

Il bundle chemmacros

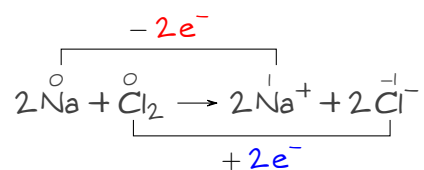
v3.5 2013/01/28

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

Clemens NIEDERBERGER

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

documentazione in italiano



| | | |
|--------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|-----------|
| Indice | II. chemmacros | 9 |
| 1. 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 | 48 |
| 15. Stati (standard), termodinamica | 25 | 25.5.1. Legami nativi | 48 |
| 15.1. Grandezze termodinamiche . . . | 25 | 25.5.2. Legami flessibili | 49 |
| 15.1.1. Definire nuove grandezze | 26 | 25.6. Personalizzazione | 50 |
| 15.1.2. Ridefinire grandezze . . | 26 | 26. Tipi speciali di input | 52 |
| 15.2. Grandezze di stato | 27 | 26.1. Token a input singolo | 52 |
| 16. Spettroscopia e valori sperimentali | 27 | 26.2. Input di opzioni | 53 |
| 16.1. Il comando \NMR | 27 | 27. Input protetto | 53 |
| 16.2. Abbreviazioni | 28 | 27.1. Testo | 53 |
| 16.3. Un ambiente per elencare valori sperimentali | 29 | 27.2. Matematica | 54 |
| 16.4. Personalizzazione | 29 | 28. Freccie | 54 |
| 16.5. Esempio di applicazione | 30 | 28.1. Tipi di frecce | 54 |
| 16.5.1. Quasi standard | 31 | 28.2. Etichettazione | 55 |
| 16.5.2. Lista formattata | 31 | 28.3. Adattamento | 56 |
| 16.5.3. Buffo | 32 | 28.4. Modificare i tipi di frecce | 57 |
| 17. Comandi per mhchem | 33 | 29. Didascalie di formule | 58 |
| 18. Ambienti di reazione | 33 | 29.1. Sintassi | 58 |
| 18.1. Definiti da CHEMMACROS | 33 | 29.2. Personalizzazione | 58 |
| 18.2. Reazioni proprie | 35 | 30. Formato e carattere | 59 |
| 18.3. Lista delle reazioni | 36 | 31. Utilizzo in ambienti matematici | 61 |
| 19. Fasi | 38 | 32. Ulteriori esempi | 61 |
| 19.1. Principi | 38 | IV. ghsystem | 63 |
| 19.2. Definire fasi proprie | 39 | 33. Setup | 63 |
| 20. Proiezioni di Newman | 39 | 34. Richiamare le frasi di rischio (H) e sicurezza (P) | 64 |
| 21. Orbitali s, p e ibridi | 40 | 34.1. Chiamata semplice | 64 |
| III. chemformula | 43 | 34.2. Frasi con segnaposto | 64 |
| 22. Impostazioni | 43 | 34.3. Frasi con buchi | 65 |
| 23. Principio di base | 43 | 34.4. Frasi combinate | 66 |
| 24. Fattori stechiometrici | 44 | 35. Pittogrammi | 66 |
| 25. Formule brute | 46 | 35.1. Le immagini | 66 |
| 25.1. Addotti | 46 | 35.2. Il tipo dell'immagine dipende dal compilatore | 69 |
| 25.2. Pedici | 46 | 36. Lingue disponibili | 69 |
| 25.3. Comandi | 47 | | |
| 25.4. Cariche ed altri apici | 47 | | |

| | | | |
|----------------------------------------------------|----|------------------------------|----|
| 37. Lista delle frasi | 69 | Suggerimenti e avvisi di bug | 81 |
| V. Appendice | 78 | Bibliografia | 82 |
| Panoramica delle opzioni e modalità di adattamento | 78 | Indice analitico | 83 |

Parte I.

Prima di cominciare

1. Licenza, requisiti e LEGGIMI

Il bundle `CHEMMACROS` è pubblicato sotto la L^AT_EX 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`

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 cerchiate, `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** = `auto|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. Nota bene: l'opzione non carica né `upgreek`²⁰ né `textgreek`,²¹ bensì determina solamente quale dei due viene utilizzato, se caricato. Scegliendo `upgreek`, è necessario *anche* caricare il pacchetto corrispondente. Default = `auto`
- 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`²² 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: `upgreek` ²¹ CTAN: `textgreek` ²² 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.

- 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 `cip-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.

- ▶ `\Hpl` → H^+ (protone)
- ▶ `\Hyd` → OH^- (ione idrossido)
- ▶ `\Ht0` → H_3O^+ (ione ossonio) (**H three O**)
- ▶ `\water` → H_2O
- ▶ `\el` → 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

- ▶ `\El` → 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`.²³ L'idea proviene proprio da questo pacchetto.²⁴
- ▶ `\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`,²⁵ da cui prende il comando `\Lewis`.

²³ CTAN: [chemstyle](#) ²⁴ Molte grazie al suo autore [Joseph Wright](#). ²⁵ CTAN: [chemfig](#)

```

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

```

Le lettere greche non sono comandi nuovi: la loro definizione dipende dai pacchetti caricati. La loro versione predefinita corrisponde alle lettere greche corsive proprie del modo matematico. Se è caricato il pacchetto `textgreek`, vengono utilizzate le sue lettere; se è caricato il pacchetto `upgreek`, 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.

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

Tabella 1: Le lettere greche

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).

```

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

```

`\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`.

```

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

```

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

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

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`

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

²⁶ L'idea e la realizzazione provengono dal pacchetto `bpchem` di Bjørn Pedersen.

`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`²⁷ 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.

| | 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 |

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

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
- `\n` → η

²⁷ CTAN: `cool`

► `\w` → ω

```

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

5 $\alpha$ -androstano-3 $\beta$ -olo
 $\alpha$ -(triclorometil)- $\omega$ -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> | <i>3H</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 = .075em

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\-\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\-\xylene} \\  
2 \RenewChemIUPAC\meta{\textit{m}} m-xylene  
3 \iupac{\meta\-\xylene} m-xylene
```


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.

Le macro sono state definite con il comando seguente:

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

| | |
|---------------------------------------------------------|-------------------|
| <pre> 1 \DeclareChemLatin\ltn{latin text} 2 \ltn </pre> | <i>latin text</i> |
|---------------------------------------------------------|-------------------|

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
- `\cmc` → cm³ Le unità `\cmc`, `\molar` e `\Molar` sono definite anche dal pacchetto chemstyle; `CHEMMACROS` le definisce solo nel caso in cui chemstyle non sia stato caricato.
- `\molar` → mol dm⁻³
- `\moLar` → mol L⁻¹

- `\Molar` → M
- `\MolMass` → g mol⁻¹
- `\normal` → N
- `\torr` → torr

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

11. Acidi/basi

È possibile 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`

| |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <pre> 1 \pH, \pKa 2 3 \chemsetup{acid-base}{p-style=slanted} \pH, \pKa 4 5 \chemsetup{acid-base}{p-style=italics} \pH, \pKa </pre> |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

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 (\oplus/\ominus) (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 (**p**lus + **ch**arge)
- `\mch[<number>]` → carica negativa (**m**inus + **ch**arge)

| | | |
|---|---------------------------------------|---------------------|
| 1 | <code>\pch, Na\pch, Ca\pch[2]\</code> | $^+, Na^+, Ca^{2+}$ |
| 2 | <code>\mch, F\mch, S\mch[2]</code> | $^-, F^-, S^{2-}$ |

Altrettanto vale per le cariche formali:

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

| | | |
|---|----------------------------------------------|-----------------------------------|
| 1 | <code>\fpch\ \fmch\ \fpch[3] \fmch[3]</code> | $\oplus \ominus 3\oplus 3\ominus$ |
|---|----------------------------------------------|-----------------------------------|

Esiste un'opzione che influenza il comportamento delle cariche:

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

Questo ha delle conseguenze:

| | |
|---|--------------------------------------------------------------|
| 1 | <code>% uses package 'mhchem'</code> |
| 2 | <code>\chemsetup{charges/append=false,phases/pos=sub}</code> |
| 3 | <code>\ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}</code> |
| 4 | |
| 5 | <code>\chemsetup{charges}{append=true}</code> |
| 6 | <code>\ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}</code> |

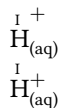
| | |
|--------------|--------------|
| $H_{(aq)}^+$ | $H_{(aq)}^+$ |
| $H_{(aq)}^+$ | $H_{(aq)}^+$ |

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} \Na, \Ca, \S, \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 $\overset{1,2}{\text{X}}$. Default = point
- ox** ► `align = center|right` → Centra il numero di ossidazione sopra l'atomo o lo giustifica a destra. Default = center

```

1 \ox[roman=false]{2,Ca} \ox{2,Ca} \Ca \Ca
2 \ox[pos=super]{3,Fe}-oxide \FeIII-oxide
3 \ox[pos=side]{3,Fe}-oxide \Fe(III)-oxide
4 \ox[parse=false]{?,Mn} \Mn?
5 \ox[align=right]{2,Ca} \CaII

```

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

```

1 \ox{3,Fe} \ox*{3,Fe} \FeIII \FeIII

```

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

```
1 \chemsetup[ox]{explicit-sign = true}
2 \ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ch{"\ox{0,F}" {2}}
```

^{+I}Na, ^{+II}Ca, ^{-II±0}S, F₂

```
1 Si confronti ad esempio \ox{-1,\ch{O2^2-}} con \ch{"\ox{-1,O}" {2}^2-}
```

Si confronti ad esempio O_2^{2-} con O_2^{-1}

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

```
1 \ox{.5,\ch{Br2}} \ch{"\ox{1/3,I}" {3}+}
```

^{0.5}Br₂ ^{1/3}I₃⁺

La frazione impiega il comando **\sfrac** del pacchetto xfrac.²⁸ 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** → $\delta+$ (**d**elta + **p**lus)

► **\delm** → $\delta-$ (**d**elta + **m**inus)

► **\fdelp** → $\delta\oplus$

► **\fdelm** → $\delta\ominus$

Segue un esempio con il comando **\ox** oppure con il pacchetto chemfig:

²⁸ CTAN: xfrac

```

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

```

$$\overset{\delta\oplus}{\text{H}}-\overset{\delta\ominus}{\text{Cl}} \quad \overset{\delta\ominus}{\text{Br}}-\overset{\delta\oplus}{\text{H}}$$

Anche queste macro possono essere utilizzate comodamente con chemfig.

