

CHEMNUM

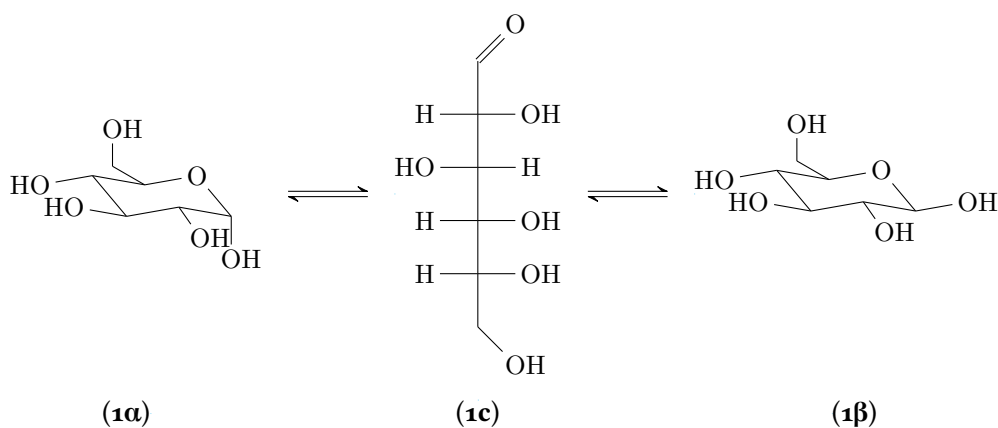
vo.5f 2012/12/29

a comprehensive approach for the numbering of chemical compounds

Clemens NIEDERBERGER

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

documentazione in italiano



Schema 1: L'anomero α e l'anomero β del D-glucosio (**1a** e **1b**) in soluzione sono in equilibrio attraverso la forma a catena aperta (**1c**).

Indice

1	Un Leggimi molto breve	2	5	Numerare i composti	5
			5.1	Comando di base	5
			5.2	Subetichette	6
			5.3	Elenchi	6
			5.4	Elenchi e intervalli di subetichette	7
2	Novità e le mie scuse	2	6	Inizializzare le etichette centralmente	8
2.1	Versione 0.4	2	6.1	Utilizzo	8
2.2	Versione 0.5	3	6.1.1	Etichette principali . . .	8
3	Opzioni globali	3	6.1.2	Subetichette	9
4	Motivazione	4	6.2	Errori anziché avvisi	10

6.3	Input personalizzato	10	10.8	Separatori	21
6.4	Perché inizializzare?	10	10.8.1	Etichette – input	21
			10.8.2	Etichette – output	21
7	Resettare il contatore	10	10.8.3	Subetichette – input	22
			10.8.4	Subetichette – output	22
8	Impieghi particolari	11	10.8.5	Elenchi – input	22
8.1	Titoli di sezioni	11	10.8.6	Elenchi – output	23
8.2	Ambienti mobili	12	10.8.7	Elenchi – ultimo separa- tore	23
8.3	Schemi di programmi esterni	12	10.8.8	Per \cmpdinit – input	24
			10.8.9	Un esempio	24
9	Impiego con hyperref	15	11	Supporto linguistico	25
9.1	Principio di base	15	11.1	Cooperazione con babel	25
9.2	Impiego limitato	16	11.2	Comma di Harvard	25
10	Personalizzazione	16	12	Panoramica	26
10.1	Il principio	16	12.1	Opzioni	26
10.2	Stile di carattere	17	12.2	Comandi	27
10.3	Etichette proprie	17			
10.4	Marcatori nelle immagini	18			
10.5	Contatori	18			
10.6	Limitatori	18			
10.7	Suffisso e prefisso	20			
				Ringraziamenti	28
				Indice analitico	29

1 Un Leggimi molto breve

CHEMNUM vo.5f è pubblicato sotto la L^AT_EX Project Public License versione 1.3 o successive. (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>)

Internamente CHEMNUM richiama i pacchetti `expl3` e `xparse`.¹ `xparse` fa parte del bundle `l3packages`,² `expl3` fa parte del bundle `l3kernel`³; ciò significa che CHEMNUM richiede il supporto di L^AT_EX3.

CHEMNUM richiede inoltre i pacchetti `etoolbox`⁴ e `psfrag`⁵ e a seconda delle opzioni globali di pacchetto⁶ impostate alternativamente uno tra i pacchetti `textgreek`⁷ o `bm`⁸ (vedi il paragrafo 3).

2 Novità e le mie scuse

2.1 Versione 0.4

Con l'aggiornamento alla vo.4 vi sono stati alcuni cambiamenti riguardanti le opzioni. Se ne sono aggiunte alcune nuove, e alcune delle preesistenti hanno variato nome: ho riassegnato dei nomi tra di loro più consistenti, che a mio parere rispecchiano la loro funzione in modo più intuitivo. Per questo motivo può accadere che alcuni documenti creati con una versione precedente di CHEMNUM non si lascino più compilare correttamente; di questo vorrei scusarmi. CHEMNUM si trova ancora in fase di sviluppo; quando sarà raggiunta la v1.0, non avverranno più⁹ cambiamenti di questo tipo.

¹ CTAN: `xparse` ² CTAN: `l3packages` ³ CTAN: `l3kernel` ⁴ CTAN: `etoolbox` ⁵ CTAN: `psfrag` ⁶ d'ora in poi chiamate «opzioni globali» ⁷ CTAN: `textgreek` ⁸ CTAN: `bm` ⁹ o solo in casi eccezionali

Le opzioni seguenti hanno dei nomi nuovi:

nome vecchio	nome nuovo
cmpd-sep	sub-output-sep
sub-marker	sub-input-sep
sub-range-sep	subrange-output-sep
sub-range-marker	subrange-input-sep
strict	init-strict
sub-init	init-sub

Queste opzioni sono nuove:

opzione	descrizione
sublist-output-sep	Simboli di elenco nelle etichette come 1a,b , vedi a pagina 23.
sublist-input-sep	Input di etichette come 1a,b , vedi a pagina 22.
init-input-sep	Input con <code>\cmpdinit</code> , vedi a pagina 24.
hyper-use	Impiego di hyperlink, vedi a pagina 15.
hyper-target	
hyper-link	
ref-style	Rappresentazione delle etichette con <code>\cmpdref</code> , vedi le pagine 12 e 17.

È nuovo anche il modo di inserire elenchi e intervalli di subetichette; per questo motivo l'opzione `sub-list` scompare. Per i dettagli si veda il paragrafo 5.4.

Inoltre è possibile generare dei collegamenti ipertestuali alle etichette, ammesso che venga caricato `hyperref`¹⁰ (vedi il paragrafo 9).

2.2 Versione 0.5

Dalla v0.5 esiste l'opzione `ref-pos` che permette di modificare le opzioni di posizionamento del comando `\psfrag`, utilizzato internamente da `\cmpdref` (vedi a pagina 18).

L'ordine degli argomenti opzionali del comando `\cmpdref` è variato (vedi a pagina 12!)

3 Opzioni globali

`CHEMNUM` ha un'opzione globale

`textgreek = artemisia/cbgreek/euler/false` Default: false

Con questa opzione si può selezionare uno dei tre stili del pacchetto `textgreek`¹¹ o caricare `CHEMNUM` senza `textgreek`. Questo documento è stato compilato con `\usepackage[textgreek=artemisia]{chemnum}`.

¹⁰ CTAN: [hyperref](#) ¹¹ Per i dettagli si rimanda alla documentazione del pacchetto `textgreek`.

4 Motivazione

Finora per la numerazione di composti era possibile impiegare tre pacchetti (di mia conoscenza), ciascuno con i suoi difetti e le sue debolezze.

Il primo, chemcono,¹² a questo scopo ridefinisce comandi bibliografici; i composti debbono essere definiti in una sorta di elenco di letteratura, alla quale si può fare riferimento nel testo. Dato che la “biblioteca di composti” viene sempre stampata, l’autore del pacchetto suggerisce il seguente:

After compilation and printout, discard the last page.

Stefan Schulz

Ovviamente non si tratta di una soluzione ottimale.

Il secondo, chemcompounds,¹³ è stato creato perché l’autore del pacchetto voleva fare a meno dei difetti di chemcono. Creando il pacchetto si è attenuto allo stesso meccanismo fondamentale di chemcono.

