000}{\celsius}]{H}

```

$$\Delta A^\ominus, \Delta_f G^\ominus, \Delta E_{\text{Na}}^\ominus, \Delta H^{1000\text{ }^\circ\text{C}}$$

Nuovamente ha opzioni (quasi) identiche:

`state` ► `exponent` = <anything>

`state` ► `subscript-left` = true/false

`state` ► `delta` = <anything>/false

16. Spettroscopia e valori sperimentali

16.1. Il comando `\NMR`

Quando delle sostanze vengono analizzate per verificare se sono quello che si è previsto, spesso viene impiegata la spettroscopia NMR. I valori sperimentali sono riportati all'incirca così:

$$^1\text{H-NMR (400 MHz, CDCl}_3\text{): } \delta = 1.59$$

`CHEMMACROS` mette a disposizione un comando che semplifica questa stesura (impiega `siunitx`).

► `\NMR{<num>, <elem>}{<num>, <unit>}[<solvent>]`

► `\NMR*{<num>, <elem>}{<num>, <unit>}[<solvent>]`

Tutti gli argomenti sono opzionali! Senza argomenti³² si ottiene:

³¹ Si faccia attenzione che `{<subscript>}` è un argomento *opzionale*. ³² Tutti gli argomenti possono essere combinati a piacimento. Il comando può essere impiegato anche in modo matematico.

| | | |
|---|---------------------|---------------------------|
| 1 | <code>\NMR \</code> | $^1\text{H-NMR: } \delta$ |
| 2 | <code>\NMR*</code> | $^1\text{H-NMR}$ |

Il primo argomento specifica il tipo di analisi NMR eseguito:

| | | |
|---|-------------------------|------------------------------|
| 1 | <code>\NMR{13,C}</code> | $^{13}\text{C-NMR: } \delta$ |
|---|-------------------------|------------------------------|

Con il secondo argomento viene riportata la frequenza utilizzata (in MHz):

| | | |
|---|------------------------|-------------------------------------|
| 1 | <code>\NMR(400)</code> | $^1\text{H-NMR (400 MHz): } \delta$ |
|---|------------------------|-------------------------------------|

Anche munita della sua unità:

| | | |
|---|-------------------------------|--|
| 1 | <code>\NMR(4e8,\hertz)</code> | $^1\text{H-NMR (4} \times 10^8 \text{ Hz): } \delta$ |
|---|-------------------------------|--|

Nota bene: le impostazioni del pacchetto siunitx hanno effetto anche su questo comando:

| | |
|---|---|
| 1 | <code>\sisetup{exponent-product=\cdot}\NMR(4e8,\hertz)</code> |
|---|---|

$^1\text{H-NMR (4} \cdot 10^8 \text{ Hz): } \delta$

Con il terzo argomento può essere indicato il solvente:

| | | |
|---|--------------------------|---|
| 1 | <code>\NMR[CDCl3]</code> | $^1\text{H-NMR (CDCl}_3\text{): } \delta$ |
|---|--------------------------|---|

16.2. Abbreviazioni

Dato che all'interno di un singolo documento alcuni nuclei possono essere necessari più di una volta, **CHEMMACROS** offre una possibilità di definire delle abbreviazioni.

- ▶ `\DeclareChemNMR{<csname>}{<num>,<atom>}`
- ▶ `\RenewChemNMR{<csname>}{<num>,<atom>}`

Questo definisce un comando con gli stessi argomenti di `\NMR` *eccetto* `{<num>,<atom>}`.

| | | |
|---|--|-------------------------------|
| 1 | <code>\DeclareChemNMR\HNMR{1,H}%</code> | |
| 2 | <code>\DeclareChemNMR\CNMR{13,C}%</code> | $^{13}\text{C-NMR (100 MHz)}$ |
| 3 | <code>\CNMR*(100) \</code> | $^1\text{H-NMR (400 MHz)}$ |
| 4 | <code>\HNMR*(400)</code> | |

16.3. Un ambiente per elencare valori sperimentali

Per facilitare l'elenco di valori sperimentali, **CHEMMACROS** offre un ambiente dedicato.

- ▶ `\begin{experimental} Dati \end{experimental}` → Ambiente per la stesura di dati sperimentali. All'interno di questo ambiente sono definiti i comandi seguenti.

- ▶ `\data{<tipo>}[<specifiche>]` → Tipo dei dati, p.es. IR, MS... Nell'argomento opzionale possono essere inserite specifiche ulteriori che vengono stampate in parentesi tonde.
- ▶ `\data*{<tipo>}[<specifiche>]` → Come `\data`, ma restituisce : anziché =, se è impostato `use-equal = false`.
- ▶ `\J[<unit>]{<list of nums>}` → Costante di accoppiamento; i valori sono inseriti separati da ;. Per NMR.
- ▶ `\#{<num>}` → Numero di nuclei. Per NMR.
- ▶ `\pos{<num>}` → Posizione/numero del nucleo. Per NMR.
- ▶ `\val{<num>}` → Valore numerico, un alias per `\num{<num>}` di siunitx
- ▶ `\val{<num1>--<num2>}` → Un alias per `\numrange{<num1>}{<num2>}` di siunitx

| | | |
|---|---|--|
| 1 | <code>\begin{experimental}</code> | |
| 2 | <code>\data{tipo1} dati.</code> | tipo1 dati. tipo2 (specifiche) altri dati. tipo3 ulteriori dati. |
| 3 | <code>\data{tipo2}[specifiche] altri dati.</code> | |
| 4 | <code>\data*{tipo3} ulteriori dati.</code> | |
| 5 | <code>\end{experimental}</code> | |

16.4. Personalizzazione

L'output dell'ambiente e dei comandi NMR può essere adattato con una serie di opzioni. Per ragioni storiche appartengono al modulo `nmr`.

- `nmr` ▶ `unit = <unit>` → Default = `\mega\hertz`
- `nmr` ▶ `nucleus = {<num>, <atom>}` → Default = {1, H}
- `nmr` ▶ `format = <commands>` → ad esempio `\bfseries`
- `nmr` ▶ `pos-number = side/sub` → posizione del numero vicino all'atomo. Default = side
- `nmr` ▶ `coupling-unit = <unit>` → Un'unità di siunitx. Default = `\hertz`
- `nmr` ▶ `parse = true/false` → Trattare il solvente come formula di mhchem/CHEMFORMULA o meno. Default = true
- `nmr` ▶ `delta = <token>` → I `<token>` vengono inseriti dopo δ .
- `nmr` ▶ `list = true/false` → L'ambiente `\begin{nmr}[<optionen>] \end{nmr}` viene formattato come lista. Default = false
- `nmr` ▶ `list-setup = <setup>` → Setup della lista. Default = vedi in basso.
- `nmr` ▶ `use-equal = true/false` → Inserire segno di uguale dopo `\NMR` e `\data`. Default = false

Il setup di default della lista:

```

1 \topsep\z@skip \partopsep\z@skip
2 \itemsep\z@ \parsep\z@ \itemindent\z@
3 \leftmargin\z@

```

```

1 \begin{experimental}[format=\bfseries]
2 \data{tipo1} dati.
3 \data{tipo2}[specifiche] altri dati.
4 \data*{tipo3} ulteriori dati.
5 \end{experimental}

```

tipo1 dati. tipo2 (specifiche) altri dati. tipo3
ulteriori dati.

Il comando `\NMR` e tutti i comandi definiti con `\DeclareChemNMR` possono essere impiegati al posto di `\data` per dati NMR.

```

1 \begin{experimental}[format=\bfseries,use-equal]
2 \data{tipo1} dati.
3 \data{tipo2}[specifiche] altri dati.
4 \NMR ulteriori dati.
5 \end{experimental}

```

tipo1 = dati. tipo2 (specifiche) = altri dati. ¹H-NMR: δ = ulteriori dati.

16.5. Esempio di applicazione

Il codice seguente è riportato in diverse versioni a seconda della selezione delle <opzioni>. Ovviamente le opzioni possono essere impostate anche globalmente con `\chemsetup`.

```

1 \sisetup{separate-uncertainty,per-mode=symbol,detect-all,range-phrase=--}
2 \begin{experimental}[<opzioni>]
3 \data*{Resa} \SI{17}{\milli\gram} aghi gialli (\SI{0.04}{\milli\mole}, \SI
4 {13}{\percent}).
5 %
6 \data{Smp.} \SI{277}{\celsius} (DSC).
7 %
8 \NMR(600)[CDC13] \val{2.01} (s, \#{24}, \pos{5}), \val{2.31} (s, \#{12}, \pos
9 {1}), \val{6.72--6.74} (m, \#{2}, \pos{11}), \val{6.82} (s, \#{8}, \pos{3}), \
10 \val{7.05--7.07} (m, \#{2}, \pos{12}), \val{7.39--7.41} (m, \#{4}, \pos{9}), \
\val{7.48--7.49} (m, \#{4}, \pos{8}).
11 %
12 \NMR{13,C}(150)[CDC13] \val{21.2} ($+$, \#{4}, \pos{1}), \val{23.4} ($+$,
13 \#{8}, \pos{5}), \val{126.0} ($+$, \#{4}, \pos{9}), \val{128.2} ($+$, \#{8}, \
14 \pos{3}), \val{130.8} ($+$, \#{2}, \pos{12}), \val{133.6} ($+$, \#{2}, \pos
15 {11}), \val{137.0} ($+$, \#{4}, \pos{8}), \val{138.6} (q, \#{4}, \pos{2}), \
16 \val{140.6} (q, \#{2}, \pos{10}), \val{140.8} (q, \#{8}, \pos{4}), \val{141.8}
17 (q, \#{4}, \pos{6}), \val{145.6} (q, \#{2}, \pos{7}).
18 %
19
20 %

```

```

11 \data{MS}[DCP, EI, \SI{60}{\electronvolt}] \val{703} (2, \ch{M+}), \val{582}
    (1), \val{462} (1), \val{249} (13), \val{120} (41), \val{105} (100).
12 %
13 \data{MS}[\ch{MeOH + H2O + KI}, ESI, \SI{10}{\electronvolt}] \val{720} (100, \
    ch{M+ + OH-}), \val{368} (\ch{M+ + 2 OH-}).
14 %
15 \data{IR}[KBr] \val{3443} (w), \val{3061} (w), \val{2957} (m), \val{2918} (m),
    \val{2856} (w), \val{2729} (w), \val{1725} (w), \val{1606} (s), \val{1592} (s)
    , \val{1545} (w), \val{1446} (m), \val{1421} (m), \val{1402} (m), \val{1357} (
    w), \val{1278} (w), \val{1238} (s), \val{1214} (s), \val{1172} (s), \val{1154}
    (m), \val{1101} (w), \val{1030} (w), \val{979} (m), \val{874} (m), \val{846}
    (s), \val{818} (w), \val{798} (m), \val{744} (w), \val{724} (m), \val{663} (w)
    , \val{586} (w), \val{562} (w), \val{515} (w).
16 %
17 \data*{UV-Vis} \SI{386}{\nano\metre} (\varepsilon = \val{65984}), \SI{406}{\
    nano\metre} (\varepsilon = \val{65378}).
18 %
19 \data*{Resa quantica} $\Phi = \val{0.74+-0.1}$\,.
20 \end{experimental}

```

16.5.1. Quasi standard

Output per <opzioni>: delta=(ppm),pos-number=sub,use-equal:

Resa: 17 mg aghi gialli (0.04 mmol, 13 %). Smp. = 277 °C (DSC). ¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 2.01 (s, 24H, H₅), 2.31 (s, 12H, H₁), 6.72–6.74 (m, 2H, H₁₁), 6.82 (s, 8H, H₃), 7.05–7.07 (m, 2H, H₁₂), 7.39–7.41 (m, 4H, H₉), 7.48–7.49 (m, 4H, H₈). ¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 21.2 (+, 4C, C₁), 23.4 (+, 8C, C₅), 126.0 (+, 4C, C₉), 128.2 (+, 8C, C₃), 130.8 (+, 2C, C₁₂), 133.6 (+, 2C, C₁₁), 137.0 (+, 4C, C₈), 138.6 (q, 4C, C₂), 140.6 (q, 2C, C₁₀), 140.8 (q, 8C, C₄), 141.8 (q, 4C, C₆), 145.6 (q, 2C, C₇). MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M⁺), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100). MS (MeOH + H₂O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M⁺ + OH⁻), 368 (M⁺ + 2 OH⁻). IR (KBr) = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m), 1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m), 1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w). UV-Vis: 386 nm (ε = 65 984), 406 nm (ε = 65 378). Resa quantica: Φ = 0.74 ± 0.10 .

16.5.2. Lista formattata

Output per <opzioni>: format=\bfseries,delta=(ppm),list=true,use-equal:

Resa: 17 mg aghi gialli (0.04 mmol, 13 %).

Smp. = 277 °C (DSC).

¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 2.01 (s, 24H, H-5), 2.31 (s, 12H, H-1), 6.72–6.74 (m, 2H, H-11), 6.82 (s, 8H, H-3), 7.05–7.07 (m, 2H, H-12), 7.39–7.41 (m, 4H, H-9), 7.48–7.49 (m, 4H, H-8).

¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 21.2 (+, 4C, C-1), 23.4 (+, 8C, C-5), 126.0 (+, 4C, C-9), 128.2 (+, 8C, C-3), 130.8 (+, 2C, C-12), 133.6 (+, 2C, C-11), 137.0 (+, 4C, C-8), 138.6 (q, 4C, C-2), 140.6 (q, 2C, C-10), 140.8 (q, 8C, C-4), 141.8 (q, 4C, C-6), 145.6 (q, 2C, C-7).

MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M⁺), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

MS (MeOH + H₂O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M⁺ + OH⁻), 368 (M⁺ + 2 OH⁻).

IR (KBr) = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m), 1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m), 1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w).

UV-Vis: 386 nm ($\epsilon = 65\,984$), 406 nm ($\epsilon = 65\,378$).

Resa quantica: $\Phi = 0.74 \pm 0.10$.

16.5.3. Buffo

Output per <opzioni>:

```
1 format=\color{red}\itshape,  
2 list=true,  
3 delta=\textcolor{green}{\ch{M+ + H2O}},  
4 pos-number=side,  
5 coupling-unit=\mega\gram\per\square\second,  
6 list-setup=,  
7 use-equal
```

Resa: 17 mg aghi gialli (0.04 mmol, 13 %).

Smp. = 277 °C (DSC).

¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ M⁺ + H₂O = 2.01 (s, 24 H, H-5), 2.31 (s, 12 H, H-1), 6.72–6.74 (m, 2 H, H-11), 6.82 (s, 8 H, H-3), 7.05–7.07 (m, 2 H, H-12), 7.39–7.41 (m, 4 H, H-9), 7.48–7.49 (m, 4 H, H-8).

¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): δ M⁺ + H₂O = 21.2 (+, 4 C, C-1), 23.4 (+, 8 C, C-5), 126.0 (+, 4 C, C-9), 128.2 (+, 8 C, C-3), 130.8 (+, 2 C, C-12), 133.6 (+, 2 C, C-11), 137.0 (+, 4 C, C-8), 138.6 (q, 4 C, C-2), 140.6 (q, 2 C, C-10), 140.8 (q, 8 C, C-4), 141.8 (q, 4 C, C-6), 145.6 (q, 2 C, C-7).

MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M⁺), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

MS (MeOH + H₂O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M⁺ + OH⁻), 368 (M⁺ + 2 OH⁻).

IR (KBr) = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m), 1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m), 1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w).

UV-Vis: 386 nm ($\epsilon = 65\,984$), 406 nm ($\epsilon = 65\,378$).

Resa quantica: $\Phi = 0.74 \pm 0.10$.

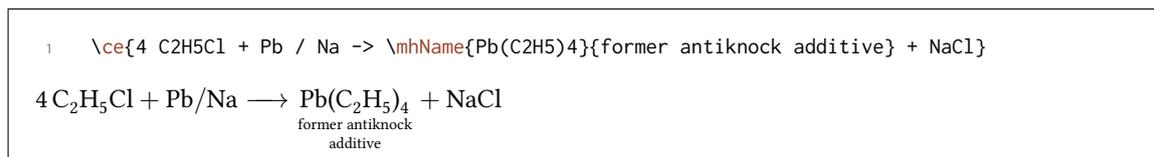
17. Comandi per mhchem

mhchem non viene più caricato automaticamente, bensì solamente utilizzando l'opzione `method = mhchem` nel preambolo. Per impostazione predefinita `CHEMMACROS` utilizza invece `CHEMFORMULA`.

`CHEMMACROS` mette a disposizione solo un unico comando speciale per mhchem.³³ Questo permette di inserire del testo al di sotto di una formula.

► `\mhName[<options>]{<formula>}{<text>}`

Per esempio:



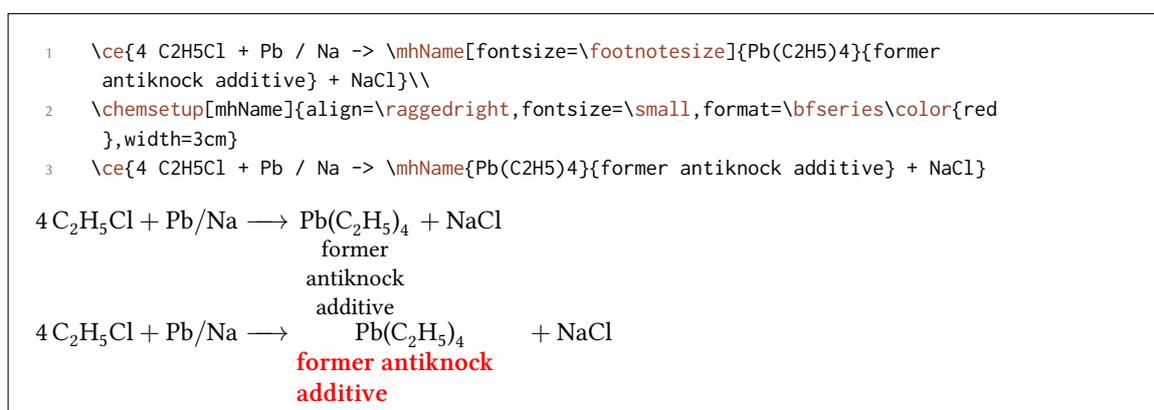
Con le opzioni seguenti può essere adattato `\mhName`:

`mhName` ► `align = <alignment command>` → L'orientamento del testo all'interno del box in cui viene scritto. Default = `\centering`

`mhName` ► `format = <anything>` → Il formato del testo.

`mhName` ► `fontsize = ` → La dimensione del testo. Default = `\tiny`

`mhName` ► `width = <dim>/auto` → La larghezza del box all'interno di cui viene scritto il testo. Default = auto



18. Ambienti di reazione

18.1. Definiti da CHEMMACROS

Sono disponibili i seguenti ambienti per reazioni numerate...

► `\begin{reaction} <formula or mhchem code> \end{reaction}`

³³ `CHEMFORMULA` ha una possibilità diversa per ottenere lo stesso risultato.

► `\begin{reactions} <formula or mhchem code> \end{reactions}`

...e le loro versioni asteriscate per reazioni non numerate.

► `\begin{reaction*} <formula or mhchem code> \end{reaction*}`

► `\begin{reactions*} <formula or mhchem code> \end{reactions*}`

In questo modo è possibile inserire reazioni (non) numerate in modo analogo alle equazioni matematiche.

Per rappresentare le reazioni gli ambienti `reaction/reaction*` internamente utilizzano ambienti `equation/equation*`, e gli ambienti `reactions/reactions*` utilizzano gli ambienti `align/align*`.

| | |
|--|--|
| <pre>1 reazione con contatore: 2 \begin{reaction} 3 A -> B 4 \end{reaction}</pre> | <pre>reazione con contatore: A → B {1}</pre> |
|--|--|

| | |
|--|--|
| <pre>1 reazione senza contatore: 2 \begin{reaction*} 3 C -> D 4 \end{reaction*}</pre> | <pre>reazione senza contatore: C → D</pre> |
|--|--|

| | |
|--|---|
| <pre>1 più reazioni allineate, con contatore: 2 \begin{reactions} 3 A &&-> B + C \\ 4 D + E &&-> F 5 \end{reactions}</pre> | <pre>più reazioni allineate, con contatore: A → B + C {2} D + E → F {3}</pre> |
|--|---|

| | |
|--|---|
| <pre>1 più reazioni allineate, senza contatore: 2 \begin{reactions*} 3 G &&-> H + I \\ 4 J + K &&-> L 5 \end{reactions*}</pre> | <pre>più reazioni allineate, senza contatore: G → H + I J + K → L</pre> |
|--|---|

Quando si desidera cambiare il formato dell'etichetta, è possibile usare

► `\renewtagform{<tagname>}[<format>]{<right delim>}{<left delim>}`.³⁴

| | |
|--|--|
| <pre>1 \renewtagform{reaction}[R \textbf]{[]{}]} 2 \begin{reaction} 3 H2O + CO2 <<=> H2CO3 4 \end{reaction}</pre> | <pre>H₂O + CO₂ ⇌ H₂CO₃ [R 4]</pre> |
|--|--|

Dalla versione 3.3 i riferimenti incrociati e l'`\intertext` di $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}$ math funzionano come ci si aspetta:

³⁴ Messo a disposizione dal pacchetto `mathtools`.

