

Il bundle chemmacros

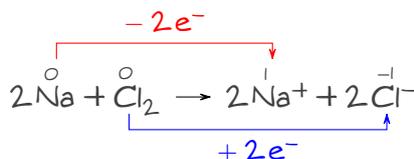
v3.4b 2013/01/04

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

Clemens NIEDERBERGER

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

documentazione in italiano



Indice	II. chemmacros	9
I. Prima di cominciare	8. Particelle, ioni e simboli	9
1. Licenza, requisiti e LEGGIMI	8.1. Predefiniti	9
2. Motivazioni e ragioni	8.2. Definire particelle proprie . . .	11
3. Installazione e caricamento del bundle	9. Nomenclatura, stereodescrittori e termini in latino	12
4. Opzioni globali	9.1. Nomi IUPAC	12
5. Setup	9.1.1. Comandi predefiniti . .	13
6. Impostazioni di lingua	9.1.2. Comandi di nomenclatura propri	16
6.1. Lingue supportate	9.2. Termini in latino	17
6.2. Particolarità	10. Unità di misura per l'impiego con siunitx	17
6.2.1. Tedesco	11. Acidi/basi	18
6.2.2. Italiano	12. Numeri di ossidazione, cariche reali e formali	19
7. Novità	12.1. Cariche ioniche	19
7.1. Versione 3.3	12.2. Numeri di ossidazione	20
7.2. Versione 3.3a	12.3. Cariche parziali e simili	21
7.3. Versione 3.3d	13. Meccanismi di reazione	22
7.4. Versione 3.4		

14. Reazioni redox	23	25.5. Legami	49
		25.5.1. Legami nativi	49
		25.5.2. Legami flessibili	49
15. Stati (standard), termodinamica	25	25.6. Personalizzazione	50
15.1. Grandezze termodinamiche	25	26. Tipi speciali di input	52
15.1.1. Definire nuove grandezze	26	26.1. Token a input singolo	53
15.1.2. Ridefinire grandezze	27	26.2. Input di opzioni	53
15.2. Grandezze di stato	27	27. Input protetto	54
16. Spettroscopia e valori sperimentali	28	27.1. Testo	54
16.1. Il comando <code>\NMR</code>	28	27.2. Matematica	54
16.2. Abbreviazioni	28	28. Freccce	55
16.3. Un ambiente per elencare valori sperimentali	29	28.1. Tipi di frecce	55
16.4. Personalizzazione	30	28.2. Etichettazione	56
16.5. Esempio di applicazione	31	28.3. Adattamento	56
16.5.1. Quasi standard	31	28.4. Modificare i tipi di frecce	57
16.5.2. Lista formattata	32	29. Didascalie di formule	58
16.5.3. Buffo	32	29.1. Sintassi	58
17. Comandi per mhchem	33	29.2. Personalizzazione	59
18. Ambienti di reazione	34	30. Formato e carattere	59
18.1. Definiti da CHEMMACROS	34	31. Utilizzo in ambienti matematici	61
18.2. Reazioni proprie	36	32. Ulteriori esempi	62
18.3. Lista delle reazioni	37	IV. ghsystem	64
19. Fasi	38	33. Setup	64
19.1. Principi	38	34. Richiamare le frasi di rischio (H) e sicurezza (P)	64
19.2. Definire fasi proprie	39	34.1. Chiamata semplice	64
20. Proiezioni di Newman	39	34.2. Frasi con segnaposto	65
21. Orbitali s, p e ibridi	41	34.3. Frasi con buchi	66
III. chemformula	43	34.4. Frasi combinate	67
22. Impostazioni	43	35. Pittogrammi	67
23. Principio di base	43	35.1. Le immagini	67
24. Fattori stechiometrici	44	35.2. Il tipo dell'immagine dipende dal compilatore	69
25. Formule brute	46	36. Lingue disponibili	69
25.1. Addotti	46		
25.2. Pedici	47		
25.3. Comandi	47		
25.4. Cariche ed altri apici	48		

37. Lista delle frasi	70	Suggerimenti e avvisi di bug	74
V. Appendice	71	Bibliografia	75
Panoramica delle opzioni e modalità di adattamento	71	Indice analitico	76

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` (vedi 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 totalmente 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). Questi vengono poste nel margine sinistro quando l’opzione viene citata per la prima volta. L’appendice (vedi la parte 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 crescente di macro che usavo frequentemente. Non ricordo più il momento e le ragioni che mi spinsero a pubblicarle come pacchetto. Ora lo avete davanti a voi – spero che anche voi 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`

2. Motivazioni e ragioni

Nel corso del tempo le macro ed il loro funzionamento sono leggermente variati, e se ne sono aggiunte di nuove. Con il 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 furono delle difficoltà a fare cooperare mhchem e CHEMMACROS. Alcuni dettagli di mhchem non mi hanno mai soddisfatto particolarmente, 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 di composti, fattori stechiometrici e frecce di reazione; contemporaneamente CHEMFORMULA offre alcune 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 inserire e richiamare in modo semplice tutti gli "hazard and precautionary statements". Le frasi sono tratte dal regolamento CE 1272/2008 [Theo8].

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

- permettere un utilizzo intuitivo, soprattutto per quanto riguarda la sintassi dei comandi;
- proporre dei comandi non solo per semplificare 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 flessibilità e adattabilità ove possibile, in modo che ogni utente possa adattare i comandi alle proprie necessità;
- usare impostazioni predefinite conformi alle norme e le indicazioni della International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC).

L'ultimo punto in particolare ha richiesto qualche incitamento da parte degli utenti¹⁶ per applicare le impostazioni giuste in numerosi punti. Se doveste notare qualcosa che non corrisponde ai consigli IUPAC¹⁷ sarei molto grato di una notifica via e-mail!

In un pacchetto di questa mole comprendente parti meno e più recenti (le ultime 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 tutti 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 la parte III) e GHSYSTEM (vedi la parte IV), ma sono felice di ricevere feedback anche su qualunque altra parte del bundle.

¹⁶ Molte grazie al 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`, `pdf`, `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 tra `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}
2 or
3 \usepackage{ghsystem}
```

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, che seguono tutte il principio chiave/valore:

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

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

Sia `CHEMFORMULA` che `GHSYSTEM` non hanno opzioni di pacchetto proprie; se caricati esplicitamente, perdono tutte le opzioni passate loro, che devono poi essere impostate con il comando di setup. `CHEMMACROS`.

option ► `bpchem = true|false` → Questa opzione carica `bpchem` e adatta il layout di `\NMR` ai comandi propri di `bpchem` `\HNMR` e `\CNMR`. Default = `false`

¹⁸ Con l'estensione `sty`.

4. Opzioni globali

- option** ▶ `circled` = `formal|all|none` → `CHEMMACROS` distingue due tipi di cariche:¹⁹ le cariche reali (+/−) e quelle formali (\oplus/\ominus). L'opzione `formal` distingue tra i due tipi, `all` le rappresenta tutte cerchiato, `none` tutte senza cerchio. 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 `vi.*`. Default = `bundle`; in realtà `2` e `bundle` sono equivalenti. L'opzione può essere impostata solamente nel preambolo.
- option** ▶ `ghsystem` = `true|false` → Attiva/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 la lettera `\Chemalpha` e le sue simili (vedi a pagina 11 per ulteriori informazioni). L'opzione può essere impostata solo nel preambolo. Default = `upgreek`
- option** ▶ `iupac` = `auto|restricted|strict` → Determina le impostazioni dei comandi di nomenclatura (vedi a pagina 13). Default = `auto`
- option** ▶ `language` = `american|british|english|french|german|italian|ngerman` → Carica impostazioni specifiche per una lingua. `english`, `american` e `british` sono tra loro equivalenti, come anche `german` e `ngerman`. L'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`. L'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`. L'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`, se `CHEMFORMULA` è stato scelto come metodo `CHEMMACROS` ne adotta le impostazioni di carattere. 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 `vi.1` trattava le cariche in modo poco coerente! ²⁰ CTAN: `mathspec`

5. Setup

Numerosi comandi di **CHEMMACROS**, **CHEMFORMULA** e **GHSYSTEM** hanno come opzioni delle coppie 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>}`

Quasi tutte le opzioni appartengono ad un modulo, che indica quale comando vanno ad influenzare. Quando viene presentata un'opzione, il suo modulo di appartenenza viene qui 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

Impostando l'opzione

```

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

```

può essere selezionata una tra le seguenti lingue: `american`, `british`, `english`, `french`, `german`, `italian` e `ngerman`. Le lingue `american`, `british` e `english` sono tra loro equivalenti, come anche le lingue `german` e `ngerman`

Vengono tradotti

- Il titolo della lista delle reazioni.

7. Novità

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

Attenzione: le frasi GHS non sono disponibili in tutte le lingue (vedi anche il 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 dei 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 a 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. Versione 3.3a

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

7.3. Versione 3.3d

- Versioni pdf dei pittogrammi GHS.
- Nuovi valori di default per lunghezza e offset dei legami, vedi a pagina 50.
- Nuova opzione `bond-style`, vedi a pagina 50.
- Nuova opzione `cap-kern`, vedi a pagina 14.

7.4. Versione 3.4

- `CHEMMACROS` ha ora un manuale italiano; tante grazie a Jonas Rivetti per la sua traduzione sia delle frasi H & P che di questo manuale!
- Il comando `\bond` permette di usare legami ulteriori a quello singolo, doppio e triplo (vedi il sottoparagrafo 25.5). Volevo aggiungere questa funzionalità da molto tempo!
- Alcuni cambiamenti all'aspetto del punto radicalico e nuove opzioni per la sua personalizzazione (vedi il sottoparagrafo 25.6).

Parte II.

chemmacros

8. Particelle, ioni e simboli

8.1. Predefiniti

`CHEMMACROS` definisce alcune semplici macro per raffigurare particelle e simboli di uso comune. 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^- (ione idrossido)
- ▶ `\HtO` → H_3O^+ (ione ossonio) (H three O)
- ▶ `\water` → H_2O
- ▶ `\e1` → e^- (elettrone)
- ▶ `\prt` → p^+ (protone)
- ▶ `\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`.

8. Particelle, ioni e simboli

- ▶ `\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
- ▶ `\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`.

²¹ CTAN: `chemstyle` ²² Molte grazie al suo autore Joseph Wright. ²³ CTAN: `chemfig`

```

1 % needs package 'chemfig'
2 \ba[elpair] \Nu[elpair=dash]          ba:~ NuI~
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`. La 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: la IUPAC consiglia di utilizzare lettere greche tonde nella nomenclatura.

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 a pagina 13).

8.2. Definire particelle proprie

Talvolta può essere utile avere a disposizione delle ulteriori particelle come macro, come ad esempio `\positron` oppure `\photon`. È possibile definirle agevolmente con i seguenti comandi:

- ▶ `\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).

²⁴ CTAN: `textgreek` ²⁵ CTAN: `upgreek`

```

1 % uses the 'upgreek' package
2 \DeclareChemParticle{\positron}{$\upbeta$+}
3 \DeclareChemParticle{\photon}{$\upgamma$}       $\beta^+ \gamma \beta^-$ 
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, specialmente all'interno di documenti in due colonne. Ciò significa che devono poter essere divisi più di una volta. Per metterlo in pratica si può utilizzare 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

```

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-dodecil-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 `\^`.

Vi sono 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`

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.

`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 *internamente* a `\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 spesso sono già predefiniti (`\L` L) oppure facilmente modificati da altri pacchetti o altre classi (ad esempio, il pacchetto `cool`²⁸ definisce sia `\D` che `\E`). Per potere controllare quali comandi siano 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 `\begin{document}`). Mantengono il significato di nomenclatura all'interno di `\iupac`.