When taking a closer look at the chemcono package, I realised that the only thing one has to do is to get rid of everything which produces text. Thus, as a basis I used the mechanism of `\bibitem` and `\cite` in pretty much the same way as chemcono does by extracting the corresponding code from `article.cls` and `latex.ltx` but deleting any unnecessary commands producing output. I also introduced several lines of code to make the printing of the compound names more customisable.

Stephan Schenk

Anche questo pacchetto ha le sue debolezze:

1. I composti solitamente devono essere dichiarati con `\declarecompound`, certamente se si vogliono etichette del tipo di **1a**; in questo caso è necessario impostare manualmente le etichette, cosa che fa perdere il senso di una numerazione automatica.
2. Il layout non può essere adattato individualmente, bensì solo globalmente per tutte le etichette.
3. La numerazione non può essere azzerata. Sebbene nella maggioranza dei casi ciò *non è né necessario né consigliabile*, possono esserci dei casi particolari in cui si desidera un comportamento di questo tipo.
4. Un elenco di più composti `\compound{a,b,c}` non può essere adattata o solo con grande difficoltà.

Esiste inoltre bpchem,¹⁴ che fornisce comandi simili a `\label` e `\ref`: `\CNlabel{}`, `\CNlabelnoref{}` e `\CNref{}`. Inoltre aggiunge dei comandi per le subetichette: `\CNlabelsub{}`, `\CNlabelsubnoref{}` e `\CNrefsub{}`. È quindi più flessibile degli altri; tuttavia non fornisce quasi nessuna modalità di personalizzazione, non permette gli elenchi e la presenza di comandi diversi per etichette ed etichette con subetichette non è una soluzione ottimale.

CHEMNUM cerca di superare queste debolezze, e per questa ragione tutti i comandi sono stati interamente riscritti. Sono state tuttavia adottate alcune idee di chemcompounds per le possibilità di rappresentazione, come i delimitatori ecc.

Se vi dovessero mancare alcune funzionalità, vi prego di comunicarmelo inviandomi un’e-mail.

¹² CTAN: chemcono ¹³ CTAN: chemcompounds ¹⁴ CTAN: bpchem

5 Numerare i composti

5.1 Comando di base

Il comando fondamentale del pacchetto è

`\cmpd{<label name>}`

Alla primo richiamo con `<label name>` l'etichetta viene generata e salvata (= dichiarata) e restituita. Ad ogni successiva chiamata viene impiegata questa etichetta.

```
1 I composti \cmpd{a} e \cmpd{b} vengono dichiarati e d'ora in poi
2 possono essere richiamati in qualunque momento: \cmpd{a}. Non \e
3 necessaria nessuna dichiarazione precedente. I composti come \cmpd{c}
4 vengono numerati nell'ordine della loro prima comparsa nel testo.\par
5 Ancora una volta: \cmpd{b}, \cmpd{a}, \cmpd{c}.
```

I composti **1** e **2** vengono dichiarati e d'ora in poi possono essere richiamati in qualunque momento:
1. Non è necessaria nessuna dichiarazione precedente. I composti come **3** vengono numerati nell'ordine della loro prima comparsa nel testo.
Ancora una volta: **2**, **1**, **3**.

Quando dovesse essere necessario dichiarare un composto senza restituirne l'etichetta nel testo, nel punto corrispondente si può usare

`\cmpd*{<label name>}`

In questo modo viene dichiarata un'etichetta invisibile che non viene restituita.

Questo comando non è necessario quando si impiega `\cmpdinit` (vedi paragrafo 6, a pagina 8ss).

```
1 La versione nascosta \cmpd*{d} genera l'etichetta senza restituirla.
2 Il prossimo \cmpd{e} prosegue con la numerazione. Attraverso \cmpd{d}
3 \e possibile richiamare l'etichetta invisibile generata.
```

La versione nascosta genera l'etichetta senza restituirla. Il prossimo **5** prosegue con la numerazione. Attraverso **4** è possibile richiamare l'etichetta invisibile generata.

Come nomi delle etichette è possibile utilizzare un testo arbitrario, ad eccezione dei simboli usati come separatori (vedi i sottoparagrafi 5.2, 5.3, 5.4 e 10.8). Si consiglia di non utilizzare spazi all'interno dell'etichetta: questo non genera degli errori, ma potrebbe assegnare lo stesso numero ad etichette diverse.

```
1 _\cmpd{aa_},_\cmpd{a_a},_\cmpd{a_a},_\cmpd{a_a},_\cmpd{aa}_e
2 _\cmpd{aa}_generano_tutti_la_stessa_etichetta;_come_anche_\cmpd{aa_},
3 _\cmpd{a_a},_\cmpd{aa}_e_\cmpd{aa}.
```

6, **6**, **6**, **6** e **6** generano tutti la stessa etichetta; come anche **6**, **6**, **6** e **6**.

5.2 Subetichette

Quando si vogliono usare etichette con la forma **1a** lo si può ottenere con la sintassi seguente:

`\cmpd{<label name>.<subname>}`

`<label name>` deve rimanere invariato, mentre `<subname>` cambia. Questa sintassi significa che il punto `.` non deve fare parte né di `<label name>` né di `<subname>`. Al posto del punto è possibile utilizzare anche un separatore diverso (vedi il sottosottoparagrafo 10.8.1).

```
1 \cmpd{f.one} e \cmpd{f.two} sono tra loro molto simili, altrettanto
2 vale per \cmpd{g.one} e \cmpd{g.two}. Naturalmente l'etichetta rimane
3 uguale anche se richiamata più avanti: \cmpd{g.two} e \cmpd{f.one}.
```

7a e **7b** sono tra loro molto simili, altrettanto vale per **8a** e **8b**. Naturalmente l'etichetta rimane uguale anche se richiamata più avanti: **8b** e **7a**.

Questa sintassi funziona anche se il nome principale è stato già assegnato.

```
1 \cmpd{a} e le sue varianti \cmpd{a.one} e \cmpd{a.two}
```

1 e le sue varianti **1a** e **1b**

Può anche essere richiamato individualmente il nome principale di etichette assegnate in modo combinato.

```
1 \cmpd{f} und \cmpd{g} 7 und 8
```

Come generare un'etichetta del tipo di **7a,b** viene spiegato nel sottoparagrafo 5.4.

5.3 Elenchi

In realtà il comando non è stato descritto completamente; difatti può essere utilizzato anche per più di un'etichetta per volta.

La descrizione corretta del comando dovrebbe essere quindi:

`\cmpd{<(possibly comma separated list of) label name(s)>}`

Questo significa che predefinitamente la virgola non può fare parte del nome dell'etichetta, se non nascosta tra parentesi graffe. Ciò può essere modificato (vedi sottosottoparagrafo 10.8.5 a pagina 22).

```
1 Più etichette possono essere inseriti separati da virgole. In questo caso
   viene
2 restituita un elenco come \cmpd{a, b, c, e, g.two}.
```

Più etichette possono essere inseriti separati da virgole. In questo caso viene restituita un elenco come **1, 2, 3, 5** e **8b**.

5.4 Elenchi e intervalli di subetichette

Talvolta può risultare utile o desiderabile riportare un'etichetta con un intervallo di subetichette. Supponiamo di avere i composti **9a**, **9b**, **9c**, **9d** e **9e**, che si distinguono p. es. attraverso i sostituenti. Talvolta si desidera riferirsi a tutti i composti: **9a–e**.

Il principio è abbastanza intuitivo – basta indicare un elenco di subetichette:

```
1  elenco di subetichette: \cmpd{q.one, q.two, q.three, q.four, q.five}\\
2  etichetta con elenco di subetichette: \cmpd{q.{one,two,three,four,five}}

elenco di subetichette: 9a, 9b, 9c, 9d e 9e
etichetta con elenco di subetichette: 9a,b,c,d,e
```

Dato che il subelenco per impostazione predefinita viene inserito con una virgola, è necessario indicare il subelenco tra parentesi graffe.