```

1 \begin{reactions}
2 A + 2 B &-> 3 C + D \label{rxn:test}
3 \intertext{Un po' di testo tra due reazioni allineate.}
4 3 E + F &\rightleftharpoons G + 1/2 H
5 \end{reactions}
6 Vedi reazione \ref{rxn:test}.

```



Un po' di testo tra due reazioni allineate.



Vedi reazione 5.

Nell'impostazione predefinita, cioè con `method = chemformula`, è sconsigliato utilizzare `\mch` e i comandi simili all'interno degli ambienti `reaction`. Nella maggior parte dei casi scombinano l'allineamento corretto. Nell'impostazione predefinita le cariche riconoscono automaticamente l'impostazione dell'opzione `circled` all'interno degli ambienti, in modo che i comandi non sono nemmeno necessari.

18.2. Reazioni proprie

Attraverso il comando

► `\DeclareChemReaction[<options>]{<name>}{<math name>}`

è possibile definire nuovi ambienti di reazione.

`<name>` sarà il nome del nuovo ambiente. `<math name>` è il tipo di ambiente matematico impiegato.

Il comando ha due opzioni.

-none- ► `star = true/false`

-none- ► `arg = true/false`

La prima opzione è `star`, che definisce anche la variante asteriscata, ammesso che esista l'equivalente ambiente matematico. In caso contrario restituirà un errore.

La seconda opzione è `arg`, che viene impiegata per definire un ambiente con un argomento obbligatorio. Anche in questo caso l'opzione è valida solamente se anche l'ambiente matematico corrispondente ha un argomento obbligatorio.

Gli ambienti predefiniti sono stati definiti attraverso

► `\DeclareChemReaction[star]{reaction}{equation}` und

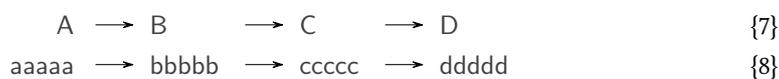
► `\DeclareChemReaction[star]{reactions}{align}`.

Ammettiamo che l'utente voglia definire un ambiente con il comportamento dell'ambiente `alignat` per reazioni di `CHEMFORMULA`-/mhchem. È possibile fare il seguente:

```
1 \DeclareChemReaction[star,arg]{reactionsat}{alignat}
```

In questo modo si è definito l'ambiente reactionsat.

```
1 \DeclareChemReaction[star,arg]{reactionsat}{alignat}
2 \begin{reactionsat}{3}
3 A &&-> B &&&&-> C &&&&-> D \\
4 aaaaa &-> bbbbb &&-> ccccc &&-> ddddd
5 \end{reactionsat}
6 \begin{reactionsat*}{2}
7 A &&-> B && C &&&&-> D \\
8 aaaaa &-> bbbbb &\quad{} & ccccc &-> ddddd
9 \end{reactionsat*}
```



18.3. Lista delle reazioni

CHEMMACROS mette a disposizione un comando per elencare le reazioni inserite attraverso ambienti di reazione.

► `\listofreactions`

```
1 \listofreactions
```

Elenco delle reazioni

| | |
|---|----|
| Reazione {1} | 34 |
| Reazione {2} | 34 |
| Reazione {3} | 34 |
| Reazione [R 4] | 34 |
| Reazione {5} | 35 |
| Reazione {6} | 35 |
| Reazione {7} | 36 |
| Reazione {8} | 36 |
| Reazione {9}: Autoprotolisi | 37 |
| Reazione {10}: first step of chain | 37 |
| Reazione {11}: second step of chain | 37 |
| Reazione {12}: Sintesi di alcani | 60 |

L'output può essere adattato con le opzioni seguenti:

reaction ▶ **list-name** = <name of the list> → Imposta il titolo della lista. Default = Reaktionsverzeichnis

reaction ▶ **list-entry** = <prefix to each entry> → Prefisso di ogni voce. Default = reazione

option Entrambi i valori predefiniti reagiscono all'opzione di lingua **german**.

Un'alternativa all'impostazione dell'opzione **list-name** è di ridefinire `\reactionlistname`.

Nell'elenco vengono elencate esclusivamente tutte le reazioni numerate. Tutte le reazioni non asteriscate hanno un argomento opzionale, attraverso il quale è possibile aggiungere una descrizione della reazione nell'elenco.

```
1 \begin{reaction}[Autoprotolisi]
2 2 H2O <=> H3O+ + OH-          2 H2O ⇌ H3O+ + OH- {9}
3 \end{reaction}
```

Questo non funzionerà quando viene impiegato l'ambiente `reactions`. In questo caso è possibile utilizzare

▶ `\AddRxnDesc{<description>}`

```
1 \begin{reactions}
2 Cl "\Lewis{0.,\vphantom{Cl}}" + CH4 &-> HCl + "\Lewis{4.,\vphantom{CH}}" CH3
  \AddRxnDesc{first~step~of~chain} \\
3 "\Lewis{4.,\vphantom{CH}}" CH3 + Cl2 &-> CH3Cl + Cl "\Lewis{0.,\vphantom{Cl}}"
  \AddRxnDesc{second~step~of~chain}
4 \end{reactions}
```

$$\text{Cl}\cdot + \text{CH}_4 \longrightarrow \text{HCl} + \cdot\text{CH}_3 \quad \{10\}$$
$$\cdot\text{CH}_3 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}\cdot \quad \{11\}$$

Nota: non è necessario impiegare i comandi «phantom», se il formato degli atomi non è stato variato, vedi il paragrafo 30 a pagina 57.

19. Fasi

19.1. Basi

Questi comandi sono pensati per indicare la fase di una sostanza.

▶ `\sld` → (s)

▶ `\lqd` → (l)

▶ `\gas` → (g)

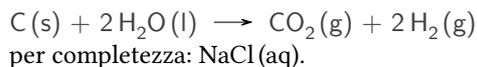
▶ `\aq` → (aq)

Il comportamento predefinito dei comandi di fase è variato per seguire le raccomandazioni IUPAC. Sia `\sld` che `\lqd` non hanno più nessun argomento opzionale.

```

1 \ch{C\sld{}} + 2 H2O\lqd{} -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{}\\
2 per completezza: NaCl\aq.

```



Con l'opzione `language = english` (vedi il paragrafo 4) si ottengono le versioni in inglese.

La raccomandazione IUPAC³⁵ per indicare uno stato di aggregazione è di porlo tra parentesi dopo la formula [Coh+08]. Tuttavia è molto diffusa l'indicazione in pedice.

The [...] symbols are used to represent the states of aggregation of chemical species. The letters are appended to the formula in parentheses and should be printed in Roman (upright) type without a full stop (period).

IUPAC Green Book [Coh+08, p. 54]

Vi sono due opzioni per adattare l'output:

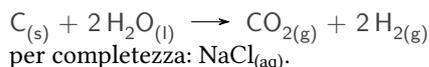
`phases` ► `pos = side/sub` → Cambia la posizione dell'indicatore di fase. Default = side

`phases` ► `space = <dim>` → Varia l'interspazio tra formula e indicatore di fase per `pos = side`. Una grandezza di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = .1333em

```

1 \chemsetup[phases]{pos=sub}
2 \ch{C\sld{}} + 2 H2O\lqd{} -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{}\\
3 per completezza: NaCl\aq.

```



19.2. Definire fasi proprie

Dipendentemente dall'argomento del documento può essere necessario indicare ulteriori stati di aggregazione; questi possono essere definiti convenientemente:

- `\DeclareChemPhase{<cmd>}[<german>]{<english>}`
- `\RenewChemPhase{<cmd>}[<german>]{<english>}`
- `\phase{<phase>}` → Quando è necessario impiegare la fase solo poche volte.

`\DeclareChemPhase` definisce la fase solamente se `<cmd>` non esiste ancora. Altrimenti `CHEMMA-CROS` dà un avvertimento o un errore, dipendentemente dall'opzione `strict`. `\RenewChemParticle` definisce una fase *solamente* se `<cmd>` esiste di già, e dà un avvertimento/un errore in caso opposto.

```

1 \DeclareChemPhase{\aqi}{aq,$\infty$}% aqueous solution at infinite dilution
2 \DeclareChemPhase{\cd}{cd}% condensed phase
3 \RenewChemPhase{\lqd}{lc}% liquid crystal
4 NaOH\aqi \ch{H2O\cd} U\phase{cr} A\lqd \\
5 \chemsetup[phases]{pos=sub}
6 NaOH\aqi \ch{H2O\cd} U\phase{cr} A\lqd

```

³⁵ Ringrazio Paul King del suggerimento.

```
NaOH(aq,∞) H2O(cd) U(cr) A(lc)
NaOH(aq,∞) H2O(cd) U(cr) A(lc)
```

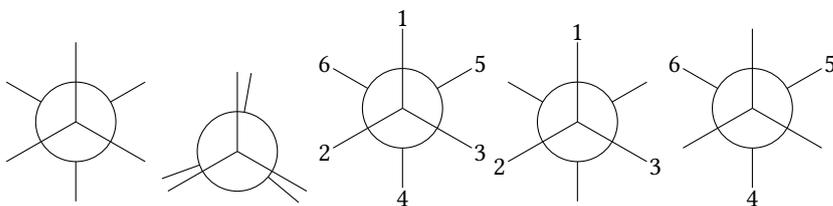
20. Proiezioni di Newman

CHEMMACROS mette a disposizione il comando

► `\newman[<options>](<angle>){<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}`

che permette di rappresentare proiezioni di Newman (impiega **TikZ**). L'argomento (<angle>) gira gli atomi posteriori in senso antiorario rispetto agli atomi anteriori.

```
1 \newman{} \newman(170){}
2 \newman{1,2,3,4,5,6} \newman{1,2,3} \newman{,,4,5,6}
```



Sono disponibili diverse opzioni per adattare il comando:

`newman` ► `angle` = <angle> → Angolo predefinito. Default = 0

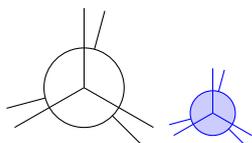
`newman` ► `scale` = <factor> → Scala l'intera proiezione. Default = 1

`newman` ► `ring` = <tikz> → Adatta l'aspetto dell'anello con chiavi di **TikZ**.

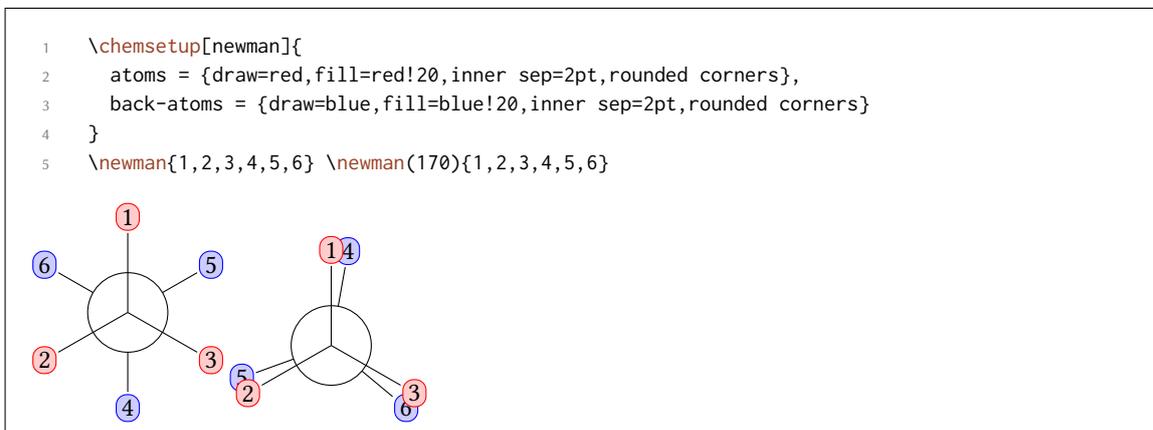
`newman` ► `atoms` = <tikz> → Adatta l'aspetto dei nodi contenenti gli atomi con chiavi di **TikZ**.

`newman` ► `back-atoms` = <tikz> → Adatta solo gli atomi posteriori.

```
1 \chemsetup[newman]{angle=45} \newman{}
2 \newman[scale=.75,ring={draw=blue,fill=blue!20}]{}
```



```
1 \chemsetup[newman]{atoms={draw=red,fill=red!20,inner sep=2pt,rounded corners}}
2 \newman{1,2,3,4,5,6}
```

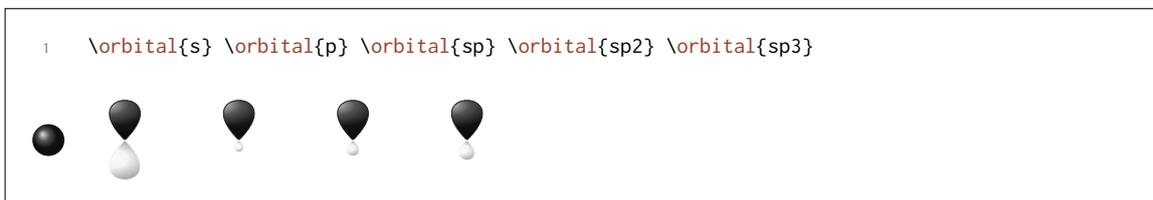


21. Orbitali s, p e ibridi

CHEMMACROS mette a disposizione un comando per rappresentare gli orbitali:

► `\orbital[<options>]{<type>}`

Sono disponibili i seguenti tipi orbitalici {<type>}:
 s
 p
 sp
 sp²
 sp³



A seconda del tipo sono disponibili diverse opzioni per modificare l'orbitale:

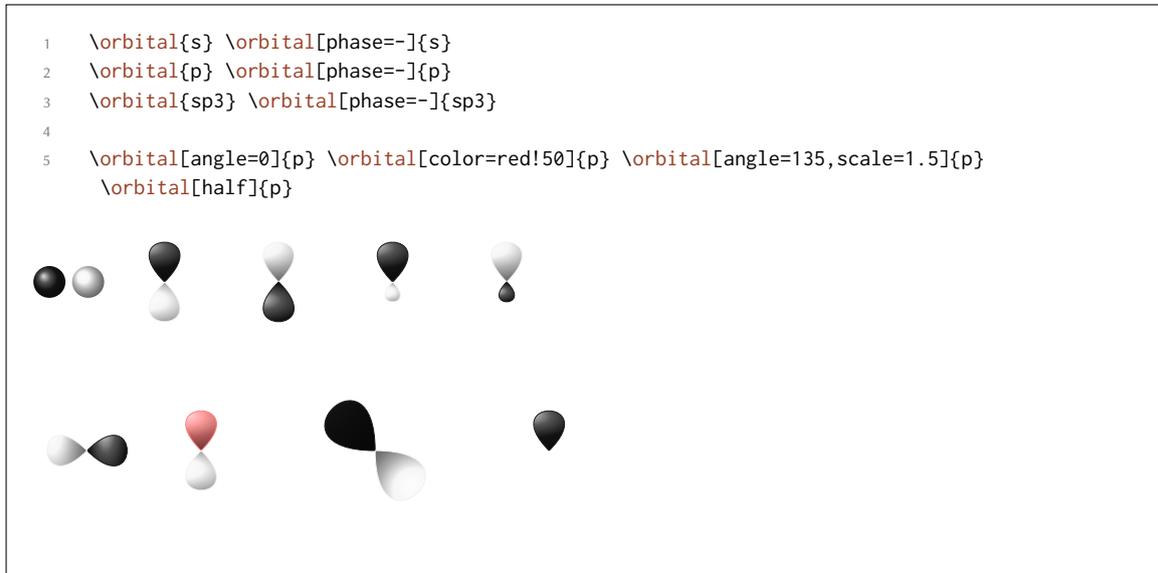
`orbital` ► `phase = +/-` → Varia la fase dell'orbitale (tutti i tipi).

orbital ▶ **scale** = <factor> → Varia la dimensione dell'orbitale (tutti i tipi).

orbital ▶ **color** = <color> → Varia il colore dell'orbitale (tutti i tipi).

orbital ▶ **angle** = <angle> → Ruota gli orbitali con un contributo p in senso antiorario (tutti i tipi tranne s).

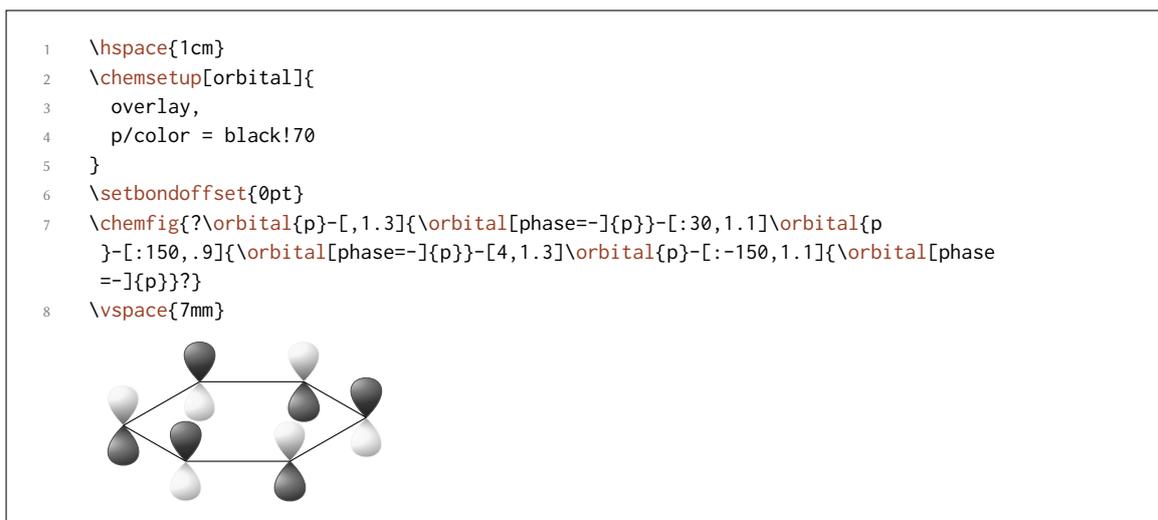
orbital ▶ **half** = true/false → mette a disposizione solo metà orbitale (solo per p).



Inoltre esistono due opzioni attraverso le quali si può influenzare il comportamento di **TikZ**:

orbital ▶ **overlay** = true/false → L'orbitale «non ha bisogno di spazio»; viene disegnato con la chiave di **TikZ** `overlay`.

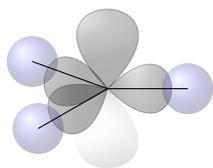
orbital ▶ **opacity** = <num> → L'orbitale diviene trasparente; <value> accetta valori compresi tra 1 (opaco) e 0 (trasparente).