- `\scrip` → + (scriptstyle + plus)
- `\scrm` → − (scriptstyle + minus)
- `\fscrp` → ⊕
- `\fscrm` → ⊖
- `\fsscrp` → ⊕ (impiega `\scriptscriptstyle`)
- `\fsscrm` → ⊖

```

1 \setatomsep{1.8em}\chemfig{CH_3-\chemabove{C}{\scrip}(-[6]C|H_3)-\vphantom{H_3}CH
   _3}
2
3 \chemfig{\fmch}{|0-\chemabove{N}{\fscrp}(-[1]O|\fmch)-[7]O|\fmch}

```

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

13. Meccanismi di reazione

Con il comando

- `\mech[<type>]`

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

- `\mech` → (vuoto, nessun argomento opzionale) sostituzione nucleofila S_N
- `\mech[1]` → sostituzione nucleofila unimolecolare S_N1
- `\mech[2]` → sostituzione nucleofila bimolecolare S_N2
- `\mech[se]` → sostituzione elettrofila S_E

- ▶ `\mech[1e]` → sostituzione elettrofila unimolecolare S_E1
- ▶ `\mech[2e]` → sostituzione elettrofila bimolecolare S_E2
- ▶ `\mech[ar]` → sostituzione elettrofila aromatica $Ar-S_E$
- ▶ `\mech[e]` → eliminazione E
- ▶ `\mech[e1]` → eliminazione unimolecolare $E1$
- ▶ `\mech[e2]` → eliminazione bimolecolare $E2$
- ▶ `\mech[cb]` → eliminazione unimolecolare “conjugated base”, cioè via carbanione $E1_{cb}$

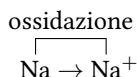
14. Reazioni redox

`CHEMMACROS` mette a disposizione due comandi con cui mostrare il trasferimento di elettroni nelle reazioni redox.²⁹ Entrambi i comandi utilizzano `TikZ`.

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

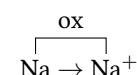
`\OX` pone <atom> in un nodo (un “node”) dal nome <name>. Una volta impiegati due `\OX`, questi possono essere collegati tramite `\redox`; i nomi dei nodi da collegare vanno posti tra parentesi tonde. Dato che `\redox` crea una Tikzpicture con le opzioni `remember picture,overlay`, il documento deve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

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



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

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

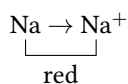


Con l'argomento [`<num>`] si può adattare la lunghezza delle linee verticali. L'impostazione predefinita vale `.6em`, lunghezza che poi viene moltiplicata per <num>. Un valore negativo pone la linea *sotto* il testo.

```
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}
```

²⁹ Ringrazio [Peter Cao](#), che ha proposto questa funzione.

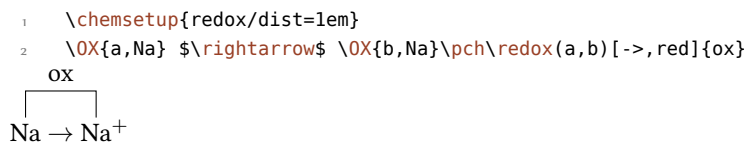
14. Reazioni redox



Con la chiave

redox ► **dist** = <dim> → Default = .6em

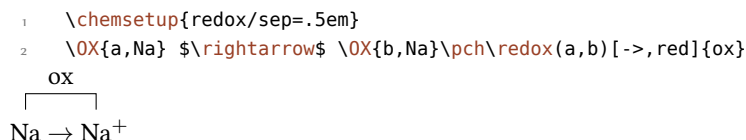
è possibile aggiustare il valore predefinito delle linee verticali:



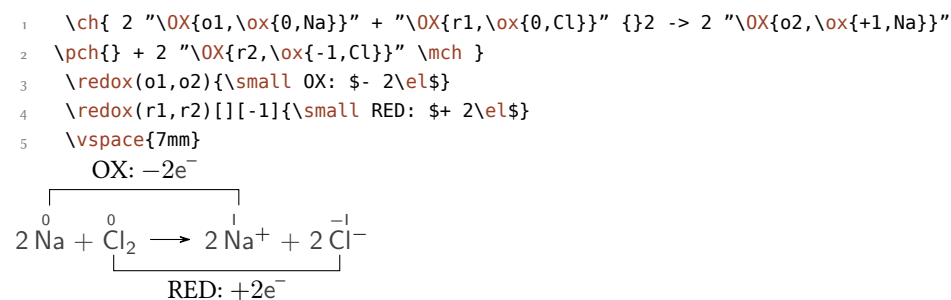
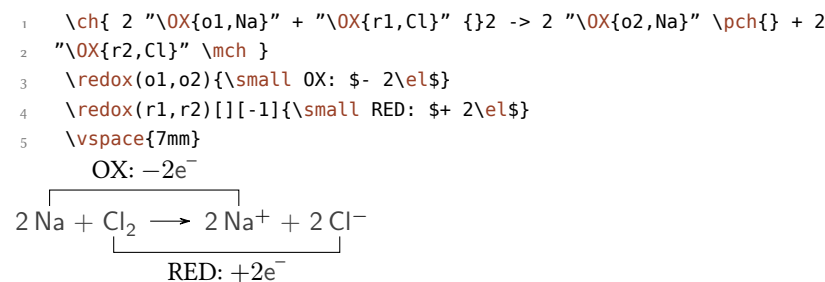
Inoltre l'opzione

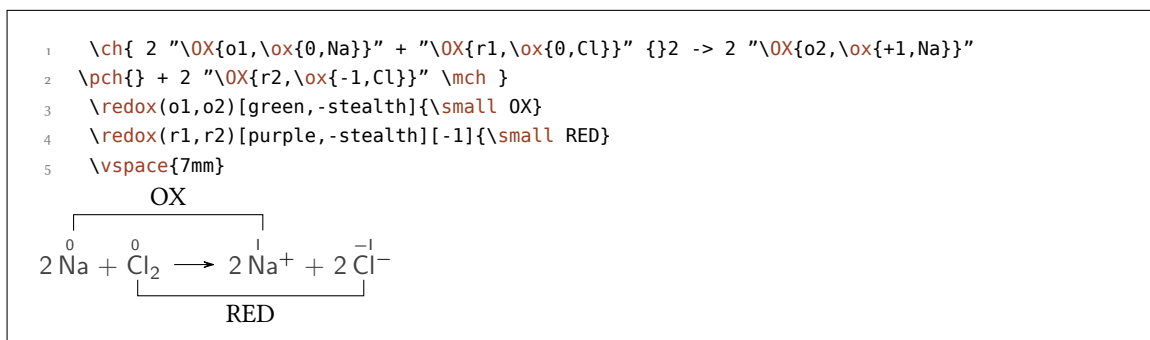
redox ► **sep** = <dim> → Default = .2em

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



Esempi:



$$2 \text{Na} + \text{Cl}_2 \longrightarrow 2 \text{Na}^+ + 2 \text{Cl}^-$$


15.1. Grandezze termodinamiche

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

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

Questi comandi possono essere adattati tramite diverse opzioni:

- 25

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> |

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

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}
2 \Enthalpy{f}{12.5}
```

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

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

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

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

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

15.2. Grandezze di stato

I comandi presentati nel paragrafo 15.1 internamente impiegano il comando³⁰

► `\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}
```

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

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

`state` ► `exponent` = <anything>

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

`state` ► `delta` = <anything>|false

16. Spettroscopia e valori sperimentali

16.1. Il comando `\NMR`

Quando delle sostanze vengono analizzate per verificare se sono quello che si è previsto spesso si ricorre alla spettroscopia NMR. I valori sperimentali vengono riportati all'incirca in questo modo:

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): $\delta = 1.59$

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

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

³⁰ Nota bene: `{<subscript>}` è un argomento *opzionale*.

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

Tutti gli argomenti sono opzionali! Senza argomenti³¹ si ottiene:

| | | |
|---|---------------------|------------------------------|
| 1 | <code>\NMR \</code> | ¹ H-NMR: δ |
| 2 | <code>\NMR*</code> | ¹ H-NMR |

Il primo argomento specifica il tipo di analisi NMR eseguito:

| | | |
|---|-------------------------|-------------------------------|
| 1 | <code>\NMR{13,C}</code> | ¹³ C-NMR: δ |
|---|-------------------------|-------------------------------|

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

| | | |
|---|------------------------|----------------------------------------|
| 1 | <code>\NMR(400)</code> | ¹ H-NMR (400 MHz): δ |
|---|------------------------|----------------------------------------|

Anche munita della sua unità:

| | | |
|---|-------------------------------|----------------------------------------------------|
| 1 | <code>\NMR(4e8,\hertz)</code> | ¹ H-NMR (4×10^8 Hz): δ |
|---|-------------------------------|----------------------------------------------------|

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

| | | |
|---|---------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| 1 | <code>\sisetup{exponent-product=\cdot}\NMR(4e8,\hertz)</code> | ¹ H-NMR ($4 \cdot 10^8$ Hz): δ |
|---|---------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|

Con il terzo argomento può essere indicato il solvente:

| | | |
|---|--------------------------|---------------------------------------------------|
| 1 | <code>\NMR[CDCl3]</code> | ¹ H-NMR (CDCl ₃): δ |
|---|--------------------------|---------------------------------------------------|

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.

► `\DeclareChemNMR{<csname>}{<num>,<atom>}`

► `\RenewChemNMR{<csname>}{<num>,<atom>}`

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

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

³¹ Tutti gli argomenti possono essere combinati a piacimento. Il comando può essere impiegato anche in modalità matematica.

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]} 13C{1H}-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.

| | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|
| <pre> 1 \begin{experimental} 2 \data{TIP01} dati. 3 \data{TIP02}[specifiche] altri dati. 4 \data*{TIP03} ulteriori dati. 5 \end{experimental} </pre> | <p>TIPO1 dati. TIPO2 (specifiche) altri dati. TIPO3 ulteriori dati.</p> |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|

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{TIP01} dati.
3 \data{TIP02}[specifiche] altri dati.
4 \data*{TIP03} 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{TIP01} dati.
3 \data{TIP02}[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)[CDCl3] \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)[CDCl3] \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 (+, 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 (ε = 65 984), 406 nm (ε = 65 378). Resa quantica: Φ = 0.74 ± 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).

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

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

UV-Vis: 386 nm (ε = 65 984), 406 nm (ε = 65 378).

Resa quantica: Φ = 0.74 \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\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, CDCl_3): δ M^+ + H_2O = 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).

^{13}C -NMR (150 MHz, CDCl_3): δ M^+ + H_2O = 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, M^+ + OH^-), 368 (M^+ + 2 OH^-).

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

UV-Vis: 386 nm (ε = 65 984), 406 nm (ε = 65 378).

Resa quantica: Φ = 0.74 \pm 0.10 .

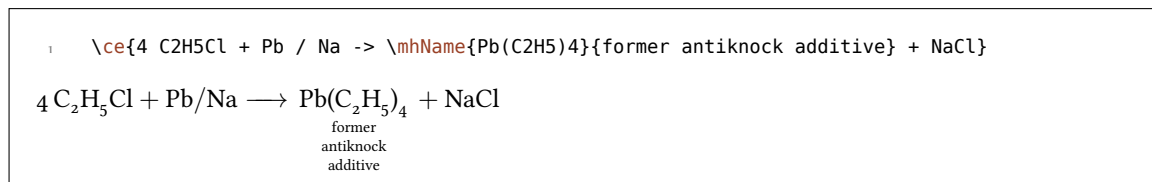
17. Comandi per mhchem

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 mhchem³² che permette di inserire del testo al di sotto di una formula.