In questo modo è possibile rappresentare anche intervalli di subetichette. Come marcatore tra i nomi delle subetichette vengono impiegati due punti . . .

```
1  \cmpd{q.{two..four}}\\          9b–d
2  \cmpd{q.{one,three..five}}\\    9a,c–e
3  \cmpd{q.{one..three,five}}      9a–c,e
```

Come impostazione predefinita nell'input dei nomi di subetichette non sono disponibili né la virgola né i due punti consecutivi. Per poterli impiegare nuovamente, utilizzando altri simboli come marcatori, si rimanda ai sottoparagrafi [10.8.3](#) e [10.8.5](#). Nel sottoparagrafo [10.8.9](#) è mostrato un esempio per un possibile input alternativo.

CHEMNUM fornisce un'opzione (vedi il paragrafo [10](#) per ulteriori spiegazioni) con cui restituire tutte le subetichette come intervallo:

cmpd-all = true/false

```
1  \cmpd[cmpd-all]{q}             9a–e
```

Affinché la chiave utilizzi le subetichette corrette, queste devono essere state dichiarate. Per questa ragione sono letti dal file `\jobname.cmpd` (supponendo che il file sorgente abbia il nome `\jobname.tex`). Ciò significa che è necessario compilare due (o più) volte il codice per rendere correttamente tutte le etichette.

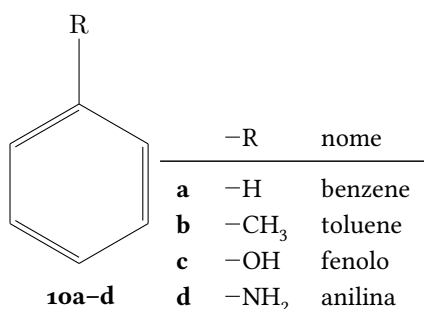
Quando si impiegano etichette con intervalli di subetichette, talvolta si desidera restituire *solo* la subetichetta in un altro punto. È possibile realizzarlo con la seguente opzione:

sub-only = true/false

```

1 % use packages 'chemfig', 'chemmacros' and 'booktabs'
2 \cmpd*[benzene.H,benzene.Me,benzene.OH,benzene.NH2]
3 \chemname{\chemfig{*6(==(-R)=-)}}{\cmpd[cmpd-all]{benzene}}
4 \begin{tabular}{lll}
5 & & & & \ch{-R} & & nome \\
6 \cmpd[sub-only]{benzene.H} & & \ch{-H} & & benzene \\
7 \cmpd[sub-only]{benzene.Me} & & \ch{-CH3} & & toluene \\
8 \cmpd[sub-only]{benzene.OH} & & \ch{-OH} & & fenolo \\
9 \cmpd[sub-only]{benzene.NH2} & & \ch{-NH2} & & anilina
10 \end{tabular}

```



Gli intervalli di subetichette richiedono una certa cura. Per prima cosa bisogna sapere esattamente quale etichetta è la minore e quale la maggiore; e come seconda cosa, quali etichette si trovano in un intervallo contenuto fra gli estremi. **CHEMNUM** non è in grado di sostituire questa cura; per questa ragione può succedere di ottenere etichette come le seguenti, se non si presta attenzione:

```

1 \cmpd{q.{five..three}} or \cmpd{q.{three,one,four}}.

```

9e–c or **9c,a,d**.

6 Inizializzare le etichette centralmente

I comandi descritti in questo paragrafo non sono necessari per l'impiego di **CHEMNUM**, ma mettono a disposizione delle funzioni che potrebbero risultare utili a qualche utente.

6.1 Utilizzo

6.1.1 Etichette principali

Forse all'utente mancherà il comando `\declarecompound` di `chemcompounds`; questo permette di avere una panoramica iniziale dei nomi già impiegati, e in determinate circostanze genera messaggi di errore quando vengono impostate delle etichette sbagliate.¹⁵ Questo comportamento può essere ottenuto con i seguenti comandi.

```
\cmpdinit{<comma separated list of label names>}
```

```
\cmpdinit*{<comma separated list of label names>}
```

¹⁵ p. es. per un errore di battitura

Tutti i composti che non vengono definiti all'interno di questo comando, sono inizializzati *nell'ordine in cui compaiono*. Impiegando un'etichetta non presente nell'elenco si ottiene un messaggio di avviso.

```
1 \cmpdinit{A, B, C} \cmpd{B} \cmpd{A.a} \cmpd{C} \cmpd{D}
```

2 1a 3 4

```
*****
* chemnum warning: cmpd-init
*
* You used \cmpdinit but didn't initiate compound D on line 1.
*****
```

Nota bene: nel caso vi siano etichette con subetichette è possibile e indicato inizializzare *solo il nome principale*. In questo modo vengono inizializzati *tutti* i composti con lo stesso nome principale.

`\cmpdinit*` restituisce lo stesso messaggio d'errore, tuttavia non assegna ancora i numeri, che vengono assegnati solo nel corso del testo e nell'ordine di comparsa.

```
1 \cmpdinit*{X, Y, Z} \cmpd{Y} \cmpd{X.x} \cmpd{Z} \cmpd{W}
```

1 2a 3 4

```
*****
* chemnum warning: cmpd-init
*
* You used \cmpdinit but didn't initiate compound W on line 1.
*****
```

Quando si desidera o necessita assegnare delle etichette proprie (vedi a pagina 17) e si desidera inizializzare le etichette in modo completo, si consiglia l'impiego di `\cmpdinit*`, che *non assegna* etichette nell'inizializzazione.

Il comando può essere utilizzato più di una volta, con o senza *. Probabilmente ha senso solo un impiego *unico*, magari nel preambolo dopo il setup di `CHEMNUM` (vedi il paragrafo 10).

6.1.2 Subetichette

Quando si desidera un avviso aggiuntivo per ogni combinazione etichetta-subetichetta o si desidera impostare l'ordine in anticipo, si può impiegare

`\cmpdinit[init-sub = true]{<comma separated list of label names>}`

In questo modo si ottiene un avviso anche in questi casi.

```
1 \cmpdinit[init-sub = true]{E.{e,f,g}}
2 \cmpd{E.e, E.h}
```

1a e 1d

```
*****
* chemnum warning: cmpd-init-sub
*
* You used \cmpdinit and init-sub = true but didn't initiate sub-compound
* E.h on line 1.
```

6.2 Errori anziché avvisi

Quando si desidera un messaggio di errore anziché di un messaggio di avviso, lo si può realizzare richiamando `\cmpdinit` nel modo seguente:

```
\cmpdinit[init-strict = true]{<comma separated list ...>}
```

L'impiego di `init-strict = false` corrisponde all'impiego senza argomento opzionale. Naturalmente l'opzione può essere utilizzata anche nella variante asteriscata del comando.

Tramite `init-strict = true` la compilazione con \TeX viene interrotta con il corrispondente messaggio di errore, quando si impiega un'etichetta non inizializzata.

Naturalmente si può richiamare `\cmpdinit` anche con entrambe le opzioni

```
\cmpdinit[init-strict = true, init-sub = true]{<comma separated list ...>}
```

oppure utilizzare `\cmpdsetup` (vedi il paragrafo 10).

6.3 Input personalizzato

Quando si sono selezionati diversi simboli di input per `sub-input-sep` (vedi a pagina 21) o `sublist-input-sep` (vedi a pagina 22) questi devono esser impiegati anche con `sub-init = true`.

La variazione dell'input di elenchi `list-input-sep` (vedi a pagina 22) non ha effetto su `\cmpdinit`. Se si desidera modificare l'input anche in quel luogo, si impieghi `init-input-sep` (vedi a pagina 24).

6.4 Perché inizializzare?

Come indicato all'inizio di questo paragrafo, l'inizializzazione delle etichette non è necessaria. Vi sono alcuni motivi per cui si può desiderare l'impiego di `\cmpdinit`.

1. L'impiego di `\cmpdinit*` è una possibilità di mantenere una panoramica delle etichette impiegate. Si ottiene un avviso o un messaggio di errore quando un'etichetta preesistente viene scritta in modo errato. A seconda del numero di etichette impiegate, questo può però portare ad una mole significativa di lavoro aggiuntivo.
2. L'impiego di `\cmpdinit` raggiunge lo stesso scopo primario di `\cmpdinit*`, ed *inoltre* dichiara le etichette nell'ordine indicato. In questo modo si rende superfluo l'impiego di `\cmpd*` (sezione 5.1) e `\cmpd+` (sezione 8.1). Si ottiene così un controllo diretto sulla correlazione tra composto e numero.