```

1 \hspace{2cm}
2 \setbondoffset{0pt}
3 \chemsetup[orbital]{
4   overlay ,
5   opacity = .75 ,
6   p/scale = 1.6 ,
7   s/color = blue!50 ,
8   s/scale = 1.6
9 }
10 \chemfig{\orbital{s}-[: -20]{\orbital[scale=2]{p}}{\orbital[half,angle=0]{p}}{\
  orbital[angle=170,half]{p}}{\orbital[angle=-150,half]{p}}(-[: -150]\orbital{s})
  -\orbital{s}}
11 \vspace{1cm}

```



Parte III.

chemformula

22. Impostazioni

Tutte le opzioni di **CHEMFORMULA** appartengono al modulo **chemformula**. Quindi possono essere impostate attraverso

```

1 \chemsetup[chemformula]{<options>} oppure
2 \chemsetup{chemformula/<option1>,chemformula/<option2>}

```

Possono inoltre essere passati direttamente come opzioni al comando **\ch**.

23. Principio di base

CHEMFORMULA ha un comando di base.

► **\ch[<options>]{<input>}**

Il suo utilizzo sarà intuitivo per l'utente che conosce mhchem:

| | | |
|----|--------------------------------------|-----------------------------|
| 1 | <code>\ch{H2O}</code> \\ | H_2O |
| 2 | <code>\ch{Sb2O3}</code> \\ | Sb_2O_3 |
| 3 | <code>\ch{H+}</code> \\ | H^+ |
| 4 | <code>\ch{CrO4^2-}</code> \\ | CrO_4^{2-} |
| 5 | <code>\ch{AgCl2-}</code> \\ | $AgCl_2^-$ |
| 6 | <code>\ch{[AgCl2]-}</code> \\ | $[AgCl_2]^-$ |
| 7 | <code>\ch{Y^{99+}}</code> \\ | Y^{99+} |
| 8 | <code>\ch{Y^{99}}</code> \\ | Y^{99+} |
| 9 | <code>\ch{H2_{(aq)}}</code> \\ | $H_{2(aq)}$ |
| 10 | <code>\ch{NO3-}</code> \\ | NO_3^- |
| 11 | <code>\ch{(NH4)2S}</code> \\ | $(NH_4)_2S$ |
| 12 | <code>\ch{^{227}_{90}Th+}</code> \\ | $^{227}_{90}Th^+$ |
| 13 | <code>\$V_{\ch{H2O}}\$</code> \\ | V_{H_2O} |
| 14 | <code>\ch{Ce^{IV}}</code> \\ | Ce^{IV} |
| 15 | <code>\ch{KCr(SO4)2 * 12 H2O}</code> | $KCr(SO_4)_2 \cdot 12 H_2O$ |

Tuttavia esistono delle differenze. La più importante è: **CHEMFORMULA** distingue diversi tipi di input. Questi tipi diversi *devono* essere necessariamente separati da spazi:

► `\ch{type1 type2 type3 type4}`

Uno spazio nell'input non corrisponde *mai* ad uno spazio nell'output. Il ruolo dello spazio vale strettamente, e quando non viene seguito può produrre output erratico.

Un'ulteriore differenza importante è: **CHEMFORMULA** cerca di evitare il modo matematico quanto più possibile:

| | | |
|---|---------------------------------------|---------------------------|
| 1 | <code>\ch{A + B ->[a] C}</code> \\ | $A + B \xrightarrow{a} C$ |
| 2 | <code>\ce{A + B ->[a] C}</code> | $A + B \xrightarrow{a} C$ |

Il primo punto significa che `\ch{2H2O}` viene considerata come *una* particella, in questo caso una formula bruta.

| | | |
|---|---------------------------|----------|
| 1 | <code>\ch{2H2O}</code> \\ | $_2H_2O$ |
| 2 | <code>\ch{2 H2O}</code> | $2 H_2O$ |

Ciò significa inoltre che una particella non può contenere spazi perché verrebbe automaticamente divisa in due parti. Quando necessario, uno spazio può essere introdotto con \sim . Dato che la maggior parte delle macro ignora gli spazi seguenti, un input del tipo di `\ch{\command ABC}` viene trattato come un'unità. Nel caso sia desiderato separare un input di questo tipo è necessario introdurre un gruppo vuoto: `\ch{\command{ } ABC}`. I diversi tipi di input sono trattati separatamente in seguito.

Il comando `\ch` ha alcune opzioni per modificare l'output. Possono essere impostate localmente come argomenti opzionali oppure globalmente con il comando

► `\chemsetup[chemformula]{<options>}`

Tutte le opzioni di **CHEMFORMULA** appartengono al modulo `chemformula`.

24. Fattori stechiometrici

Un fattore stechiometrico deve contenere solo cifre e simboli tra . , _ / ().

```
1 \ch{2} \\
2 \ch{12}
3
4 % decimals:
5 \ch{3.5} \\
6 \ch{5,75}
7
8 % fractions:
9 \ch{3/2} \\
10 \ch{1_1/2}
```

Nell'input è necessario badare alla sintassi giusta, anche se ritengo che sia piuttosto intuitiva.

```
1 questo non funzionerà, ma darà invece un errore: \ch{1/1_1}
```

Quando i fattori stechiometrici sono scritti tra parentesi le frazioni non vengono convertite. Il testo inserito tra parentesi viene restituito nello stesso modo.

```
1 \ch{(1/2) H2O} \ch{1/2 H2O} \ch{0.5 H2O} (1/2)H2O  $\frac{1}{2}$ H2O 0.5 H2O
```

Numerosi esempi come il seguente per l'utilizzo delle parentesi per racchiudere fattori stechiometrici possono essere trovati per esempio nello „IUPAC Green Book“ [Coh+08]:



L'output può essere adattato utilizzando le opzioni seguenti:

- ▶ **decimal-marker** = <marker> → Il simbolo usato come separatore decimale. Default = .
- ▶ **frac-style** = math/xfrac/nicefrac → Determina come vengono rappresentate le frazioni. Default = math
- ▶ **stoich-space** = <dim> → La dimensione dello spazio dopo un fattore stechiometrico. Una dimensione di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = .1667em

```
1 \ch[decimal-marker={,}]{3.5} \ch[decimal-marker={\cdot}]{3,5}
3,5 3·5
```

L'opzione **frac-style** = xfrac utilizza il comando `\sfrac` del pacchetto xfrac. L'output può dipendere fortemente dal carattere impiegato.

```
1 \ch[frac-style=xfrac]{3/2} \ch[frac-style=xfrac]{1_1/2}
```


► `\ch{A*B}` → A · B

| | | |
|---|--------------------------------|--------------------------------------|
| 1 | <code>\ch{CaSO4.H2O} \\</code> | CaSO ₄ · H ₂ O |
| 2 | <code>\ch{CaSO4*H2O}</code> | CaSO ₄ · H ₂ O |

Dato che le cifre in una formula bruta vengono considerate sempre come pedici (vedi il paragrafo 25.2), talvolta è necessario lasciare uno spazio in modo che il numero venga riconosciuto come fattore stechiometrico:

| | | |
|---|-------------------------------------|---|
| 1 | <code>\ch{Na3PO4*12H2O} \\</code> | Na ₃ PO ₄ · 12H ₂ O |
| 2 | <code>\ch{Na3PO4* 12 H2O} \\</code> | Na ₃ PO ₄ · 12 H ₂ O |
| 3 | <code>\ch{Na3PO4 * 12 H2O}</code> | Na ₃ PO ₄ · 12 H ₂ O |

25.2. Pedici

Tutte le cifre in una sostanza vengono considerate come pedici.

| | | |
|---|-------------------------|--------------------------------|
| 1 | <code>\ch{H2SO4}</code> | H ₂ SO ₄ |
|---|-------------------------|--------------------------------|

Quando si desidera utilizzare un carattere come pedice, va utilizzata la sintassi matematica:

| | | |
|---|--------------------------|-------------------------------|
| 1 | <code>\ch{A_nB_m}</code> | A _n B _m |
|---|--------------------------|-------------------------------|

Il pedice riconosce i gruppi, all'interno dei quali è anche possibile usare il modo matematico.

| | | |
|---|-------------------------------------|-------------------------------|
| 1 | <code>\ch{A_{n\$}B_{m\$}} \\</code> | A _n B _m |
| 2 | <code>\ch{NaCl_{(aq)}}</code> | NaCl _(aq) |

25.3. Comandi

All'interno di una formula bruta sono permessi i comandi:

| | | |
|---|--|---|
| 1 | <code>\ch{\textbf{A2}B3} \ch{A2\color{red}B3}</code> | A ₂ B ₃ A ₂ B ₃ |
|---|--|---|

Quando però un comando richiede come argomento un numero, ad esempio comandi regolanti la spaziatura oppure il comando `\ox`, l'utilizzo diretto fallirà. Questo deriva dal fatto che le cifre verranno riconosciute come pedice *prima* dell'espansione del comando.

| | |
|---|--|
| 1 | <code>\ch{A\hspace{2mm}B}</code> darà un errore, dato che <code>\hspace</code> vedrà qualcosa del genere: <code>\hspace{\$_2\$mm}</code> . |
|---|--|

Vedi il paragrafo 27.1 per una via d'uscita.

25.4. Cariche ed altri apici

Basi Quando una formula bruta *finisce* con un segno più o meno questo verrà interpretato come un simbolo di carica e messo ad apice. In altri punti un più rappresenta un legame triplo ed un trattino un legame singolo, vedi il paragrafo 25.5.

| | | |
|---|-----------------------------------|------------------|
| 1 | <code>\ch{A+B} \ch{AB+} \\</code> | $A\equiv B AB^+$ |
| 2 | <code>\ch{A-B} \ch{AB-}</code> | $A-B AB^-$ |

Per gruppi di carica più lunghi oppure altri apici è possibile utilizzare la sintassi matematica. Questa riconosce i gruppi e permette la matematica al loro interno. All'interno di questi gruppi né il simbolo + né - vengono interpretati come legami. Quando ad apice si trova un punto . non indica un addotto bensì un radicale. Un asterisco * indica uno stato eccitato.

| | | |
|---|-----------------------------------|----------------|
| 1 | <code>\ch{A^{x-}} \\</code> | A^{x-} |
| 2 | <code>\ch{A^x-} \\</code> | A^{x-} |
| 3 | <code>\ch{A^{x}-} \\</code> | A^{x-} |
| 4 | <code>\ch{A^{x-}} \\</code> | A^{x-} |
| 5 | <code>\ch{RNO2^{-.}} \\</code> | RNO_2^{--} |
| 6 | <code>\ch{^3H} \\</code> | 3H |
| 7 | <code>\ch{^{14}6C} \\</code> | ^{14}C |
| 8 | <code>\ch{^{58}_{26}Fe} \\</code> | $^{58}_{26}Fe$ |
| 9 | <code>\ch{NO^*}</code> | NO^* |

Ioni e composti ionici con più di una carica vengono inseriti allo stesso modo:

| | | |
|---|--|------------------------------|
| 1 | <code>\ch{SO4^2-} \ch{Ca^2+ SO4^2-}</code> | $SO_4^{2-} Ca^{2+}SO_4^{2-}$ |
|---|--|------------------------------|

Comandi ionici Non sono necessari comandi del tipo di `\mch` all'interno di `\ch`. Difatti *sarebbe opportuno evitarli*, dato che possono scombinare l'orientamento degli apici e dei pedici. L'opzione circled di `CHEMMACROS` viene rispettata da `\ch`.

| | | |
|---|--|---|
| 1 | <code>\chemsetup[option]{circled=all}</code> | $H^{\oplus} + OH^{\ominus} \rightleftharpoons H_2O$ |
| 2 | <code>\ch{H+ + OH- <=> H2O}</code> | |

Comportamento Gli apici si comportano diversamente in base alla loro posizione in una formula bruta, nel caso apice e pedice siano direttamente consecutivi.

| | | |
|---|---|--|
| 1 | <code>\ch{^33B} \ch{{}^33B} \ch{3^3B} \ch{B^3} \ch{B3^3} \\</code> | |
| 2 | <code>\ch{^{23}_{123}B} \ch{{}^{23}_{123}B} \ch{_{123}^{23}B} \ch{B^{23}} \ch{B_{123}^{23}} \\</code> | |
| 3 | <code>\ch{^{123}_{23}B} \ch{{}^{123}_{23}B} \ch{_{23}^{123}B} \ch{B^{123}} \ch{B_{23}^{123}}</code> | |

3_3B 3_3B 3_3B B^3 B_3^3
 $^{23}_{123}B$ $^{23}_{123}B$ $^{23}_{123}B$ B^{23} B_{123}^{23}
 $^{123}_{23}B$ $^{123}_{23}B$ $^{123}_{23}B$ B^{123} B_{23}^{123}

- Quando una formula *inizia* con un apice, gli apici e i pedici vengono orientati a *destra*, altrimenti a *sinistra*.
- Quando un apice *segue* un pedice, questo verrà ulteriormente spostato di una lunghezza che viene determinata dall'opzione `charge-hshift = <dim>`, vedi anche a pagina 48s.

Il secondo punto segue l'indicazione IUPAC:

In writing the formula for a complex ion, spacing for charge number can be added (staggered arrangement), as well as parentheses: SO_4^{2-} , $(\text{SO}_4)^{2-}$. The staggered arrangement is now recommended.

IUPAC Green Book [Coh+08, p. 51]

25.5. Legami

CHEMFORMULA conosce tre tipi di legami:

| | | |
|---|---------------------------------------|--------------------------------------|
| 1 | <code>einfach: \ch{CH3-CH3} \\</code> | einfach: $\text{CH}_3\text{-CH}_3$ |
| 2 | <code>doppel: \ch{CH2=CH2} \\</code> | doppel: $\text{CH}_2\text{=CH}_2$ |
| 3 | <code>dreifach: \ch{CH+CH}</code> | dreifach: $\text{CH}\equiv\text{CH}$ |

25.6. Personalizzazione

Queste opzioni permettono di adattare l'output:

- ▶ `subscript-vshift = <dim>` → Ulteriore spostamento verticale dei pedici. Default = 0pt
- ▶ `subscript-style = text/math` → Stile usato per i pedici. Default = `text`
- ▶ `charge-hshift = <dim>` → Spostamento degli apici seguenti un pedice. Default = $.5\text{ex}$
- ▶ `charge-style = text/math` → Stile usato per gli apici. Default = `text`
- ▶ `adduct-space = <dim>` → Spazio vuoto ai lati del punto di addotto. Default = $.1333\text{em}$
- ▶ `bond-length = <dim>` → Lunghezza dei legami. Come lunghezza di default viene impiegata la lunghezza di un tratto, come determinata con `\settowidth{<len>}{\textendash}`.
- ▶ `bond-offset = <dim>` → Distanza tra atomo e legame. Default = 0pt

Forse l'utente si sarà accorto che per alcuni ioni le cariche sono spostate a destra:

| | | |
|---|---|--|
| 1 | <code>\ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}</code> | $\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$ |
|---|---|--|

Le cariche vengono spostate quando *seguono* un pedice. La dimensione dello spostamento può essere impostata con l'opzione `charge-hshift`.