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

Per esempio:



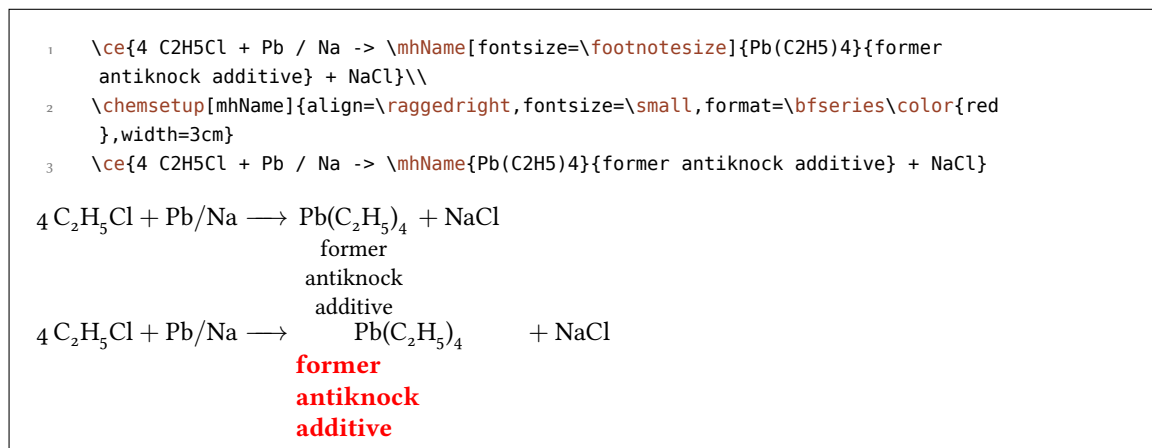
`\mhName` può essere adattato con le opzioni seguenti:

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



18. Ambienti di reazione

18.1. Definiti da CHEMMACROS

Sono disponibili i seguenti ambienti per reazioni numerate...

³² CHEMFORMULA ha una possibilità diversa per ottenere lo stesso risultato.

- `\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*`.

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

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

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

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

- `\renewtagform{<tagname>}[<format>]{<right delim>}{<left delim>}`.³³

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

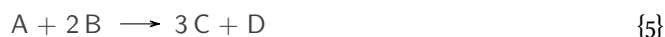
³³ Messo a disposizione dal pacchetto `mathtools`.

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 &\rightleftharpoons G + 1/2 H
5 \end{reactions}
6 Vedi reazione~\ref{rxn:test}.

```



Un po' di testo tra due reazioni allineate.



Vedi reazione 5.

Nell'impostazione predefinita, cioè con `method = chemformula`, è sconsigliato utilizzare `\mch` e 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.

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

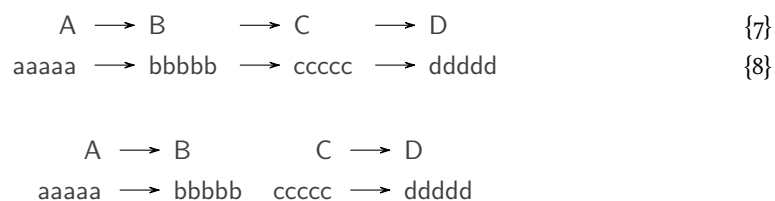
► `\DeclareChemReaction[star]{reactions}{align}`.

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*}
```



18.3. Lista delle reazioni

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

► `\listofreactions`

```
1 \listofreactions
```

Elenco delle reazioni

| | |
|-----------------------------------------------|----|
| Reazione {1} | 34 |
| Reazione {2} | 34 |
| Reazione {3} | 34 |
| Reazione [R 4] | 34 |
| Reazione {5} | 35 |
| Reazione {6} | 35 |
| Reazione {7} | 36 |
| Reazione {8} | 36 |
| Reazione {9}: Autoprotolisi | 37 |
| Reazione {10}: first step of chain | 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 astericate hanno un argomento opzionale, attraverso il quale è possibile aggiungere una descrizione della reazione nell'elenco.

```

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

```

$$2 \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^- \quad \{9\}$$

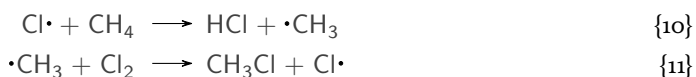
Questo non funzionerà quando viene impiegato l'ambiente `reactions`. In questo caso è possibile ricorrere a

► `\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.
```

$\text{C(s)} + 2 \text{H}_2\text{O(l)} \longrightarrow \text{CO}_2\text{(g)} + 2 \text{H}_2\text{(g)}$
 per completezza: NaCl(aq) .

La raccomandazione IUPAC³⁴ 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]

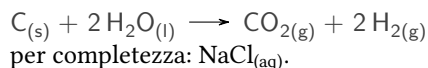
Vi sono due opzioni per adattare l’output:

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 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = .1333em

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

³⁴ Ringrazio Paul King del suggerimento.



19.2. Definire fasi proprie

In base all'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

```

NaOH(aq,∞) H₂O (cd) U(cr) A(lc)

NaOH_(aq,∞) H₂O_(cd) U_(cr) A_(lc)

20. Proiezioni di Newman

`CHEMMACROS` mette a disposizione il comando

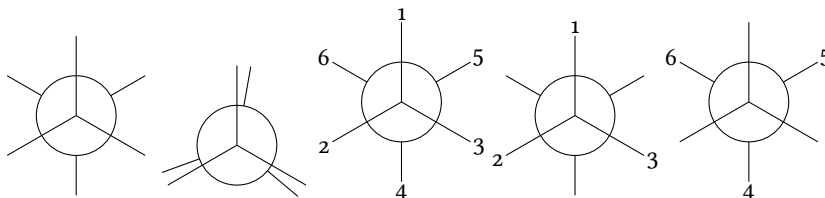
- `\newman[<options>](<angle>){<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}`

che permette di rappresentare 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}

```



Sono disponibili alcune opzioni per adattare il comando:

`newman` ► `angle` = `<angle>` → Angolo predefinito (in gradi). Default = 0

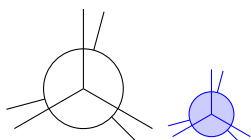
newman ► **scale** = <factor> → Scala l'intera proiezione. Default = 1

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

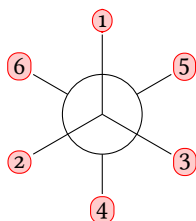
newman ► **atoms** = <tikz> → Adatta l'aspetto dei nodi contenenti gli atomi con chiavi di **TikZ**.

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

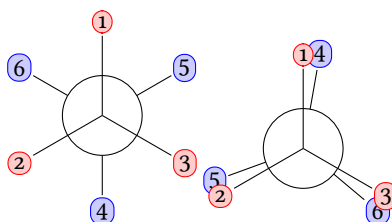
```
1 \chemsetup[newman]{angle=45} \newman{}
2 \newman[scale=.75,ring={draw=blue,fill=blue!20}]{}
```



```
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

sp²sp³

```
1 \orbital{s} \orbital{p} \orbital{sp} \orbital{sp2} \orbital{sp3}
```



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

orbital ► **phase** = $\pm|-$ → Varia la fase dell'orbitale (tutti i tipi).

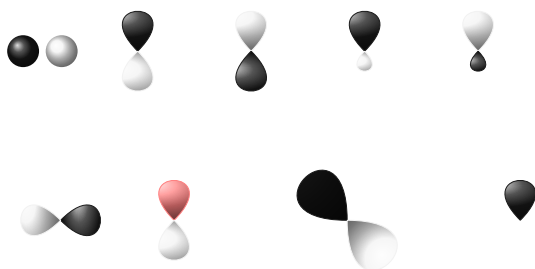
orbital ► **scale** = <factor> → Varia la dimensione dell'orbitale (tutti i tipi).

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).

```
1 \orbital{s} \orbital[phase=-]{s}
2 \orbital{p} \orbital[phase=-]{p}
3 \orbital{sp3} \orbital[phase=-]{sp3}
4
5 \orbital[angle=0]{p} \orbital[color=red!50]{p} \orbital[angle=135,scale=1.5]{p}
   \orbital[half]{p}
```



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`.

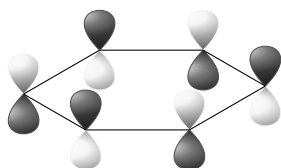
21. Orbitali s, p e ibridi

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
   =-]{p}}??}
9 \vspace{7mm}

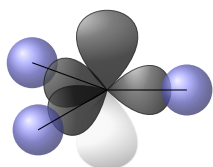
```



```

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}}{\
11   orbital[angle=170,half]{p}}{\orbital[angle=-150,half]{p}}(-[: -150]\orbital{s})
   -\orbital{s}}
12 \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:

| | | |
|----|--------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| 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: `.`, `_`, `/`, `()`

| | | |
|----|---------------------------|----------------|
| 1 | <code>\ch{2} \</code> | |
| 2 | <code>\ch{12}</code> | 2 |
| 3 | | 12 |
| 4 | <code>% decimals:</code> | |
| 5 | <code>\ch{3.5} \</code> | 3.5 |
| 6 | <code>\ch{5,75}</code> | 5.75 |
| 7 | | $\frac{3}{2}$ |
| 8 | <code>% fractions:</code> | $1\frac{1}{2}$ |
| 9 | <code>\ch{3/2} \</code> | |
| 10 | <code>\ch{1_1/2}</code> | |

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 | <code>\ch{(1/2) H2O} \ch{1/2 H2O} \ch{0.5 H2O}</code> | $(1/2)\text{H}_2\text{O} \frac{1}{2}\text{H}_2\text{O} 0.5\text{H}_2\text{O}$ |
|---|-------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|

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



L'output può essere adattato utilizzando le opzioni seguenti:

- **decimal-marker** = <marker> → Il simbolo usato come separatore decimale. Default = .
- **frac-style** = math|xfrac|nicefrac → Determina in che modo vengono rappresentate le frazioni. Default = math
- **stoich-space** = <skip> → La dimensione dello spazio dopo un fattore stechiometrico. Una lunghezza elastica. Default = .1667em plus .0333em minus .0117em

```
1 \ch[decimal-marker={,}]{3.5} \ch[decimal-marker={\cldot$}]{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-fraction, che può essere adattata alle proprie necessità. Le impostazioni di default sono elencate di seguito:

```
1 \DeclareInstance{xfrac}{chemformula-text-fraction}{text}
2 {
3   slash-left-kern = -.15em ,
4   slash-right-kern = -.15em
5 }
```

Questo documento impiega il Font LINUX LIBERTINE O e la definizione seguente:

```
1 \DeclareInstance{xfrac}{chemformula-text-fraction}{text}
2 {
3   scale-factor      = 1 ,
4   denominator-bot-sep = -.2ex ,
5   denominator-format = \scriptsize #1 ,
6   numerator-top-sep = -.2ex ,
7   numerator-format = \scriptsize #1
8 }
```

L'opzione **frac-style** = nicefrac utilizza il comando **\nicefrac** del pacchetto nicefrac.

25. Formule brute

| | |
|---|----------------------------------------------------------------------------|
| 1 | <code>\ch[frac-style=nicefrac]{3/2} \ch[frac-style=nicefrac]{1_1/2}</code> |
| | $\frac{3}{2}$ $1\frac{1}{2}$ |

L'opzione **stoich-space** permette di adattare la larghezza dello spazio tra fattore stechiometrico e formula bruta.

| | | |
|---|--------------------------------------------|------------------------|
| 1 | <code>\ch{2 H2O} \\\</code> | $2 \text{H}_2\text{O}$ |
| 2 | <code>\ch[stoich-space=.3em]{2 H2O}</code> | $2 \text{H}_2\text{O}$ |

25. Formule brute

CHEMFORMULA considera le formule brute come il tipo “diverso da tutti gli altri”. Questo diverrà più chiaro in seguito quando saranno elencati gli altri tipi.

| | | |
|---|---------------------------------|-----------------------------------|
| 1 | <code>\ch{H2SO4} \\\</code> | H_2SO_4 |
| 2 | <code>\ch{[Cu(NH3)4]^2+}</code> | $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ |

25.1. Addotti

CHEMFORMULA riconosce due identificatori che creano addotti.

► `\ch{A.B}` → $A \cdot B$

► `\ch{A*B}` → $A \cdot B$

| | | |
|---|---------------------------------|------------------------------------------|
| 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 \ch{A_nB_m}
```