Nella tabella 2 è dimostrato il funzionamento delle diverse modalità.

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

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

9.1.1. Comandi predefiniti

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

▶ `\a` → α

▶ `\b` → β

▶ `\g` → γ

▶ `\d` → δ

▶ `\k` → κ

▶ `\m` → μ

²⁸ CTAN: `cool`

9. Nomenclatura, stereodescrittori e termini in latino

► `\n` → η

► `\w` → ω

```
1 \iupac{5\alpha\androstano-3\beta\olo} \\
2 \iupac{\alpha-(tri\cloro\metil)\-\omega\cloro\poli(1,4\fenilene\metilene)}
```

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

Eteroatomi e idrogeni aggiunti I legami agli 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>	3 <i>H</i> -pyrrole
3	<code>\iupac{\O\ethyl hexanethioate}</code>	<i>O</i> -ethyl hexanethioate

Cahn-Ingold-Prelog

► `\cip{<conf>}` → p. es.: `\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`.

Sia i comandi che i descrittori *entgegen/zusammen* ricevono un po' di kerning aggiuntivo dopo la parentesi chiusa. La sua quantità può essere variata attraverso l'opzione seguente:

`iupac` ► `cip-kern` = <dim> → ammontare del kerning dopo la parentesi chiusa. Default = .1ex

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, come impostazione predefinita la loro versione in `CHEMMACROS` 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 (2*S*,3*S*)-tartarico
D-(–)-treosio = (2*S*,3*R*)-(–)-2,3,4-triidrossibutanale
cis-2-butene = (*Z*)-2-butene
(2*E*,4*Z*)-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( $\eta^5$ -cyclopentadienyl)iron
tetra- $\mu_3$ -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 vale 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 la definizione di un comando di nomenclatura preesistente, bensì restituisce un'avvertimento o un errore (in base all'opzione globale `strict`).

```

1 \DeclareChemIUPAC\endo{\textit{endo}}
2 \RenewChemIUPAC\anti{\textit{anti}}
3 \iupac{(2-\endo,7-\anti)-2-bromo-7-fluoro\|bicyclo[2.2.1]heptane}

(2-endo,7-anti)-2-bromo-7-fluorobicyclo[2.2.1]heptane

```

`\RenewChemIUPAC` permette di ridefinire i comandi predefiniti.

```

1 \iupac{\meta-xilene} \
2 \RenewChemIUPAC\meta{\textit{m}}
3 \iupac{\meta-xilene}

```

m-xilene
m-xilene

9.2. Termini in latino

Il pacchetto chemstyle mette a disposizione il comando `\latin` per riportare termini latini comuni in modo consistente. `CHEMMACROS` definisce un comando `\latin` analogo solamente se chemstyle *non* è caricato; mette inoltre a disposizione i seguenti comandi:

- ▶ `\insitu` → *in situ*
- ▶ `\abinitio` → *ab initio*
- ▶ `\invacuo` → *in vacuo*

Nel caso sia caricato il pacchetto chemstyle, i comandi sono stati già definiti con il suo comando `\latin`; il loro aspetto dipende quindi dall'opzione `abbremph` di chemstyle:

<pre> 1 \insitu, \abinitio\ 2 \cstsetup{abbremph=false} 3 \insitu, \abinitio </pre>	<p><i>in situ, ab initio</i></p> <p>in situ, ab initio</p>
-------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------

Le macro sono state definite con il comando seguente:

- ▶ `\DeclareChemLatin{<cmd>}{<phrase>}`
- ▶ `\RenewChemLatin{<cmd>}{<phrase>}`

<pre> 1 \DeclareChemLatin\ltn{latin text} 2 \ltn \cstsetup{abbremph=false} \ltn </pre>	<p><i>latin text latin text</i></p>
----------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------

Nel caso in cui chemstyle *non* sia stato caricato è possibile cambiarne l'aspetto tramite l'opzione seguente:

`latin` ▶ `format` = <definition> → Default = `\itshape`

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, e `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

11. Acidi/basi

- ▶ `\cmc` → cm³ Le unità `\cmc`, `\molar` e `\Molar` sono definite anche dal pacchetto `chemstyle`; `CHEMMA-CROS` 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 rappresentare semplicemente pH, pK_A ... (la resa dei comandi `\Ka` e `\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>}` → p. es.: `\p{\Kw}` pK_W

<code>\Ka</code> <code>\Kb</code> <code>\pKa</code> <code>\pKa[1]</code> <code>\pKb</code> <code>\pKb[1]</code>	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

Le cariche (reali) sono di facile impiego:

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

```

1 \pch, Na\pch, Ca\pch[2]\      +, Na+, Ca2+
2 \mch, F\mch, S\mch[2]      -, F-, S2-

```

Altrettanto vale per le cariche formali:

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

```

1 \fpch\ \fmch\ \fpch[3] \fmch[3]      ⊕ ⊖ 3⊕ 3⊖

```

Esiste un'opzione che influenza il comportamento delle cariche:

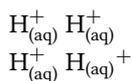
charges ▶ `append = true|false` → Quando è impostata a true, la carica viene appesa ad un gruppo vuoto.
 Default = false

Questo ha delle conseguenze:

```

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}

```

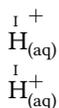


Nella maggior parte dei casi questo comportamento può essere indesiderato, anche se esistono delle occasioni dove può tornare utile:

```

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}

```



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}   \ox{+1,Na}, \ox{+2,Ca}, \ox{-2,S}, \ox{-1,F}

```

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

- ox ▶ `parse = true|false` → Quando vale false, può essere inserito un contenuto qualunque per <number>. Default = true
- ox ▶ `roman = true|false` → Seleziona l'impiego di numeri romani o arabi. Default = true
- ox ▶ `pos = top|super|side` → Varia la posizione del numero di ossidazione: 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` → Sceglie il tipo di segno decimale per i numeri di ossidazione come $\overset{1,2}{X}$. Default = point
- ox ▶ `align = center|right` → Centra il numero di ossidazione sopra l'atomo o lo giustifica a destra. Default = center

12. Numeri di ossidazione, cariche reali e formali

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}-oxide \\\</code>	Fe ^{III} -oxide
3	<code>\ox[pos=side]{3,Fe}-oxide \\\</code>	Fe(III)-oxide
4	<code>\ox[parse=false]{?,Mn} \\\</code>	$\overset{?}{\text{Mn}}$
5	<code>\ox[align=right]{2,Ca}</code>	$\overset{\text{II}}{\text{Ca}}$

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 indicato 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>	
		$\overset{+1}{\text{Na}}, \overset{+2}{\text{Ca}}, \overset{-2}{\text{S}}, \overset{-II \pm 0}{\text{F}_2}$

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

```

Naturalmente può essere ridefinita a seconda dei propri gusti.

12.3. Cariche parziali e simili

Sono poco usate, ma possono risultare utili:

► `\delp` → $\delta+$ (delta + plus)

²⁹ CTAN: `xfrac`

► `\delm` → δ^- (delta + minus)

► `\fdelp` → δ^+

► `\fdelm` → δ^-

Segue 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}}

```

$$\delta^+ \quad \delta^- \quad \delta^- \quad \delta^+$$

$$\text{H} - \text{Cl} \quad \quad \quad \text{Br} - \text{H}$$

Anche queste macro possono essere utilizzate comodamente con `chemfig`.

► `\scrip` → + (scriptstyle + plus)

► `\scrm` → - (scriptstyle + minus)

► `\fscrp` → \oplus

► `\fscrm` → \ominus

► `\fsscrp` → \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}{\fscrp}(-[1]O|\fmch)-[7]O|\fmch}

```

$$\text{CH}_3 - \overset{+}{\text{C}} - \text{CH}_3$$

$$\quad \quad \quad |$$

$$\quad \quad \quad \text{CH}_3$$

$$\ominus \text{O} - \overset{\oplus}{\text{N}} \begin{matrix} \diagup \text{O}^- \\ \diagdown \text{O}^- \end{matrix}$$

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:

14. Reazioni redox

- ▶ `\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 E_1
- ▶ `\mech[e2]` → eliminazione bimolecolare E_2
- ▶ `\mech[cb]` → eliminazione unimolecolare “conjugated base”, cioè via carbanione E_{1cb}

14. Reazioni redox

`CHEMMACROS` mette a disposizione due comandi con cui mostrare 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}
ossidazione
┌───┐
Na → Na+
```

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

```
1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}
ox
┌───┐
Na → Na+
```

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

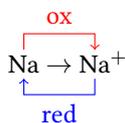
14. Reazioni redox

Con l'argomento [`<num>`] si può adattare la lunghezza delle linee verticali. L'impostazione predefinita vale `.6em`, lunghezza che poi 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

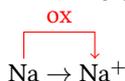
`redox ▶ dist = <dim> → Default = .6em`

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

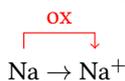
`redox ▶ sep = <dim> → Default = .2em`

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}

```

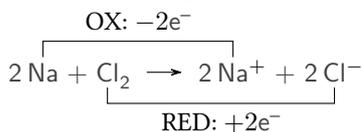


Esempi:

```

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}

```

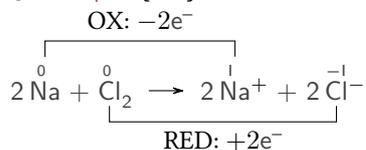


15. Stati (standard), termodinamica

```

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){\small OX: $- 2\el$}
4 \redox(r1,r2)[-1]{\small RED: $+ 2\el$}
5 \vspace{7mm}

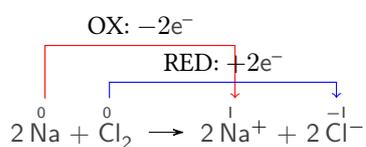
```



```

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)[draw=red,->][3.33]{\small OX: $- 2\el$}
4 \redox(r1,r2)[draw=blue,->]{\small RED: $+ 2\el$}

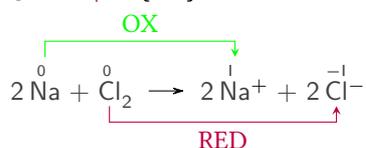
```



```

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:

15. Stati (standard), termodinamica

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>	$\Delta G^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$

(`<subscript>`) aggiunge 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	<code>\Enthalpy{-1234.56e3} \\\</code>	
2	<code>\sisetup{per-mode=symbol,exponent-product=\cdot,output-decimal-marker={,},group-four-digits=true}</code>	
3	<code>\Enthalpy{-1234.56e3}</code>	

$\Delta H^\ominus = -1234.56 \times 10^3 \text{ kJ mol}^{-1}$
 $\Delta H^\ominus = -1\,234,56 \cdot 10^3 \text{ kJ/mol}$

15.1.1. Definire nuove grandezze

Con il comando

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

è possibile definire nuove grandezze.

1	<code>\DeclareChemState{Helmholtz}{A}{\kilo\joule\per\mole}</code>	
2	<code>\DeclareChemState[subscript-left=false,exponent=]{ElPot}{E}{\volt}</code>	
3	<code>\Helmholtz{123.4} \\\</code>	
4	<code>\ElPot{-1.1} \\\</code>	
5	<code>\ElPot[exponent=0](\$\ch{Sn} \ch{Sn^2+} \ch{Pb^2+} \ch{Pb}\$){0.01}</code>	

$\Delta A^\ominus = 123.4 \text{ kJ mol}^{-1}$
 $\Delta E = -1.1 \text{ V}$
 $\Delta E_{\text{Sn}|\text{Sn}^{2+}||\text{Pb}^{2+}|\text{Pb}}^0 = 0.01 \text{ V}$

15. Stati (standard), termodinamica

Le opzioni di questo comando sono quasi identiche a quelle delle grandezze stesse, con cui possono essere variate le impostazioni predefinite delle nuove grandezze.

- ▶ `exponent` = <anything>
- ▶ `delta` = <anything>|false
- none- ▶ `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}          Δfh⊖ = 12.5J
2 \Enthalpy{f}{12.5}
```

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

Sarebbe quindi facile – 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}

Δh = -12.3 kJ mol-1 ΔH = -12.3 kJ
```

15.2. Grandezze di stato

I comandi presentati nel paragrafo 15.1 internamente impiegano il comando³¹

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

Questo comando può essere utilizzato per scrivere le grandezze prive di valore e unità.

Esempi:

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

ΔA⊖, ΔfG⊖, ΔENa⊖, ΔH1000 °C
```

Le sue opzioni sono (quasi) identiche a quelle viste in precedenza:

- `state` ▶ `exponent` = <anything>
- `state` ▶ `subscript-left` = true|false
- `state` ▶ `delta` = <anything>|false

³¹ Nota bene: {<subscript>} è un argomento *opzionale*.