```

1 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\
2 \chemsetup[chemformula]{charge-hshift=.5ex} SO42- NH4+ Na+
3 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\
4 \chemsetup[chemformula]{charge-hshift=.5pt} SO42- NH4+ Na+
5 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}

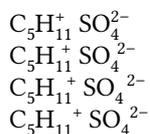
```

Nonostante l'indicazione IUPAC, **CHEMFORMULA** nell'impostazione predefinita non genera apici completamente spostati, che a mio parere in alcuni casi sono di difficile lettura ed in altri casi di aspetto sgradevole. Essendo questa una percezione soggettiva, **CHEMFORMULA** offre sia la possibilità di impostare un valore assoluto per lo spostamento che di spostare completamente l'apice. A questo proposito va impiegato `charge-hshift = full`.

```

1 \ch[charge-hshift=0pt]{C5H11+} \ch[charge-hshift=0pt]{SO4^2-} \\
2 \ch{C5H11+} \ch{SO4^2-} \\
3 \ch[charge-hshift=1ex]{C5H11+} \ch[charge-hshift=1ex]{SO4^2-} \\
4 \ch[charge-hshift=full]{C5H11+} \ch[charge-hshift=full]{SO4^2-}

```

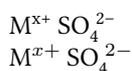


Se non si desidera riprodurre le cariche in modo testuale, è possibile passare al modo matematico:

```

1 \ch{M^x+} \ch{SO4^2-} \\
2 \chemsetup[chemformula]{charge-style = math}
3 \ch{M^x+} \ch{SO4^2-}

```

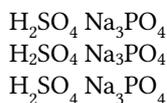


L'opzione `subscript-vshift` può essere impiegata per adattare lo spostamento verticale dei pedici.

```

1 \ch{H2SO4} \ch{Na3PO4} \\
2 \chemsetup[chemformula]{subscript-vshift=.5ex}
3 \ch{H2SO4} \ch{Na3PO4} \\
4 \chemsetup[chemformula]{subscript-vshift=-.2ex}
5 \ch{H2SO4} \ch{Na3PO4}

```

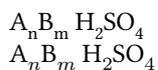


Si può inoltre selezionare in quale modo verranno composti i pedici:

```

1 \ch{A_nB_m} \ch{H2SO4} \\
2 \chemsetup[chemformula]{subscript-style = math}
3 \ch{A_nB_m} \ch{H2SO4}

```

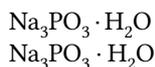


Con l'opzione `adduct-space` è possibile adattare lo spazio a sinistra e destra del segno di addotto.

```

1 \ch{Na3PO3*H2O} \\
2 \chemsetup[chemformula]{adduct-space=.2em}
3 \ch{Na3PO3*H2O}

```

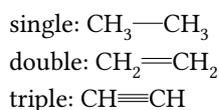


La lunghezza dei legami va variata con:

```

1 \chemsetup[chemformula]{bond-length=4mm}%
2 single: \ch{CH3-CH3} \\
3 double: \ch{CH2=CH2} \\
4 triple: \ch{CH#CH}

```



Si può inoltre impostare la distanza tra atomo e legame:

```

1 \ch{H-H + N#N + O=O} \\
2 \ch[bond-offset=1pt]{H-H + N#N + O=O}

```



26. Tipi speciali di input

Vi sono alcuni «tipi particolari di input».

26.1. Token a input singolo

Il primo tipo è composto da un singolo token tra i seguenti:

- ▶ `\ch{ + }` → + Genera un segno più tra formule se spaziato a destra e sinistra:
`\ch{2 Na + Cl2}` 2 Na + Cl₂
- ▶ `\ch{ v }` → ↓ Simbolo per una precipitazione o la formazione di un solido: `\ch{BaSO4 v}` BaSO₄↓
- ▶ `\ch{ ^ }` → ↑ Simbolo per la formazione di gas: `\ch{H2 ^}` H₂↑

Lo spazio a sinistra e destra del più può essere adattato tramite un'opzione:

- ▶ `plus-space = <dim>` → Una lunghezza di T_EX. Default = .3em

```

1 \ch{A + B} \\
2 \ch[plus-space=4pt]{A + B}

```



26.2. Input di opzioni

Talvolta si desidera applicare un'opzione solo ad una parte di una reazione. Naturalmente è possibile impiegare ripetutamente `\ch`.

```
1 \ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-> H3O+ + HSO4-} \\
2 \ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-> H3O+ + HSO4-}
```



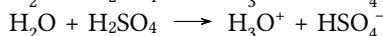
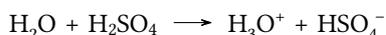
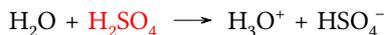
Tuttavia questo interrompe l'input nel sorgente e *potrebbe* influenzare le distanze. Per questo motivo esiste un'alternativa:

► `\ch{ @<options> } }` → Le opzioni date sono attive *solo* fino alla fine della *prossima* formula bruta.

```
1 \ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-> H3O+ + HSO4-} \\
2 \ch{H2O + @\format=\color{red}} H2SO4 -> H3O+ + HSO4-} \\
3 o naturalmente:\\
4 \ch{H2O + \textcolor{red}{H2SO4} -> H3O+ + HSO4-}\[1em]
5 \ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-> H3O+ + HSO4-} \\
6 \ch{H2O + @\subscript-vshift=2pt} H2SO4 -> H3O+ + HSO4-}
```



o naturalmente:



Si tratta di una feature sperimentale che potrà scomparire nelle versioni future.

27. Input protetto

In certi casi si può desiderare di evitare che `CHEMFORMULA` elabori l'input. Esistono due possibilità di ottenere proprio questo.

27.1. Testo

Quando del testo viene posto tra " " oppure ' ', allora l'input viene considerato come testo normale, ad eccezione per gli spazi che non sono ammessi e devono essere dati con `~`.

► `\ch{ "<escaped text>" }`

► `\ch{ '<escaped text>' }`

```

1 \ch{"\ox{2,Ca}" O} \\  

2 \ch{"\ldots\," Na + "\ldots\," Cl2 -> "\ldots\," NaCl} \\  

3 \ch{'A~>~B'}

```

CaO
 $\dots\text{Na} + \dots\text{Cl}_2 \longrightarrow \dots\text{NaCl}$
 $A \rightarrow B$

In molti casi non sarà necessario. Ma quando risulta difficile impiegare un comando all'interno di `\ch`, può essere utile applicare il metodo di protezione.

27.2. Matematica

Quando si ha dell'input matematico, è sufficiente porlo tra $\$$. L'output si distingue dal testo protetto oltre che per il modo matematico anche per la presenza di uno spazio in seguito.

► `\ch{ $<escaped math>$ }`

| | | |
|---|---|--|
| 1 | escaped text: <code>\ch{"\$x\$" H2O} \\ 2</code> | escaped text: $x\text{H}_2\text{O}$ |
| 2 | escaped math: <code>\ch{\$x\$ H2O} \\ 3</code> | escaped math: $x\text{H}_2\text{O}$ |
| 3 | <code>\ch{\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl}</code> | $2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$ |

Lo spazio seguente l'input matematico protetto può essere adattato.

► `math-space = <dim>` Una lunghezza di T_EX. Default = .1667em

| | | |
|---|--|--|
| 1 | <code>\ch{\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl} \\ 2</code> | $2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$ |
| 2 | <code>\chemsetup[chemformula]{math-space=.25em}</code> | $2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$ |
| 3 | <code>\ch{\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl} \\ 4</code> | $A \rightarrow B$ |
| 4 | <code>\ch{\$A->B\$}</code> | |

28. Freccce

28.1. Tipi di frecce

Le frecce vengono indicate con lo stesso modo intuitivo di mhchem. Ne esiste una serie:

- `\ch{ -> } → →` freccia comune a destra
- `\ch{ <- } → ←` freccia comune a sinistra
- `\ch{ -/> } → ⇏` non reagisce (destra)
- `\ch{ </- } → ⇏` non reagisce (sinistra)
- `\ch{ <-> } → ↔` freccia di mesomeria
- `\ch{ <> } → ⇌` la reazione avviene in entrambe le direzioni

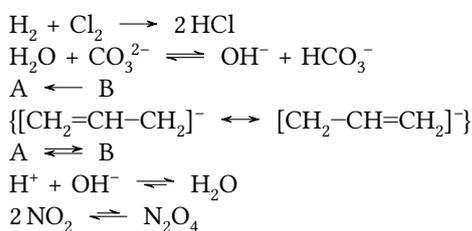
- `\ch{ == }` → $=$ equazione stechiometrica
- `\ch{ <=> }` → \rightleftharpoons freccia di equilibrio
- `\ch{ <=>> }` → \rightleftharpoons equilibrio spostato a destra
- `\ch{ <=>< }` → \rightleftharpoons equilibrio spostato a sinistra
- `\ch{ <o> }` → \longleftrightarrow freccia isolobale

Tutte le frecce sono disegnate con **TikZ**.

```

1 \ch{H2 + Cl2 -> 2 HCl} \\
2 \ch{H2O + CO3^2- <=> OH- + HCO3-} \\
3 \ch{A <- B} \\
4 \ch{\{[CH2=CH-CH2]- <-> [CH2-CH=CH2]- \}} \\
5 \ch{A <> B} \\
6 \ch{H+ + OH- <=>> H2O} \\
7 \ch{2 NO2 <=>< N2O4}

```



28.2. Etichettazione

Le frecce hanno due argomenti opzionali per essere etichettate.

- `\ch{ ->[<above>][<below>] }`

| | |
|--|---|
| <pre> 1 \ch{A ->[a] B} \\ 2 \ch{A ->[a][b] B} \\ 3 \ch{A ->[\SI{100}{\celsius}] B} </pre> | $ \begin{aligned} & \text{A} \xrightarrow{\text{a}} \text{B} \\ & \text{A} \xrightarrow[\text{b}]{\text{a}} \text{B} \\ & \text{A} \xrightarrow{100^\circ\text{C}} \text{B} \end{aligned} $ |
|--|---|

Il testo descrittivo può essere elaborato indipendentemente dalla freccia: basta usare degli spazi.

| | |
|--|--|
| <pre> 1 \ch{A ->[H2O] B} \\ 2 \ch{A ->[H2O] B} \\ 3 \ch{A ->["\ox{2,Ca}" F2] B} \\ 4 \ch{A ->[\Delta, [H+]] B} </pre> | $ \begin{aligned} & \text{A} \xrightarrow{\text{H}_2\text{O}} \text{B} \\ & \text{A} \xrightarrow{\text{H}_2\text{O}} \text{B} \\ & \text{A} \xrightarrow[\text{CaF}_2]{\text{II}} \text{B} \\ & \text{A} \xrightarrow{\Delta, [\text{H}^+]} \text{B} \end{aligned} $ |
|--|--|

Quando sono presenti gli spazi **CHEMFORMULA** elabora dapprima la parte tra parentesi come un input normale. Le frecce leggono i loro argomenti solo *dopo* l'elaborazione. Come si può vedere, le frecce «crescono» con la lunghezza dell'etichetta, mentre rimane costante la parte eccedente. Nell'ultimo esempio si può inoltre vedere che le parentesi quadre all'interno degli argomenti dei

comandi freccia devono essere inserite con `\[` e `\]`; naturalmente al di fuori di `\ch` mantengono il loro comportamento normale. Questi comandi sono necessari perché il metodo solitamente impiegato di racchiudere le parentesi quadre tra parentesi graffe non funziona a causa del metodo in cui `\ch` legge il suo argomento.

```

1 \ch{A ->[a] B} \\
2 \ch{A ->[ab] B} \\
3 \ch{A ->[abc] B} \\
4 \ch{A ->[abc~abc] B} \\
5 % needs the 'chemfig' package:
6 \setatomsep{15pt}
7 \ch{A ->[ "\chemfig{-[:30]-[: -30]OH} " ] B} \\
8 \ch{A ->[[]] B} vs. \ch{A ->[\[\] B}

A  $\xrightarrow{a}$  B
A  $\xrightarrow{ab}$  B
A  $\xrightarrow{abc}$  B
A  $\xrightarrow{abc\ abc}$  B
A  $\xrightarrow{\text{OH}}$  B
A  $\xrightarrow{[ ]} B$  vs. A  $\xrightarrow{[\ ]} B$ 

```

28.3. Adattamento

Con le opzioni seguenti è possibile adattare la resa grafica delle frecce:

- ▶ **arrow-offset** = <dim> → La lunghezza della freccia eccedente l’etichetta (a sinistra e destra). La lunghezza di una freccia vuota è il doppio di `arrow-offset`. Una lunghezza di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = 1.5ex
- ▶ **arrow-yshift** = <dim> → Sposta una freccia verso l’alto (valore positivo) o verso il basso (valore negativo). Una lunghezza di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = 0pt
- ▶ **arrow-ratio** = <factor> → Il rapporto delle lunghezze della frecce di equilibrio spostato. $.4$ significa che la freccia più corta è lunga 0.4 volte la freccia più lunga. Default = $.6$
- ▶ **compound-sep** = <dim> → Lo spazio vuoto tra formule e frecce. Una lunghezza di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = 1ex
- ▶ **label-offset** = <dim> → Lo spazio tra le frecce e la loro etichetta. Una lunghezza di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = 2pt
- ▶ **label-style** = → La dimensione relativa di carattere dell’etichetta. Default = `\footnotesize`

Il codice seguente mostra gli effetti delle varie opzioni sulla freccia `<=>`:

```

1 standard: \ch{A <=>[x][y] B} \\
2 più lunga: \ch[arrow-offset=12pt]{A <=>[x][y] B} \\
3 più alta: \ch[arrow-yshift=2pt]{A <=>[x][y] B} \\
4 più bilanciata: \ch[arrow-ratio=.8]{A <=>[x][y] B} \\
5 etichetta più distante: \ch[label-offset=4pt]{A <=>[x][y] B} \\
6 distanza maggiore dalle formule: \ch[compound-sep=2ex]{A <=>[x][y] B} \\
7 etichette più piccole: \ch[label-style=\tiny]{A <=>[x][y] B}

```

standard: $A \xrightarrow{y} B$
 più lunga: $A \xrightarrow{\quad y \quad} B$
 più alta: $A \xrightarrow{\quad y \quad} B$
 più bilanciata: $A \xrightarrow{\quad y \quad} B$
 etichetta più distante: $A \xrightarrow{\quad y \quad} B$
 distanza maggiore dalle formule: $A \xrightarrow{\quad y \quad} B$
 etichette più piccole: $A \xrightarrow{\quad y \quad} B$

28.4. Adattare i tipi di frecce

Le frecce sono definite attraverso il comando

► `\DeclareChemArrow{<tokens>}{<tikz>}`

{<tokens>} sono i simboli sostituiti dal codice proprio della freccia. Ad esempio, la freccia principale è stata definita attraverso

```
1 \DeclareChemArrow{->}{\draw[-cf] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end) ;}
```

Nel caso si desideri definire proprie frecce, è necessario avere delle conoscenze fondamentali di **TikZ**.³⁶

Esistono delle coordinate predefinite di cui si consiglia l'uso:

(cf_arrow_start) L'inizio della freccia.

(cf_arrow_end) La fine della freccia.

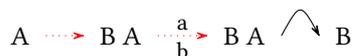
(cf_arrow_mid) La metà della freccia.

(cf_arrow_mid_start) L'inizio della freccia più breve nelle frecce del tipo \rightleftharpoons .

(cf_arrow_mid_end) La fine della freccia più breve nelle frecce del tipo \rightleftharpoons .

cf, left cf, right cf Punta di frecce definite per **CHEMFORMULA**.

```
1 \DeclareChemArrow{.>}{\draw[-cf,dotted,red] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end);}
2 \DeclareChemArrow{n>}{\draw[-cf] (cf_arrow_start) .. controls ([yshift=3ex]cf_
  arrow_mid) .. (cf_arrow_end);}
3 \ch{A .> B} \ch{A .>[a][b] B} \ch{A n> B}
```



Quando si desidera ridefinire una freccia preesistente, è possibile usare uno dei due comandi seguenti:

► `\RenewChemArrow{<tokens>}{<tikz>}`

³⁶ Si rimanda alla guida pgfmanual.

► `\ShowChemArrow{<tokens>}`

Il secondo mostra la definizione esistente, il primo ridefinisce la freccia.

```
1 \texttt{\ShowChemArrow{->}} \\  
2 \RenewChemArrow{->}{\draw[->,red] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end) ;}  
3 \texttt{\ShowChemArrow{->}} \\  
4 \ch{A -> B}  
  
\draw [-cf](cf_arrow_start) (cf_arrow_end);  
\draw [->,red] (cf_arrow_start) (cf_arrow_end) ;  
A → B
```

29. Didascalie di formule

29.1. Sintassi

`CHEMFORMULA` ha una propria sintassi per scrivere del testo sotto ad una formula chimica; questa funziona in modo analogo agli argomenti opzionali delle frecce.

► `\ch{ !(<name>)(<formula>) }`

Quando un punto esclamativo viene seguito da una coppia di parentesi tonde, `CHEMFORMULA` fa il seguente:

```
1 \ch{!(ethanol)( CH2CH2OH )}          CH2CH2OH  
                                         ethanol
```

Quel che vale per le descrizioni di frecce vale anche qui: lasciando degli spazi le parti di input vengono elaborate a seconda del loro tipo, prima che la formula venga scritta sotto il testo.

```
1 \ch{!(water)(H2O)} \quad  
2 \ch{!( "\textcolor{blue}{water}" )( H2O )} \quad  
3 \ch{!( $2n-1$ )( H2O )} \quad  
4 \ch{!( H2O )( H2O )} \quad  
5 \ch{!(oxonium)( H3O+ )}
```

```
H2O   H2O   H2O   H2O   H3O+  
water  blue  2n-1  H2O   oxonium
```

Se per qualche ragione si desidera avere un punto esclamativo *senza* inserire un testo sotto una formula, bisogna solamente evitare di farlo seguire da parentesi.