 A_nB_m

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

```
1 \ch{A_{n$}B_{m$}} \\\
```

 A_nB_m

```
2 \ch{NaCl_{(aq)}}
```

 $\text{NaCl}_{(\text{aq})}$

25.3. Comandi

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

```
1 \ch{\textbf{A2}B3} \ch{A2\color{red}B3}
```

 $A_2B_3 \text{ } A_2B_3$

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 \ch{A\hspace{2mm}B} darà un errore, dato che \hspace vedrà qualcosa del
   genere: \hspace{$_2$mm}.
```

Vedi il paragrafo 27.1 per una via d'uscita da questo problema.

25.4. Cariche ed altri apici

Principi Quando una formula bruta *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 \ch{A+B} \ch{AB+} \\\
```

 $A \equiv B \text{ } AB^+$

```
2 \ch{A-B} \ch{AB-}
```

 $A - B \text{ } AB^-$

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 \ch{A^{x-}} \\\
```

 A^{x-}

```
2 \ch{A^x-} \\\
```

 A^{x-}

```
3 \ch{A^{x}-} \\\
```

 A^{x-}

```
4 \ch{A^{x-$}} \\\
```

 A^{x-}

```
5 \ch{RNO2^{-.}} \\\
```

 $\text{RNO}_2^{\cdot-}$

```
6 \ch{^3H} \\\
```

 ^3H

```
7 \ch{^{14}6C} \\\
```

 $^{14}_6\text{C}$

```
8 \ch{^{58}_{26}Fe} \\\
```

 $^{58}_{26}\text{Fe}$

```
9 \ch{NO^*}
```

 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> | $\text{SO}_4^{2-} \text{Ca}^{2+} \text{SO}_4^{2-}$ |
|---|--------------------------------------------|----------------------------------------------------|

Comandi ionici All'interno di `\ch` non sono necessari comandi del tipo di `\mch`; difatti è opportuno evitarli, dato che possono scombinare l'orientamento degli apici e dei pedici. L'opzione `circled` di `CHEMMACROS` viene rispettata da `\ch`.

| | | |
|---|----------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | <code>\chemsetup{option}{circled=all}</code> | $\text{H}^{\oplus} + \text{OH}^{\ominus} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$ |
| 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{^3B} \ch{{}^3B} \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}} \\\</code> |
| 3 | <code>\ch{^{123}_{23}B} \ch{{}^{123}_{23}B} \ch{{}_{23}^{123}B} \ch{B^{123}} \ch{B_{23}}</code> |

${}^3\text{B} \quad {}^3\text{B} \quad {}^3\text{B} \quad {}^3\text{B} \quad {}^3\text{B}$
 ${}^{23}_{123}\text{B} \quad {}^{23}_{123}\text{B} \quad {}^{23}_{123}\text{B} \quad {}^{23}_{123}\text{B} \quad {}^{23}_{123}\text{B}$
 ${}^{123}_{23}\text{B} \quad {}^{123}_{23}\text{B} \quad {}^{123}_{23}\text{B} \quad {}^{123}_{23}\text{B} \quad {}^{123}_{23}\text{B}$

- 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 505).

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\equiv CH}</code> | triplo: $\text{CH}\equiv\text{CH}$ |

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 |

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.

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

C—C=C≡C.....C≡C→C←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-
5   bond-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
- `subscript-style` = text|math → Stile usato per i pedici. Default = text
- `charge-hshift` = <dim> → Spostamento degli apici seguenti un pedice. Default = .25em
- `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 = .5833em.
- `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:

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

Queste vengono spostate quando *seguono* un pedice, seguendo la raccomandazione IUPAC [Coh+08, p. 51]. La dimensione dello spostamento può essere impostata con l'opzione `charge-hshift`.

```

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

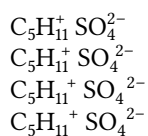
```

Nonostante l'indicazione IUPAC, `CHEMFORMULA` nell'impostazione predefinita non genera apici completamente spostati, che a mio parere in alcuni casi sono di difficile lettura ed in altri casi di aspetto sgradevole. 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 \ch[charge-hshift=0pt]{C5H11+} \ch[charge-hshift=0pt]{SO4^2-} \\
2 \ch{C5H11+} \ch{SO4^2-} \\
3 \ch[charge-hshift=1ex]{C5H11+} \ch[charge-hshift=1ex]{SO4^2-} \\
4 \ch[charge-hshift=full]{C5H11+} \ch[charge-hshift=full]{SO4^2-}

```

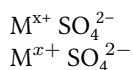


Se non si desidera rendere le cariche in modo testuale è possibile passare al modo matematico:

```

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

```

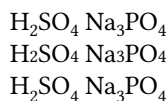


L'opzione `subscript-vshift` può essere impiegata per adattare lo spostamento verticale dei pedici.

```

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

```

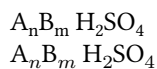


Si può inoltre selezionare in quale modo verranno composti i pedici:

```

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

```

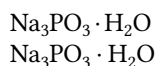


Con l'opzione **adduct-space** è possibile variare lo spazio a sinistra e destra del segno di addotto.

```

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

```

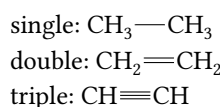


La lunghezza dei legami va modificata con:

```

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

```

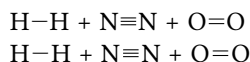


Si può inoltre impostare la distanza tra atomo e legame:

```

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

```



26. Tipi speciali di input

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:

$$\text{\ch{2 Na + Cl2}} \quad 2Na + Cl_2$$
- **\ch{ v }** → ↓ Simbolo per una precipitazione o la formazione di un solido: $\text{\ch{BaSO4 v}} \quad BaSO_4 \downarrow$
- **\ch{ ^ }** → ↑ Simbolo per la formazione di gas: $\text{\ch{H2 ^}} \quad H_2 \uparrow$

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

- **plus-space** = <skip> → Una lunghezza elastica. Default = .3em plus .1em minus .1em

```

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

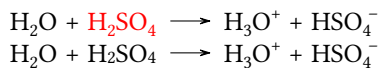
```



26.2. Input di opzioni

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

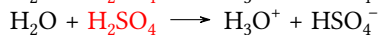
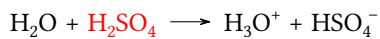
```
1 \ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-> H3O+ + HSO4-} \\
2 \ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-> H3O+ + HSO4-}
```



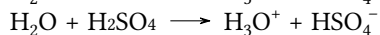
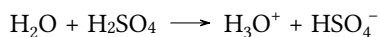
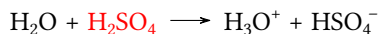
Tuttavia questo interrompe l'input nel sorgente e *potrebbe* influenzare la spaziatura. Per questo motivo esiste un'alternativa:

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

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



o naturalmente:



Si tratta di una 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 `\`.

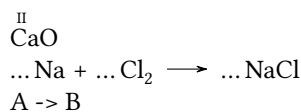
► `\ch{ "<escaped text>" }`

► `\ch{ '<escaped text>' }`

```

1 \ch{"\ox{2,Ca}" 0} \\\
2 \ch{"\ldots\," Na + "\ldots\," Cl2 -> "\ldots\," NaCl} \\\
3 \ch{'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{ $<escaped math>$ }`

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

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

► `math-space = <skip> →` Una lunghezza elastica. Default = .1667em plus .0333em minus .0117em

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

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

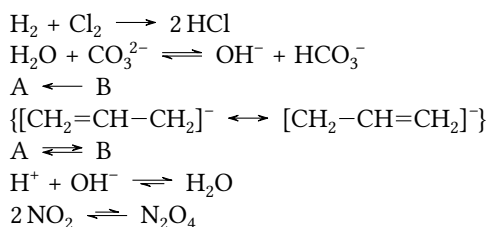
- `\ch{ == }` → $=$ equazione stechiometrica
- `\ch{ <=> }` → \rightleftharpoons doppia freccia di equilibrio
- `\ch{ <=>> }` → \rightleftharpoons equilibrio spostato a destra
- `\ch{ <=>< }` → \rightleftharpoons equilibrio spostato a sinistra
- `\ch{ <o> }` → \longleftrightarrow freccia isolobale

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

```

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

```



28.2. Etichettazione

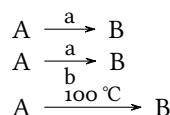
Le frecce hanno due argomenti opzionali per essere etichettate.

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

```

1 \ch{A ->[a] B} \
2 \ch{A ->[a][b] B} \
3 \ch{A ->[\SI{100}{\celsius}] B}

```

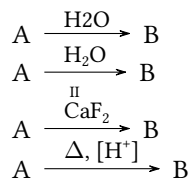


Il testo descrittivo può essere elaborato indipendentemente dalla freccia: basta usare degli spazi.

```

1 \ch{A ->[H2O] B} \
2 \ch{A ->[ H2O ] B} \
3 \ch{A ->[ "\ox{2,Ca}" F2 ] B} \
4 \ch{A ->[\Delta, [H+]] B}

```



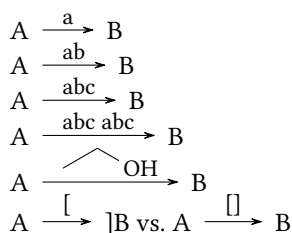
Quando sono presenti degli spazi **CHEMFORMULA** elabora dapprima la parte tra parentesi come un input normale. Le frecce leggono i loro argomenti solo *dopo* l'elaborazione. Come si può vedere, le frecce “crescono” con la lunghezza dell'etichetta, mentre rimane costante la parte eccedente. Nell'ultimo 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 \ch{A ->[a] B} \\
2 \ch{A ->[ab] B} \\
3 \ch{A ->[abc] B} \\
4 \ch{A ->[abc-abc] B} \\
5 % needs the 'chemfig' package:
6 \setatomsep{15pt}
7 \ch{A ->[ "\chemfig{[:-30]-[:-30]OH}" ] B} \\
8 \ch{A ->[[]] B} vs. \ch{A ->[\[] B}

```



28.3. Adattamento

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

- **arrow-offset** = <dim> → La lunghezza della freccia eccedente l'etichetta (a sinistra e destra). La lunghezza di una freccia vuota è il doppio di **arrow-offset**. Una lunghezza di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = .75em
- **arrow-yshift** = <dim> → Sposta una freccia verso l'alto (valore positivo) o verso il basso (valore negativo); una dimensione di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. 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 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = .5em
- **label-offset** = <dim> → Lo spazio tra freccia ed etichette; una dimensione di $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. Default = 2pt
- **label-style** = → Il corpo del font dell'etichetta. Default = `\footnotesize`

Il codice seguente mostra gli effetti delle varie opzioni sulla freccia \rightleftharpoons :

```

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

```


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

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

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

Nel caso si desideri definire frecce proprie sono necessarie conoscenze fondamentali di **TikZ**.³⁵ Si consiglia l'uso di alcune coordinate predefinite:

(cf_arrow_start) L'inizio della freccia.