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 si ricorre alla spettroscopia NMR. I valori sperimentali vengono riportati all'incirca in questo modo:

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

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:

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 richiamati più di una volta **CHEMMACROS** offre una possibilità di definire delle abbreviazioni.

³² Tutti gli argomenti possono essere combinati a piacimento. Il comando può essere impiegato anche in modalità matematica.

16. Spettroscopia e valori sperimentali

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

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

```
1 \DeclareChemNMR\HNMR{1,H}%  
2 \DeclareChemNMR\CNMR{13,C}%  
3 \CNMR*(100) \\  
4 \HNMR*(400) %  
13C-NMR (100 MHz)  
1H-NMR (400 MHz)
```

16.3. Un ambiente per elencare valori sperimentali

`CHEMMACROS` offre un ambiente dedicato per facilitare l'elenco di valori sperimentali.

- ▶ `\begin{experimental}` Dati `\end{experimental}` → Ambiente per l'elenco 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 vale `use-equal = true`.
- ▶ `\NMR{<num>,<elem>[<coupling core>]}(<num>,<unit>)[<solvent>]` → questo comando prende un argomento aggiuntivo: `\NMR{13,C[^1H]}` $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR: δ
- ▶ `\J(<bonds>;<nuclei>)[<unit>]{<list of nums>}` → Costante di accoppiamento (NMR) con il separatore ; tra i valori. L'argomento (<bonds>;<nuclei>) è opzionale e permette di specificare ulteriormente l'accoppiamento.
- ▶ `\#{<num>}` → Numero di nuclei (NMR).
- ▶ `\pos{<num>}` → Posizione/numero del nucleo (NMR).
- ▶ `\val{<num>}` → Valore numerico, un alias per `\num{<num>}` di siunitx.
- ▶ `\val{<num1>--<num2>}` → Un alias per `\numrange{<num1>}{<num2>}` di siunitx.

```
1 \begin{experimental}  
2 \data{TIPO1} dati. TIPO1 dati. TIPO2 (specifiche) altri dati. TIPO3  
3 \data{TIPO2}[specifiche] ulteriori dati.  
4 \data*{TIPO3} ulteriori dati.  
5 \end{experimental}
```

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> → Formato delle specifiche dei dati, 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 → Tratta il solvente come formula di mhchem/CHEMFORMULA. Default = true

`nmr` ▶ `delta` = <token> → I <token> vengono inseriti dopo δ .

`nmr` ▶ `list` = true|false → L'ambiente `\begin{nmr}[<options>]` `\end{nmr}` viene formattato come lista.
Default = false

`nmr` ▶ `list-setup` = <setup> → Setup della lista. Default = vedi in basso.

`nmr` ▶ `use-equal` = `true`|false → Inserisce un 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
  {13}{\percent}).
4 %
5 \data{P.f.} \SI{277}{\celsius} (DSC).
6 %
7 \NMR(600)[CDC13] \val{2.01} (s, \#{24}, \pos{5}), \val{2.31} (s, \#{12}, \
  pos{1}), \val{6.72--6.74} (m, \#{2}, \pos{11}), \val{6.82} (s, \#{8}, \pos
  {3}), \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}).
8 %
9 \NMR{13,C}(150)[CDC13] \val{21.2} ($+$, \#{4}, \pos{1}), \val{23.4} ($+$,
  \#{8}, \pos{5}), \val{126.0} ($+$, \#{4}, \pos{9}), \val{128.2} ($+$,
  \#{8}, \pos{3}), \val{130.8} ($+$, \#{2}, \pos{12}), \val{133.6} ($+$,
  \#{2}, \pos{11}), \val{137.0} ($+$, \#{4}, \pos{8}), \val{138.6} (q, \#{4},
  \pos{2}), \val{140.6} (q, \#{2}, \pos{10}), \val{140.8} (q, \#{8}, \pos
  {4}), \val{141.8} (q, \#{4}, \pos{6}), \val{145.6} (q, \#{2}, \pos{7}).
10 %
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 %). P.f. = 277 °C (DSC). ¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 2.01 (s, 24 H, H₅), 2.31 (s, 12 H, H₁), 6.72–6.74 (m, 2 H, H₁₁), 6.82 (s, 8 H, H₃), 7.05–7.07 (m, 2 H, H₁₂), 7.39–7.41 (m, 4 H, H₉), 7.48–7.49 (m, 4 H, H₈). ¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 21.2 (+, 4 C, C₁), 23.4 (+, 8 C, C₅), 126.0 (+, 4 C, C₉), 128.2 (+, 8 C, C₃), 130.8 (+, 2 C, C₁₂), 133.6 (+, 2 C, C₁₁), 137.0

16. Spettroscopia e valori sperimentali

(+, 4 C, C₈), 138.6 (q, 4 C, C₂), 140.6 (q, 2 C, C₁₀), 140.8 (q, 8 C, C₄), 141.8 (q, 4 C, C₆), 145.6 (q, 2 C, 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 ($\epsilon = 65\,984$), 406 nm ($\epsilon = 65\,378$). Resa quantica: $\Phi = 0.74 \pm 0.10$.

16.5.2. Lista formattata

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

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

P.f. = 277 °C (DSC).

¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 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 (ppm) = 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: $\Phi = 0.74 \pm 0.10$.

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 %).

P.f. = 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).

17. Comandi per mhchem

$^{13}\text{C-NMR}$ (150 MHz, CDCl_3): δ $\text{M}^+ + \text{H}_2\text{O}$ = 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 + H_2O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, $\text{M}^+ + \text{OH}^-$), 368 ($\text{M}^+ + 2 \text{OH}^-$).

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 : $\Phi = 0.74 \pm 0.10$.

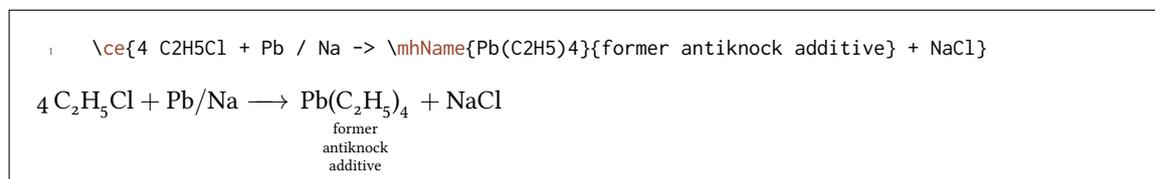
17. Comandi per mhchem

mhchem non viene più caricato automaticamente da CHEMMACROS bensì solamente nel caso in cui si utilizzi nel preambolo l'opzione `method = mhchem`; predefinitamente si utilizza invece CHEMFORMULA.

CHEMMACROS mette a disposizione solo un unico comando speciale per mhchem³³ che permette di inserire del testo al di sotto di una formula.

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

Per esempio:



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

`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 = ` → Il corpo del testo. Default = `\tiny`

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

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

18. Ambienti di reazione

```

1 \ce{4 C2H5Cl + Pb / Na -> \mhName[fontsize=\footnotesize]{Pb(C2H5)4}{former
  antiknock additive} + NaCl}\
2 \chemsetup[mhName]{align=\raggedright,fontsize=\small,format=\bfseries\color{red
  },width=3cm}
3 \ce{4 C2H5Cl + Pb / Na -> \mhName{Pb(C2H5)4}{former antiknock additive} + NaCl}

4 C2H5Cl + Pb/Na → Pb(C2H5)4 + NaCl
      former
      antiknock
      additive
4 C2H5Cl + Pb/Na → Pb(C2H5)4 + NaCl
      former
      antiknock
      additive

```

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}`
- ▶ `\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*`.

```

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

```

```

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

```

18. Ambienti di reazione

<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 \rightarrow B + C \quad \{2\} D + E \rightarrow F \quad \{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 \rightarrow H + I J + K \rightarrow 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 \rightleftharpoons H2CO3 \quad [R 4] </pre>
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------

Dalla versione 3.3 i riferimenti incrociati e il comando `\intertext` di $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}$ math funzionano come previsto:

```

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 \&<=> 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 simili all'interno degli ambienti `reaction`: nella maggior parte dei casi scombinano l'allineamento corretto. Come impostazione predefinita le cariche riconoscono automaticamente l'impostazione dell'opzione `circled` all'interno degli ambienti, in modo che i comandi non siano nemmeno necessari.

³⁴ Messo a disposizione dal pacchetto `mathtools`.

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 tramite

► `\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*}
```

$$\begin{array}{ccccccc} A & \longrightarrow & B & & \longrightarrow & C & & \longrightarrow & D & & \{7\} \\ aaaaa & \longrightarrow & bbbbb & & \longrightarrow & ccccc & & \longrightarrow & ddddd & & \{8\} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccccc} A & \longrightarrow & B & & C & \longrightarrow & D \\ aaaaa & \longrightarrow & bbbbb & & ccccc & \longrightarrow & ddddd \end{array}$$

18.3. Lista delle reazioni

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

► `\listofreactions`

1 <code>\listofreactions</code>	
Elenco delle reazioni	
Reazione {1}	34
Reazione {2}	35
Reazione {3}	35
Reazione [R 4]	35
Reazione {5}	35
Reazione {6}	35
Reazione {7}	36
Reazione {8}	36
Reazione {9}: Autoprotolisi	37
Reazione {10}: first step of chain	38
Reazione {11}: second step of chain	38
Reazione {12}: Sintesi di alcani	62

L'output può essere adattato con le opzioni seguenti:

reaction ► `list-name` = <name of the list> → Imposta il titolo della lista. Default = List of reactions

reaction ► `list-entry` = <prefix to each entry> → Prefisso di ogni voce. Default = Reaction

option Entrambi i valori predefiniti reagiscono all'opzione di lingua `italian`, variando rispettivamente a "Elenco delle reazioni" e "Reazione". 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	<code>\begin{reaction}[Autoprotolisi]</code>	
2	<code>2 H2O <<=> H3O+ + OH-</code>	$2 \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$ {9}
3	<code>\end{reaction}</code>	

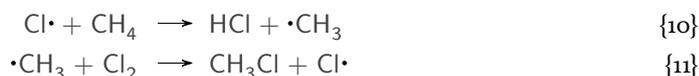
Questo non funzionerà quando viene impiegato l'ambiente `reactions`. In questo caso è possibile ricorrere a

► `\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}

```



Nota bene: non è necessario impiegare i comandi “phantom”, se il formato degli atomi non è stato variato (vedi il paragrafo 30 a pagina 59).

19. Fasi

19.1. Principi

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

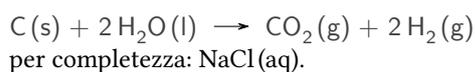
- ▶ `\sld` → (s)
- ▶ `\lqd` → (l)
- ▶ `\gas` → (g)
- ▶ `\aq` → (aq)

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.