```
1 \ch{H2O~(!)} \quad H2O (!)  
2 \ch{A!{ }()} \quad A!()
```

29.2. Personalizzazione

`CHEMFORMULA` mette a disposizione due opzioni per adattare il testo:

- ▶ `name-format` = <commands> → Il formato del testo. Può essere un input qualunque. Default = `\scriptsize\centering`
- ▶ `name-width` = <dim>/auto → La larghezza del box nel quale viene posto il testo. auto riconosce la larghezza della didascalia e imposta il box di conseguenza. Default = auto

```

1 \ch{!(acido)( H2SO4 ) -> B} \
2 \ch[name-format=\sffamily\small]{!(acido)( H2SO4 ) -> B} \
3 \ch[name-format=\scriptsize N:~]{!(acido)( H2SO4 ) -> B} \
4 \ch[name-width=3em,name-format=\scriptsize\raggedright]{!(acido)( H2SO4 ) -> B}

```

$H_2SO_4 \rightarrow B$
 acido
 $H_2SO_4 \rightarrow B$
 acido
 $H_2SO_4 \rightarrow B$
 N: acido
 $H_2SO_4 \rightarrow B$
 acido

30. Formato e carattere

Come impostazione predefinita `CHEMFORMULA` non varia l'output delle formule. Prendiamo come esempio un input privo di senso chimico per dimostrare tutte le capacità di `CHEMFORMULA`:

```

1 \newcommand*\sample{\ch{H2C-C+C-CH=CH+ + CrO4^2- <=>[x][y] 2.5 Cl^{-.} + 3_1/2
  Na*OH_{(aq)} + !(name)( A^n ) "\LaTeXe"}}
2 \sample

```

$H_2C-C\equiv C-CH=CH^+ + CrO_4^{2-} \xrightleftharpoons[x]{y} 2.5 Cl^- + 3\frac{1}{2} Na \cdot OH_{(aq)} + A^n \LaTeX 2\epsilon$

Ora variamo alcuni aspetti del testo e vediamo cosa succede:

```

1 \sffamily Ciao \sample \
2 \ttfamily Ciao \sample \normalfont \
3 \bfseries Ciao \sample \normalfont \
4 \itshape Ciao \sample

```

Ciao $H_2C-C\equiv C-CH=CH^+ + CrO_4^{2-} \xrightleftharpoons[x]{y} 2.5 Cl^- + 3\frac{1}{2} Na \cdot OH_{(aq)} + A^n \LaTeX 2\epsilon$
 Ciao $H_2C-C\equiv C-CH=CH^+ + CrO_4^{2-} \xrightleftharpoons[x]{y} 2.5 Cl^- + 3\frac{1}{2} Na \cdot OH_{(aq)} + A^n \LaTeX 2\epsilon$
 Ciao $H_2C-C\equiv C-CH=CH^+ + CrO_4^{2-} \xrightleftharpoons[x]{y} 2.5 Cl^- + 3\frac{1}{2} Na \cdot OH_{(aq)} + A^n \LaTeX 2\epsilon$
 Ciao $H_2C-C\equiv C-CH=CH^+ + CrO_4^{2-} \xrightleftharpoons[x]{y} 2.5 Cl^- + 3\frac{1}{2} Na \cdot OH_{(aq)} + A^n \LaTeX 2\epsilon$

Come si può vedere la maggior parte delle funzioni adattano le caratteristiche del font circostante. Quando si vuole cambiare questo comportamento preimpostato oppure il formato di default è possibile usare la seguente opzione:

- **format** = <anything> → Inserisce il codice desiderato all'inizio del comando `\ch`.

```

1 % blu e privo di grazie:
2 \definecolor{newblue}{rgb}{.1,.1,.5}\chemsetup[chemformula]{format=\color{
   newblue}\sffamily}
3 \sffamily Ciao \sample \
4 \ttfamily Ciao \sample \normalfont \
5 \bfseries Ciao \sample \normalfont \
6 \itshape Ciao \sample

Ciao H2C-C≡C-CH=CH+ + CrO42-  $\xrightleftharpoons{x/y}$  2.5 Cl- + 3½ Na·OH(aq) + An name LATEX 2ε
Ciao H2C-C≡C-CH=CH+ + CrO42-  $\xrightleftharpoons{x/y}$  2.5 Cl- + 3½ Na·OH(aq) + An name LATEX 2ε
Ciao H2C-C≡C-CH=CH+ + CrO42-  $\xrightleftharpoons{x/y}$  2.5 Cl- + 3½ Na·OH(aq) + An name LATEX 2ε
Ciao H2C-C≡C-CH=CH+ + CrO42-  $\xrightleftharpoons{x/y}$  2.5 Cl- + 3½ Na·OH(aq) + An name LATEX 2ε

```

Inoltre si possono variare specificatamente la famiglia, la serie e la forma dell'output:

- **font-family** = <family> → Varia la famiglia di font dell'output con: `\fontfamily{<family>}\selectfont`.
- **font-series** = <series> → Varia la serie di font dell'output con: `\fontseries{<series>}\selectfont`.
- **font-shape** = <shape> → Varia la forma di font dell'output con `\fontshape{<shape>}\selectfont`.

```

1 % immer fett:
2 \chemsetup[chemformula]{font-series=bx}
3 Ciao \sample \
4 \sffamily Ciao \sample \normalfont \
5 \chemsetup[chemformula]{font-family=lmr,font-series=m} Ciao \sample \normalfont
   \
6 \itshape Ciao \sample

Ciao H2C-C≡C-CH=CH+ + CrO42-  $\xrightleftharpoons{x/y}$  2.5 Cl- + 3½ Na·OH(aq) + An name LATEX 2ε
Ciao H2C-C≡C-CH=CH+ + CrO42-  $\xrightleftharpoons{x/y}$  2.5 Cl- + 3½ Na·OH(aq) + An name LATEX 2ε
Ciao H2C-C≡C-CH=CH+ + CrO42-  $\xrightleftharpoons{x/y}$  2.5 Cl- + 3½ Na·OH(aq) + An name LATEX 2ε
Ciao H2C-C≡C-CH=CH+ + CrO42-  $\xrightleftharpoons{x/y}$  2.5 Cl- + 3½ Na·OH(aq) + An name LATEX 2ε

```

Quando si impiegano X_Y-L^AT_EX oppure LuaL^AT_EX avendo caricato il pacchetto fontspec,³⁷ è possibile variare il carattere di CHEMFORMULA anche in questo modo:

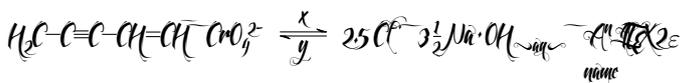
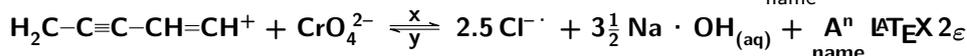
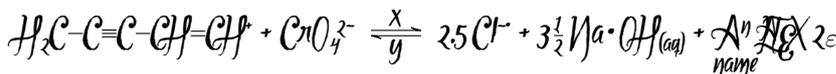
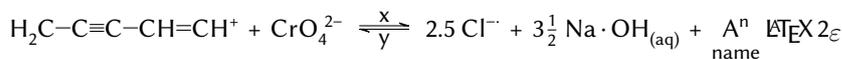
- **font-spec** = {} oppure con opzioni
- **font-spec** = [{<options>}]

³⁷ CTAN: fontspec

```

1 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Linux Biolinum 0}} \sample \
2 \chemsetup[chemformula]{font-spec={[Color=darkgray]Augie}} \sample \
3 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Tipbrush Script}} \sample \
4 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Latin Modern Sans}} \sample \
5 \bfseries \sample \normalfont \
6 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Feathergraphy Decoration}} \sample

```



31. Utilizzo in ambienti matematici

Il comando `\ch` può essere utilizzato in ambienti matematici. Riconosce `\` e `&` e ne passa oltre i contenuti. Tuttavia gli argomenti opzionali di `\` non possono essere utilizzati all'interno di `\ch`.

```

1 \begin{align}
2 \ch{
3 H2O & \rightarrow[a] H2SO4 \\
4 Cl2 & \rightarrow[x][y] CH4
5 }
6 \end{align}
7 \begin{align*}
8 \ch{
9 RNO2 & \rightleftharpoons[+ e^-] RNO2^{-.} \\
10 RNO2^{-.} & \rightleftharpoons[+ e^-] RNO2^{2-}
11 }
12 \end{align*}

```

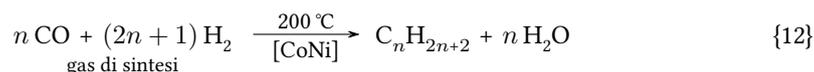
32. Ulteriori esempi

Questo paragrafo mostra ulteriori esempi per l'impiego di `CHEMFORMULA`, ed in particolare l'accoppiamento agli ambienti reaction di `CHEMMACROS`.

```

1 \begin{reaction}[Sintesi di alcani]
2 !(gas~di~sintesi)( $n$ CO + $(2n+1)$ H2 ) ->[\SI{200}{\celsius}][\CoNi\] C_{$
n$}H_{$2n+2$} + $n$ H2O
3 \end{reaction}

```

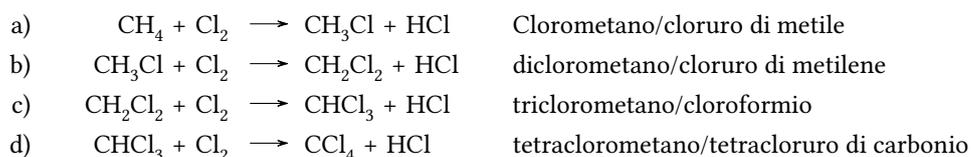


{12}

```

1 \begin{reactions*}
2 "a)" && CH4 + Cl2 &-> CH3Cl + HCl && "{\small Clorometano/cloruro-di~metile}" \\
3 "b)" && CH3Cl + Cl2 &-> CH2Cl2 + HCl && "{\small diclorometano/cloruro-di~metilene}" \\
4 "c)" && CH2Cl2 + Cl2 &-> CHCl3 + HCl && "{\small triclorometano/cloroformio}" \\
5 "d)" && CHCl3 + Cl2 &-> CCl4 + HCl && "{\small tetraclorometano/tetracloruro~di~carbonio}" \\
6 \end{reactions*}

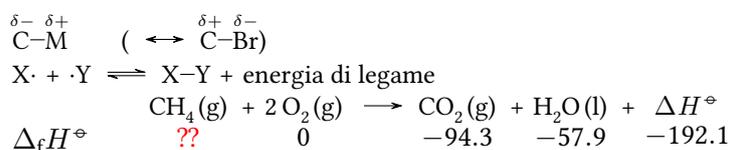
```



```

1 \chemsetup[ox]{parse=false}\ch{"\ox{\delm,C}" -{ } "\ox{\delp,M}" \quad ( <-> "\ox{\delp,C}" -{ } "\ox{\delm,Br}" )} \\
2 \ch[adduct-space=0pt]{X. + .Y <=> X-Y + energia~di~legame} \\
3 \ch[name-format=\normalsize]{!(\State{H}{f}\quad)() !(\textcolor{red}{??})( CH4\gas{ } ) + !(\num{0})( 2 O2\gas{ } ) -> !(\num{-94.3})( CO2\gas{ } ) + !(\num{-57.9})( H2O\lqd{ } ) + !(\num{-192.1})( "\State{H}" )}

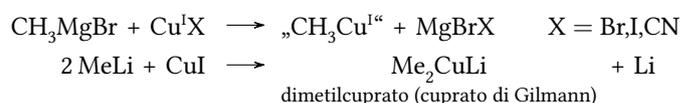
```



```

1 \begin{reactions*}
2 CH3MgBr + "\ox*{1,Cu}" X &-> "\glqq" CH3 "\ox*{1,Cu}\grqq" + MgBrX "\quad X ~$~$~Br,I,CN" \\
3 2 MeLi + CuI &&&&&& &-> !(dimetilcuprato~(cuprato~di~Gilman))( Me2CuLi ) + Li \\
4 \end{reactions*}

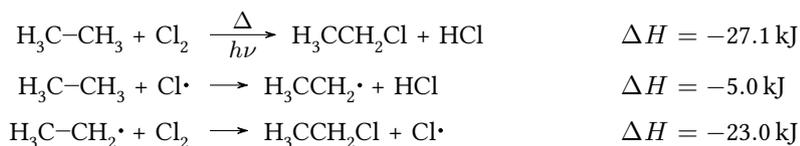
```



```

1 % needs 'chemfig'
2 \begin{reactions*}
3 H3C-CH3 + Cl2 & \xrightarrow[\Delta]{h\nu} H3CCH2Cl + HCl
  & & \& \text{"\Enthalpy{-27.1}" \ \
4 H3C-CH3 + "\Lewis{0.,Cl}" & \xrightarrow{} H3CCH2 "\Lewis{0.,\vphantom{H}}"} +
  HCl & \& \text{"\Enthalpy{-5.0}" \ \
5 H3C-CH2 "\Lewis{0.,\vphantom{H}}"} + Cl2 & \xrightarrow{} H3CCH2Cl + "\Lewis{0.,Cl}"
  & \& \text{"\Enthalpy{-23.0}"
6 \end{reactions*}

```

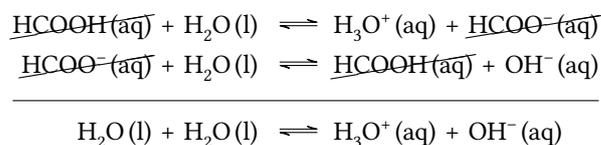


L'esempio seguente mostra come si può eseguire la semplificazione di reazioni.³⁸

```

1 % needs 'cancel'
2 \begin{align*}
3 \centering
4 \ch{\cancel{HCOOH\aq} + H2O\lqd} & \rightleftharpoons H3O^+\aq + \cancel{HCOO^-\aq} \ \
5 \ch{\cancel{HCOO^-\aq} + H2O\lqd} & \rightleftharpoons \cancel{HCOOH\aq} + OH^-\aq \ \ [-1ex]
6 \cline[1-2]{}
7 \ch{H2O\lqd} + H2O\lqd & \rightleftharpoons H3O^+\aq + OH^-\aq
8 \end{align*}

```



Parte IV.

ghsystem

33. Setup

Tutte le opzioni di `GHSYSTEM` appartengono al modulo `ghsystem`. Possono essere impostate anche con

- ▶ `\chemsetup[ghsystem]{<options>}` oppure
- ▶ `\chemsetup{ghsystem/<option1>,ghsystem/<option2>}`

Inoltre possono essere passate anche localmente ai comandi come argomenti opzionali.

³⁸ Ispirato da una domanda su TeX.SE: <http://tex.stackexchange.com/q/30118/5049>

34. Richiamare le frasi di rischio (H) e sicurezza (P)

34.1. Chiamata semplice

È generalmente semplice richiamare le frasi:

- ▶ `\ghs[<options>]{<type>}{<number>}`
- ▶ `\ghs*[<options>]{<type>}{<number>}`

Esistono tre tipi di frasi: h, euh e p. L'argomento `{<type>}` non distingue tra maiuscole e minuscole.

| | | |
|---|--------------------------------|---|
| 1 | <code>\ghs{h}{200} \\</code> | H200: Esplosivo instabile. |
| 2 | <code>\ghs{H}{224} \\</code> | H224: Liquido e vapori altamente infiammabili. |
| 3 | <code>\ghs{euh}{001} \\</code> | EUH001: Esplosivo allo stato secco. |
| 4 | <code>\ghs{Euh}{202} \\</code> | EUH202: Cianoacrilato. Pericolo. Incolla la pelle e gli occhi in pochi secondi. Tenere fuori dalla portata dei bambini. |
| 5 | <code>\ghs{p}{201}</code> | P201: Procurarsi istruzioni specifiche prima dell'uso. |

La versione asteriscata nasconde il numero e restituisce solo la frase. Quando si desidera nascondere la frase e richiamare solo il numero, è possibile utilizzare l'opzione seguente:

- ▶ `hide = true/false`

Inoltre esiste un'opzione per adattare l'output.

- ▶ `space = <space command> → Spazio tra <type> e <number>.`

| | | |
|---|--|-----------------------------|
| 1 | <code>\ghs{h}{200} \\</code> | H200: Esplosivo instabile. |
| 2 | <code>\ghs[space=\,]{h}{200} \\</code> | H 200: Esplosivo instabile. |
| 3 | <code>\ghs*{h}{200} \\</code> | Esplosivo instabile. |
| 4 | <code>\ghs[hide]{h}{200}</code> | H200 |

34.2. Frasi con segnaposto

Alcune frasi utilizzano dei segnaposto. Ve ne sono quattro tipi:

- *<indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo>*
- *<indicare l'effetto specifico, se noto>*
- *<o indicare tutti gli organi interessati, se noti>*
- *<denominazione della sostanza sensibilizzante>*

Da predefinito sono nascosti tutti tranne l'ultimo, che deve essere sostituito. Possono essere resi visibili attraverso l'opzione

- ▶ `fill-in = true/false → Default = false`

```

1 \ghs{h}{340} \\
2 \ghs[fill-in]{h}{340} \\
3 \ghs{h}{360} \\
4 \ghs[fill-in]{h}{360} \\
5 \ghs{h}{370} \\
6 \ghs[fill-in]{h}{370} \\
7 \ghs{euh}{208} \\
8 \ghs[fill-in]{euh}{208}

```

H340: Può provocare alterazioni genetiche

H340: Può provocare alterazioni genetiche *<indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo>*

H360: Può nuocere alla fertilità o al feto

H360: Può nuocere alla fertilità o al feto *<indicare l'effetto specifico, se noto> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo>*

H370: Provoca danni agli organi.

H370: Provoca danni agli organi *<o indicare tutti gli organi interessati, se noti>. <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo>*

EUH208: Contiene *<denominazione della sostanza sensibilizzante>*. Può provocare una reazione allergica.

EUH208: Contiene *<denominazione della sostanza sensibilizzante>*. Può provocare una reazione allergica.

Con le opzioni seguenti è possibile sostituire i segnaposto:

- ▶ **exposure** = <text> → segnaposto di esposizione
- ▶ **effect** = <text> → segnaposto di effetto
- ▶ **organs** = <text> → segnaposto di organo
- ▶ **substance** = <text> → segnaposto di sostanza

```

1 \ghs[exposure=In questo modo si è esposti al pericolo.]{h}{340} \\
2 \ghs[effect=Questi sono gli effetti.]{h}{360} \\
3 \ghs[organs=quest'organo]{h}{370} \\
4 \ghs[substance=sostanza]{euh}{208}

```

H340: Può provocare alterazioni genetiche In questo modo si è esposti al pericolo.

H360: Può nuocere alla fertilità o al feto Questi sono gli effetti.

H370: Provoca danni quest'organo.

EUH208: Contiene sostanza. Può provocare una reazione allergica.

34.3. Frasi con buchi

Alcune frasi hanno dei buchi:

```

1 \ghs{p}{301} \\
2 \ghs{p}{401} \\
3 \ghs{p}{411} \\
4 \ghs{p}{413}

```

P301: IN CASO DI INGESTIONE:
P401: Conservare
P411: Conservare a temperature non superiori a °C.
P413: Conservare le rinfuse di peso superiore a kg a temperature non superiori a °C.

Con le seguenti opzioni questi buchi possono essere riempiti:

- ▶ **text** = <text> → Riempie il «bucio invisibile» che segue un doppio punto.
- ▶ **dots** = <text> → Riempie il buco indicato da «...».
- ▶ **C-temperature** = <num> → Inserisce la temperatura in Celsius.
- ▶ **F-temperature** = <num> → Inserisce la temperatura in Fahrenheit.
- ▶ **kg-mass** = <num> → Inserisce massa in chilogrammi.
- ▶ **lbs-mass** = <num> → Inserisce massa in libbre.