(cf_arrow_end) La fine della freccia.

(cf_arrow_mid) La metà della freccia.

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

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

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

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

$A \cdots\cdots\rightarrow B$ $A \xrightarrow[a]{a} B$ $A \curvearrowright B$

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

► `\RenewChemArrow{<tokens>}{<tikz>}`

³⁵ Si rimanda alla guida pgfmanual.

► `\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  $\longrightarrow$  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:

| | | |
|---|----------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------|
| 1 | <code>\ch{!(ethanol)(CH₂CH₂OH)}</code> | CH ₂ CH ₂ OH 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+ )}

```

| | | | | |
|------------------|------------------|------------------|------------------|-------------------------------|
| H ₂ O | H ₂ O | H ₂ O | H ₂ O | H ₃ O ⁺ |
| water | water | 2n – 1 | H ₂ O | 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 | <code>\ch{H₂O~(!)} \</code> | H ₂ O (!) |
| 2 | <code>\ch{A!{}} \</code> | 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}

```

$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{B}$

acido

$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{B}$

acido

$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{B}$

N: acido

$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{B}$

acido

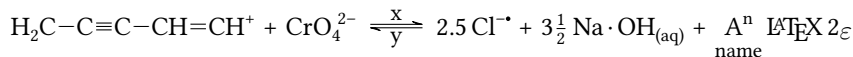
30. Formato e carattere

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

```

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

```



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

```

Ciao $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n \text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\varepsilon}$

name

Ciao $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n \text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\varepsilon}$

name

Ciao $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n \text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\varepsilon}$

name

Ciao $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n \text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\varepsilon}$

name

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

Ciao 
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \overset{\text{A}^n}{\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}} 2\varepsilon$$

Ciao 
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \overset{\text{A}^n}{\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}} 2\varepsilon$$

Ciao 
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \overset{\text{A}^n}{\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}} 2\varepsilon$$

Ciao 
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \overset{\text{A}^n}{\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}} 2\varepsilon$$


```

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`.

```

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

Ciao 
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \overset{\text{A}^n}{\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}} 2\varepsilon$$

Ciao 
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \overset{\text{A}^n}{\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}} 2\varepsilon$$

Ciao 
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \overset{\text{A}^n}{\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}} 2\varepsilon$$

Ciao 
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \overset{\text{A}^n}{\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}} 2\varepsilon$$


```

Quando si impiegano $\text{X}_{\text{L}}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ oppure $\text{LuaL}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ avendo caricato il pacchetto `fontspec`,³⁶ è possibile variare il carattere di **CHEMFORMULA** anche nel modo seguente:

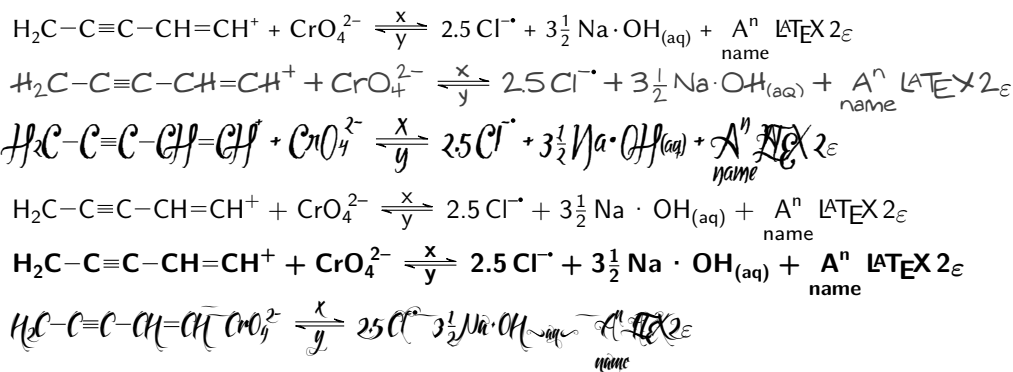
- **font-spec** = {} oppure con opzioni
- **font-spec** = {[<options>]}

³⁶ CTAN: `fontspec`

```

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

```



31. Utilizzo in ambienti matematici

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

```

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

```

$$\begin{array}{ll}
 \text{H}_2\text{O} & \xrightarrow{\text{a}} \text{H}_2\text{SO}_4 \quad (1) \\
 \text{Cl}_2 & \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} \text{CH}_4 \quad (2)
 \end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
 \text{RNO}_2 & \rightleftharpoons[+ e^-] \text{RNO}_2^{\cdot-} \\
 \text{RNO}_2^{\cdot-} & \rightleftharpoons[+ e^-] \text{RNO}_2^{2-}
 \end{array}$$

32. Ulteriori esempi

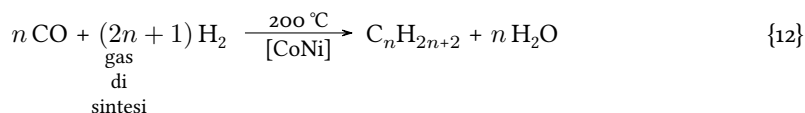
Questo paragrafo mostra ulteriori esempi per l'impiego di `CHEMFORMULA`, ed in particolare l'accoppiamento agli ambienti reaction di `CHEMMACROS`.

```

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

```

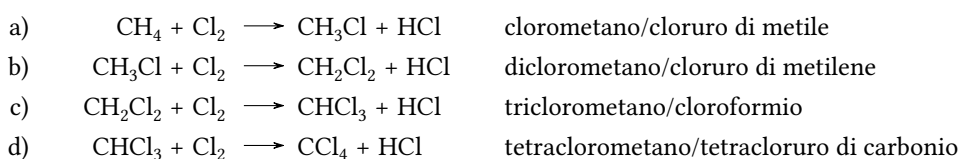
32. Ulteriori esempi



```

1 \begin{reactions*}
2 "a)" && \text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl} && "\small \text{clorometano/cloruro-di-metile}" \\
3 "b)" && \text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{HCl} && "\small \text{diclorometano/cloruro-di-metilene}" \\
4 "c)" && \text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CHCl}_3 + \text{HCl} && "\small \text{triclorometano/cloroformio}" \\
5 "d)" && \text{CHCl}_3 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CCl}_4 + \text{HCl} && "\small \text{tetraclorometano/tetracloruro-di-carbonio}" \\
6 \end{reactions*}

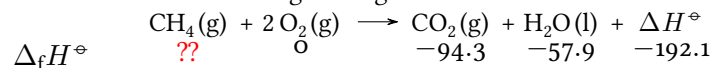
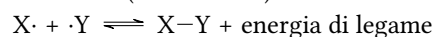
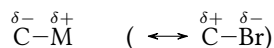
```



```

1 \chemsetup[ox]{parse=false}\ch{"\ox{\delm,C}" -{ } "\ox{\delm,M}" \quad ( <-> "\ox{\delm,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}{???})( \text{CH}_4\text{gas} ) + !(\num{0})( 2 \text{O}_2\text{gas} ) -> !(\num{-94.3})( \text{CO}_2\text{gas} ) + !(\num{-57.9})( \text{H}_2\text{O}\text{ld} ) + !(\num{-192.1})( "\State{H}" ) }

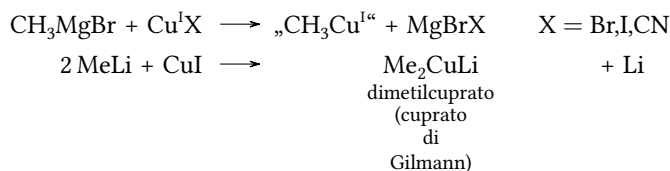
```



```

1 \begin{reactions*}
2 \text{CH}_3\text{MgBr} + "\ox*[1,Cu]" X &-> "\glqq" \text{CH}_3 "\ox*[1,Cu]\grqq" + \text{MgBrX} "\quad X \\
3 2 \text{MeLi} + \text{CuI} &&& &-> !( \text{dimetilcuprato-(cuprato-di-Gilman)} ) ( \text{Me}_2\text{CuLi} ) \\
4 \end{reactions*}

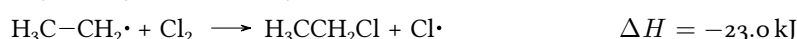
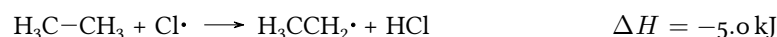
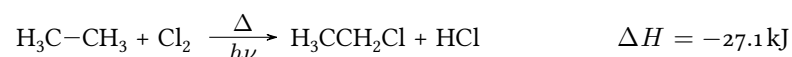
```



```

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

```

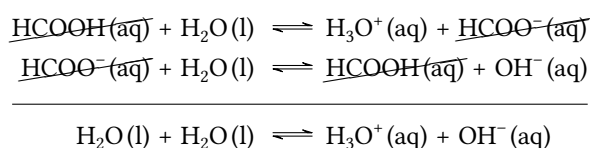


L'esempio seguente mostra come si può rappresentare la semplificazione di sistemi di reazioni.³⁷

```

1 % needs 'cancel'
2 \begin{align*}
3 \centering
4 \ch{\cancel{HCOOH}\aq} + H2O\lqd{} &\<=> H3O^+\aq{} + \cancel{HCOO^-\aq{}} \\
5 \ch{\cancel{HCOO^-\aq{}} + H2O\lqd{}} &\<=> \cancel{HCOOH}\aq{} + OH^-\aq{} \\
6 \cline{1-2}
7 \ch{H2O\lqd{}} + H2O\lqd{} &\<=> 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.

³⁷ Ispirato da una domanda su TeX.SE: <http://tex.stackexchange.com/q/30118/5049>

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

34.1. Chiamata semplice

È generalmente semplice richiamare le frasi:

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

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

| | | |
|---|---------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | <code>\ghs{h}{200} \\\</code> | H200: Unstable explosives. |
| 2 | <code>\ghs{H}{224} \\\</code> | H224: Extremely flammable liquid and vapour. |
| 3 | <code>\ghs{euh}{001} \\\</code> | EUH001: Explosive when dry. |
| 4 | <code>\ghs{Euh}{202} \\\</code> | EUH202: Cyanoacrylate. Danger. Bonds skin and eyes in seconds. Keep out of the reach of children. |
| 5 | <code>\ghs{p}{201}</code> | P201: Obtain special instructions before use. |

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

- `hide = true|false`

Inoltre esiste un'opzione per adattare l'output.

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

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

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`

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

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

H340: May cause genetic defects.

H340: May cause genetic defects. *<state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard>*

H360: May damage fertility or the unborn child.

H360: May damage fertility or the unborn child. *<state specific effect if known> <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard>*

H370: Causes damage to organs.

H370: Causes damage to organs *<or state all organs affected, if known>. <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard>*

EUH208: Contains *<name of sensitising substance>*. May produce an allergic reaction.

EUH208: Contains *<name of sensitising substance>*. May produce an allergic reaction.

Con le opzioni seguenti è possibile sostituire i segnaposto:

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

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

H340: May cause genetic defects. In questo modo si è esposti al pericolo.

H360: May damage fertility or the unborn child. Questi sono gli effetti.

H370: Causes damage quest'organo.

EUH208: Contains sostanza. May produce an allergic reaction.

34.3. Frasi con buchi

Alcune frasi hanno dei “buchi”:

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

P301: IF SWALLOWED:

P401: Store ...

P411: Store at temperatures not exceeding °C/°F.

P413: Store bulk masses greater than kg/lbs at temperatures not exceeding °C/°F.

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}

```

P₃₀₁: IF SWALLOWED:
P₄₀₁: Store ...
P₄₁₁: Store at temperatures not exceeding 50 °C/122 °F.
P₄₁₃: Store bulk masses greater than 5.0 kg/11 lbs at temperatures not exceeding 50 °C/122 °F.