```



La raccomandazione IUPAC³⁵ per indicare uno stato di aggregazione è di porlo tra parentesi dopo la formula [Coh+08]; è tuttavia molto diffusa anche 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:

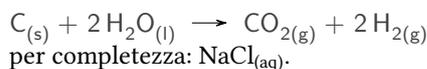
phases ▶ pos = side|sub → Cambia la posizione dell’indicatore di fase. Default = side

phases ▶ **space** = <dim> → Varia l'interspazio tra formula e indicatore di fase per **pos** = side. Una grandezza di \TeX . 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

In base al argomento del testo può essere necessario indicare ulteriori stati di aggregazione; questi possono essere definiti convenientemente attraverso:

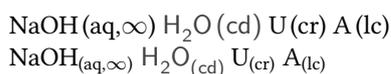
- ▶ `\DeclareChemPhase{<cmd>}[<german>]{<english>}`
- ▶ `\RenewChemPhase{<cmd>}[<german>]{<english>}`
- ▶ `\phase{<phase>}` → Quando è necessario impiegare la fase solo poche volte.

`\DeclareChemPhase` definisce la fase solamente se `<cmd>` non esiste ancora; altrimenti **CHEMMACROS** dà un avvertimento o un errore, dipendentemente dall'opzione `strict`. `\RenewChemParticle` definisce una fase *solamente* se `<cmd>` esiste 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

```



20. Proiezioni di Newman

CHEMMACROS mette a disposizione il comando

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

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

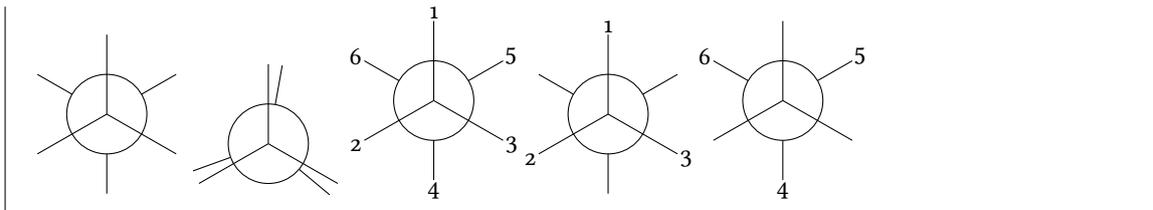
```

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

```

³⁵ Ringrazio Paul King del suggerimento.

20. Proiezioni di Newman



Sono disponibili alcune opzioni per adattare il comando:

newman ▶ **angle** = <angle> → Angolo predefinito (in gradi). Default = 0

newman ▶ **scale** = <factor> → Scala l'intera proiezione. Default = 1

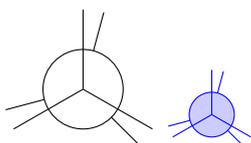
newman ▶ **ring** = <tikz> → Adatta l'aspetto dell'anello con chiavi di **TikZ**.

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

newman ▶ **back-atoms** = <tikz> → Adatta solo gli atomi posteriori.

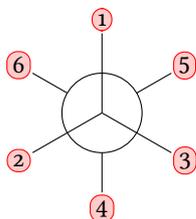
```
1 \chemsetup[newman]{angle=45} \newman{}
2 \newman[scale=.75,ring={draw=blue,fill=blue!20}]{}

```



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

```



```
1 \chemsetup[newman]{
2   atoms = {draw=red,fill=red!20,inner sep=2pt,rounded corners},
3   back-atoms = {draw=blue,fill=blue!20,inner sep=2pt,rounded corners}
4 }
5 \newman{1,2,3,4,5,6} \newman(170){1,2,3,4,5,6}

```



21. Orbitali s, p e ibridi

CHEMMACROS mette a disposizione un comando per rappresentare alcuni orbitali:

► `\orbital[<options>]{<type>}`

Sono disponibili i seguenti tipi orbitalici per `{<type>}`:

s

p

sp

sp²

sp³



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

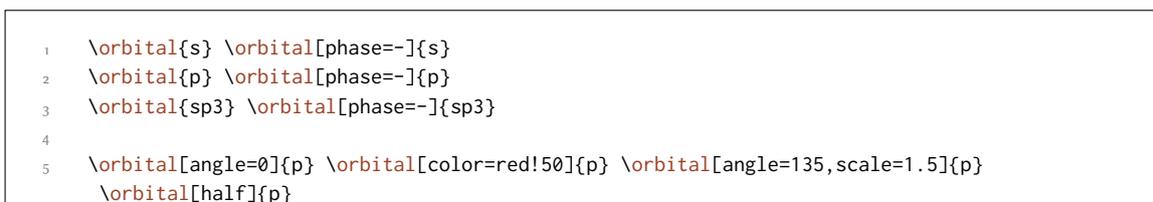
`orbital` ► `phase = +/-` → Varia la fase dell'orbitale (tutti i tipi).

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

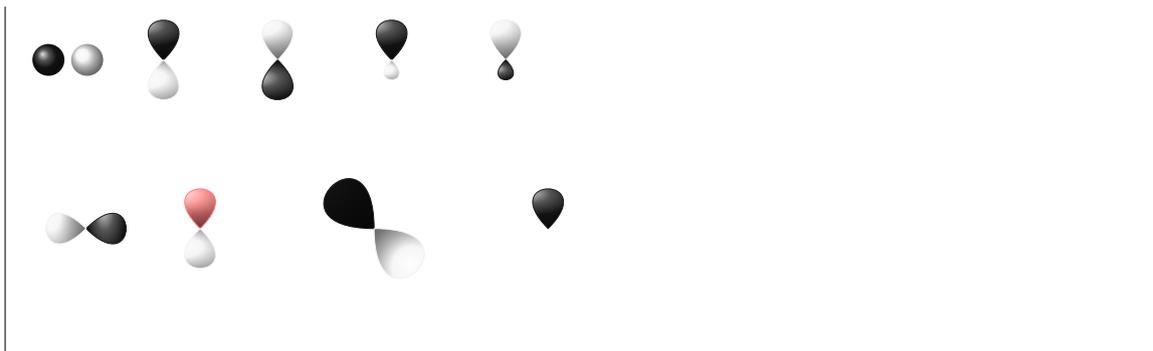
`orbital` ► `color = <color>` → Varia il colore dell'orbitale (tutti i tipi).

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

`orbital` ► `half = true|false` → Raffigura solo metà orbitale (solo per `<type> = p`).



21. Orbitali s, p e ibridi



Esistono due opzioni ulteriori attraverso le quali si può influenzare il comportamento di `TikZ`:

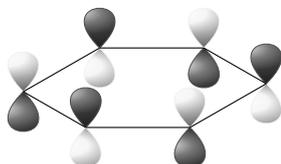
`orbital` ► `overlay = true|false` → L'orbitale "non ha bisogno di spazio"; viene disegnato con la chiave di `TikZ overlay`.

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

```

1 \hspace{1cm}
2 \chemsetup[orbital]{
3   overlay,
4   p/color = black!70
5 }
6 \setbondoffset{0pt}
7 \chemfig{?\orbital{p}-[1.3]{\orbital[phase=-]{p}}-[:30,1.1]\orbital{p}
8 }-[:150,.9]{\orbital[phase=-]{p}}-[4,1.3]\orbital{p}-[:150,1.1]{\orbital[phase
9 =-]{p}}??}
10 \vspace{7mm}

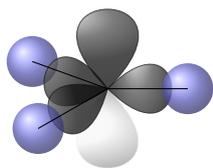
```



```

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 passate 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 pratico di mhchem:

24. Fattori stechiometrici

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>	$[\text{AgCl}_2]^-$
7	<code>\ch{Y^{99+}} \\\</code>	Y^{99+}
8	<code>\ch{Y^{99+}} \\\</code>	Y^{99+}
9	<code>\ch{H2_{(aq)}} \\\</code>	$\text{H}_{2(\text{aq})}$
10	<code>\ch{NO3-} \\\</code>	NO_3^-
11	<code>\ch{(NH4)2S} \\\</code>	$(\text{NH}_4)_2\text{S}$
12	<code>\ch{^{227}_{90}Th+} \\\</code>	$^{227}_{90}\text{Th}^+$
13	<code>\$V_{\ch{H2O}}\$ \\\</code>	$V_{\text{H}_2\text{O}}$
14	<code>\ch{Ce^{IV}} \\\</code>	Ce^{IV}
15	<code>\ch{KCr(SO4)2 * 12 H2O}</code>	$\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$

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. A titolo di esempio, `\ch{2H2O}` viene considerata come *una* particella, in questo caso una formula bruta.

1	<code>\ch{2H2O} \\\</code>	${}_2\text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch{2 H2O}</code>	$2 \text{H}_2\text{O}$

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

Un'ulteriore differenza importante è che **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 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 i seguenti: `.`, `_`, `/`, `()`

24. Fattori stechiometrici

```

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 reso allo 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+o8]:



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 in che modo vengono rappresentate le frazioni. Default = math
- ▶ **stoch-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}
 $\frac{3}{2}$  1 $\frac{1}{2}$ 

```

CHEMFORMULA definisce l'istanza `formula-text-frac`, che può essere adattata alle proprie necessità. Le impostazioni di default sono elencate di seguito:

25. Formule brute

1	<code>\ch{CaSO4.H2O}</code>	$\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch{CaSO4*H2O}</code>	$\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Dato che le cifre all'interno di 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>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch{Na3PO4* 12 H2O}</code>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$
3	<code>\ch{Na3PO4 * 12 H2O}</code>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$

25.2. Pedici

Tutte le cifre in una sostanza vengono considerate come pedici.

1	<code>\ch{H2SO4}</code>	H_2SO_4
---	-------------------------	-------------------------

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

1	<code>\ch{A_nB_m}</code>	A_nB_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_nB_m
2	<code>\ch{NaCl_{(aq)}}</code>	$\text{NaCl}_{(\text{aq})}$

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>	$A_2B_3 A_2B_3$
---	------------------------------------------------------	-----------------

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 da questo problema.

25.4. Cariche ed altri apici

Principi Quando una formula brutta *termina* 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>	$A\equiv B \quad AB^+$
2	<code>\ch{A-B} \ch{AB-}</code>	$A-B \quad AB^-$

Per gruppi di carica più lunghi oppure altri apici è possibile utilizzare la sintassi matematica, che riconosce i gruppi e permette il modo matematico al loro interno. Entro 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>	$RNO_2^{\cdot-}$
6	<code>\ch{^31H} \\\</code>	3_1H
7	<code>\ch{^{14}6C} \\\</code>	${}^{14}_6C$
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 in modo analogo:

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

Comandi ionici All'interno di `\ch` non sono necessari comandi del tipo di `\mch`; difatti è opportuno evitarli, dato che possono scombicare 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 Nel caso apice e pedice siano direttamente consecutivi in una formula brutta gli apici si comportano diversamente in base alla loro posizione.

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>	

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

25. Formule brute

- Quando una formula *inizia* con un apice, gli apici e i pedici vengono giustificati 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 51s).

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

25.5.1. Legami nativi

Vi sono tre tipi di quelli chiamati d'ora in poi "legami nativi".

1	singolo: <code>\ch{CH3-CH3} \\</code>	singolo: $\text{CH}_3\text{-CH}_3$
2	doppio: <code>\ch{CH2=CH2} \\</code>	doppio: $\text{CH}_2\text{=CH}_2$
3	triplo: <code>\ch{CH+CH}</code>	triplo: $\text{CH}\equiv\text{CH}$

25.5.2. Legami flessibili

Predefiniti Oltre i tre legami nativi ve ne sono alcuni altri che possono essere richiamati tramite

► `\bond{<bond name>}`

I tipi predefiniti sono mostrati nella tabella 3.

Tabella 3: Legami disponibili con `\bond`.

Nome	Aspetto	Alias
single	—	normal, sb
double	=	db
triple	≡	tp
dotted	⋯	semisingle
deloc	≡	semidouble
tdeloc	≡	semitriple
co>	→	coordright
<co	←	coordleft