```

1 \ghs[dots=Contattare un medico!]{p}{301} \\
2 \ghs[text=qui]{p}{401} \\
3 \ghs[C-temperature=50, F-temperature=122]{p}{411} \\
4 \ghs[kg-mass=5.0, lbs-mass=11, C-temperature=50, F-temperature=122]{p}{413}

```

P301: IN CASO DI INGESTIONE:
P401: Conservare
P411: Conservare a temperature non superiori a 50 °C.
P413: Conservare le rinfuse di peso superiore a 5.0 kg a temperature non superiori a 50 °C.

34.4. Frasi combinate

Esistono alcune frasi combinate. Vengono inserite con un + tra i numeri:

```

1 \ghs{p}{235+410} \\
2 \ghs{p}{301+330+331}

```

P235 + P410: Tenere in luogo fresco. Proteggere dai raggi solari.
P301 + P330 + P331: IN CASO DI INGESTIONE: sciacquare la bocca. NON provocare il vomito.

Si noti che sono valide solo le combinazioni ufficiali. *Non è possibile combinare le frasi a piacere.*

35. Pittogrammi

35.1. Le immagini

Il GHS contiene alcuni pittogrammi:



Il comando

► `\ghspic[<options>]{<name>}`

li carica. Tabella 3 mostra tutti i pittogrammi e i nomi dei loro file, o meglio: mostra i nomi dei file da utilizzare con il comando `\ghspic`. Di fatti i file si chiamano `ghsystem_<name>.<filetype>`, dove `<filetype>` dev'essere un'estensione tra `eps`, `jpg` oppure `png`, vedi anche il paragrafo 35.2.

```
1 \ghspic{skull} 
```

Se si preferisce variare la dimensione, è disponibile l'opzione

► `scale = <factor>` → Scala il pittogramma. Default = 1

Le immagini originali sono piuttosto grandi. La preimpostazione (fattore = 1) scala le immagini ad un ventesimo della loro dimensione reale.

```
1 \ghspic[scale=2]{skull} 
```

Se si desidera utilizzare opzioni speciali di `\includegraphics`, ad esempio per ruotare il pittogramma, va usata l'opzione seguente:

► `includegraphics = {<includegraphics keyvals>}`

```
1 \ghspic[includegraphics={angle=90}]{skull} 
```

Tabella 3: Tutti i pittogrammi GHS disponibili.

| nome | pittogramma | nome | pittogramma |
|----------|---|----------|---|
| explos |  | explos-1 |  |
| explos-2 |  | explos-3 |  |

| nome | pittogramma | nome | pittogramma |
|-----------------|---|-----------------|---|
| explos-4 |  | explos-5 |  |
| explos-6 |  | | |
| flame |  | flame-2-white |  |
| flame-2-black |  | flame-3-white |  |
| flame-3-black |  | flame-4-1 |  |
| flame-4-2 |  | flame-4-3-white |  |
| flame-4-3-black |  | flame-5-2-white |  |
| flame-5-2-black |  | | |
| flame-0 |  | flame-0-5-1 |  |
| bottle |  | bottle-2-black |  |
| bottle-2-white |  | | |
| acid |  | acid-8 |  |
| skull |  | skull-2 |  |
| skull-6 |  | | |

| nome | pittogramma | nome | pittogramma |
|--------|---|------|-------------|
| exclam |  | | |
| health |  | | |
| aqpol |  | | |

35.2. Il tipo dell'immagine dipende dall'engine

L'utente probabilmente è a conoscenza che non tutti i tipi di immagini sono compatibili con ciascun compilatore. pdf \TeX in modalità DVI richiede file di tipo eps, mentre pdf \TeX in modalità PDF, Xe \TeX e Lua \TeX convertono file di tipo eps in pdf, ammesso che l'utente abbia diritti di scrittura nella cartella contenente le immagini.

Gli ultimi elencati sanno tuttavia includere immagini di tipo jpg e png senza problemi mentre pdf \TeX in modalità DVI non ne è capace.

Per risolvere il problema `GHSYSTEM` verifica quale compilatore viene utilizzato, e nel caso di pdf \TeX anche la modalità di utilizzo; poi sceglie quale immagine utilizzare tra eps e png per i pittogrammi. In ogni caso il tipo di immagine può essere selezionato a piacimento attraverso l'opzione

► `pic-type = eps/jpg/png`

36. Lingue disponibili

Al momento attuale le frasi H e P sono disponibili solo in inglese, tedesco ed italiano. Il pacchetto reagisce all'opzione `german` di `CHEMMACROS`, ma non riconosce (ancora) la lingua impostata con `babel`³⁹ o `polyglossia`.⁴⁰

È possibile scegliere la lingua anche in modo esplicito.

► `language = english/german/italian`

| | | |
|---|---|---|
| 1 | <code>\ghs{h}{201}</code> | H201: Esplosivo; pericolo di esplosione di massa. |
| 2 | | |
| 3 | <code>\chemsetup[ghsystem]{language=english}</code> | H201: Explosive; mass explosion hazard. |
| 4 | <code>\ghs{h}{201}</code> | |

È mia intenzione implementare ulteriori lingue in futuro; tuttavia potrebbe volerci ancora del tempo. Chi volesse partecipare a `GHSYSTEM` e trascrivere le frasi in un'altra lingua, è invitato a contattarmi⁴¹; gli metterò a disposizione un file template, un pdf contenenti le traduzioni ufficiali ed ogni aiuto ulteriore necessario.

³⁹ CTAN: babel ⁴⁰ CTAN: polyglossia ⁴¹ contact@mychemistry.eu

37. Lista delle frasi

Se si desidera elencare tutte le frasi, è possibile utilizzare il comando

▶ `\ghslistall`[<options>]

Questo comando crea una tabella di tutte le frasi nell'ambiente `longtable` del pacchetto `longtable`. Il suo aspetto può essere adattato con le opzioni seguenti.

- ▶ `table-head-number` = <text> → Default = numero
- ▶ `table-head-text` = <text> → Default = frase
- ▶ `table-next-page` = <text> → Default = segue sulla prossima pagina
- ▶ `table-caption` = <text> → <text> in `\caption`{<text>}. Default = Tutte le frasi H, EUH e P.
- ▶ `table-caption-short` = <text> → <short> in `\caption`[<short>]{<text>}
- ▶ `table-label` = <text> → Il label per inserire riferimenti incrociati con comandi del tipo di `\ref`. Default = `tab:ghs-hp-statements`
- ▶ `table-row-sep` = <dim> → Distanza tra le righe. Una dimensione di \TeX . Default = 3pt
- ▶ `table-rules` = `default`/`booktabs`/`none` → Lo stile delle righe orizzontali della tabella. `default` utilizza `\hline`, `booktabs` utilizza `\toprule`, `\midrule` e `\bottomrule`. Questa opzione richiede il pacchetto `booktabs`,⁴² che deve essere caricato. Default = `default`
- ▶ `table-top-head-rule` = `default`/`booktabs`/`none` → Variare la riga in modo esplicito. Default = `default`
- ▶ `table-head-rule` = `default`/`booktabs`/`none` → Variare la riga in modo esplicito. Default = `default`
- ▶ `table-foot-rule` = `default`/`booktabs`/`none` → Variare la riga in modo esplicito. Default = `default`
- ▶ `table-last-foot-rule` = `default`/`booktabs`/`none` → Variare la riga in modo esplicito. Default = `default`

Il codice seguente mostra come è stata creata [Tabella 4](#):