34.4. Frasi combinate

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

```

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

```

P₂₃₅ + P₄₁₀: Keep cool. Protect from sunlight.
P₃₀₁ + P₃₃₀ + P₃₃₁: IF SWALLOWED: rinse mouth. Do NOT induce vomiting.

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>}

```
1 \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 | |

| nome | pittogramma | nome | pittogramma |
|-----------------|-------------|-----------------|-------------|
| flame-2-black | | flame-3-white | |
| flame-3-black | | flame-4-1 | |
| flame-4-2 | | flame-4-3-white | |
| flame-4-3-black | | flame-5-2-white | |
| flame-5-2-black | | | |
| flame-0 | | flame-0-5-1 | |
| bottle | | bottle-2-black | |
| bottle-2-white | | | |
| acid | | acid-8 | |
| skull | | skull-2 | |
| skull-6 | | | |
| 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. pdfTeX in modalità DVI richiede file di tipo eps, mentre pdfTeX in modalità PDF, XeTeX e LuaTeX 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 pdfTeX in modalità DVI non ne è capace.

Per risolvere il problema GHSYSTEM verifica quale compilatore viene utilizzato, e nel caso di pdfTeX 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 babel³⁸ o polyglossia.³⁹

È possibile scegliere la lingua anche in modo esplicito.

► `language = english|german|italian`

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

È mia intenzione implementare ulteriori lingue in futuro; tuttavia potrebbe volerci ancora del tempo. Chi volesse partecipare a GHSYSTEM e trascrivere le frasi in un'altra lingua, è invitato a contattarmi⁴⁰; 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`

³⁸ CTAN: babel ³⁹ CTAN: polyglossia ⁴⁰ contact@mychemistry.eu

- `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 T_EX. 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`.⁴¹ 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`

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

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

Tabella 5: All H, EUH, and P Statements.

| Identifier | Statement |
|------------|----------------------------------------------|
| H200 | Unstable explosives. |
| H201 | Explosive; mass explosion hazard. |
| H202 | Explosive, severe projection hazard. |
| H203 | Explosive; fire, blast or projection hazard. |
| H204 | Fire or projection hazard. |
| H205 | May mass explode in fire. |
| H220 | Extremely flammable gas. |
| H221 | Flammable gas. |
| H222 | Extremely flammable aerosol. |
| H223 | Flammable aerosol. |
| H224 | Extremely flammable liquid and vapour. |

continues on next page

⁴¹ CTAN: `booktabs`

| Identifier | Statement |
|------------|--------------------------------------------------------------------------------|
| H225 | Highly flammable liquid and vapour. |
| H226 | Flammable liquid and vapour. |
| H228 | Flammable solid. |
| H240 | Heating may cause an explosion. |
| H241 | Heating may cause a fire or explosion. |
| H242 | Heating may cause a fire. |
| H250 | Catches fire spontaneously if exposed to air. |
| H251 | Self-heating; may catch fire. |
| H252 | Self-heating in large quantities; may catch fire. |
| H260 | In contact with water releases flammable gases which may ignite spontaneously. |
| H261 | In contact with water releases flammable gases. |
| H270 | May cause or intensify fire; oxidiser. |
| H271 | May cause fire or explosion; strong oxidiser. |
| H272 | May intensify fire; oxidiser. |
| H280 | Contains gas under pressure; may explode if heated. |
| H281 | Contains refrigerated gas; may cause cryogenic burns or injury. |
| H290 | May be corrosive to metals. |
| H300 | Fatal if swallowed. |
| H301 | Toxic if swallowed. |
| H302 | Harmful if swallowed. |
| H304 | May be fatal if swallowed and enters airways. |
| H310 | Fatal in contact with skin. |
| H311 | Toxic in contact with skin. |
| H312 | Harmful in contact with skin. |
| H314 | Causes severe skin burns and eye damage. |
| H315 | Causes skin irritation. |
| H317 | May cause an allergic skin reaction. |
| H318 | Causes serious eye damage. |
| H319 | Causes serious eye irritation. |
| H330 | Fatal if inhaled. |
| H331 | Toxic if inhaled. |
| H332 | Harmful if inhaled. |
| H334 | May cause allergy or asthma symptoms or breathing difficulties if inhaled. |
| H335 | May cause respiratory irritation. |
| H336 | May cause drowsiness or dizziness. |

continues on next page

| Identifier | Statement |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| H340 | May cause genetic defects. <i><state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H341 | Suspected of causing genetic defects. <i><state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H350 | May cause cancer. <i><state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H351 | Suspected of causing cancer. <i><state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H360 | May damage fertility or the unborn child. <i><state specific effect if known> <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H361 | Suspected of damaging fertility or the unborn child. <i><state specific effect if known> <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H362 | May cause harm to breast-fed children. |
| H370 | Causes damage to organs <i><or state all organs affected, if known>. <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H371 | May cause damage to organs <i><or state all organs affected, if known>. <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H372 | Causes damage to organs <i><or state all organs affected, if known></i> through prolonged or repeated exposure. <i><state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H373 | May cause damage to organs <i><or state all organs affected, if known></i> through prolonged or repeated exposure. <i><state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard></i> |
| H400 | Very toxic to aquatic life. |
| H410 | Very toxic to aquatic life with long lasting effects. |
| H411 | Toxic to aquatic life with long lasting effects. |
| H412 | Harmful to aquatic life with long lasting effects. |
| H413 | May cause long lasting harmful effects to aquatic life. |
| H350i | May cause cancer by inhalation. |
| H360F | May damage fertility. |

continues on next page

| Identifier | Statement |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| H360D | May damage the unborn child. |
| H361f | Suspected of damaging fertility. |
| H361d | Suspected of damaging the unborn child. |
| H360FD | May damage fertility. May damage the unborn child. |
| H361fd | Suspected of damaging fertility. Suspected of damaging the unborn child. |
| H360Fd | May damage fertility. Suspected of damaging the unborn child. |
| H360Df | May damage the unborn child. Suspected of damaging fertility. |
| EUH001 | Explosive when dry. |
| EUH006 | Explosive with or without contact with air. |
| EUH014 | Reacts violently with water. |
| EUH018 | In use may form flammable/explosive vapour-air mixture. |
| EUH019 | May form explosive peroxides. |
| EUH044 | Risk of explosion if heated under confinement. |
| EUH029 | Contact with water liberates toxic gas. |
| EUH031 | Contact with acids liberates toxic gas. |
| EUH032 | Contact with acids liberates very toxic gas. |
| EUH066 | Repeated exposure may cause skin dryness or cracking. |
| EUH070 | Toxic by eye contact. |
| EUH071 | Corrosive to the respiratory tract. |
| EUH059 | Hazardous to the ozone layer. |
| EUH201 | Contains lead. Should not be used on surfaces liable to be chewed or sucked by children. |
| EUH201A | Warning! contains lead. |
| EUH202 | Cyanoacrylate. Danger. Bonds skin and eyes in seconds. Keep out of the reach of children. |
| EUH203 | Contains chromium(VI). May produce an allergic reaction. |
| EUH204 | Contains isocyanates. May produce an allergic reaction. |
| EUH205 | Contains epoxy constituents. May produce an allergic reaction. |
| EUH206 | Warning! Do not use together with other products. May release dangerous gases (chlorine). |
| EUH207 | Warning! Contains cadmium. Dangerous fumes are formed during use. See information supplied by the manufacturer. Comply with the safety instructions. |
| EUH208 | Contains <name of sensitising substance>. May produce an allergic reaction. |
| EUH209 | Can become highly flammable in use. |

continues on next page

| Identifier | Statement |
|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| EUH209A | Can become flammable in use. |
| EUH210 | Safety data sheet available on request. |
| EUH401 | To avoid risks to human health and the environment, comply with the instructions for use. |
| P101 | If medical advice is needed, have product container or label at hand. |
| P102 | Keep out of reach of children. |
| P103 | Read label before use. |
| P201 | Obtain special instructions before use. |
| P202 | Do not handle until all safety precautions have been read and understood. |
| P210 | Keep away from heat/sparks/open flames/hot surfaces. — No smoking. |
| P211 | Do not spray on an open flame or other ignition source. |
| P220 | Keep/Store away from clothing/.../combustible materials. |
| P221 | Take any precaution to avoid mixing with combustibles ... |
| P222 | Do not allow contact with air. |
| P223 | Keep away from any possible contact with water, because of violent reaction and possible flash fire. |
| P230 | Keep wetted with ... |
| P231 | Handle under inert gas. |
| P232 | Protect from moisture. |
| P233 | Keep container tightly closed. |
| P234 | Keep only in original container. |
| P235 | Keep cool. |
| P240 | Ground/bond container and receiving equipment. |
| P241 | Use explosion-proof electrical/ventilating/lighting/... equipment. |
| P242 | Use only non-sparking tools. |
| P243 | Take precautionary measures against static discharge. |
| P244 | Keep reduction valves free from grease and oil. |
| P250 | Do not subject to grinding/shock/.../friction. |
| P251 | Pressurized container: Do not pierce or burn, even after use. |
| P260 | Do not breathe dust/fume/gas/mist/vapours/spray. |
| P261 | Avoid breathing dust/fume/gas/mist/vapours/spray. |
| P262 | Do not get in eyes, on skin, or on clothing. |
| P263 | Avoid contact during pregnancy/while nursing. |
| P264 | Wash ... thoroughly after handling. |