7 Resetare il contatore

Con il seguente comando è possibile resettare il contatore:

```
\cmpdreset[<number>]
```

Senza argomento viene impostato a 1 e corrisponde così a `\cmpdreset[1]`. A differenza della maggior parte degli altri comandi presentati questo comando ha effetto globalmente, non solo localmente entro un gruppo.

```

1 \cmpdreset I composti adesso vengono contati di nuovo a partire
2 da 1: \cmpd{h, i, j}

```

I composti adesso vengono contati di nuovo a partire da 1: **1, 2 e 3**

Si consiglia di utilizzare questo comando con molta prudenza! Di norma non è consigliabile resettare il contatore; composti diversi possono venire indicati dallo stesso numero!

```

1 Stessi numeri: \cmpd{a}, \cmpd{h}

```

Stessi numeri: **1, 1**

8 Impieghi particolari

8.1 Titoli di sezioni

L'impiego di `\cmpd` in un titolo inizialmente non sembra essere un problema. Non vi sono errori, e l'output appare come previsto:

```

1 \section{Compound \cmpd[cmpd-delim]{b}}
2 \ldots

```

Quando tuttavia si impiega `\tableofcontents` – molto probabilmente, come prevedo –, avviene qualcosa di indesiderato: dato che l'indice generale viene posto all'inizio del documento, l'etichetta viene dichiarata già alla sua comparsa nell'indice, anziché nel luogo di prima comparsa nel testo. Vi sono due possibilità di evitare questo comportamento:

1. Si dichiarano le etichette nel preambolo con `\cmpdinit{}` (vedi a pagina 8).
2. Si impiega `\cmpd+` per comporre l'etichetta. In questo modo l'etichetta viene letta dal file `\jobname.cmpd` (supponendo un nome principale di `\jobname.tex`); ciò significa che sono necessari *almeno due*, eventualmente anche più esecuzioni di \TeX per impostare correttamente tutte le etichette.

Altrettanto vale anche per qualsiasi lista di argomenti mobili che vengano impiegati *prima* della comparsa dell'etichetta nel testo.

Il comando

`\cmpd+{<label name>}`

legge il nome dell'etichetta da rendere dal file `\jobname.cmpd`. È in un certo senso la controparte di `\cmpd*`, dato non si ha una dichiarazione dell'etichetta ma solo un suo riferimento e la sua resa. Per potere utilizzare `\cmpd+{<label>}` è necessario dichiarare `<label>` con `\cmpd{<label>}` oppure `\cmpd*{<label>}` (prima o dopo). `\cmpd+` è utile quando un'etichetta dev'essere impiegata in un argomento mobile come `\section{}`.

Il comando non è necessario quando viene impiegato `\cmpdinit` (vedi il paragrafo 6, pag. 8ss).

```
1 \subsubsection{Titolo di prova con il l'etichetta di composto %  
2 \cmpd+[cmpd-delim]{f.one}}  
3 % con hyperref:  
4 \subsubsection{Titolo di prova con il l'etichetta di composto %  
5 \texorpdfstring{\cmpd+[cmpd-delim]{f.two}}{(7b)}}
```

8.2 Ambienti mobili

L'impiego di `\cmpd` in ambienti mobili non dovrebbe essere un problema: le etichette vengono dichiarate nell'ordine di comparsa nel codice, inclusi gli ambienti mobili. Per andare sul sicuro è comunque possibile utilizzare `\cmpd+`.

```
1 % preamble:  
2 % \usepackage{chemscheme}  
3 % \renewcommand*\schemename{Schema}  
4 % document:  
5 \cmpdreset\cmpd{float1, float2}. E ora uno schema:  
6 \begin{scheme}[ht]  
7 \centering  
8 \caption{Questa etichetta dovrebbe essere un 2: \cmpd{float2}}  
9 Se 2 = \cmpd{float2}, allora va tutto bene.  
10 \end{scheme}
```

1 e 2. E ora uno schema:

Se 2 = **2**, allora va tutto bene.

Scheme 2: Questa etichetta dovrebbe essere un 2: **2**

Funziona tutto come desiderato, anche se l'ambiente flottante scivola davanti al codice del testo, p. es. con l'opzione `[t]`.

8.3 Schemi di programmi esterni

Se gli schemi vengono creati con programmi esterni come p. es. CHEMDRAW oppure MARVINSKETCH e si desidera ricorrere anche in questo caso a `CHEMNUM`, lo si può ottenere con

`\cmpdref[<tag>][<options>]{<label name>}`

Questo comando è ispirato a `\schemeref` del pacchetto `chemscheme`¹⁶ e funziona nello stesso modo: lo schema viene creato e salvato con etichette temporanee come file eps.

Con la vo.5 è cambiato l'ordine degli argomenti opzionali!

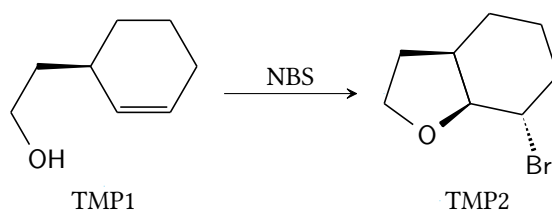
¹⁶ CTAN: [chemscheme](#)

```

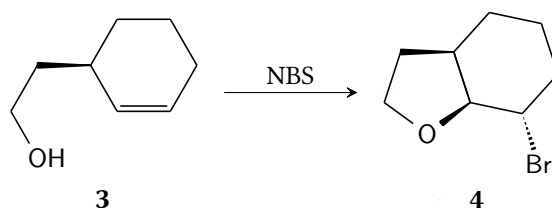
1 \begin{scheme}[ht]
2 \centering
3 \includegraphics{scheme-tmp.ps}
4 \caption{Schema con marcatori temporanei.}
5 \end{scheme}
6 \begin{scheme}[ht]
7 \centering
8 \cmpdref{Alc} % sostituisce TMP1
9 \cmpdref{EtherBr} % sostituisce TMP2
10 % \cmpdref{drittes} sostituirebbe TMP3
11 \includegraphics{scheme-tmp.ps}
12 \caption{Schema con etichette automatizzate.}
13 \end{scheme}

```

Nello schema si enumerano le sostanze con TMP1, TMP2 ecc. Questi marcatori vengono poi



Scheme 3: Schema con marcatori temporanei.



Scheme 4: Schema con etichette automatizzate.

sostituiti dalle etichette corrispondenti. A questo scopo come chemscheme anche [CHEMNUM](#) impiega il comando `\psfrag` del pacchetto `psfrag`. Per farlo funzionare è quindi necessario compilare tramite LATEX, DVIPS, PS2PDF o p. es. utilizzare il pacchetto `auto-pst-pdf`¹⁷ insieme a `pdfLATEX`. `XYLATEX` purtroppo non funzionerà, e probabilmente nemmeno `LuaLATEX`, che tuttavia non è stato testato.

In ogni caso è importante che il marcatore sia salvato come *testo* nel file eps.

Con le opzioni presentate nel paragrafo 10 è anche possibile personalizzare le etichette.

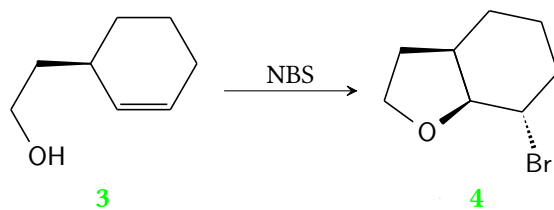
```

1 \begin{scheme}[ht]
2 \centering
3 \cmpdsetup{ref-style=\color{green}}
4 \cmpdref{Alc} % sostituisce TMP1
5 \cmpdref{EtherBr} % sostituisce TMP2
6 \includegraphics{scheme-tmp.ps}
7 \caption{Schema con etichette automatizzate.}

```

¹⁷ CTAN: [auto-pst-pdf](#)

8 \end{scheme}



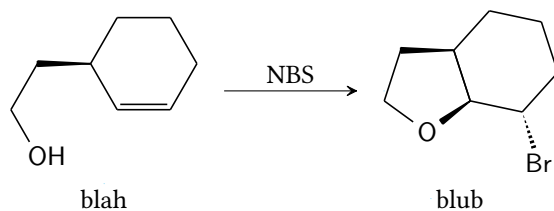
Scheme 5: Schema con etichette automatizzate.