```
1 \ghslistall[fill-in,table-rules=booktabs]
```

Tabella 4: Tutte le frasi H, EUH e P.

| Numero | Frase |
|--------|----------------------|
| H200 | Esplosivo instabile. |

continua sulla prossima pagina

⁴² CTAN: `booktabs`

| Numero | Frase |
|--------|--|
| H201 | Esplosivo; pericolo di esplosione di massa. |
| H202 | Esplosivo; grave pericolo di proiezione. |
| H203 | Esplosivo; pericolo di incendio, di spostamento d'aria o di proiezione. |
| H204 | Pericolo di incendio o di proiezione. |
| H205 | Pericolo di esplosione di massa in caso d'incendio. |
| H220 | Gas altamente infiammabile. |
| H221 | Gas infiammabile. |
| H222 | Aerosol altamente infiammabile. |
| H223 | Aerosol infiammabile. |
| H224 | Liquido e vapori altamente infiammabili. |
| H225 | Liquido e vapori facilmente infiammabili. |
| H226 | Liquido e vapori infiammabili. |
| H228 | Solido infiammabile. |
| H240 | Rischio di esplosione per riscaldamento. |
| H241 | Rischio d'incendio o di esplosione per riscaldamento. |
| H242 | Rischio d'incendio per riscaldamento. |
| H250 | Spontaneamente infiammabile all'aria. |
| H251 | Autoriscaldante; può infiammarsi. |
| H252 | Autoriscaldante in grandi quantità; può infiammarsi. |
| H260 | A contatto con l'acqua libera gas infiammabili che possono infiammarsi spontaneamente. |
| H261 | A contatto con l'acqua libera gas infiammabili. |
| H270 | Può provocare o aggravare un incendio; comburente. |
| H271 | Può provocare un incendio o un'esplosione; molto comburente. |
| H272 | Può aggravare un incendio; comburente. |
| H280 | Contiene gas sotto pressione; può esplodere se riscaldato. |
| H281 | Contiene gas refrigerato; può provocare ustioni o lesioni criogeniche. |
| H290 | Può essere corrosivo per i metalli. |
| H300 | Letale se ingerito. |
| H301 | Tossico se ingerito. |
| H302 | Nocivo se ingerito. |
| H304 | Può essere letale in caso di ingestione e di penetrazione nelle vie respiratorie. |
| H310 | Letale per contatto con la pelle. |
| H311 | Tossico per contatto con la pelle. |

continua sulla prossima pagina

| Numero | Frase |
|--------|---|
| H312 | Nocivo per contatto con la pelle. |
| H314 | Provoca gravi ustioni cutanee e gravi lesioni oculari. |
| H315 | Provoca irritazione cutanea. |
| H317 | Può provocare una reazione allergica cutanea. |
| H318 | Provoca gravi lesioni oculari. |
| H319 | Provoca grave irritazione oculare. |
| H330 | Letale se inalato. |
| H331 | Tossico se inalato. |
| H332 | Nocivo se inalato. |
| H334 | Può provocare sintomi allergici o asmatici o difficoltà respiratorie se inalato. |
| H335 | Può irritare le vie respiratorie. |
| H336 | Può provocare sonnolenza o vertigini. |
| H340 | Può provocare alterazioni genetiche <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> |
| H341 | Sospettato di provocare alterazioni genetiche <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> |
| H350 | Può provocare il cancro <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> |
| H351 | Sospettato di provocare il cancro <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> |
| H360 | Può nuocere alla fertilità o al feto <i><indicare l'effetto specifico, se noto> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> |
| H361 | Sospettato di nuocere alla fertilità o al feto <i><indicare l'effetto specifico, se noto> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> |
| H362 | Può essere nocivo per i lattanti allattati al seno. |
| H370 | Provoca danni agli organi <i><o indicare tutti gli organi interessati, se noti>. <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> |
| H371 | Può provocare danni agli organi <i><o indicare tutti gli organi interessati, se noti>. <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> |

continua sulla prossima pagina

| Numero | Frase |
|--------|--|
| H372 | Provoca danni agli organi <o indicare tutti gli organi interessati, se noti> in caso di esposizione prolungata o ripetuta. <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo> |
| H373 | Può provocare danni agli organi <o indicare tutti gli organi interessati, se noti> in caso di esposizione prolungata o ripetuta. <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo> |
| H400 | Molto tossico per gli organismi acquatici. |
| H410 | Molto tossico per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata. |
| H411 | Tossico per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata. |
| H412 | Nocivo per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata. |
| H413 | Può essere nocivo per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata. |
| H350i | Può causare il cancro se inalato. |
| H360F | Può nuocere alla fertilità. |
| H360D | Può nuocere al feto. |
| H361f | Sospettato di nuocere alla fertilità. |
| H361d | Sospettato di nuocere al feto. |
| H360FD | Può nuocere alla fertilità. Può nuocere al feto. |
| H361fd | Sospettato di nuocere alla fertilità. Sospettato di nuocere al feto. |
| H360Fd | Può nuocere alla fertilità. Sospettato di nuocere al feto. |
| H360Df | Può nuocere al feto. Sospettato di nuocere alla fertilità. |
| EUH001 | Esplosivo allo stato secco. |
| EUH006 | Esplosivo a contatto o senza contatto con l'aria. |
| EUH014 | Reagisce violentemente con l'acqua. |
| EUH018 | Durante l'uso può formarsi una miscela vapore-aria esplosiva/infiammabile. |
| EUH019 | Può formare perossidi esplosivi. |
| EUH044 | Rischio di esplosione per riscaldamento in ambiente confinato. |
| EUH029 | A contatto con l'acqua libera un gas tossico. |
| EUH031 | A contatto con acidi libera gas tossici. |
| EUH032 | A contatto con acidi libera gas molto tossici. |
| EUH066 | L'esposizione ripetuta può provocare secchezza o screpolature della pelle. |
| EUH070 | Tossico per contatto oculare. |
| EUH071 | Corrosivo per le vie respiratorie. |

continua sulla prossima pagina

| Numero | Frase |
|---------|---|
| EUH059 | Pericoloso per lo strato di ozono. |
| EUH201 | Contiene piombo. Non utilizzare su oggetti che possono essere masticati o succhiati dai bambini. |
| EUH201A | Attenzione! Contiene piombo. |
| EUH202 | Cianoacrilato. Pericolo. Incolla la pelle e gli occhi in pochi secondi. Tenere fuori dalla portata dei bambini. |
| EUH203 | Contiene cromo(VI). Può provocare una reazione allergica. |
| EUH204 | Contiene isocianati. Può provocare una reazione allergica. |
| EUH205 | Contiene componenti epossidici. Può provocare una reazione allergica. |
| EUH206 | Attenzione! Non utilizzare in combinazione con altri prodotti. Possono liberarsi gas pericolosi (cloro). |
| EUH207 | Attenzione! Contiene cadmio. Durante l'uso si sviluppano fumi pericolosi. Leggere le informazioni fornite dal fabbricante. Rispettare le disposizioni di sicurezza. |
| EUH208 | Contiene <denominazione della sostanza sensibilizzante>. Può provocare una reazione allergica. |
| EUH209 | Può diventare facilmente infiammabile durante l'uso. |
| EUH209A | Può diventare infiammabile durante l'uso. |
| EUH210 | Scheda dati di sicurezza disponibile su richiesta. |
| EUH401 | Per evitare rischi per la salute umana e per l'ambiente, seguire le istruzioni per l'uso. |
| P101 | In caso di consultazione di un medico, tenere a disposizione il contenitore o l'etichetta del prodotto. |
| P102 | Tenere fuori dalla portata dei bambini. |
| P103 | Leggere l'etichetta prima dell'uso. |
| P201 | Procurarsi istruzioni specifiche prima dell'uso. |
| P202 | Non manipolare prima di avere letto e compreso tutte le avvertenze. |
| P210 | Tenere lontano da fonti di calore/scintille/fiamme libere/superfici riscaldate. —Non fumare. |
| P211 | Non vaporizzare su una fiamma libera o altra fonte di accensione. |
| P220 | Tenere/conservare lontano da indumenti/.../materiali combustibili. |
| P221 | Prendere ogni precauzione per evitare di miscelare con sostanze combustibili |
| P222 | Evitare il contatto con l'aria. |

continua sulla prossima pagina

| Numero | Frase |
|--------|---|
| P223 | Evitare qualsiasi contatto con l'acqua: pericolo di reazione violenta e di infiammazione spontanea. |
| P230 | Mantenere umido con |
| P231 | Manipolare in atmosfera di gas inerte. |
| P232 | Proteggere dall'umidità. |
| P233 | Tenere il recipiente ben chiuso. |
| P234 | Conservare soltanto nel contenitore originale. |
| P235 | Conservare in luogo fresco. |
| P240 | Mettere a terra/massa il contenitore e il dispositivo ricevente. |
| P241 | Utilizzare impianti elettrici/di ventilazione/d'illuminazione/.../a prova di esplosione. |
| P242 | Utilizzare solo utensili antiscintillamento. |
| P243 | Prendere precauzioni contro le scariche elettrostatiche. |
| P244 | Mantenere le valvole di riduzione libere da grasso e olio. |
| P250 | Evitare le abrasioni/gli urti/.../gli attriti. |
| P251 | Recipiente sotto pressione: non perforare né bruciare, neppure dopo l'uso. |
| P260 | Non respirare la polvere/i fumi/i gas/la nebbia/i vapori/gli aerosol. |
| P261 | Evitare di respirare la polvere/i fumi/i gas/la nebbia/i vapori/gli aerosol. |
| P262 | Evitare il contatto con gli occhi, la pelle o gli indumenti. |
| P263 | Evitare il contatto durante la gravidanza/l'allattamento. |
| P264 | Lavare accuratamente ... dopo l'uso. |
| P270 | Non mangiare, né bere, né fumare durante l'uso. |
| P271 | Utilizzare soltanto all'aperto o in luogo ben ventilato. |
| P272 | Gli indumenti da lavoro contaminati non devono essere portati fuori dal luogo di lavoro. |
| P273 | Non disperdere nell'ambiente. |
| P280 | Indossare guanti/indumenti protettivi/Proteggere gli occhi/il viso. |
| P281 | Utilizzare il dispositivo di protezione individuale richiesto. |
| P282 | Utilizzare guanti termici/schermo facciale/Proteggere gli occhi. |
| P283 | Indossare indumenti completamente ignifughi o in tessuti ritardanti di fiamma. |
| P284 | Utilizzare un apparecchio respiratorio. |
| P285 | In caso di ventilazione insufficiente utilizzare un apparecchio respiratorio. |

continua sulla prossima pagina

| Numero | Frase |
|-------------|---|
| P231 + P232 | Manipolare in atmosfera di gas inerte. Tenere al riparo dall'umidità. |
| P235 + P410 | Tenere in luogo fresco. Proteggere dai raggi solari. |
| P301 | IN CASO DI INGESTIONE: |
| P302 | IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: |
| P303 | IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE (o con i capelli): |
| P304 | IN CASO DI INALAZIONE: |
| P305 | IN CASO DI CONTATTO CON GLI OCCHI: |
| P306 | IN CASO DI CONTATTO CON GLI INDUMENTI: |
| P307 | IN CASO di esposizione: |
| P308 | IN CASO di esposizione o di possibile esposizione: |
| P309 | IN CASO di esposizione o di malessere: |
| P310 | Contattare immediatamente un CENTRO ANTIVELENI o un medico. |
| P311 | Contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico. |
| P312 | In caso di malessere, contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico. |
| P313 | Consultare un medico. |
| P314 | In caso di malessere, consultare un medico. |
| P315 | Consultare immediatamente un medico. |
| P320 | Trattamento specifico urgente (vedere ... su questa etichetta). |
| P321 | Trattamento specifico (vedere ... su questa etichetta). |
| P322 | Misure specifiche (vedere ... su questa etichetta). |
| P330 | Sciacquare la bocca. |
| P331 | NON provocare il vomito. |
| P332 | In caso di irritazione della pelle: |
| P333 | In caso di irritazione o eruzione della pelle: |
| P334 | Immergere in acqua fredda/avvolgere con un bendaggio umido. |
| P335 | Rimuovere le particelle depositate sulla pelle. |
| P336 | Sgelare le parti congelate usando acqua tiepida. Non sfregare la parte interessata. |
| P337 | Se l'irritazione degli occhi persiste: |
| P338 | Togliere le eventuali lenti a contatto se è agevole farlo. Continuare a sciacquare. |
| P340 | Trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione. |
| P341 | Se la respirazione è difficile, trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione. |

continua sulla prossima pagina

| Numero | Frase |
|--------------------|--|
| P342 | In caso di sintomi respiratori: |
| P350 | Lavare delicatamente e abbondantemente con acqua e sapone. |
| P351 | Sciacquare accuratamente per parecchi minuti. |
| P352 | Lavare abbondantemente con acqua e sapone. |
| P353 | Sciacquare la pelle/fare una doccia. |
| P360 | Sciacquare immediatamente e abbondantemente gli indumenti contaminati e la pelle prima di togliersi gli indumenti. |
| P361 | Togliersi di dosso immediatamente tutti gli indumenti contaminati. |
| P362 | Togliersi di dosso gli indumenti contaminati e lavarli prima di indossarli nuovamente. |
| P363 | Lavare gli indumenti contaminati prima di indossarli nuovamente. |
| P370 | In caso di incendio: |
| P371 | In caso di incendio grave e di quantità rilevanti: |
| P372 | Rischio di esplosione in caso di incendio. |
| P373 | NON utilizzare mezzi estinguenti se l'incendio raggiunge materiali esplosivi. |
| P374 | Utilizzare i mezzi estinguenti con le precauzioni abituali a distanza ragionevole. |
| P375 | Rischio di esplosione. Utilizzare i mezzi estinguenti a grande distanza. |
| P376 | Bloccare la perdita se non c'è pericolo. |
| P377 | In caso d'incendio dovuto a perdita di gas , non estinguere a meno che non sia possibile bloccare la perdita senza pericolo. |
| P378 | Estinguere con |
| P380 | Evacuare la zona. |
| P381 | Eliminare ogni fonte di accensione se non c'è pericolo. |
| P390 | Assorbire la fuoriuscita per evitare danni materiali. |
| P391 | Raccogliere il materiale fuoriuscito. |
| P301 + P310 | IN CASO DI INGESTIONE: contattare immediatamente un CENTRO ANTIVELENI o un medico. |
| P301 + P312 | IN CASO DI INGESTIONE accompagnata da malessere: contattare un CENTROANTIVELENI o un medico. |
| P301 + P330 + P331 | IN CASO DI INGESTIONE: sciacquare la bocca. NON provocare il vomito. |
| P302 + P334 | IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: immergere in acqua fredda/avvolgere con un bendaggio umido. |

continua sulla prossima pagina

| Numero | Frase |
|--------------------|--|
| P302 + P350 | IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: lavare delicatamente e abbondantemente con acqua e sapone. |
| P302 + P352 | IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: lavare abbondantemente con acqua e sapone. |
| P303 + P361 + P353 | IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE (o con i capelli): togliersi di dosso immediatamente tutti gli indumenti contaminati. Sciacquare la pelle/fare una doccia. |
| P304 + P340 | IN CASO DI INALAZIONE: trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione. |
| P304 + P341 | IN CASO DI INALAZIONE: se la respirazione è difficile, trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione. |
| P305 + P351 + P338 | IN CASO DI CONTATTO CON GLI OCCHI: sciacquare accuratamente per parecchi minuti. Togliere le eventuali lenti a contatto se è agevole farlo. Continuare a sciacquare. |
| P306 + P360 | IN CASO DI CONTATTO CON GLI INDUMENTI: sciacquare immediatamente e abbondantemente gli indumenti contaminati e la pelle prima di togliersi gli indumenti. |
| P307 + P311 | IN CASO di esposizione, contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico. |
| P308 + P313 | IN CASO di esposizione o di possibile esposizione, consultare un medico. |
| P309 + P311 | IN CASO di esposizione o di malessere, contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico. |
| P332 + P313 | In caso di irritazione della pelle: consultare un medico. |
| P333 + P313 | In caso di irritazione o eruzione della pelle: consultare un medico. |
| P335 + P334 | Rimuovere le particelle depositate sulla pelle. Immergere in acqua fredda/avvolgere con un bendaggio umido. |
| P337 + P313 | Se l'irritazione degli occhi persiste, consultare un medico. |
| P342 + P311 | In caso di sintomi respiratori: contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico. |
| P370 + P376 | In caso di incendio: bloccare la perdita se non c'è pericolo. |
| P370 + P378 | In caso di incendio: estinguere con |
| P370 + P380 | Evacuare la zona in caso di incendio. |
| P370 + P380 + P375 | In caso di incendio: evacuare la zona. Rischio di esplosione. Utilizzare i mezzi estinguenti a grande distanza. |

continua sulla prossima pagina

| Numero | Frase |
|--------------------|--|
| P371 + P380 + P375 | In caso di incendio grave e di grandi quantità: evacuare la zona. Rischio di esplosione. Utilizzare i mezzi estinguenti a grande distanza. |
| P401 | Conservare |
| P402 | Conservare in luogo asciutto. |
| P403 | Conservare in luogo ben ventilato. |
| P404 | Conservare in un recipiente chiuso. |
| P405 | Conservare sotto chiave. |
| P406 | Conservare in recipiente resistente alla corrosione/... provvisto di rivestimento interno resistente. |
| P407 | Mantenere uno spazio libero tra gli scaffali/i pallet. |
| P410 | Proteggere dai raggi solari. |
| P411 | Conservare a temperature non superiori a °C. |
| P412 | Non esporre a temperature superiori a 50 °C. |
| P413 | Conservare le rinfuse di peso superiore a kg a temperature non superiori a °C. |
| P420 | Conservare lontano da altri materiali. |
| P422 | Conservare sotto |
| P402 + P404 | Conservare in luogo asciutto e in recipiente chiuso. |
| P403 + P233 | Tenere il recipiente ben chiuso e in luogo ben ventilato. |
| P403 + P235 | Conservare in luogo fresco e ben ventilato. |
| P410 + P403 | Proteggere dai raggi solari. Conservare in luogo ben ventilato. |
| P410 + P412 | Proteggere dai raggi solari. Non esporre a temperature superiori a 50 °C. |
| P411 + P235 | Conservare in luogo fresco a temperature non superiori a °C. |
| P501 | Smaltire il prodotto/recipiente in |

Parte V.

Appendice

Panoramica delle opzioni e modalità di adattamento

Opzioni

Nella tabella seguente sono elencate tutte le opzioni disponibili in **CHEMMACROS**. Tutte le opzioni che appartengono ad un particolare modulo possono essere impostate tramite

► `\chemsetup[<module>]{<options>}` oppure

► `\chemsetup{<module>/<options>}`

Alcune opzioni possono essere utilizzate senza un valore; in tal caso verrà utilizzato il valore sottolineato. Le opzioni dei moduli `chemformula` e `ghssystem` non sono elencate a parte.

| opzione | modulo | valori | default | |
|--|------------------------|--------------------------------|-----------------------|-----------|
| opzioni globali: | | | | |
| <code>bpchem</code> | <code>option</code> | <u>true/false</u> | false | pagina 5 |
| <code>circled</code> | <code>option</code> | formal/ <u>all</u> /none | formal | pagina 6 |
| <code>circletype</code> | <code>option</code> | chem/math | chem | pagina 6 |
| <code>cmversion</code> | <code>option</code> | 1/2/bundle | bundle | pagina 6 |
| <code>ghssystem</code> | <code>option</code> | <u>true/false</u> | true | pagina 6 |
| <code>iupac</code> | <code>option</code> | auto/restricted/strict | auto | pagina 6 |
| <code>language</code> | <code>option</code> | <language> | english | pagina 6 |
| <code>method</code> | <code>option</code> | chemformula/formula | formula | pagina 6 |
| <code>Nu</code> | <code>option</code> | chemmacros/mathspec | chemmacros | pagina 6 |
| <code>strict</code> | <code>option</code> | <u>true/false</u> | false | pagina 6 |
| <code>synchronize</code> | <code>option</code> | <u>true/false</u> | false | pagina 6 |
| <code>greek</code> | <code>option</code> | math/textgreek/ <u>upgreek</u> | upgreek | pagina 6 |
| <code>xspace</code> | <code>option</code> | <u>true/false</u> | true | pagina 6 |
| <code>\ba, \Nu:</code> | | | | |
| <code>elpair</code> | <code>particle</code> | <u>dots</u> /dash/false | false | pagina 10 |
| IUPAC-Befehle: | | | | |
| <code>break-space</code> | <code>iupac</code> | <dim> | .01em | pagina 12 |
| <code>bridge-number</code> | <code>iupac</code> | sub/super | sub | pagina 15 |
| <code>coord-use-hyphen</code> | <code>iupac</code> | <u>true/false</u> | true | pagina 15 |