continues on next page

37. Lista delle frasi

| Identifier | Statement |
|-------------|----------------------------------------------------------------------------|
| P270 | Do not eat, drink or smoke when using this product. |
| P271 | Use only outdoors or in a well-ventilated area. |
| P272 | Contaminated work clothing should not be allowed out of the workplace. |
| P273 | Avoid release to the environment. |
| P280 | Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection. |
| P281 | Use personal protective equipment as required. |
| P282 | Wear cold insulating gloves/face shield/eye protection. |
| P283 | Wear fire/flammable resistant/retardant clothing. |
| P284 | Wear respiratory protection. |
| P285 | In case of inadequate ventilation wear respiratory protection. |
| P231 + P231 | Handle under inert gas. Protect from moisture. |
| P235 + P410 | Keep cool. Protect from sunlight. |
| P301 | IF SWALLOWED: |
| P302 | IF ON SKIN: |
| P303 | IF ON SKIN (or hair): |
| P304 | IF INHALED: |
| P305 | IF IN EYES: |
| P306 | IF ON CLOTHING: |
| P307 | IF exposed: |
| P308 | IF exposed or concerned: |
| P309 | IF exposed or if you feel unwell: |
| P310 | Immediately call a POISON CENTER or doctor/physician. |
| P311 | Call a POISON CENTER or doctor/physician. |
| P312 | Call a POISON CENTER or doctor/physician if you feel unwell. |
| P313 | Get medical advice/attention. |
| P314 | Get medical advice/attention if you feel unwell. |
| P315 | Get immediate medical advice/attention. |
| P320 | Specific treatment is urgent (see ... on this label). |
| P321 | Specific treatment (see ... on this label). |
| P322 | Specific measures (see ... on this label). |
| P330 | Rinse mouth. |
| P331 | Do NOT induce vomiting. |
| P332 | If skin irritation occurs: |
| P333 | If skin irritation or rash occurs: |
| P334 | Immerse in cool water/wrap in wet bandages. |

continues on next page

37. *Lista delle frasi*

| Identifier | Statement |
|-------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| P335 | Brush off loose particles from skin. |
| P336 | Thaw frosted parts with lukewarm water. Do not rub affected area. |
| P337 | If eye irritation persists: |
| P338 | Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing. |
| P340 | Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing. |
| P341 | If breathing is difficult, remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing. |
| P342 | If experiencing respiratory symptoms: |
| P350 | Gently wash with plenty of soap and water. |
| P351 | Rinse cautiously with water for several minutes. |
| P352 | Wash with plenty of soap and water. |
| P353 | Rinse skin with water/shower. |
| P360 | Rinse immediately contaminated clothing and skin with plenty of water before removing clothes. |
| P361 | Remove/Take off immediately all contaminated clothing. |
| P362 | Take off contaminated clothing and wash before reuse. |
| P363 | Wash contaminated clothing before reuse. |
| P370 | In case of fire: |
| P371 | In case of major fire and large quantities: |
| P372 | Explosion risk in case of fire. |
| P373 | DO NOT fight fire when fire reaches explosives. |
| P374 | Fight fire with normal precautions from a reasonable distance. |
| P375 | Fight fire remotely due to the risk of explosion. |
| P376 | Stop leak if safe to do so. |
| P377 | Leaking gas fire: Do not extinguish, unless leak can be stopped safely. |
| P378 | Use ... for extinction. |
| P380 | Evacuate area. |
| P381 | Eliminate all ignition sources if safe to do so. |
| P390 | Absorb spillage to prevent material damage. |
| P391 | Collect spillage. |
| P301 + P310 | IF SWALLOWED: Immediately call a POISON CENTER or doctor/physician. |
| P301 + P312 | IF SWALLOWED: Call a POISON CENTER or doctor/physician if you feel unwell. |

continues on next page

| Identifier | Statement |
|--------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| P301 + P330 + P331 | IF SWALLOWED: rinse mouth. Do NOT induce vomiting. |
| P302 + P334 | IF ON SKIN: Immerse in cool water/wrap in wet bandages. |
| P302 + P350 | IF ON SKIN: Gently wash with plenty of soap and water. |
| P302 + P352 | IF ON SKIN: Wash with plenty of soap and water. |
| P303 + P361 + P353 | IF ON SKIN (or hair): Remove/Take off immediately all contaminated clothing. Rinse skin with water/shower. |
| P304 + P340 | IF INHALED: Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing. |
| P304 + P341 | IF INHALED: If breathing is difficult, remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing. |
| P305 + P351 + P338 | IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing. |
| P306 + P360 | IF ON CLOTHING: Rinse immediately contaminated clothing and skin with plenty of water before removing clothes. |
| P307 + P311 | IF exposed: Call a POISON CENTER or doctor/physician. |
| P308 + P313 | IF exposed or concerned: Get medical advice/attention. |
| P309 + P311 | IF exposed or if you feel unwell: Call a POISON CENTER or doctor/physician. |
| P332 + P313 | If skin irritation occurs: Get medical advice/attention. |
| P333 + P313 | If skin irritation or rash occurs: Get medical advice/attention. |
| P335 + P334 | Brush off loose particles from skin. Immerse in cool water/wrap in wet bandages. |
| P337 + P313 | If eye irritation persists: Get medical advice/attention. |
| P342 + P311 | If experiencing respiratory symptoms: Call a POISON CENTER or doctor/physician. |
| P370 + P376 | In case of fire: Stop leak if safe to do so. |
| P370 + P378 | In case of fire: Use ... for extinction. |
| P370 + P380 | In case of fire: Evacuate area. |
| P370 + P380 + P375 | In case of fire: Evacuate area. Fight fire remotely due to the risk of explosion. |
| P371 + P380 + P375 | In case of major fire and large quantities: Evacuate area. Fight fire remotely due to the risk of explosion. |
| P401 | Store ... |
| P402 | Store in a dry place. |
| P403 | Store in a well-ventilated place. |
| P404 | Store in a closed container. |
| P405 | Store locked up. |

continues on next page

| Identifier | Statement |
|-------------|------------------------------------------------------------------------------|
| P406 | Store in corrosive resistant/... container with a resistant inner liner. |
| P407 | Maintain air gap between stacks/pallets. |
| P410 | Protect from sunlight. |
| P411 | Store at temperatures not exceeding °C/°F. |
| P412 | Store at temperatures not exceeding 50 °C/122 °F. |
| P413 | Store bulk masses greater than kg/lbs at temperatures not exceeding °C/°F. |
| P420 | Store away from other materials. |
| P422 | Store contents under ... |
| P402 + P404 | Store in a dry place. Store in a closed container. |
| P403 + P233 | Store in a well-ventilated place. Keep container tightly closed. |
| P403 + P235 | Store in a well-ventilated place. Keep cool. |
| P410 + P403 | Protect from sunlight. Store in a well-ventilated place. |
| P410 + P412 | Protect from sunlight. Do not expose to temperatures exceeding 50 °C/122 °F. |
| P411 + P235 | Store at temperatures not exceeding °C/°F . Keep cool. |
| P501 | Dispose of contents/container to ... |

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: | | | |

| opzione | modulo | valori | default | |
|--------------------------------------------|-----------|--------------------------------|-----------------------|-----------|
| <code>bpchem</code> | option | <u>true</u> false | false | pagina 5 |
| <code>circled</code> | option | <u>formal</u> all none | formal | pagina 6 |
| <code>circletype</code> | option | chem math | chem | pagina 6 |
| <code>cmversion</code> | option | 1 2 bundle | bundle | pagina 6 |
| <code>ghsystem</code> | option | <u>true</u> false | true | pagina 6 |
| <code>iupac</code> | option | auto restricted strict | auto | pagina 6 |
| <code>language</code> | option | <language> | english | pagina 6 |
| <code>method</code> | option | chemformula mhchem | chemformula | pagina 6 |
| <code>Nu</code> | option | chemmacros mathspec | chemmacros | pagina 6 |
| <code>strict</code> | option | <u>true</u> false | false | pagina 6 |
| <code>synchronize</code> | option | <u>true</u> false | false | pagina 6 |
| <code>greek</code> | option | math textgreek <u>upgreek</u> | upgreek | pagina 6 |
| <code>xspace</code> | option | <u>true</u> false | true | pagina 6 |
| \ba, \Nu: | | | | |
| <code>elpair</code> | particle | <u>dots</u> dash false | false | pagina 10 |
| comandi IUPAC: | | | | |
| <code>break-space</code> | iupac | <dim> | .01em | pagina 13 |
| <code>bridge-number</code> | iupac | sub super | sub | pagina 16 |
| <code>cip-kern</code> | iupac | <dim> | .075em | pagina 14 |
| <code>coord-use-hyphen</code> | iupac | <u>true</u> false | true | pagina 16 |
| <code>hyphen-pre-space</code> | iupac | <dim> | .01em | pagina 12 |
| <code>hyphen-post-space</code> | iupac | <dim> | -.03em | pagina 12 |
| \DeclareChemLatin: | | | | |
| <code>format</code> | latin | <anything> | \itshape | pagina 17 |
| \pch, \mch, \fpch, \fmch: | | | | |
| <code>append</code> | charges | <u>true</u> false | false | pagina 19 |
| acido/base: | | | | |
| <code>p-style</code> | acid-base | slanted italics upright | upright | pagina 18 |
| \ox: | | | | |
| <code>align</code> | ox | center right | center | pagina 20 |
| <code>parse</code> | ox | <u>true</u> false | true | pagina 20 |
| <code>roman</code> | ox | <u>true</u> false | true | pagina 20 |
| <code>pos</code> | ox | top super side | top | pagina 20 |
| <code>explicit-sign</code> | ox | <u>true</u> false | false | pagina 20 |
| <code>decimal-marker</code> | ox | comma point | point | pagina 20 |
| <code>align</code> | ox | center right | center | pagina 20 |
| \OX, \redox: | | | | |
| <code>dist</code> | redox | <dim> | .6em | pagina 24 |
| <code>sep</code> | redox | <dim> | .2em | pagina 24 |
| \Enthalpy, \Entropy, \Gibbs: | | | | |
| <code>exponent</code> | | <anything> | \standardstate | pagina 25 |
| <code>delta</code> | | <anything> false | | pagina 25 |
| <code>subscript</code> | | left right | | pagina 25 |
| <code>unit</code> | | <unit> | | pagina 25 |
| \DeclareChemState, \RenewChemState: | | | | |
| <code>exponent</code> | | <anything> | \standardstate | pagina 25 |
| <code>delta</code> | | <anything> false | | pagina 25 |
| <code>subscript</code> | | <anything> | | pagina 25 |