È possibile sostituire anche con del testo arbitrario; a tale proposito esiste il secondo argomento opzionale.

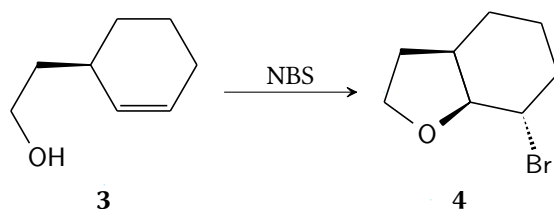
```

1 \begin{scheme}[ht]
2 \centering
3 \includegraphics{scheme-bla.ps}
4 \caption{Schema con marcatori arbitrari.}
5 \end{scheme}
6 \begin{scheme}[ht]
7 \centering
8 \cmpdref[blah]{Alc}
9 \cmpdref[blub]{EtherBr}
10 % \cmpdref{drittes} sostituirebbe TMP1.
11 \includegraphics{scheme-bla.ps}
12 \caption{Schema con etichette impostate appositamente.}
13 \end{scheme}

```



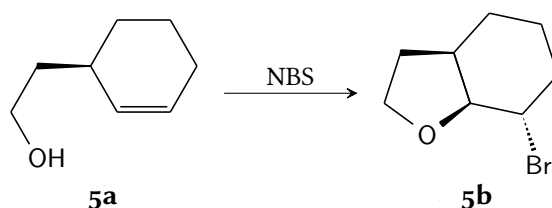
Scheme 6: Schema con marcatori arbitrari.



Scheme 7: Schema con etichette impostate appositamente.

Naturalmente l'utilizzo delle subetichette funziona nel modo abituale:

```
1 \begin{scheme}[ht]
2 \centering
3 \cmpdref{cpd.red}
4 \cmpdref{cpd.ox}
5 \includegraphics{scheme-tmp.ps}
6 \caption{Schema con etichette e subetichette automatizzate.}
7 \end{scheme}
```



Scheme 8: Schema con etichette e subetichette automatizzate.

9 Impiego con hyperref

9.1 Principio di base

Quando viene caricato il pacchetto hyperref, è possibile trasformare le etichette nel PDF in hyperlink cliccabili.

`hyper-use = true/false`

Quando questa opzione viene impostata a true (per informazioni ulteriori confronta il paragrafo 10), allora al primo impiego dell'etichetta si definisce un traguardo, a cui viene creato un collegamento ad ogni impiego ulteriore. Questo tuttavia funziona solamente finché l'etichetta viene impostata *senza* elenco o intervallo di subetichette. Anche un'etichetta impostata con `\cmpd*` non può essere utilizzata come traguardo.

```
1 \cmpdsetup{hyper-use}
2 Al primo impiego si stabilisce il traguardo: \cmpd{a.two,b,c,d,e,f}. Al
   prossimo
3 impiego viene creato un collegamento: \cmpd{a.two,d,e}.
4
5 Questo funziona solo con le etichette prive senza lista o elenco di
   subetichette:
6 \cmpd{a,f.{one,two},c}. Dato che \cmpd{a.two} e \cmpd{a} hanno due
   significati
7 diversi, hanno anche traguardi diversi.
```

Al primo impiego si stabilisce il traguardo: **1b**, **2**, **3**, **4**, **5** e **7**. Al prossimo impiego viene creato un collegamento: **1b**, **4** e **5**. Questo funziona solo con le etichette prive senza lista o elenco di subetichette: **1**, **7a,b** e **3**. Dato che **1b** e **1** hanno due significati diversi, hanno anche traguardi diversi.

9.2 Impiego limitato

L'impiego automatizzato può non essere desiderato; in questo caso forse è sufficiente definire un riferimento ipertestuale in uno o due punti. Ciò può essere realizzato con le seguenti chiavi:

`hyper-target` = <link name>

`hyper-link` = <link name>

Con `hyper-target` si determina un traguardo. **Nota bene:** impiegando questa chiave con una lista, allora *ogni* etichetta ottiene lo stesso nome traguardo e `hyperref` restituisce un avviso del tipo

destination with the same identifier (name{<link name>}) has been already used, duplicated and ignored

Con `hyper-link` si può generare un collegamento al traguardo creato. **Nota bene:** se questa chiave viene impiegata con un elenco, *ogni* etichetta indicherà lo stesso traguardo.

```
1 Si imposta un collegamento \cmpd[hyper-link=mylink,cmpd-all]{f}
2 senza dimenticare il traguardo corrispondente
3 \cmpd[hyper-target=mylink,cmpd-all]{f}.
```

Si imposta un collegamento **7a-4** senza dimenticare il traguardo corrispondente **7a-4**.

Quando si usa `hyper-link` senza avere impostato il `hyper-target` corrispondente, allora `hyperref` restituirà un avviso del tipo

name{<link name>} has been referenced but does not exist, replaced by a fixed one

10 Personalizzazione

10.1 Il principio

La personalizzazione avviene con un sistema del tipo chiave-valore. Le impostazioni possono essere definite centralmente tramite

```
\cmpdsetup{key1 = value1, key2 = value2}
```

oppure localmente sul comando

```
\cmpd[key1 = value1, key2 = value2]{<label name>}
```

Quando si usano delle opzioni `\cmpdsetup{key1,key2}` senza assegnargli un valore vengono richiamati dei valori di default. Questi possono *non essere* vuoti e *non corrispondere* alla preimpostazione del pacchetto.

Le opzioni sono suddivise in diverse classi che indicano l'area di appartenenza. Seguono tutte la forma <class>-key = <value>:

- `cmpd`: Le opzioni che iniziano con questo codice hanno effetti sull’etichetta in genere o quella principale.
- `sub`, `sublist`, `subref`: Queste opzioni hanno direttamente a che fare con le subetichette.
- `list`: Queste opzioni influenzano la resa degli elenchi.
- `ref`: Queste opzioni sono riferite particolarmente a `\cmpdref`.
- `hyper`: Queste opzioni sono specifiche per l’uso di `hyperref`.
- `init`: Queste opzioni hanno a che fare con l’inizializzazione delle etichette.

10.2 Stile di carattere

Per variare lo stile con cui sono resi i numeri, vi sono le seguenti opzioni:

`cmpd-style` = <style>

`cmpd-weight` = bold/normal → Default = bold

Dato che è comune rendere gli schemi con un carattere senza grazie, mentre il testo viene composto con le grazie, è possibile definire uno stile separato per `\cmpdref`. Come impostazione predefinita le etichette create con `\cmpdref` vengono rese con `\sffamily`.

```

1 % preamble:
2 % \usepackage[normalem]{ulem}
3 % document:
4 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % default
5 \cmpd[cmpd-style = \underline]{a, b, f.two, k}\\ % sottolineato
6 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % nuovamente default
7 \cmpdsetup{cmpd-style = \itshape\underline}
8 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % corsivo e sottolineato
9 \cmpd[cmpd-weight=normal]{a, b, f.two, k}

1, 2, 7b e 10
1, 2, 7b e 10
1, 2, 7b e 10
1, 2, 7b e 10
1, 2, 7b e 10

```

Che il peso del carattere venga impostato separatamente deriva dalla presenza di caratteri greci nelle etichette (vedi il paragrafo 10.5). A seconda della rispettiva opzione globale la variazione di peso deve essere realizzata diversamente.

10.3 Etichette proprie

Con l’opzione

`cmpd-label` = <label>

è possibile impostare etichette proprie.

```

1 Etichetta propria: \cmpd[cmpd-label = XYZ]{1}, viene attribuita a \emph{
  tutte
2 le etichette nuove} di una lista! \cmpd[cmpd-label = XYZ]{1, a, m}

Etichetta propria: XYZ, viene attribuita a tutte le etichette nuove di una lista! XYZ, 1 e XYZ

```

10.4 Marcatori nelle immagini

Vi sono alcune opzioni specifiche per le etichette contenute in immagini esterne che vengono piazzate con `\cmpdref`.

`ref-marker` = <marker> → Varia il marcatore di default da sostituire. Default = TMP

`ref-pos` = {<tex-pos>}{<ps-pos>} → Default = bb

`ref-style` = <style> → Varia il formato dell'etichetta negli schemi esterni. Default = `\sffamily`

Con l'opzione `ref-pos` si può variare il tipo di piazzamento utilizzato da `\cmpdref`. Il comando `\psfrag` utilizzato internamente ha due opzioni a riguardo. La prima determina come viene piazzato il sostituto \TeX ; la seconda come viene piazzato il sostituto nel box creato dal marcatore. Per ulteriori dettagli si rimanda alla documentazione del pacchetto `psfrag`.