| <code>hyphen-pre-space</code> | <code>iupac</code> | <dim> | .01em | pagina 12 |
| <code>hyphen-post-space</code> | <code>iupac</code> | <dim> | -.03em | pagina 12 |
| <code>\DeclareChemLatin:</code> | | | | |
| <code>format</code> | <code>latin</code> | <anything> | <u>\itshape</u> | pagina 16 |
| <code>\pch, \mch, \fpch, \fmch:</code> | | | | |
| <code>append</code> | <code>charges</code> | <u>true/false</u> | false | pagina 19 |
| acid/base: | | | | |
| <code>p-style</code> | <code>acid-base</code> | slanted/italics/upright | upright | pagina 18 |
| <code>\ox:</code> | | | | |
| <code>parse</code> | <code>ox</code> | <u>true/false</u> | true | pagina 19 |
| <code>roman</code> | <code>ox</code> | <u>true/false</u> | true | pagina 19 |
| <code>pos</code> | <code>ox</code> | top/super/side | top | pagina 19 |
| <code>explicit-sign</code> | <code>ox</code> | <u>true/false</u> | false | pagina 19 |
| <code>decimal-marker</code> | <code>ox</code> | comma/point | point | pagina 20 |
| <code>\OX, \redox:</code> | | | | |
| <code>dist</code> | <code>redox</code> | <dim> | .6em | pagina 23 |
| <code>sep</code> | <code>redox</code> | <dim> | .2em | pagina 23 |
| <code>\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:</code> | | | | |
| <code>exponent</code> | | <anything> | <u>\standardstate</u> | pagina 25 |
| <code>delta</code> | | <anything>/false | | pagina 25 |
| <code>subscript</code> | | left/right | | pagina 25 |
| <code>unit</code> | | <unit> | | pagina 25 |
| <code>\DeclareChemState, \RenewChemState:</code> | | | | |

| opzione | modulo | valori | default | |
|---|----------------|-----------------------|-----------------------|-----------|
| exponent | | <anything> | \standardstate | pagina 25 |
| delta | | <anything>/false | | pagina 25 |
| subscript | | <anything> | | pagina 25 |
| subscript-left | | <u>true</u> /false | | pagina 26 |
| \State: | | | | |
| exponent | state | <anything> | \standardstate | pagina 27 |
| delta | state | <anything>/false | | pagina 27 |
| subscript-left | state | <u>true</u> /false | | pagina 27 |
| \NMR, \begin{spectroscopy} \end{spectroscopy}: | | | | |
| unit | nmr | <unit> | \mega\hertz | pagina 29 |
| nucleus | nmr | {<num>,<atom symbol>} | {1,H} | pagina 29 |
| format | nmr | <anything> | | pagina 29 |
| pos-number | nmr | side/sub | side | pagina 29 |
| coupling-unit | nmr | <unit> | \hertz | pagina 29 |
| parse | nmr | <u>true</u> /false | true | pagina 29 |
| delta | nmr | <anything> | | pagina 29 |
| list | nmr | <u>true</u> /false | false | pagina 29 |
| list-setup | nmr | | vedi il testo | pagina 29 |
| use-equal | nmr | <u>true</u> /false | false | pagina 29 |
| \DeclareChemReaction: | | | | |
| star | | <u>true</u> /false | false | pagina 35 |
| arg | | <u>true</u> /false | false | pagina 35 |
| list-name | reaction | <anything> | Elenco delle reazioni | pagina 37 |
| list-entry | reaction | <anything> | Reaction | pagina 37 |
| \mhName: | | | | |
| align | mhName | <alignment> | \centering | pagina 33 |
| format | mhName | <commands> | | pagina 33 |
| fontsize | mhName | <fontsize> | \tiny | pagina 33 |
| width | mhName | <dim> | | pagina 33 |
| phases: | | | | |
| pos | phases | side/sub | side | pagina 38 |
| space | phases | <dim> | .1333em | pagina 38 |
| \newman: | | | | |
| angle | newman | <angle> | 0 | pagina 39 |
| scale | newman | <factor> | 1 | pagina 39 |
| ring | newman | <tikz> | | pagina 39 |
| atoms | newman | <tikz> | | pagina 39 |
| back-atoms | newman | <tikz> | | pagina 39 |
| \orbital <type> = s/p/sp/sp2/sp3: | | | | |
| phase | orbital/<type> | +/- | + | pagina 40 |
| scale | orbital/<type> | <factor> | 1 | pagina 41 |
| color | orbital/<type> | <color> | black | pagina 41 |
| angle | orbital/<type> | <angle> | 90 | pagina 41 |
| half | orbital/p | <u>true</u> /false | false | pagina 41 |
| overlay | orbital | <u>true</u> /false | false | pagina 41 |
| opacity | ornital | <num> | 1 | pagina 41 |

Comandi di personalizzazione

È stata presentata una serie di comandi che mostrano le possibilità di adattare **CHEMMACROS**. Vengono elencate nuovamente qui sotto.

- ▶ `\DeclareChemArrow` → Definisce una nuova freccia, vedi a pagina 55.
- ▶ `\RenewChemArrow` → Modifica una freccia già esistente.
- ▶ `\DeclareChemIUPAC` → Definisce un nuovo comando IUPAC, vedi a pagina 15.
- ▶ `\RenewChemIUPAC` → Ridefinisce un comando IUPAC.
- ▶ `\DeclareChemLatin` → Definisce un nuovo termine latino, vedi a pagina 16.
- ▶ `\RenewChemLatin` → Ridefinisce un termine latino.
- ▶ `\DeclareChemNMR` → Definisce un nuovo comando NMR, vedi a pagina 28.
- ▶ `\RenewChemNMR` → Ridefinisce un comando NMR.
- ▶ `\DeclareChemParticle` → Definisce una nuova particella, vedi a pagina 11.
- ▶ `\RenewChemParticle` → Ridefinisce una particella.
- ▶ `\DeclareChemPhase` → Definisce un nuovo comando di fase, vedi a pagina 38.
- ▶ `\RenewChemPhase` → Ridefinisce un comando di fase
- ▶ `\DeclareChemReaction` → Definisce un nuovo ambiente di reazione, vedi a pagina 35.
- ▶ `\DeclareChemState` → Definisce una nuova grandezza di stato, vedi a pagina 26.
- ▶ `\RenewChemState` → Ridefinisce una grandezza di stato.

Suggerimenti e avvisi di bug

Ogni feedback riguardante **CHEMMACROS**, **CHEMFORMULA** e **GHSYSTEM** è il benvenuto! Se vi sono proposte, se mancano delle funzionalità oppure vengono notati dei bug, non esitate a contattarmi. Se venissero trovati degli errori, siano essi di natura chimica, documentazione sbagliata ecc. sarei grato di una breve e-mail.⁴³

Se venisse trovato un bug, sarebbe il meglio mandarmi un esempio minimale con cui sia possibile riprodurre il bug. È anche possibile segnalarlo come «Issue» su <https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/>.

Ringrazio tanto anche tutti coloro da cui ho già avuto segnalazioni, in particolare (in ordine alfabetico):

- [Peter Cao](#)
- Christina Lüdigg

⁴³ contact@mychemistry.eu

- Dr. Paul King
- Jonas Rivetti (traduzione delle frasi H e P in italiano)
- Christoph Schäfer

Bibliografia

- [Coh+08] E. Richard Cohan, Tomislav Cvitaš, Jeremy G. Frey, Bertil Holmström, Kozo Kuchitsu, Roberto Marquardt, Ian Mills, Franco Pavese, Martin Quack, Jürgen Stohner, Herbert L. Strauss, Michio Takami e Anders J Thor. *“Quantities, Symbols and Units in Physical Chemistry”*, *IUPAC Green Book*. 3rd Edition. 2nd Printing. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 2008.
- [Con+05] Neil G. Connelly, Ture Damhus, Richard M. Hartshorn e Alan T. Hutton. *“Nomenclature of Inorganic Chemistry”*, *IUPAC Red Book*. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 2005. ISBN: 0-85404-438-8.
- [Eur12] United Nations Economic Commission for Europe. *GHS Implementation*. 20 Mar. 2012. URL: http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation_e.html (visitato il 20/03/2012).
- [The08] The European Parliament and The Council of the European Union. *Regulation (EC) No 1272/2008 of the European Parliament and of the Council. on classification, labelling and packaging of substances and mixtures, amending and repealing Directives 67/548/EEC and 1999/45/EC, and amending Regulation (EC) No 1907/2006*. 16 Dic. 2008.

Indice analitico

I titoli sono posti in **grassetto**, i pacchetti senza grazie, i comandi in **\marrone**, le opzioni in **verde** e i moduli (solo per CHEMMACROS) in **rosso**.

Symbols

| | |
|-----------------|-------|
| \# | 29 |
| \- | 11 f. |
| \[..... | 54 |
| \] | 54 |
| \^ | 11 f. |

A

| | |
|-----------------------------------|--------|
| \a | 13 |
| \abinitio | 16 |
| acid-base | |
| p-style | 18 |
| Acidi/basi | 17 |
| Acido/base | 18 |
| \AddRxnDesc | 37 |
| adduct-space | 48, 50 |
| align | 33 |
| Ambienti | |
| experimental | 8, 28 |
| nmr | 29 |
| reaction | 8, 33 |
| reaction* | 34 |
| reactions | 34 |
| reactions* | 34 |
| spectroscopy | 79 |
| Ambienti di reazione | 33–37 |
| Ambienti matematici | 59 |
| angle | 39, 41 |
| \anti | 14 |
| append | 19 |
| APPENDICE | 77 |
| \aq | 37 |
| arg | 35 |
| arrow-offset | 54 |
| arrow-ratio | 54 |
| arrow-yshift | 54 |
| \atm | 17 |
| \atmosphere | 17 |

| | |
|--------------------|----|
| atoms | 39 |
|--------------------|----|

B

| | |
|----------------------------|----------|
| \b | 13 |
| \ba | 9 f., 78 |
| babel | 67 |
| back-atoms | 39 |
| bm | 3 |
| bond-length | 48 |
| bond-offset | 48 |
| booktabs | 68 |
| bpchem | 3, 5 |
| bpchem | 3, 5, 11 |
| break-space | 12 |
| \bridge | 8, 15 |
| bridge-number | 15 |

C

| | |
|--|---------------------------------|
| C-temperature | 64 |
| Cahn-Ingold-Prelog | 14 |
| \cal | 17 |
| \calory | 17 |
| Caricamento del bundle | 4 |
| Caricamento del pacchetto | 5 |
| Cariche ioniche | 18 f. |
| Cariche parziali | 20 f. |
| \centering | 79 |
| \ch | 42 f., 45 ff., 50–54, 56, 58 f. |
| charge-hshift | 48 f. |
| charge-style | 48 |
| charges | |
| append | 19 |
| \Chemalpha | 6, 9 f. |
| \Chembeta | 9 f. |
| \ChemDelta | 10 |
| \Chemdelta | 9 |
| \Chemepsilon | 9 |
| \Chemeta | 10 |
| chemfig | 10, 21 |
| CHEMFORMULA | 42–61 |
| \Chemgamma | 9 |
| \Chemkappa | 10 |
| CHEMMACROS | 9–42 |

| | |
|---|-------------------|
| <code>\Chemmu</code> | 10 |
| <code>\Chemnu</code> | 10 |
| <code>\Chemomega</code> | 10 |
| <code>\Chempi</code> | 10 |
| <code>\Chemrho</code> | 10 |
| <code>\chemsetup</code> | 7, 30, 43, 61, 78 |
| <code>\Chemsigma</code> | 10 |
| <code>chemstyle</code> | 9, 16 f. |
| <code>\cip</code> | 14 |
| <code>circled</code> | 5, 11, 35 |
| <code>circletype</code> | 6 |
| <code>\cis</code> | 14 |
| <code>cis/trans</code> | 14 |
| <code>\cmc</code> | 17 |
| <code>cmversion</code> | 6 |
| <code>color</code> | 41 |
| Comandi per mhchem | 33 |
| <code>compound-sep</code> | 54 |
| Configurazione assoluta | 14 |
| <code>cool</code> | 12, 14 |
| <code>coord-use-hyphen</code> | 15 |
| <code>coupling-unit</code> | 29 |
| D | |
| <code>\D</code> | 12, 14 |
| <code>\d</code> | 13 |
| <code>\data</code> | 29 f. |
| <code>\data*</code> | 29 |
| <code>decimal-marker</code> | 20, 44 |
| <code>\DeclareChemArrow</code> | 55, 80 |
| <code>\DeclareChemIUPAC</code> | 15, 80 |
| <code>\DeclareChemLatin</code> | 16, 78, 80 |
| <code>\DeclareChemNMR</code> | 28, 30, 80 |
| <code>\DeclareChemParticle</code> | 11, 80 |
| <code>\DeclareChemPhase</code> | 38, 80 |
| <code>\DeclareChemReaction</code> | 35, 79 f. |
| <code>\DeclareChemState</code> | 26, 78, 80 |
| <code>\delm</code> | 21 |
| <code>\delp</code> | 21 |
| <code>delta</code> | 25 ff., 29 |
| Didascalie di formule | 56 f. |
| Personalizzazione | 56 |
| sintassi | 56 |
| <code>dist</code> | 23 |
| <code>dots</code> | 64 |

| | |
|--|----------------|
| E | |
| <code>\E</code> | 12, 14 |
| <code>effect</code> | 63 |
| <code>\El</code> | 9 |
| <code>\el</code> | 9 |
| <code>elpair</code> | 10 |
| <code>\Enthalpy</code> | 25, 78 |
| <code>\Entropy</code> | 25, 78 |
| <code>environ</code> | 3 |
| <code>experimental (amb.)</code> | 8, 28 |
| <code>explicit-sign</code> | 19 f. |
| <code>exponent</code> | 25 ff. |
| <code>exposure</code> | 63 |
| F | |
| <code>F-temperature</code> | 64 |
| Fasi | 37 |
| Basi | 37 |
| proprie | 38 |
| Fattori stechiometrici | 44 f. |
| <code>nicefrac</code> | 45 |
| <code>space</code> | 45 |
| <code>xfrac</code> | 44 |
| <code>\fdelm</code> | 21 |
| <code>\fdelp</code> | 21 |
| <code>fill-in</code> | 62 |
| Fischer | 14 |
| <code>\fmch</code> | 18, 78 |
| <code>\fminus</code> | 9 |
| <code>font-family</code> | 58 |
| <code>font-series</code> | 58 |
| <code>font-shape</code> | 58 |
| <code>font-spec</code> | 58 |
| <code>fontsize</code> | 33 |
| <code>fontspec</code> | 58 |
| <code>format</code> | 16, 29, 33, 58 |
| Formato e carattere | 57 ff. |
| Formle brute | |
| Pedici | 46 |
| Formule brute | 45–50 |
| Addotti | 45 |
| Apici | 47 |
| Comandi di carica | 47 |
| Comportamento | 47 |
| Cariche | 47 |
| Spostamento | 48 |

| | |
|--------------------------------------|------------------|
| Comandi | 46 |
| Legami | 48 |
| Lunghezza | 50 |
| Pedici | |
| Spostamento | 49 |
| Personalizzazione | 48 |
| <code>\fpch</code> | 18, 78 |
| <code>\fplus</code> | 6, 9 |
| <code>frac-style</code> | 44 f. |
| Fraasi di rischio e sicurezza | 62 ff. |
| Frecce | 52–56 |
| Adattamento | 54 |
| Etichettaziane | 53 |
| Tipi | 52 |
| tipi | |
| adattare | 55 |
| <code>\fscrm</code> | 21 |
| <code>\fscrp</code> | 21 |
| <code>\fsscrm</code> | 21 |
| <code>\fsscrp</code> | 21 |
| G | |
| <code>\g</code> | 13 |
| <code>\gas</code> | 37 |
| <code>german</code> | 8, 37, 67 |
| <code>ghs</code> | 6 |
| <code>\ghs</code> | 62 |
| <code>\ghs*</code> | 62 |
| <code>\ghslistall</code> | 68 |
| <code>\ghspic</code> | 65 |
| GHSYSTEM | 61–77 |
| Chiamata | 62 |
| Fraasi combinate | 64 |
| Fraasi con buchi | 63 |
| Segnaposto | 62 |
| <code>ghsystem</code> | 6 |
| <code>\Gibbs</code> | 25, 78 |
| <code>graphicx</code> | 3 |
| <code>greek</code> | 6, 8, 10 |
| H | |
| <code>\H</code> | 13 |
| <code>half</code> | 41 |
| <code>\hapto</code> | 8, 15 |
| <code>\hertz</code> | 79 |
| <code>hide</code> | 62 |
| <code>\Hp1</code> | 9 |
| <code>\Ht0</code> | 9 |
| <code>\Hyd</code> | 9 |
| <code>hyphen-post-space</code> | 12 |
| <code>hyphen-pre-space</code> | 12 |
| I | |
| <code>ifpdf</code> | 3 |
| Impostazioni di lingua | 7 f. |
| <code>includegraphics</code> | 65 |
| Input protetto | 52 |
| <code>math</code> | 52 |
| <code>text</code> | 51 |
| Input protetto | 51 |
| <code>\insitu</code> | 16 |
| Installazione | 4 f. |
| <code>\intertext</code> | 34 |
| <code>\invacuo</code> | 16 |
| <code>iupac</code> | 6, 12 f., 15 |
| iupac | |
| <code>break-space</code> | 12 |
| <code>bridge-number</code> | 15 |
| <code>coord-use-hyphen</code> | 15 |
| <code>hyphen-post-space</code> | 12 |
| <code>hyphen-pre-space</code> | 12 |
| <code>\iupac</code> | 11 f., 14 |
| J | |
| <code>\J</code> | 29 |
| K | |
| <code>\k</code> | 13 |
| <code>\Ka</code> | 17 |
| <code>\Kb</code> | 17 |
| <code>kg-mass</code> | 64 |
| <code>\Kw</code> | 17 |
| L | |
| <code>\L</code> | 12, 14 |
| <code>l3kernel</code> | 3 |
| <code>l3packages</code> | 3 |
| <code>label-offset</code> | 54 |
| <code>label-style</code> | 54 |
| <code>language</code> | 6, 8, 17, 38, 67 |
| latin | |
| <code>format</code> | 16 |
| <code>\latin</code> | 16 |

| | |
|-------------------------------|---------------------------------|
| lbs-mass | 64 |
| list | 29 |
| list-entry | 37 |
| list-name | 37 |
| list-setup | 29 |
| Lista delle frasi | 68–77 |
| \listofreactions | 36 |
| longtable | 3, 68 |
| \lqd | 8, 37 |
| M | |
| \m | 13 |
| math-space | 52 |
| mathspec | 6, 9 |
| mathtools | 3, 34 |
| \mch | 18, 35, 47, 78 |
| Meccanismi di reazione | 21 f. |
| \mech | 21 f. |
| \mega | 79 |
| \meta | 12, 14 |
| method | 3, 6, 11, 33, 35 |
| mhchem | 3 f., 6, 11, 29, 33, 35, 42, 52 |
| mhName | |
| align | 33 |
| fontsize | 33 |
| format | 33 |
| width | 33 |
| \mhName | 33, 79 |
| \Molar | 17 |
| \moLar | 17 |
| \molar | 17 |
| \MolMass | 17 |
| N | |
| \N | 13 |
| \n | 13 |
| name-format | 57 |
| name-width | 57 |
| newman | |
| angle | 39 |
| atoms | 39 |
| back-atoms | 39 |
| ring | 39 |
| scale | 39 |
| \newman | 39, 79 |
| ngerman | 8 |
| nicefrac | 3, 45 |
| \NMR | 5, 27–30, 79 |
| nmr | |
| coupling-unit | 29 |
| delta | 29 |
| format | 29 |
| list | 29 |
| list-setup | 29 |
| nucleus | 29 |
| parse | 29 |
| pos-number | 29 |
| unit | 29 |
| use-equal | 29 |
| nmr (amb.) | 29 |
| \NMR* | 27 |
| Nomi IUPAC | 11–16 |
| Cahn-Ingold-Prelog | 14 |
| caratteri greci | 12 |
| cis/trans | 14 |
| Eteroatomi | 13 |
| Fischer | 14 |
| orto/meta/para | 14 |
| predefiniti | 12 |
| propri | 15 |
| sin/anti | 14 |
| tert | 14 |
| zusammen/entgegen | 14 |
| \normal | 17 |
| Novità | 8 f. |
| \ntr | 9 |
| Nu | 6, 9 |
| \Nu | 6, 9 f., 78 |
| \Nuc | 9 |
| nucleus | 29 |
| Numeri di ossidazione | 19 f. |
| O | |
| \O | 13 |
| opacity | 41 |
| option | |
| bpchem | 5 |
| circled | 5 |
| circletype | 6 |
| cmversion | 6 |
| german | 37, 67 |
| ghsystem | 6 |

| | |
|--|---------------|
| greek | 6, 10 |
| iupac | 6, 12, 15 |
| language | 6 |
| method | 6, 33 |
| Nu | 6, 9 |
| strict | 6 |
| synchronize | 6 |
| xspace | 6 |
| Opzioni globali | 5 f. |
| orbital | |
| angle | 41 |
| color | 41 |
| half | 41 |
| opacity | 41 |
| overlay | 41 |
| phase | 40 |
| scale | 41 |
| <code>\orbital</code> | 40, 79 |
| Orbitali | 40 ff. |
| organs | 63 |
| <code>\ortho</code> | 14 |
| orto/meta/para | 14 |
| overlay | 41 |
| <code>\OX</code> | 22, 78 |
| ox | |
| decimal-marker | 20 |
| explicit-sign | 19 f. |
| parse | 19 |
| pos | 19 f. |
| roman | 19 |
| <code>\ox</code> | 4, 19, 21, 78 |
| <code>\ox*</code> | 4, 20 |
| P | |
| <code>\P</code> | 13 |
| <code>\p</code> | 17 |
| p-style | 18 |
| Panoramica delle opzioni (chemmacros) | 77–80 |
| <code>\para</code> | 14 |
| parse | 19, 29 |
| Particelle, ioni e simboli | 9 ff. |
| predefiniti | 9 |
| proprie | 11 |
| particle | |
| elpair | 10 |
| <code>\pch</code> | 18, 78 |
| <code>\pH</code> | 17 |
| phase | 40 |
| <code>\phase</code> | 38 |
| Phasen | 39 |
| phases | |
| pos | 38 |
| space | 38 |
| pic-type | 67 |
| Pittogrammi | 64–67 |
| <code>\pKa</code> | 8, 17 |
| <code>\pKb</code> | 17 |
| plus-space | 50 |
| <code>\pOH</code> | 17 |
| polyglossia | 67 |
| pos | 19 f., 38 |
| <code>\pos</code> | 29 |
| pos-number | 29 |
| PRIMA DI COMINCIARE | 3–9 |
| Proiezioni di Newman | 39 f. |
| <code>\prt</code> | 9 |
| R | |
| <code>\R</code> | 12, 14 |
| <code>\Rad</code> | 10 |
| <code>\Rconf</code> | 14 |
| reaction | |
| list-entry | 37 |
| list-name | 37 |
| reaction (amb.) | 8, 33 |
| reaction* (amb.) | 34 |
| <code>\reactionlistname</code> | 37 |
| reactions (amb.) | 34 |
| reactions* (amb.) | 34 |
| Reazioni redox | 22–25 |
| redox | |
| dist | 23 |
| sep | 23 |
| <code>\redox</code> | 22, 78 |
| <code>\RenewChemArrow</code> | 55, 80 |
| <code>\RenewChemIUPAC</code> | 15 f., 80 |
| <code>\RenewChemLatin</code> | 16, 80 |
| <code>\RenewChemNMR</code> | 28, 80 |
| <code>\RenewChemParticle</code> | 11, 38, 80 |
| <code>\RenewChemPhase</code> | 38, 80 |
| <code>\RenewChemState</code> | 26, 78, 80 |
| <code>\renewtagform</code> | 34 |

| | | | |
|---|-------------------|-------------------------------|------------------------|
| ring | 39 | table-next-page | 68 |
| roman | 19 | table-row-sep | 68 |
| S | | table-rules | 68 |
| \S | 12, 14 | table-top-head-rule | 68 |
| scale | 39, 41, 65 | tabu | 3 |
| \Sconf | 14 | \ter | 8 |
| \scrm | 21 | Termini in latino | 16 |
| \scrp | 21 | Termodinamica | 25 ff. |
| sep | 23 | tert | 14 |
| Setup | 7 | \tert | 14 |
| \Sf | 13 | text | 64 |
| \ShowChemArrow | 56 | textgreek | 10, 12 |
| \sin | 8 | TikZ | 14, 22, 39, 41, 53, 55 |
| siunitx | 3, 17, 25, 27 ff. | tikz | 3 |
| \sld | 8, 37 | \tiny | 79 |
| space | 38, 62 | Tipi di input speciali | 51 |
| spectroscopy (amb.) | 79 | Input di opzioni | 51 |
| Spettroscopia | 27–32 | Tipi speciali di input | 50 |
| \standardstate | 9, 78 f. | Token a input singolo | 50 |
| star | 35 | \torr | 17 |
| \State | 27, 79 | \trans | 12, 14 |
| state | | \transitionstatesymbol | 9 |
| delta | 27 | U | |
| exponent | 27 | unit | 25, 29 |
| subscript-left | 27 | Unità di misura | 17 |
| Stereodescrittori e nomenclatura | 12–15 | upgreek | 8 |
| stoich-space | 44 f. | upgreek | 10, 12 |
| strict | 6, 11, 15, 38 | use-equal | 29 |
| subscript | 25 f. | V | |
| subscript-left | 26 f. | \val | 29 |
| subscript-style | 48 | W | |
| subscript-vshift | 48 f. | \w | 13 |
| substance | 63 | \water | 9 |
| \syn | 14 | width | 33 |
| synchronize | 6 | X | |
| T | | xfrac | 20, 44 |
| table-caption | 68 | xspace | 3, 6 |
| table-caption-short | 68 | xspace | 3 |
| table-foot-rule | 68 | Z | |
| table-head-number | 68 | \Z | 14 |
| table-head-rule | 68 | zusammen/entgegen | 14 |
| table-head-text | 68 | | |
| table-label | 68 | | |
| table-last-foot-rule | 68 | | |