```
1 \ch{C\bond{sb}C\bond{db}C\bond{tp}C\bond{deloc}C\bond{tdeloc}C\bond{co>}C\bond{<co}C}
```

$\text{C}-\text{C}=\text{C}\equiv\text{C}\equiv\text{C}\rightarrow\text{C}\leftarrow\text{C}$

Legami personalizzati CHEMFORMULA offre dei comandi per definire dei tipi di legame personali:

- ▶ `\DeclareChemBond{<name>}{<code>}`
- ▶ `\RenewChemBond{<name>}{<code>}`
- ▶ `\DeclareChemBondAlias{<new name>}{<old name>}`
- ▶ `\ShowChemBond{<name>}`

Il loro uso è facilmente descritto da un esempio. Vediamo come sono definiti il legame `single` ed il legame `co`:

```

1 \DeclareChemBond{single}
2   { \draw[chembond] (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond-end) ; }
3 \DeclareChemBond{coordright}
4   { \draw[chembond,butt cap->] (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond
5     -end) ; }
6 \DeclareChemBondAlias{co}{coordright}

```

Due punti sono importanti: i nomi delle coordinate di partenza e di arrivo, `chemformula-bond-start` e `chemformula-bond-end`, e lo stile `TikZ` dei legami `chembond`.

Supponiamo di voler definire un particolare tipo di legame tratteggiato, ad esempio nel modo seguente:

```

1 \usetikzlibrary{decorations.pathreplacing}
2 \makeatletter
3 \DeclareChemBond{dashed}
4   {
5     \draw[
6       chembond,
7       decorate,
8       decoration={ticks,segment length=\chemformula@bondlength/10,amplitude=1.5
9         pt}]
10      (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond-end) ;
11   }
12 \makeatother
13 \chemsetup[chemformula]{bond-length=2ex}
14 \ch{C\bond{dashed}C}

```

C====C

L'ultimo esempio mostra un'ulteriore macro: `\chemformula@bondlength`. Esiste solamente per accedere direttamente alla lunghezza di legame impostata direttamente con `bond-length`.

25.6. Personalizzazione

Le seguenti opzioni permettono di adattare l'output:

- ▶ `subscript-vshift = <dim>` → Ulteriore spostamento verticale dei pedici. Default = `0pt`

25. Formule brute

- ▶ `subscript-style = text|math` → Stile usato per i pedici. Default = text
- ▶ `charge-hshift = <dim>` → Spostamento degli apici seguenti un pedice. Default = .5ex
- ▶ `charge-style = text|math` → Stile usato per gli apici. Default = text
- ▶ `adduct-space = <dim>` → Spazio vuoto ai lati del punto di addotto. Default = .1333em
- ▶ `bond-length = <dim>` → Lunghezza dei legami. Default = 1.1667ex.
- ▶ `bond-offset = <dim>` → Distanza tra atomo e legame. Default = .07em
- ▶ `bond-style = <tikz>` → Opzioni di TikZ per i legami. Inizialmente vuoto.
- ▶ `radical-style = <tikz>` → Opzioni di TikZ per il punto radicalico. Inizialmente vuoto.
- ▶ `radical-radius = <dim>` → Il raggio del punto radicalico. Default = .2ex

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>	$\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$
---	---------------------------------------------	----------------------------------------------

Queste vengono spostate quando *seguono* un pedice, seguendo la raccomandazione IUPAC [Coh+o8, p. 51]. La dimensione dello spostamento può essere impostata con l'opzione `charge-hshift`.

1	<code>\ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\\</code>	
2	<code>\chemsetup[chemformula]{charge-hshift=.5ex}</code>	$\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$
3	<code>\ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\\</code>	$\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$
4	<code>\chemsetup[chemformula]{charge-hshift=.5pt}</code>	$\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$
5	<code>\ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}</code>	

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. Trattandosi di una percezione soggettiva, `CHEMFORMULA` offre sia la possibilità di impostare un valore assoluto per lo spostamento che di spostare completamente l'apice. Nell'ultimo caso va impiegato `charge-hshift = full`.

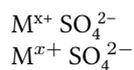
1	<code>\ch[charge-hshift=0pt]{C5H11+} \ch[charge-hshift=0pt]{SO4^2-} \\\</code>
2	<code>\ch{C5H11+} \ch{SO4^2-} \\\</code>
3	<code>\ch[charge-hshift=1ex]{C5H11+} \ch[charge-hshift=1ex]{SO4^2-} \\\</code>
4	<code>\ch[charge-hshift=full]{C5H11+} \ch[charge-hshift=full]{SO4^2-}</code>

$\text{C}_5\text{H}_{11}^+ \text{SO}_4^{2-}$
 $\text{C}_5\text{H}_{11}^+ \text{SO}_4^{2-}$
 $\text{C}_5\text{H}_{11}^+ \text{SO}_4^{2-}$
 $\text{C}_5\text{H}_{11}^+ \text{SO}_4^{2-}$

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

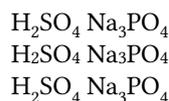
1	<code>\ch{M^x+} \ch{SO4^2-} \\\</code>
2	<code>\chemsetup[chemformula]{charge-style = math}</code>
3	<code>\ch{M^x+} \ch{SO4^2-}</code>

26. Tipi speciali di input



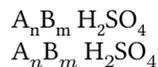
L'opzione `subscript-vshift` può essere impiegata per adattare lo spostamento verticale dei pedici.

```
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 variare lo spazio a sinistra e destra del segno di addotto.

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

$$Na_3PO_3 \cdot H_2O$$
$$Na_3PO_3 \cdot H_2O$$

La lunghezza dei legami va modificata con:

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

$$\text{single: } CH_3 \text{—} CH_3$$
$$\text{double: } CH_2 = CH_2$$
$$\text{triple: } CH \equiv CH$$

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}
```

$$H-H + N \equiv N + O=O$$
$$H-H + N \equiv N + O=O$$

26. Tipi speciali di input

Esistono alcuni “tipi di input speciali”.

26.1. Token a input singolo

Questo tipo è composto da un singolo token compreso 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:

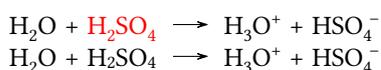
- ▶ `plus-space = <dim>` → Una lunghezza di TeX. Default = .3em

1	<code>\ch{A + B}\</code>	A + B
2	<code>\ch[plus-space=4pt]{A + B}</code>	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`.

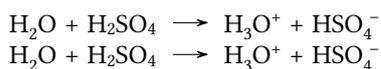
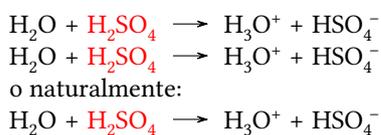
1	<code>\ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-> H3O+ + HSO4-} \</code>
2	<code>\ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-> H3O+ + HSO4-}</code>



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

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

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



Si tratta di una modalità sperimentale che potrebbe 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: non sono ammessi e devono essere inseriti 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'}

II  

CaO  

...Na + ...Cl2 → ...NaCl  

A -> B

```

Questo stratagemma sarà necessario in pochi casi; ma quando risulta difficoltoso impiegare un comando all'interno di `\ch` può essere utile applicare il modo protetto.

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

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

► `math-space = <dim>` Una lunghezza di $\text{T}_\text{E}_\text{X}$. Default = .1667em

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

28. Frecce

28.1. Tipi di frecce

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

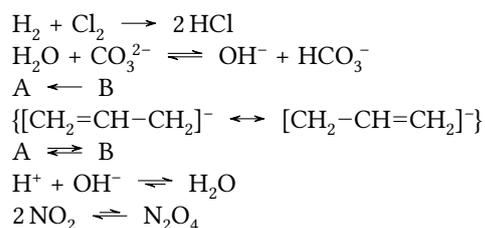
- ▶ `\ch{ -> }` → → freccia semplice a destra
- ▶ `\ch{ <- }` → ← freccia semplice a sinistra
- ▶ `\ch{ -/> }` → ⇏ non reagisce (destra)
- ▶ `\ch{ </- }` → ⇏ non reagisce (sinistra)
- ▶ `\ch{ <-> }` → ↔ doppia freccia di mesomeria
- ▶ `\ch{ <> }` → ⇌ la reazione avviene in entrambe le direzioni
- ▶ `\ch{ == }` → = equazione stechiometrica
- ▶ `\ch{ <=> }` → ⇌ doppia freccia di equilibrio
- ▶ `\ch{ <=>> }` → ⇌ equilibrio spostato a destra
- ▶ `\ch{ <<=> }` → ⇌ equilibrio spostato a sinistra
- ▶ `\ch{ <o> }` → ⇌ 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>] }`

1	<code>\ch{A ->[a] B} \\</code>	$A \xrightarrow{a} B$
2	<code>\ch{A ->[a][b] B} \\</code>	$A \xrightarrow[b]{a} B$
3	<code>\ch{A ->[\SI{100}{\celsius}] B}</code>	$A \xrightarrow{100^\circ\text{C}} B$

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

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

Quando sono presenti degli 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 modo in cui `\ch` legge il suo argomento.

1	<code>\ch{A ->[a] B} \\</code>	$A \xrightarrow{a} B$
2	<code>\ch{A ->[ab] B} \\</code>	$A \xrightarrow{ab} B$
3	<code>\ch{A ->[abc] B} \\</code>	$A \xrightarrow{abc} B$
4	<code>\ch{A ->[abc~abc] B} \\</code>	$A \xrightarrow{abc\ abc} B$
5	% needs the 'chemfig' package:	
6	<code>\setatomsep{15pt}</code>	
7	<code>\ch{A ->["\chemfig{-[:30]-[: -30]OH}"] B} \\</code>	$A \xrightarrow{\text{OH}} B$
8	<code>\ch{A ->[[]] B} vs. \ch{A ->[\[\]] B}</code>	$A \xrightarrow{[] } B$ 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 \TeX . Default = 1.5ex
- ▶ `arrow-yshift` = <dim> → Sposta una freccia verso l'alto (valore positivo) o verso il basso (valore negativo); una dimensione di \TeX . Default = 0pt
- ▶ `arrow-ratio` = <factor> → Il rapporto tra le lunghezze delle 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 freccia; una dimensione di \TeX . Default = 1ex
- ▶ `label-offset` = <dim> → Lo spazio tra freccia ed etichette; una dimensione di \TeX . Default = 2pt
- ▶ `label-style` = → Il corpo del font 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 $\frac{x}{y} \rightleftharpoons$ B
più lunga: A $\frac{x}{y} \rightleftharpoons$ B
più alta: A $\frac{x}{y} \rightleftharpoons$ B
più bilanciata: A $\frac{x}{y} \rightleftharpoons$ B
etichetta più distante: A $\frac{x}{y} \rightleftharpoons$ B
distanza maggiore dalle formule: A $\frac{x}{y} \rightleftharpoons$ B
etichette più piccole: A $\frac{x}{y} \rightleftharpoons$ B

28.4. Modificare 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 frecce proprie sono necessarie conoscenze fondamentali di `TikZ`.³⁶ Si consiglia l'uso di alcune coordinate predefinite:

³⁶ Si rimanda alla guida `pgfmanual`.

29. Didascalie di formule

(cf_arrow_start) L'inizio della freccia.

(cf_arrow_end) La fine della freccia.

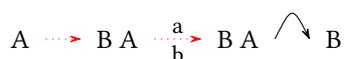
(cf_arrow_mid) La metà della freccia.

(cf_arrow_mid_start) L'inizio della freccia più breve nelle frecce del tipo <=>>.