10.5 Contatori

Se lo si desidera è possibile anche modificare il formato del contatore di **1a**.

`cmpd-counter` = arabic/alph/Alph/greek/Greek/roman/Roman/Symbol → Default = arabic

`sub-counter` = arabic/alph/Alph/greek/Greek/roman/Roman/Symbol → Default = alph

Nota bene: una variazione del formato di contatore ha effetto solo sulle etichette *non ancora generate*!

```

1 \cmpdsetup{cmpd-counter = Alph, sub-counter = arabic}
2 \cmpd{a, b, f.two, k}\ % nessun'effetto sulle etichette gi'a create!
3 \cmpd{n.one,n.two,o.one}\
4 \cmpd{f.three,f.four}\ % Attenzione: l'etichetta principale \e stata gi'a
5 % generata e non verr'a modificata!
6 \cmpd[cmpd-counter,sub-counter = greek]{p.one,p.two}

1, 2, 7b e 10
K1, K2 e L1
73 e 74
13α e 13β

```

10.6 Limitatori

È possibile dotare di delimitatori sia i numeri singoli che le liste. A tale proposito esistono le opzioni seguenti:

cmpd-delim = <odelim><cdelim> → Richiedono *due* token come valori!

list-delim = <odelim><cdelim> → Richiedono *due* token come valori!

```
1 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % default
2 \cmpd[cmpd-delim = ()]{a, b, f.two, k}\\ % tra parentesi
3 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % nuovamente default
4 \cmpdsetup{cmpd-delim = ()}
5 \cmpd{a, b, f.two, k} % tra parentesi
```

1, 2, 7b e 10
(1), (2), (7b) e (10)
1, 2, 7b e 10
(1), (2), (7b) e (10)

Quando si scrive `\cmpd[cmpd-delim]{<label>}` senza specificarne il valore vengono impiegate (). Altrettanto vale per **list-delim**. Si noti che i delimitatori di elenco vengono impiegati solo per almeno *due* etichette.

```
1 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % default
2 \cmpd[list-delim = {[ ]]{a, b, f.two, k}\\ % tra parentesi
3 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % nuovamente default
4 \cmpdsetup[list-delim = [ ]]
5 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % tra parentesi
6 \cmpd{a} % NON \E una lista!
```

1, 2, 7b e 10
[1, 2, 7b e 10]
1, 2, 7b e 10
[1, 2, 7b e 10]
1

Se si desidera ottenere generalmente le etichette racchiuse tra parentesi, ma si vogliono usare localmente senza, vi sono diverse possibilità:

```
1 \cmpdsetup{cmpd-delim}
2 Normalmente \cmpd{b}, \cmpd{c}, \cmpd{d.one}, ma talvolta cos'\i
3 \cmpd[cmpd-delim = ]{e} oppure \cmpd-{e}.
```

Normalmente (2), (3), (4a), ma talvolta così5 oppure 5.

Con

`\cmpd-{\<label name>}`

`\cmpdref-{\<label name>}`

è possibile rimuovere velocemente le parentesi di un'etichetta (ma non quelle di un elenco).

```
1 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % default
2 \cmpdsetup{cmpd-delim = (), list-delim = [ ]}
3 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % tra parentesi doppie
4 \cmpd-{a, b, f.two, k} % tra parentesi semplici
```

1, 2, 7b e 10
[(1), (2), (7b) e (10)]
[1, 2, 7b e 10]

Con gli argomenti vuoti `\cmpdsetup{cmpd-delim = }` e `\cmpdsetup{list-delim = }` è possibile ripristinare i valori predefiniti.

10.7 Suffisso e prefisso

Quando lo si desidera è possibile assegnare pre- e suffissi sia ad etichette singole che agli elenchi.

`cmpd-prefix` = <prefix>

`cmpd-suffix` = <prefix>

`list-prefix` = <prefix>

`list-suffix` = <prefix>

Come per i delimitatori vale: gli attributi di elenco vengono impegnati solo per un elenco – quindi per due o più etichette.

Esempi per gli attributi di elenco:

```
1 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % default
2 \cmpd[cmpd-prefix = nr.]{a, b, f.two, k}\\
3 \cmpdsetup{cmpd-prefix = \(\rightarrow\)}
4 \cmpd{a, b, f.two, k}\\
5 \cmpd{a} % NON \‘E una lista!
```

1, 2, 7b e 10
nr. **1**, nr. **2**, nr. **7b** e nr. **10**
→ **1**, → **2**, → **7b** e → **10**
→ **1**

Esempi per gli attributi di elenco:

```
1 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % default
2 \cmpd[list-prefix = elenco:]{a, b, f.two, k}\\
3 \cmpdsetup{list-prefix = raccolta:}
4 \cmpd{a, b, f.two, k}\\
5 \cmpd{a} % NON \‘E una lista!
```

1, 2, 7b e 10
elenco: **1, 2, 7b e 10**
raccolta: **1, 2, 7b e 10**
1

Tra prefisso, etichetta e suffisso predefinitamente vi è uno spazio:

```
1 \cmpd[cmpd-suffix=Sx,cmpd-prefix=Px]{k} Px 10 Sx
```

Questo può essere adattato con

cmpd-space = <space>

```
1 \cmpd[cmpd-suffix=Sx,cmpd-prefix=Px,cmpd-space={}]{k}
Px10Sx
```

10.8 Separatori

10.8.1 Etichette – input

Predefinitamente **CHEMNUM** impiega il punto . come simbolo per distinguere i nomi delle etichette principali da quelle secondarie; il simbolo può essere adattato a piacimento. I simboli %, , e # non possono essere impiegati e @ non dovrebbe essere utilizzato. Inoltre è necessario badare a non usare gli stessi simboli (vedi le sezioni seguenti) per gli altri separatori.

sub-input-sep = <separator> → Default = .

```
1 \cmpdsetup{sub-input-sep = !}% 7a e 8b
2 \cmpd{f!one, g!two}\\ 7a e 8b
3 \cmpd[sub-input-sep= +]{f+one, g+two}\\ 7a e 8b
4 \cmpd[sub-input-sep= ~]{f~one, g~two}\\ 7a e 8b
5 \cmpd[sub-input-sep= &]{f&one, g&two}\\ 7a e 8b
6 \cmpd[sub-input-sep= *]{f*one, g*two}
```

Si consiglia – non solo per motivi di coerenza – di stabilire *unicamente* all’inizio del documento i simboli utilizzati; e in particolare *prima* di richiamare **\tableofcontents**, al meglio nel preambolo. Altrimenti **\tableofcontents** non può sapere quali simboli sono impiegati, e le etichette nell’indice generale possono essere rese nel modo sbagliato.

10.8.2 Etichette – output

Anche nel caso di etichette con subetichette è possibile utilizzare dei delimitatori, che vanno a piazzarsi tra etichetta principale e secondaria.

sub-output-sep = <separator>

```
1 \cmpd{a, b, f.two, f.three, k}\\ % default
2 \cmpd[sub-output-sep = -]{a, b, f.two, f.three, k}\\
3 \cmpdsetup{sub-output-sep = $\cdot$}
4 \cmpd{a, b, f.two, f.three, k}\\
5 \cmpd[sub-output-sep = :]{a, b, f.two, f.three, k}

1, 2, 7b, 73 e 10
1, 2, 7-b, 7-3 e 10
1, 2, 7·b, 7·3 e 10
1, 2, 7:b, 7:3 e 10
```

10.8.3 Subetichette – input

Per l'input di un intervallo di subetichette `CHEMNUM` impiega predefinitamente due punti `..`; si può tuttavia scegliere un qualunque input diverso. I simboli `%`, `,` e `#` non possono essere impiegati e `@` non dovrebbe essere utilizzato. Inoltre è necessario badare a non utilizzare gli stessi simboli per separatori diversi.