| <code>subscript-left</code> | | <u>true</u> false | | pagina 26 |
| \State: | | | | |

| opzione | modulo | valori | default | |
|------------------------------------------------|----------------|-----------------------|-----------------------|-----------|
| exponent | state | <anything> | \standardstate | pagina 27 |
| delta | state | <anything> false | | pagina 27 |
| subscript-left | state | true false | | pagina 27 |
| \NMR, \begin{spectroscopy} \end{spectroscopy}: | | | | |
| unit | nmr | <unit> | \mega\hertz | pagina 29 |
| nucleus | nmr | {<num>,<atom symbol>} | {1,H} | pagina 29 |
| format | nmr | <anything> | | pagina 29 |
| pos-number | nmr | side sub | side | pagina 29 |
| coupling-unit | nmr | <unit> | \hertz | pagina 29 |
| parse | nmr | true false | true | pagina 29 |
| delta | nmr | <anything> | | pagina 29 |
| list | nmr | true false | false | pagina 30 |
| list-setup | nmr | | (vedi il testo) | pagina 30 |
| use-equal | nmr | true false | false | pagina 30 |
| \DeclareChemReaction: | | | | |
| star | | true false | false | pagina 35 |
| arg | | true false | false | pagina 35 |
| list-name | reaction | <anything> | Elenco delle reazioni | pagina 37 |
| list-entry | reaction | <anything> | Reazione | pagina 37 |
| \mhName: | | | | |
| align | mhName | <alignment> | \centering | pagina 33 |
| format | mhName | <commands> | | pagina 33 |
| fontsize | mhName | <fontsize> | \tiny | pagina 33 |
| width | mhName | <dim> | auto | pagina 33 |
| fasi: | | | | |
| pos | phases | side sub | side | pagina 38 |
| space | phases | <dim> | .1333em | pagina 38 |
| \newman: | | | | |
| angle | newman | <angle> | 0 | pagina 39 |
| scale | newman | <factor> | 1 | pagina 40 |
| ring | newman | <tikz> | | pagina 40 |
| atoms | newman | <tikz> | | pagina 40 |
| back-atoms | newman | <tikz> | | pagina 40 |
| \orbital <type> = s p sp sp2 sp3: | | | | |
| phase | orbital/<type> | + - | + | pagina 41 |
| scale | orbital/<type> | <factor> | 1 | pagina 41 |
| color | orbital/<type> | <color> | black | pagina 41 |
| angle | orbital/<type> | <angle> | 90 | pagina 41 |
| half | orbital/p | true false | false | pagina 41 |
| overlay | orbital | true false | false | pagina 41 |
| opacity | orbital | <num> | 1 | 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 49.
- ▶ `\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 28.
- ▶ `\RenewChemNMR` → Ridefinisce un comando NMR.
- ▶ `\DeclareChemParticle` → Definisce una nuova particella; vedi a pagina 11.
- ▶ `\RenewChemParticle` → Ridefinisce una particella.
- ▶ `\DeclareChemPhase` → Definisce un nuovo comando di fase; vedi a pagina 39.
- ▶ `\RenewChemPhase` → Ridefinisce un comando di fase.
- ▶ `\DeclareChemReaction` → Definisce un nuovo ambiente di reazione; vedi a pagina 35.
- ▶ `\DeclareChemState` → Definisce una nuova grandezza di stato; vedi a pagina 26.
- ▶ `\RenewChemState` → Ridefinisce una grandezza di stato.

Suggerimenti e avvisi di bug

Ogni feedback riguardante `CHEMMACROS`, `CHEMFORMULA` e `GHSYSTEM` è il benvenuto! Se 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.⁴²

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

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

- [Peter Cao](#)
- Christina Lüdigg
- Dr. Paul King

⁴² contact@mychemistry.eu

- Jonas Rivetti (traduzione delle frasi H e P in italiano; molte grazie anche per la traduzione del manuale!)
- Christoph Schäfer
- Timo Stein

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).
- [Theo8] 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 50, 52

align 20, 33

Ambienti

experimental ... 8, 29

nmr 30

reaction 8, 34

reaction* 34

reactions 34

reactions* 34

spectroscopy 80

Ambienti di reazione

33-38

Ambienti matematici . 61

angle 39, 41

\anti 15

append 19

APPENDICE 78

\aq 38

arg 35

arrow-offset 56

arrow-ratio 56

arrow-yshift 56

\atm 17

\atmosphere 17

atoms 40

B

\b 13

\ba 10, 79

babel 69

back-atoms 40

bm 3

\bond 9, 49

bond-length 50

bond-offset 50

bond-style 9, 50

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 80

\ch . 43 f., 46, 48, 52-56, 58,

60 f.

charge-hshift 48, 50 f.

charge-style 50

charges

append 19

\Chemalpha 6, 10 f.

\Chembeta 10 f.

\ChemDelta 10 f.

\Chemdelta 10

\Chemepsilon 10

\Chemeta 10

chemfig 10, 21 f.

CHEMFORMULA . 43-63

\Chemgamma 10

\Chemkappa 10

CHEMMACROS 9-42

\Chemmu 10

\Chemnu 10

\Chemomega 10

\Chempi 10

\Chemrho 10

\chemsetup 7, 30, 44, 63, 78

\Chemsigma 10

chemstyle 10, 17 f.

\cip 14

cip-kern 9, 14

circled 6, 11, 35

circletype 6

\cis 15

cis/trans 15

\cmc 17

cmversion 6

color 41

Comandi per mhchem 33

compound-sep 56

Configurazione assoluta 15

cool 13, 15

coord-use-hyphen 16

coupling-unit 29

D

\D 13 ff.

\d 13

\data 29 f.

\data* 29

decimal-marker 20, 45

\DeclareChemArrow . 57, 80

\DeclareChemBond .. 49, 81

\DeclareChemBondAlias

49, 81

\DeclareChemIUPAC .. 16, 81

`\DeclareChemLatin` . 17, 79, 81
`\DeclareChemNMR` 28, 30, 81
`\DeclareChemParticle` 11 f., 81
`\DeclareChemPhase` . 39, 81
`\DeclareChemReaction` . 35, 80 f.
`\DeclareChemState` . 26 f., 79, 81
`\delm`..... 21
`\delp`..... 21
`delta`..... 25 ff., 29
Didascalie di formule
 58 f.
 Personalizzazione . 58
 sintassi . 58
`dist` 24
`dots` 66
E
`\E`..... 13, 15
`effect` 65
`\El` 10
`\el` 9
`elpair`..... 10
`\Enthalpy`..... 25, 79
`\Entropy`..... 25, 79
`environ`..... 3
`experimental (amb.)` . 8, 29
`explicit-sign`..... 20 f.
`exponent`..... 25 ff.
`exposure`..... 65
F
`F-temperature`..... 66
Fasi..... 38
 Principi 38
 proprie 39
Fattori stechiometrici
 44 ff.
 `nicefrac` 45
 `space` 46
 `xfrac`..... 45
`\fdelm` 21
`\fdelp` 21

`fill-in`..... 64
 Fischer 14
`\fmch` 19, 79
`\fminus` 10
`font-family`..... 60
`font-series`..... 60
`font-shape`..... 60
`font-spec`..... 60
`fontsize`..... 33
`fontspec` 60
`format`..... 17, 29, 33, 60
Formato e carattere 59 ff.
Formle brute
 Pedici 46
Formule brute..... 46–52
 Addotti 46
 Apici 47
 Comandi di carica 48
 Comportamento . 48
 Cariche 47
 Spostamento . 50
 Comandi 47
 Legami 48
 Lunghezza 52
 Pedici
 Spostamento 51
 Personalizzazione . 50
`\fpch` 19, 79
`\fplus` 6, 10
`frac-style`..... 45
Frasi di rischio e
 sicurezza... 64 ff.
Frecce..... 54–58
 Adattamento 56
 Etichettazione 55
 Tipi 54
 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`..... 69
`\ghspic`..... 66
GHSYSTEM 63–78
 Chiamata 64
 Frase combinate . 66
 Frase con buchi . 65
 Segnaposto 64
`ghsystem`..... 6
`\Gibbs` 25, 79
`graphicx`..... 3
`greek`..... 6, 8, 11
H
`\H`..... 14
`half`..... 41
`\hapto` 8, 16
`\hertz`..... 80
`hide` 64
`\Hpl` 9
`\HtO` 9
`\Hyd` 9
`hyphen-post-space`..... 12
`hyphen-pre-space`..... 12
I
`ifpdf` 3
Impostazioni di lingua
 7 f.
`includegraphics` 67
Input protetto 54
 `math`..... 54
 `text`..... 53
Input protetto 53
`\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` 12
`hyphen-pre-space` . 12
`\iupac` 12-15

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` 56
`label-style` 56
`language` 6, 8, 18, 69
`latin`
 `format` 17
`\latin` 17
`lbs-mass` 66
`list` 30
`list-entry` 37
`list-name` 37
`list-setup` 30
Lista delle frasi ... 69-78
`\listofreactions` 36
`longtable` 3, 69
`\lqd` 8, 38

M

`\m` 13
`math-space` 54
`mathspec` 6, 9
`mathtools` 3, 34
`\mch` 19, 35, 48, 79
Meccanismi di reazione
 22 f.
`\mech` 22 f.
`\mega` 80
`\meta` 13, 15

`method` 3, 6, 11, 33, 35
`mhchem` .. 3 f., 6, 11, 29, 33,
 36, 43, 54

mhName

`align` 33
`fontsize` 33
`format` 33
`width` 33
`\mhName` 33, 80
`\Molar` 17 f.
`\moLar` 17
`\molar` 17
`\MolMass` 18

N

`\N` 14
`\n` 13
`name-format` 59
`name-width` 59
`newman`
 `angle` 39
 `atoms` 40
 `back-atoms` 40
 `ring` 40
 `scale` 40
`\newman` 39, 80
`ngerman` 8
`nicefrac` 3, 45
`\NMR` 5, 27-30, 80
`nmr`

`coupling-unit` 29
`delta` 29
`format` 29
`list` 30
`list-setup` 30
`nucleus` 29
`parse` 29
`pos-number` 29
`unit` 29
`use-equal` 30
`nmr (amb.)` 30
`\NMR*` 28

Nomi IUPAC

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., 79

`\Nuc` 9

`nucleus` 29

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

orbital

`angle` 41
`color` 41
`half` 41
`opacity` 42
`overlay` 41
`phase` 41
`scale` 41

`\orbital` 40, 80

Orbitali 40 ff.
organs 65
\ortho 15
 orto/meta/para 15
overlay 41
\OX 23, 79
ox
 align 20
 decimal-marker ... 20
 explicit-sign... 20 f.
 parse 20
 pos 20
 roman 20
\ox 4, 20 f., 79
\ox* 4, 20

P
\P 14
\p 18
p-style 18
Panoramica delle
 opzioni
 (chemmacros)
 78–81
\para 15
parse 20, 29
Particelle, ioni e simboli
 9–12
 predefiniti 9
 proprie 11
particle
 elpair 10
\pch 19, 79
\pH 18
phase 41
\phase 39
Phasen 39
phases
 pos 38
 space 38
pic-type 69
Pittogrammi 66–69
\pKa 8, 18
\pKb 18
plus-space 52
\pOH 18

polyglossia 69
pos 20, 38
\pos 29
pos-number 29
PRIMA DI
 COMINCIARE
 3–9
Proiezioni di Newman
 39 f.
\prt 9

R
\R 13 f.
\Rad 10
radical-radius 50
radical-style 50
\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, 79
\RenewChemArrow ... 57, 80
\RenewChemBond 49, 81
\RenewChemIUPAC 16, 81
\RenewChemLatin 17, 81
\RenewChemNMR 28, 81
\RenewChemParticle .. 11 f.,
 39, 81
\RenewChemPhase 39, 81
\RenewChemState 26, 79, 81
\renewtagform 34
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 49
\sin 8
siunitx 3, 17 f., 25–29
\sld 8, 38
space 38, 64
spectroscopy (amb.) ... 80
Spettroscopia 27–32
\standardstate ... 10, 79 f.
star 35
\State 27, 79
state
 delta 27
 exponent 27
 subscript-left ... 27
Stereodescrittori e
 nomenclatura
 13 ff.
stoich-space 45 f.
strict 6, 12, 16, 39
subscript 25 f.
subscript-left 26 f.
subscript-style 50
subscript-vshift ... 50 f.
substance 65
\syn 15
synchronize 6

T
table-caption 70
table-caption-short .. 70
table-foot-rule 70
table-head-number 69
table-head-rule 70
table-head-text 69
table-label 70
table-last-foot-rule . 70
table-next-page 69
table-row-sep 70
table-rules 70

INDICE ANALITICO

`table-top-head-rule` .. 70
`tabu` 3
`\ter` 8
Termini in latino 17
Termodinamica 25 ff.
`tert` 15
`\tert` 15
`text` 66
`textgreek` 6, 11, 13
`TikZ`. 15, 23, 39 ff., 50, 55, 57
`tikz` 3
`\tiny` 80
Tipi di input speciali . 53
 Input di opzioni 53
Tipi speciali di input . 52

Token a input singolo
 52
`\torr` 18
`\trans` 13, 15
`\transitionstatesymbol`
 10
U
`unit` 25, 29
Unità di misura 17 f.
`upgreek` 8
`upgreek` 6, 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