(cf_arrow_mid_end) La fine della freccia più breve nelle frecce del tipo <=>>.

cf, left cf, right cf Punte 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>}`

► `\ShowChemArrow{<tokens>}`

Il secondo mostra la definizione attuale, 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, che 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:

30. Formato e carattere

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

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

```
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  water  2n - 1  H2O   oxonium
```

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

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

29.2. Personalizzazione

CHEMFORMULA mette a disposizione due opzioni per adattare il testo:

- **name-format** = <commands> → Il formato del testo; può essere inserito 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}
```

```
H2SO4 → B
acido
H2SO4 → B
acido
H2SO4 → B
N: acido
H2SO4 → B
acido
```

30. Formato e carattere

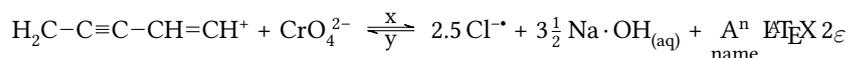
Come impostazione predefinita **CHEMFORMULA** non varia l'output delle formule. Prendiamo come esempio un input privo di senso chimico per dimostrare tutte le capacità di **CHEMFORMULA**:

30. Formato e carattere

```

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

```

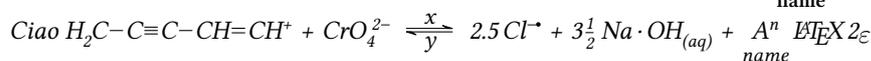
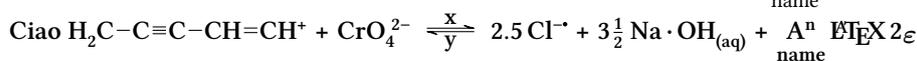
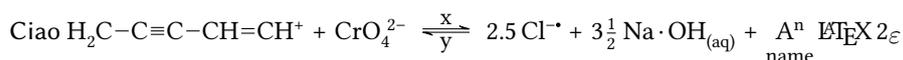


Ora variamo alcuni aspetti del testo e osserviamo i risultati:

```

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

```



Come si osserva la maggior parte delle funzioni adattano le caratteristiche del font circostante.

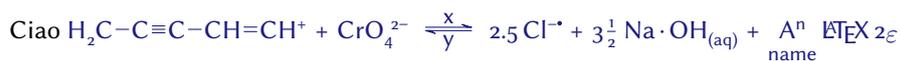
Quando si vuole cambiare questo comportamento preimpostato oppure il formato di default è possibile usare la seguente opzione:

► **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

```



Si possono inoltre variare specificatamente la famiglia, la serie e la forma del font dell'output:

► **font-family** = <family> → Varia la famiglia con: `\fontfamily{<family>}\selectfont`.

► **font-series** = <series> → Varia la serie con: `\fontseries{<series>}\selectfont`.

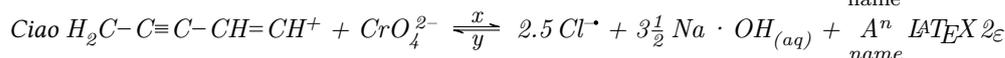
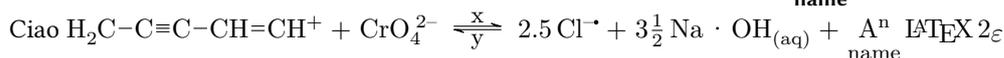
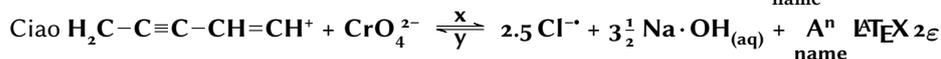
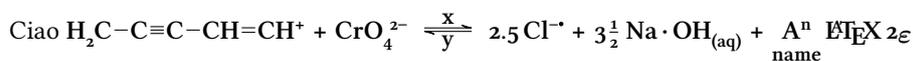
► **font-shape** = <shape> → Varia la forma con `\fontshape{<shape>}\selectfont`.

31. Utilizzo in ambienti matematici

```

1 % sempre in nero:
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

```



Quando si impiegano \XeTeX oppure \LuaTeX avendo caricato il pacchetto fontspec,³⁷ è possibile variare il carattere di `CHEMFORMULA` anche nel modo seguente:

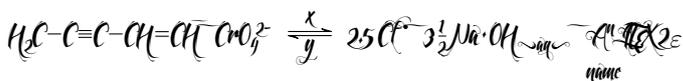
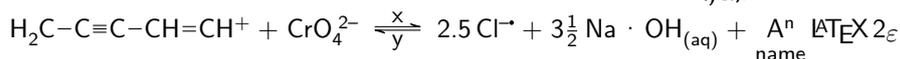
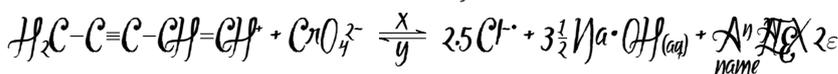
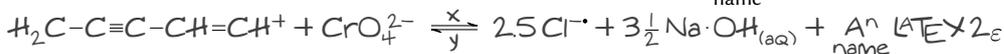
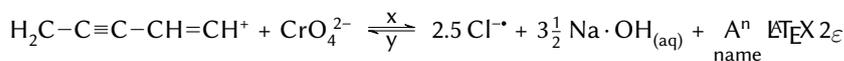
► `font-spec` = {} oppure con opzioni

► `font-spec` = {[<options>]}

```

1 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Linux Biolinum O}} \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

```

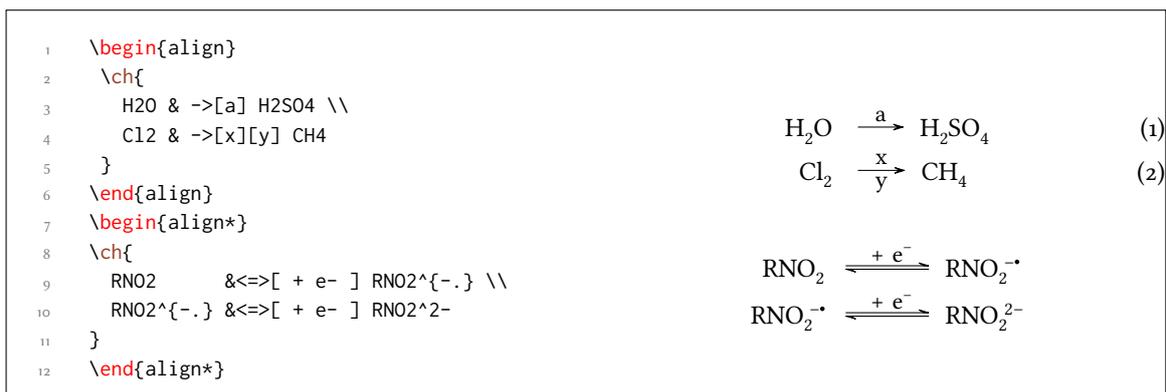


31. Utilizzo in ambienti matematici

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`.

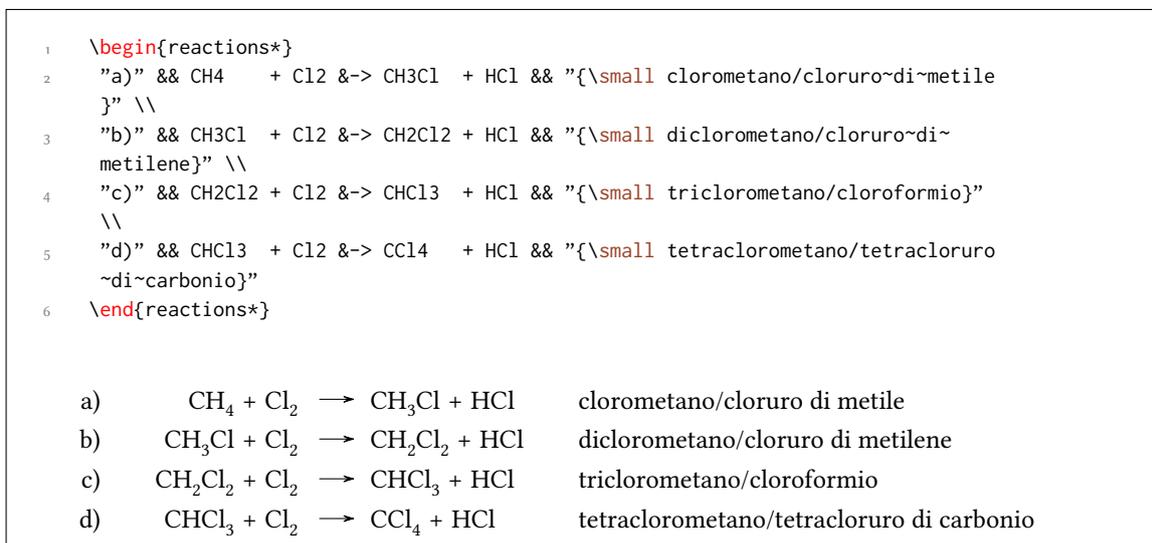
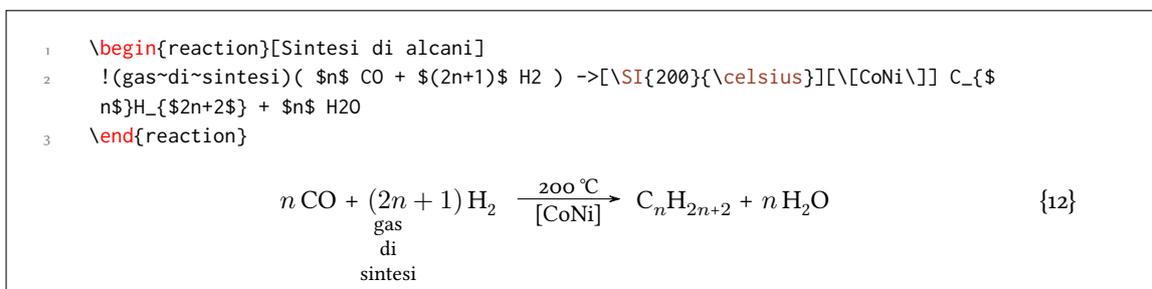
³⁷ CTAN: fontspec

32. Ulteriori esempi



32. Ulteriori esempi

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

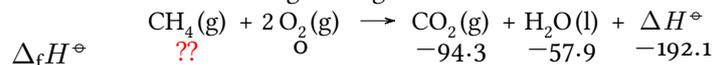
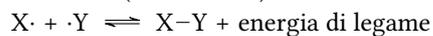
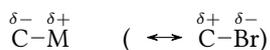


32. Ulteriori esempi

```

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}{??})( CH
4\gas{ } ) + !(\num{0})( 2 O2\gas{ } ) -> !(\num{-94.3})( CO2\gas{ } ) + !(\num
{-57.9})( H2O\lqd{ } ) + !(\num{-192.1})( "\State{H}" )}

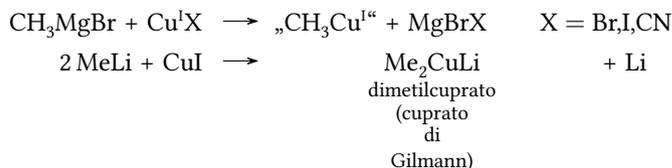
```



```

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 \quad \quad \quad &-> !(dimetilcuprato~(cuprato~di~Gilmann))( Me2CuLi )
+ Li
4 \end{reactions*}

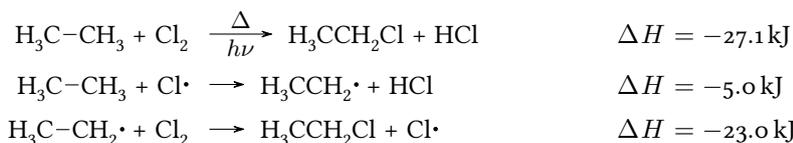
```



```

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

```



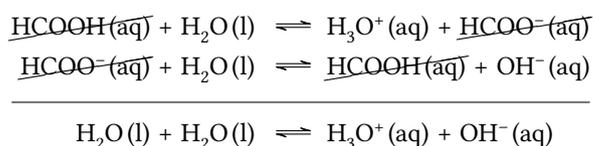
L'esempio seguente mostra come si può rappresentare la semplificazione di sistemi di reazioni.³⁸

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

```

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} \\
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.

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 \ghs{h}{200} \\
2 \ghs{H}{224} \\
3 \ghs{euh}{001} \\
4 \ghs{Euh}{202} \\
5 \ghs{p}{201}

```

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 \ghs{h}{200} \\
2 \ghs[space=\,]{h}{200} \\
3 \ghs*{h}{200} \\
4 \ghs[hide]{h}{200}
```

34.2. Frasi con segnaposto

Alcune frasi utilizzano dei segnaposto; ve ne sono quattro diversi:

- *<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}
```

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

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}
```

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}
```

Con le seguenti opzioni questi buchi possono essere riempiti:

- ▶ `text` = <text> → Riempie il “buco 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 la massa in chilogrammi.
- ▶ `lbs-mass` = <num> → Inserisce la 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}
```

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}
```

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. La tabella 4 mostra tutti i pittogrammi e i nomi dei loro file, o meglio: mostra i nomi dei file da utilizzare con il comando `\ghspic`. In realtà i file si chiamano `ghsystem_<name>.<filetype>`, dove `<filetype>` è un'estensione tra `eps`, `pdf`, `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>}`

35. Pittogrammi

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



Tabella 4: Tutti i pittogrammi GHS disponibili.