`subrange-input-sep` = <separator> → Default = `..`

```
1 \cmpd[subrange-input-sep=:] {q.{one:four}}\\
2 \cmpdsetup[subrange-input-sep=--]
3 \cmpd{q.{one--four}}
```

9a-d

9a-d

10.8.4 Subetichette – output

Non si gradisce la resa **9a-e** e si vuole indicare diversamente l'intervallo? Può essere fatto con l'opzione seguente:

`subrange-output-sep` = <separator> → Default = `--`

```
1 \cmpd[subrange-output-sep={ {\normalfont bis} }] {q.{one..four}}\\
2 \cmpdsetup[subrange-output-sep=-]
3 \cmpd{q.{one..four}}
```

9a bis d

9a-d

10.8.5 Elenchi – input

Quando lo si desidera è possibile modificare il separatore dell'input di elenchi. Per default viene impiegata la virgola `,`, anche se è possibile selezionare qualunque input diverso. I simboli `%`, `,` e `#` non possono essere impiegati e `@` non dovrebbe essere utilizzato. Inoltre è necessario badare a non utilizzare gli stessi simboli per separatori diversi.

`list-input-sep` = <separator> → Default = `,`

`sub-input-sep` = <separator> → Default = `,`

```
1 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % default
2 \cmpd[list-input-sep = +]{a + b + f.two + k}\\
3 \cmpd{a, b, f.two, k}\\
4 \cmpdsetup[list-input-sep = ;]
5 \cmpd{a; b; f.two; k}
```

```
1, 2, 7b e 10
1, 2, 7b e 10
1, 2, 7b e 10
1, 2, 7b e 10
```

Questo permette p. es. l'impiego di nomi IUPAC come nomi di etichetta.¹⁸

```
1 \cmpdsetup{list-input-sep=;}
2 \cmpd{1,3-dichlorocyclohexanol}
```

14

10.8.6 Elenchi – output

Anche per gli elenchi si lascia stabilire un carattere separatore che determina come vengono separate etichette diverse. Per impostazione predefinita è la virgola.

`list-output-sep` = <separator> → Default = ,

`sub-output-sep` = <separator> → Default = ,

```
1 \cmpd{a, b, f.two, k}\\ % default
2 \cmpd[list-output-sep = ]{a, b, f.two, k}\\
3 \cmpd{a, b, f.two, k}\\
4 \cmpdsetup{list-output-sep = ;}
5 \cmpd{a, b, f.two, k}
```

```
1, 2, 7b e 10
1 2 7b e 10
1, 2, 7b e 10
1; 2; 7b e 10
```

10.8.7 Elenchi – ultimo separatore

L'ultimo separatore negli elenchi, quello tra la penultima e l'ultima etichetta elencate, rappresenta un caso particolare. Per questo motivo esistono due opzioni per adattarlo.

`list-last-sep` = <separator>

`list-lang` = US/GB/DE/FR/ES/IT → Default = US

```
1 \cmpd[list-lang = US]{a, b, f.two, k} \cmpd[list-lang = US]{a, b}\\
2 \cmpd[list-lang = GB]{a, b, f.two, k} \cmpd[list-lang = GB]{a, b}\\
3 \cmpd[list-lang = DE]{a, b, f.two, k} \cmpd[list-lang = DE]{a, b}\\
4 \cmpd[list-lang = FR]{a, b, f.two, k} \cmpd[list-lang = FR]{a, b}\\
5 \cmpd[list-lang = ES]{a, b, f.two, k} \cmpd[list-lang = ES]{a, b}\\
6 \cmpd[list-lang = IT]{a, b, f.two, k} \cmpd[list-lang = IT]{a, b}
```

¹⁸ Molte grazie a Christina Lüdigg, che in un certo senso ha proposto questa feature.

1, 2, 7b, and 10 1 and 2
1, 2, 7b and 10 1 and 2
1, 2, 7b und 10 1 und 2
1, 2, 7b et 10 1 et 2
1, 2, 7b y 10 1 y 2
1, 2, 7b e 10 1 e 2

Come indicato l'impostazione di lingua US impiega predefinitamente il comma di Harvard, tutte le altre lingue non lo fanno. Ulteriori informazioni sul riconoscimento linguistico e sul comma di Harvard sono riportati nel paragrafo 11.

L'ultimo separatore può essere anche impostato individualmente con `list-last-sep`.

```

1 \cmpdsetup{list-lang = DE}%
2 \cmpd[list-last-sep = {e poi}]{a, b, f.two, k}\\
3 \cmpd[list-last-sep = ]{a, b, f.two, k}\\
4 \cmpd[list-last-sep = come anche]{a, b, f.two, k}\\
5 \cmpd[list-last-sep = empty]{a, b, f.two, k}

1, 2, 7b e poi 10
1, 2, 7b 10
1, 2, 7b come anche 10
1, 2, 7b, 10

```

Un'opzione speciale è `list-last-sep = empty`. Quando viene richiamata, viene impiegato ovunque il separatore stabilito da `list-output-sep`.

```

1 \cmpdsetup{list-last-sep = empty}%
2 \cmpd{a, b, f.two, k}\\
3 \cmpd[list-output-sep = ;]{a, b, f.two, k}\\
4 \cmpd[list-output-sep = {\ e}]{a, b, f.two, k}

1, 2, 7b, 10
1; 2; 7b; 10
1 e 2 e 7b e 10

```

10.8.8 Per `\cmpdinit` – input

Quando lo si desidera, è possibile variare il separatore dell'input di elenchi. Predefinitamente viene impiegata la virgola , ed è possibile impiegare qualunque altro input. I simboli %, , e # non possono essere impiegati e @ non dovrebbe essere utilizzato.

`init-input-sep = <separator> → Default = ,`

10.8.9 Un esempio

Segue un piccolo esempio di una variante personalizzata dei separatori.

```

1 \cmpdsetup{
2   sub-input-sep      = ! ,
3   subrange-input-sep = : ,
4   sublist-input-sep  = / ,
5   list-input-sep     = +
6 }
7 \cmpd{a + f ! one + q ! one / three : five}

```

1, 7a e 9a,c-e

11 Supporto linguistico

11.1 Cooperazione con babel

CHEMNUM supporta la selezione di lingua tramite babel¹⁹ per una serie di lingue. Questo avviene grazie al pacchetto translations.²⁰

```

1 \selectlanguage{ngerman}DE: \cmpd{r,s,t} \selectlanguage{german}\cmpd{r,s,t}
2   \\\
3 \selectlanguage{naustrian}AU: \cmpd{r,s,t} \selectlanguage{austrian}\cmpd{r,
4   s,t}\\\
5 \selectlanguage{english}EN: \cmpd{r,s,t}\\\
6 \selectlanguage{british}GB: \cmpd{r,s,t}\\\
7 \selectlanguage{american}US: \cmpd{r,s,t}\\\
8 \selectlanguage{canadian}CDN-EN: \cmpd{r,s,t}\\\
9 \selectlanguage{canadien}CDN-FR: \cmpd{r,s,t}\\\
10 \selectlanguage{french}FR: \cmpd{r,s,t}\\\
11 \selectlanguage{spanish}ES: \cmpd{r,s,t}\\\
12 \selectlanguage{italian}IT: \cmpd{r,s,t}

```

DE: 15, 16 und 17 15, 16 und 17
 AU: 15, 16 und 17 15, 16 und 17
 EN: 15, 16, and 17
 GB: 15, 16 and 17
 US: 15, 16, and 17
 CDN-EN: 15, 16, and 17
 CDN-FR : 15, 16 et 17
 FR : 15, 16 et 17
 ES: 15, 16 y 17
 IT: 15, 16 e 17

Il supporto linguistico di gran lunga non comprende tutte le lingue, in primo luogo per motivi di realizzabilità. Se vi dovesse mancare una lingua, vi prego di inviarmi un'e-mail²¹ con la corrispondente opzione di babel e la traduzione corretta, e la aggiungerò volentieri.

11.2 Comma di Harvard

Nell'inglese statunitense è molto diffuso l'impiego del cosiddetto comma di Harvard o di Oxford, mentre nell'inglese britannico e nelle altre lingue europee è raramente impiegato.

¹⁹ CTAN: [babel](#) ²⁰ translations è parte del bundle exsheets. ²¹ contact@mychemistry.eu

The serial comma (also known as the Oxford comma or Harvard comma, and sometimes referred to as the series comma) is the comma used immediately before a coordinating conjunction (usually and or or, and sometimes nor) preceding the final item in a list of three or more items. For example, a list of three countries can be punctuated as either Portugal, Spain, and France (with the serial comma) or as Portugal, Spain and France (without the serial comma).

Opinions vary among writers and editors on the usage or avoidance of the serial comma. In American English, the serial comma is standard usage in non-journalistic writing that follows the CHICAGO MANUAL OF STYLE. Journalists, however, usually follow the AP Stylebook, which advises against it. It is used less often in British English, where it is standard usage to leave it out, with some notable exceptions such as FOWLER'S MODERN ENGLISH USAGE. In many languages (e.g., French, German, Italian, Polish, Spanish), the serial comma is not the norm and may even go against punctuation rules. It may be recommended in many cases, however, to avoid ambiguity or to aid prosody. *Wikipedia, 2011/11/07*

CHEMNUM attiva il comma di Harvard quando è selezionato American English, ma non con le altre lingue. È tuttavia possibile (dis-)attivare il comma di Harvard a piacimento con l'opzione

`list-serial-comma = true/false`

```
1 \selectlanguage{ngerman}DE: \cmpd[list-serial-comma]{r,s,t} vs. \cmpd{r,s,t}
  \\\
2 \selectlanguage{american}US: \cmpd[list-serial-comma=false]{r,s,t} vs. \cmpd
  {r,s,t}
```

DE: 15, 16, und 17 vs. 15, 16 und 17

US: 15, 16 and 17 vs. 15, 16, and 17

Quando si seleziona manualmente la lingua, viene richiamato l'impostazione predefinita della lingua. Quindi `list-serial-comma` dovrebbe essere richiamato *dopo* `list-lang`.

```
1 sbagliato: \cmpdsetup{list-serial-comma=false, list-lang=US}\cmpd{r,s,t}\
2 giusto: \cmpdsetup{list-lang=US, list-serial-comma=false}\cmpd{r,s,t}
```

sbagliato: 15, 16, and 17

giusto: 15, 16 and 17

12 Panoramica

12.1 Opzioni

In seguito sono elencate tutte le opzioni disponibili.

opzione	valore vuoto	impostazione predefinita	tipo
<code>cmpd-style</code>			macro
<code>cmpd-weight</code>	bold	bold	choice
<code>cmpd-label</code>			literal
<code>cmpd-delim^a</code>	()		literal

cmpd-odelim			literal
cmpd-cdelim			literal
cmpd-prefix			literal
cmpd-suffix			literal
cmpd-space	<code>\penalty \@m\</code>	<code>\penalty \@m\</code>	literal
cmpd-counter	arabic	arabic	choice
cmpd-all	true	false	boolean
sub-only	true	false	boolean
sub-counter	alph	alph	choice
sub-output-sep		,	literal
sub-input-sep	.	.	literal
sublist-output-sep	,	,	literal
sublist-input-sep	,	,	literal
subrange-output-sep	--	--	literal
subrange-input-sep	literal
list-delim ^a	()		literal
list-odelim			literal
list-cdelim			literal
list-prefix			literal
list-suffix			literal
list-input-sep	,	,	literal
list-output-sep	,	,	literal
list-lang	US	US ^b	choice
list-last-sep	and ^c		literal
list-serial-comma	true	true ^c	boolean
ref-tag	TMP	TMP	literal
ref-style		<code>\sffamily</code>	macro
ref-pos ^a	bb	bb	literal
init-strict	true	false	boolean
init-sub	true	false	boolean
init-input-sep	,	,	literal
hyper-use	true	false	boolean
hyper-target			literal
hyper-link			literal

^a Richiede *due* token come valore.

^b Dipende dall'impiego di babel.

^c Dipende dal valore di `list-lang` e dall'impiego di babel.

12.2 Comandi

In seguito sono elencati tutti i comandi definiti da `CHEMNUM` e le loro varianti.

Comando	Descrizione
---------	-------------

<code>\cmpd[<keyval>]{<labels>}</code>	Comando principale; genera e rende etichette o liste di etichette, vedi a pagina 5ss.
<code>\cmpd*{<labels>}</code>	invisibile, genera etichette, vedi a pagina 5
<code>\cmpd-<[<keyval>]{<labels>}</code>	senza delimitatori, vedi a pagina 19
<code>\cmpd+-[<keyval>]{<labels>}</code>	l'etichetta viene letta da un file ausiliario, vedi a pagina 11
<code>\cmpdinit[<keyval>]{<labels>}</code>	inizializza e crea le etichette, vedi a pagina 8s.
<code>\cmpdinit*-<[<keyval>]{<labels>}</code>	inizializza le etichette, vedi a pagina 8s.
<code>\cmpdref[<keyval>][<marker>]</code>	sostituisce le etichette temporanee nei file eps con etichette, vedi a pagina 12
<code>\cmpdref-<[<keyval>][<marker>]</code>	sostituisce etichette temporanee nei file eps con etichette senza delimitatori, vedi a pagina 19
<code>\cmpdreset[<num>]</code>	resetta il contatore, vedi a pagina 10
<code>\cmpdsetup{<keyval>}</code>	imposta <code>CHEMNUM</code> , vedi a pagina 16ss.

Ringraziamenti

Vorrei ringraziare Joseph WRIGHT e Russell HEWITT dei loro preziosi suggerimenti e feedback per migliorare `CHEMNUM`.

Grazie di cuore a Jonas RIVETTI che ha tradotto il testo in italiano.

Indice analitico

Abschnittsüberschriften werden **fett**, Pakete serifenlos, Befehle **braun** und Keys **grün** dargestellt.

A

auto-pst-pdf 13

B

babel 25, 27

bm 2

bpchem 4

C

chemcompounds 4, 8

chemcono 4

chemscheme 12 f.

\cmpd 5 f., 11 f., 16, 19

cmpd-all 7

cmpd-counter 18

cmpd-delim 19 f.

cmpd-label 17

cmpd-prefix 20

cmpd-sep 3

cmpd-space 21

cmpd-style 17

cmpd-suffix 20

cmpd-weight 17

\cmpd* 5, 10 f., 15

\cmpdinit* 9

\cmpd+ 10 ff.

\cmpd- 19

\cmpdinit 3, 5, 8–12

\cmpdinit* 8 ff.

\cmpdref 3, 12, 17 f.

\cmpdref- 19

\cmpdreset 10

\cmpdsetup 10, 16, 20

comando di base 5

comma di Harvard 25 f.

contatori 18

D

delimitatori 20

E

elenchi 6

etichette proprie 17 f.

etoolbox 2

expl3 2

exsheets 25

H

hyper-link 3, 16

hyper-target 3, 16

hyper-use 3, 15

hyperref 3, 15 ff.

I

impieghi particolari 11–15

impiego con hyperref 15 f.

init-input-sep 3, 10, 24

init-strict 3, 10

init-sub 3, 9 f.

inizializzare le etichette 8 ff.

L

l3kernel 2

l3packages 2

limitatori 18

list-delim 19 f.

list-input-sep 10, 22

list-lang 26 f.

list-lang 23

list-last-sep 23 f.

list-output-sep 23 f.

list-prefix 20

list-serial-comma 26

list-suffix 20

M

maarcatori nelle immagini 18

marcatori nelle immagini 18

O

opzioni globali 3

P

psfrag 2, 13, 18

\psfrag 3, 18

R

ref-marker	18
ref-pos	3, 18
ref-style	3, 18
resettare il contatore	10 f.

S

schemi di programmi esterni	12–15
separatori	
\cmpdinit	24
elenchi	
input	22
output	23
ultimo separatore	23
etichette	
input	21
output	21
subetichette	
input	22
output	22
separatori	21–25
stile di carattere	17
strict	3
sub-counter	18
sub-init	3, 10
sub-input-sep	3, 10, 21 f.
sub-list	3
sub-marker	3
sub-only	7
sub-output-sep	3, 21, 23
sub-range-marker	3
sub-range-sep	3
subetichette	
elenchi	7
intervalli	7
subetichette	6
sublist-input-sep	3, 10
sublist-output-sep	3
subrange-input-sep	3, 22
subrange-output-sep	3, 22
suffisso e prefisso	20 f.
supporto linguistico	25 f.

T

textgreek	3
textgreek	2 f.

translations	25
--------------	----

X

xparse	2
--------	---