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

nome	pittogramma	nome	pittogramma
bottle-2-white			
acid		acid-8	
skull		skull-2	
skull-6			
exclam			
health			
aqpol			

35.2. Il tipo dell'immagine dipende dal compilatore

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, X \LaTeX 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|pdf|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 `italian` di `CHEMMACROS`, ma non riconosce (ancora) la lingua impostata con `babel`³⁹ o `polyglossia`.⁴⁰

È possibile scegliere la lingua anche in modo esplicito.

³⁹ CTAN: `babel` ⁴⁰ CTAN: `polyglossia`

- ▶ `language = english|german|italian`

```

1 \ghs{h}{201}
2
3 \chemsetup[ghsystem]{language=english}
4 \ghs{h}{201}

```

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 ulteriore aiuto necessario.

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 = Continua nella prossima pagina
- ▶ `table-caption = <text>` → Didascalia della tabella. Default = Elenco di tutte le frasi H, EUH e P.
- ▶ `table-caption-short = <text>` → `<short>` in `\caption[<short>]{<text>}`.
- ▶ `table-label = <text>` → L'etichetta per l'uso di riferimenti incrociati con i 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 che sia caricato il pacchetto `booktabs`.⁴² Default = `default`
- ▶ `table-top-head-rule = default|booktabs|none` → Varia la riga in modo esplicito. Default = `default`
- ▶ `table-head-rule = default|booktabs|none` → Varia la riga in modo esplicito. Default = `default`
- ▶ `table-foot-rule = default|booktabs|none` → Varia la riga in modo esplicito. Default = `default`
- ▶ `table-last-foot-rule = default|booktabs|none` → Varia la riga in modo esplicito. Default = `default`

⁴¹ contact@mychemistry.eu ⁴² CTAN: `booktabs`

Il codice seguente mostra come è stata creata la tabella 5:

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

Tabella 5:

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 richiamate senza assegnargli 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</u> false	false	pagina 5
<code>circled</code>	<code>option</code>	<u>formal</u> all 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</u> false	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 mhchem	chemformula	pagina 6
<code>Nu</code>	<code>option</code>	chemmacros mathspec	chemmacros	pagina 6
<code>strict</code>	<code>option</code>	<u>true</u> false	false	pagina 6
<code>synchronize</code>	<code>option</code>	<u>true</u> false	false	pagina 6
<code>greek</code>	<code>option</code>	math textgreek <u>upgreek</u>	upgreek	pagina 6

Panoramica delle opzioni e modalità di adattamento

opzione	modulo	valori	default	
xspace	option	<u>true</u> false	true	pagina 6
<code>\ba, \Nu:</code>				
elpair	particle	<u>dots</u> dash false	false	pagina 10
comandi IUPAC:				
break-space	iupac	<dim>	.01em	pagina 13
bridge-number	iupac	sub super	sub	pagina 16
cip-kern	iupac	<dim>	.1ex	pagina 14
coord-use-hyphen	iupac	<u>true</u> false	true	pagina 16
hyphen-pre-space	iupac	<dim>	.01em	pagina 12
hyphen-post-space	iupac	<dim>	-.03em	pagina 13
<code>\DeclareChemLatin:</code>				
format	latin	<anything>	<code>\itshape</code>	pagina 17
<code>\pch, \mch, \fpch, \fmch:</code>				
append	charges	<u>true</u> false	false	pagina 19
acido/base:				
p-style	acid-base	slanted italics upright	upright	pagina 18
<code>\ox:</code>				
align	ox	center right	center	pagina 20
parse	ox	<u>true</u> false	true	pagina 20
roman	ox	<u>true</u> false	true	pagina 20
pos	ox	top super side	top	pagina 20
explicit-sign	ox	<u>true</u> false	false	pagina 20
decimal-marker	ox	comma point	point	pagina 20
align	ox	center right	center	pagina 20
<code>\OX, \redox:</code>				
dist	redox	<dim>	.6em	pagina 24
sep	redox	<dim>	.2em	pagina 24
<code>\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:</code>				
exponent		<anything>	<code>\standardstate</code>	pagina 26
delta		<anything> false		pagina 26
subscript		left right		pagina 26
unit		<unit>		pagina 26
<code>\DeclareChemState, \RenewChemState:</code>				
exponent		<anything>	<code>\standardstate</code>	pagina 26
delta		<anything> false		pagina 26
subscript		<anything>		pagina 26
subscript-left		<u>true</u> false		pagina 27
<code>\State:</code>				
exponent	state	<anything>	<code>\standardstate</code>	pagina 27
delta	state	<anything> false		pagina 27
subscript-left	state	<u>true</u> false		pagina 27
<code>\NMR, \begin{spectroscopy} \end{spectroscopy}:</code>				
unit	nmr	<unit>	<code>\mega\hertz</code>	pagina 30
nucleus	nmr	{<num>,<atom symbol>}	{1,H}	pagina 30
format	nmr	<anything>		pagina 30
pos-number	nmr	side sub	side	pagina 30
coupling-unit	nmr	<unit>	<code>\hertz</code>	pagina 30
parse	nmr	<u>true</u> false	true	pagina 30
delta	nmr	<anything>		pagina 30
list	nmr	<u>true</u> false	false	pagina 30

opzione	modulo	valori	default	
<code>list-setup</code>	<code>nmr</code>		(vedi il testo)	pagina 30
<code>use-equal</code>	<code>nmr</code>	<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 30
<code>\DeclareChemReaction:</code>				
<code>star</code>		<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 36
<code>arg</code>		<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 36
<code>list-name</code>	<code>reaction</code>	<code><anything></code>	Elenco delle reazioni	pagina 37
<code>list-entry</code>	<code>reaction</code>	<code><anything></code>	Reazione	pagina 37
<code>\mhName:</code>				
<code>align</code>	<code>mhName</code>	<code><alignment></code>	<code>\centering</code>	pagina 33
<code>format</code>	<code>mhName</code>	<code><commands></code>		pagina 33
<code>fontsize</code>	<code>mhName</code>	<code><fontsize></code>	<code>\tiny</code>	pagina 33
<code>width</code>	<code>mhName</code>	<code><dim></code>	<code>auto</code>	pagina 33
fasi:				
<code>pos</code>	<code>phases</code>	<code>side sub</code>	<code>side</code>	pagina 38
<code>space</code>	<code>phases</code>	<code><dim></code>	<code>.1333em</code>	pagina 39
<code>\newman:</code>				
<code>angle</code>	<code>newman</code>	<code><angle></code>	<code>0</code>	pagina 40
<code>scale</code>	<code>newman</code>	<code><factor></code>	<code>1</code>	pagina 40
<code>ring</code>	<code>newman</code>	<code><tikz></code>		pagina 40
<code>atoms</code>	<code>newman</code>	<code><tikz></code>		pagina 40
<code>back-atoms</code>	<code>newman</code>	<code><tikz></code>		pagina 40
<code>\orbital <type> = s p sp sp2 sp3:</code>				
<code>phase</code>	<code>orbital/<type></code>	<code>+ -</code>	<code>+</code>	pagina 41
<code>scale</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><factor></code>	<code>1</code>	pagina 41
<code>color</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><color></code>	<code>black</code>	pagina 41
<code>angle</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><angle></code>	<code>90</code>	pagina 41
<code>half</code>	<code>orbital/p</code>	<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 41
<code>overlay</code>	<code>orbital</code>	<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 42
<code>opacity</code>	<code>orbital</code>	<code><num></code>	<code>1</code>	pagina 42

Comandi di personalizzazione

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

- ▶ `\DeclareChemArrow` → Definisce una nuova freccia; vedi a pagina 57.
- ▶ `\RenewChemArrow` → Modifica una freccia già esistente.
- ▶ `\DeclareChemBond` → Definisce un nuovo legame; vedi a pagina 50.
- ▶ `\RenewChemBond` → Ridefinisce un legame.
- ▶ `\DeclareChemBondAlias` → Definisce un alias per un legame esistente.
- ▶ `\DeclareChemIUPAC` → Definisce un nuovo comando IUPAC; vedi a pagina 16.
- ▶ `\RenewChemIUPAC` → Ridefinisce un comando IUPAC.
- ▶ `\DeclareChemLatin` → Definisce un nuovo termine latino; vedi a pagina 17.

- ▶ `\RenewChemLatin` → Ridefinisce un termine latino.
- ▶ `\DeclareChemNMR` → Definisce un nuovo comando NMR; vedi a pagina 29.
- ▶ `\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 39.
- ▶ `\RenewChemPhase` → Ridefinisce un comando di fase.
- ▶ `\DeclareChemReaction` → Definisce un nuovo ambiente di reazione; vedi a pagina 36.
- ▶ `\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 avete proposte, se mancano delle funzionalità oppure vengono notati dei bug, non esitate a contattarmi. Se trovate degli errori, siano essi di natura chimica, di documentazione sbagliata ecc. sarei grato di una breve e-mail.⁴³

Se trovate un bug, sarebbe il meglio mandarmi un esempio minimale con cui sia possibile riprodurre il bug. È anche possibile segnalare 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
- Dr. Paul King
- Jonas Rivetti (traduzione delle frasi H e P in italiano; molte grazie anche per la traduzione del manuale!)
- Christoph Schäfer
- Timo Stein

⁴³ contact@mychemistry.eu

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
\- 12
\[..... 56
\] 56
\^ 12

A

\a 13
\abinitio 17
acid-base

p-style 18

Acidi/basi 18

Acido/base 19

\AddRxnDesc 37

adduct-space 51 f.

align 20, 33

Ambienti

experimental ... 8, 29

nmr 30

reaction 8, 34

reaction* 34

reactions 34

reactions* 34

spectroscopy 72

Ambienti di reazione

 34-38

Ambienti matematici . 61 f.

angle 40 f.

\anti 15

append 19

APPENDICE 71

\aq 38

arg 36

arrow-offset 57

arrow-ratio 57

arrow-yshift 57

\atm 17

\atmosphere 17

atoms 40

B

\b 13

\ba 10, 72

babel 69

back-atoms 40

bm 3

\bond 9, 49

bond-length 50 f.

bond-offset 51

bond-style 9, 51

booktabs 70

bpchem 3, 5

bpchem 3, 5, 12

break-space 13

\bridge 8, 16

bridge-number 16

C

C-temperature 66

Cahn-Ingold-Prelog 14

\cal 17

\calory 17

Caricamento del bundle . 5

Caricamento del

pacchetto 5

Cariche ioniche 19 f.

Cariche parziali 21 f.

\centering 73

\ch . 43 f., 46, 48, 53-56, 58,

 60 f.

charge-hshift 49, 51

charge-style 51

charges

append 19

\Chemalpha 6, 10 f.

\Chembeta 10 f.

\ChemDelta 10 f.

\Chemdelta 10

\Chemepsilon 10

\Chemeta 10

chemfig 10, 22

CHEMFORMULA .. 43-64

\Chemgamma 10

\Chemkappa 10

CHEMMACROS 9-43

\Chemmu 10

\Chemnu 10

\Chemomega 10

\Chempi 10

\Chemrho 10

\chemsetup . 7, 31, 44, 64, 71

\Chemsigma 10

chemstyle 10, 17 f.

\cip 14

cip-kern 9, 14

circled 6, 11, 35

circletype 6

\cis 15

cis/trans 15

\cmc 18

cmversion 6

color 41

Comandi per mhchem

 33 f.

compound-sep 57

Configurazione assoluta . 15

cool 13, 15

coord-use-hyphen 16

coupling-unit 30

D

\D 13 ff.

\d 13

\data 29 f.

\data* 29

decimal-marker ... 20, 45

\DeclareChemArrow . 57, 73

\DeclareChemBond .. 50, 73

\DeclareChemBondAlias 50,

 73

\DeclareChemIUPAC .. 16, 73

\DeclareChemLatin 17, 72 f.

INDICE ANALITICO

- `\DeclareChemNMR` . . . 29 f., 74
`\DeclareChemParticle` 11 f.,
 74
`\DeclareChemPhase` . 39, 74
`\DeclareChemReaction`. 36,
 73 f.
`\DeclareChemState` . . 26 f.,
 72, 74
`\delm` 22
`\delp` 21
`delta` 26 f., 30
Didascalie di formule . 58 f.
 Personalizzazione . . 59
 sintassi 58
`dist` 24
`dots` 66
E
`\E` 13, 15
`effect` 66
`\El` 10
`\el` 9
`elpair` 10
`\Enthalpy` 25 f., 72
`\Entropy` 25, 72
`environ` 3
`experimental` (amb.) . 8, 29
`explicit-sign` 20 f.
`exponent` 26 f.
`exposure` 66
F
`F-temperature` 66
Fasi 38
 Principi 38
 proprie 39
Fattori stechiometrici 44 ff.
 nicefrac 46
 space 46
 xfrac 45
`\fdelm` 22
`\fdelp` 22
`fill-in` 65
Fischer 14
`\fmch` 19, 72
`\fminus` 10
`font-family` 60
`font-series` 60
`font-shape` 60
`font-spec` 61
`fontsize` 33
`fontspec` 61
`format` 17, 30, 33, 60
Formato e carattere . . 59 ff.
Formle brute
 Pedici 47
Formule brute 46–52
 Addotti 46
 Apici 48
 Comandi di carica 48
 Comportamento . 48
 Cariche 48
 Spostamento 51
 Comandi 47
 Legami 49
 Lunghezza 52
 Pedici
 Spostamento 52
 Personalizzazione . . 50
`\fpch` 19, 72
`\fplus` 6, 10
`frac-style` 45 f.
Fra di rischio e sicurezza
 64–67
Frecce 55–58
 Adattamento 56
 Etichettazione 56
 Tipi 55
 tipi
 modificare 57
`\fscrm` 22
`\fscrp` 22
`\fsscrm` 22
`\fsscrp` 22
G
`\g` 13
`\gas` 38
`german` 8
`ghs` 6
`\ghs` 64
`\ghs*` 64
`\ghslistall` 70
`\ghspic` 67
GHSYSTEM 64–71
 Chiamata 64
 Frasi combinate . . . 67
 Frasi con buchi 66
 Segnaposto 65
`ghsystem` 6
`\Gibbs` 25, 72
`graphicx` 3
`greek` 6, 8, 11
H
`\H` 14
`half` 41
`\hapto` 8, 16
`\hertz` 72
`hide` 65
`\Hpl` 9
`\HtO` 9
`\Hyd` 9
`hyphen-post-space` . . . 13
`hyphen-pre-space` 12
I
`ifpdf` 3
Impostazioni di lingua . 7 f.
`includegraphics` 67
Input protetto 55
 math 54
 text 54
Input protetto 54
`\insitu` 17
Installazione 5
`\intertext` 35
`\invacuo` 17
`italian` 37, 69
`iupac` 6, 13, 16
iupac
 break-space 13
 bridge-number 16
 cip-kern 14
 coord-use-hyphen . . 16
 hyphen-post-space . 13
 hyphen-pre-space . . 12
`\iupac` 12–15

INDICE ANALITICO

- J**
`\J` 29
- K**
`\k` 13
`\Ka` 18
`\Kb` 18
`kg-mass` 66
`\Kw` 18
- L**
`\L` 13 f.
`l3kernel` 3
`l3packages` 3
`label-offset` 57
`label-style` 57
`language` 6, 8, 18, 70
latin
 `format` 17
`\latin` 17
`lbs-mass` 66
`list` 30
`list-entry` 37
`list-name` 37
`list-setup` 30
Lista delle frasi 70 f.
`\listofreactions` 37
`longtable` 3, 70
`\lqd` 8, 38
- M**
`\m` 13
`math-space` 54
`mathspec` 6, 9
`mathtools` 3, 35
`\mch` 19, 35, 48, 72
Meccanismi di reazione
 22 f.
`\mech` 22 f.
`\mega` 72
`\meta` 13, 15
`method` 3, 6, 11, 33, 35
`mhchem` .. 3 f., 6, 11, 30, 33,
 36, 43, 55
mhName
 `align` 33
 `fontsize` 33
 `format` 33
 `width` 33
`\mhName` 33, 73
`\Molar` 18
`\moLar` 18
`\molar` 18
`\MolMass` 18
- N**
`\N` 14
`\n` 14
`name-format` 59
`name-width` 59
newman
 `angle` 40
 `atoms` 40
 `back-atoms` 40
 `ring` 40
 `scale` 40
`\newman` 39, 73
`ngerman` 8
`nicefrac` 3, 46
`\NMR` 5, 28 ff., 72
nmr
 `coupling-unit` 30
 `delta` 30
 `format` 30
 `list` 30
 `list-setup` 30
 `nucleus` 30
 `parse` 30
 `pos-number` 30
 `unit` 30
 `use-equal` 30
`nmr (amb.)` 30
`\NMR*` 28
- Nomi IUPAC** 12–16
 Cahn-Ingold-Prelog 14
 caratteri greci 13
 cis/trans 15
 Eteroatomi 14
 Fischer 14
 orto/meta/para 15
 predefiniti 13
 propri 16
 sin/anti 15
- `tert` 15
`zusammen/entgegen` 15
`\normal` 18
Novità 8 f.
`\ntr` 9
`Nu` 6, 9
`\Nu` 6, 9 f., 72
`\Nuc` 9
`nucleus` 30
Numeri di ossidazione 20 f.
- O**
`\O` 14
`opacity` 42
option
 `bpchem` 5
 `circled` 6
 `circletype` 6
 `cmversion` 6
 `ghsystem` 6
 `greek` 6, 11
 `italian` 37, 69
 `iupac` 6, 13, 16
 `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` 42
 `overlay` 42
 `phase` 41
 `scale` 41
`\orbital` 41, 73
Orbitali 41 ff.
`organs` 66
`\ortho` 15
 orto/meta/para 15
`overlay` 42
`\OX` 23, 72
ox

INDICE ANALITICO

- align 20
 decimal-marker ... 20
 explicit-sign... 20 f.
 parse 20
 pos 20 f.
 roman 20
 \ox 4, 20, 22, 72
 \ox* 4, 21
- P**
 \P 14
 \p 18
 p-style 18
**Panoramica delle opzioni
 (chemmacros)**
 71–74
 \para 15
 parse 20, 30
Particelle, ioni e simboli
 9–12
 predefiniti 9
 proprie 11
particle
 elpair 10
 \pch 19, 72
 \pH 18
 phase 41
 \phase 39
Phasen 39
phases
 pos 38
 space 39
 pic-type 69
Pittogrammi 67 ff.
 \pKa 8, 18
 \pKb 18
 plus-space 53
 \pOH 18
 polyglossia 69
 pos 20 f., 38 f.
 \pos 29
 pos-number 30
PRIMA DI COMINCIARE
 3–9
Proiezioni di Newman
 39 ff.
- \prt 9
- R**
 \R 13 f.
 \Rad 10
 radical-radius 51
 radical-style 51
 \Rconf 15
reaction
 list-entry 37
 list-name 37
 reaction (amb.) 8, 34
 reaction* (amb.) 34
 \reactionlistname 37
 reactions (amb.) 34
 reactions* (amb.) 34
Reazioni redox 23 ff.
redox
 dist 24
 sep 24
 \redox 23, 72
 \RenewChemArrow 58, 73
 \RenewChemBond 50, 73
 \RenewChemIUPAC 16, 73
 \RenewChemLatin 17, 74
 \RenewChemNMR 29, 74
 \RenewChemParticle 11 f.,
 39, 74
 \RenewChemPhase 39, 74
 \RenewChemState 27, 72, 74
 \renewtagform 35
 ring 40
 roman 20
- S**
 \S 13 f.
 scale 40 f., 67
 \Sconf 15
 \scrm 22
 \scrp 22
 sep 24
Setup 7
 \Sf 14
 \ShowChemArrow 58
 \ShowChemBond 50
 \sin 8
- siunitx ... 3, 17 f., 25 f., 28 ff.
 \sld 8, 38
 space 39, 65
 spectroscopy (amb.) 72
Spettroscopia 28–33
 \standardstate 10, 72
 star 36
 \State 27, 72
state
 delta 27
 exponent 27
 subscript-left 27
- Stereodescrittori e
 nomenclatura**
 13 ff.
 stoich-space 45 f.
 strict 6, 12, 16, 39
 subscript 26 f.
 subscript-left 27
 subscript-style 51
 subscript-vshift .. 50, 52
 substance 66
 \syn 15
 synchronize 6
- T**
 table-caption 70
 table-caption-short .. 70
 table-foot-rule 70
 table-head-number 70
 table-head-rule 70
 table-head-text 70
 table-label 70
 table-last-foot-rule . 70
 table-next-page 70
 table-row-sep 70
 table-rules 70
 table-top-head-rule .. 70
 tabu 3
 \ter 8
Termini in latino 17
Termodinamica 25 ff.
 tert 15
 \tert 15
 text 66
 textgreek 11, 13

INDICE ANALITICO

`TikZ` . . . 15, 23, 39 f., 42, 50 f.,
 55, 57
`tikz` 3
`\tiny` 73
Tipi di input speciali . . . 54
 Input di opzioni . . . 53
Tipi speciali di input . . . 52
 Token a input singolo
 53
`\torr` 18
`\trans` 13, 15
`\transitionstatesymbol`

10

U

`unit` 26, 30
Unità di misura 17 f.
`upgreek` 8
`upgreek` 11, 13
`use-equal` 29 f.

V

`\val` 29

W

`\w` 14
`\water` 9
`width` 33

X

`xfrac` 21, 45
`xspace` 3, 6
`xspace` 3

Z

`\Z` 15
zusammen/entgegen . . . 15