Formule chimiche di struttura in TEX con il pacchetto PPCHTEX

Gabriele Zucchetta

Pisa, 22 Ottobre 2005

Sommario

PPCHTEXè un pacchetto (di macro) con il quale è possibile creare formule chimiche di struttura in documenti TEX. Ciò significa che la realizzazione di queste formule avviene a partire da stringhe di caratteri inserite tra il normale testo scritto. I risultati che si ottengono sono di elevata qualità tipografica con relativa semplicità ma con grande flessibilità e rapidità. Un altro punto a favore di questo il pacchetto (e tutti i pacchetti ai quali si appoggia) è il fatto che si tratta di software libero [1], con quello che ciò comporta. Di seguito ne viene presentata un'introduzione alle possibilità mostrandone alcuni esempi d'uso.

Indice

1 Introduzione

In tutti i testi tecnico-scientifici, per necessità di brevità, precisione, chiarezza, si fa molto uso di immagini e figure. Non fanno eccezione i testi chimici nei quali, la necessità principale è quella di scrivere formule (chimiche) di struttura. Queste sono rappresentazioni schematiche, delle molecola[1] create a partire da tratti, curve, lettere ed simboli: elementi, questi, che TEXè in grado di gestire perfettamente.

Com'è noto, però, l'interazione diretta tra gli utenti ed il TEX non è semplice. Per questo motivo poter disporre di opportune macro è è molto pratico in quanto la manipolazione di questi elementi viene semplificata e snellita. Riguardo al soggetto di questo articolo, tra i pochi pacchetti disponibili, PPCHTEX è sicuramente il più interessante per una serie di elementi:

- il tipo di approccio usato per descrivere la costruzione della formula chimica risulta estremamente flessibile;
- la grande varieà di formule di struttura che è in grado di produrre;
- l'ottima qualità tipografica dell'immagine ottenuta;
- la licenza di tipo libero [1] sotto la quale è rilasciato.

L'approccio di questo tipo di pacchetti comporta, in pratica, che vengano digitati una serie di comandi (con le loro opzioni) in modo tale da dare tutte le informazioni necessarie a TEX per creare la formula di struttura, questi comandi vengono posti all'internot del eesto vero e proprio del documento.

Questo sistema, evidentemente, si contrappone profondamente a quello che prevede l'utilizzazione di programmi grafici di disegno (siano questi generici, come ad esempio X-fig, o specifici come ad esempio Xdrwachem [2]). Utilizzando questi programma si disegna, letteralmente, la formula chimica che viene esportata in un opportuno formato grafico ed inclusa nel documento come immagine. La figura 1 riporta una schermata del programma Xdrawchem al lavoro su una molecola di caffeina .

Sebbene questi programmi siano semplici da utilizzare anche per i principianti, il risultato che producono è di scarsa qualità. Inoltre, eventuali correzioni sulle formule richiedono l'uso del programma di disegno e del file di origine dell'immagine. Questo potrebbe essere un problema nel caso in cui il lavoro sia una collaborazione tra più persone.

Nel seguito dell'articolo verranno mostrati i princìpi di funzionamento di PPPCHTEX al fine di chiarire quanto fin'ora detto. Si rimandano tutti coloro volessero apprenderne l'uso alla documentazione ufficiale che accompagna il pacchetto [5].

2 Conoscenze di base

PPCHTEX è un pacchetto di macro scritto da Hans Hagen per TEX per la creazione di formule chimiche. Esso è un modulo (una parte) di CONTEX, il

[1] Le informazioni minime contenute in una formula sono il numero ed il tipo di atomi della molecola e come questi sono legati tra di loro. Tramite opportune convenzioni possono essere rappresentati anche altri elementi come, ad esempio, la disposizione tridimensionale degli atomi.

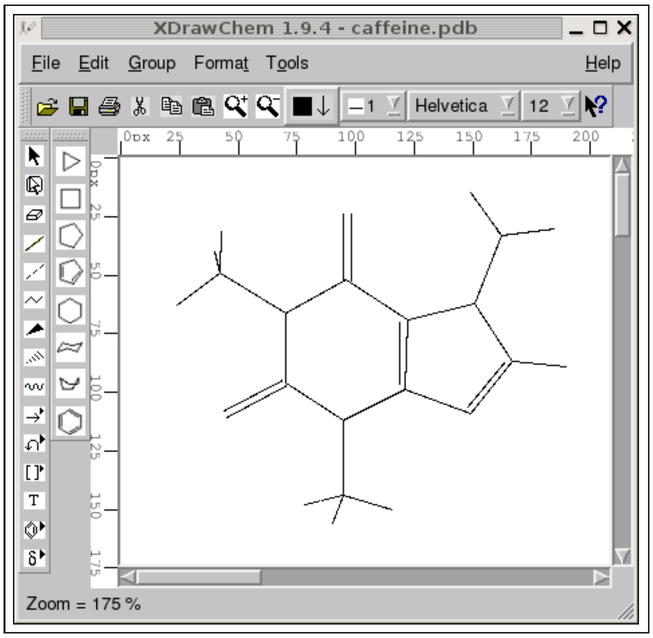

Figura 1: Formula di struttura della caffeina disegnata con Xdrawchem.

quale a sua volta è un sistema completo di macro per TeX creato dalla società *Pragma Advanced Document Engineering* [2]. La stessa società si occupa anche di PPCHTeX. L'homepage di questa società [3] è il punto di riferimento per la reperibilità di questo pacchetto e della sua documentazione. Il pacchetto appartiene alla categoria dei software liberi ed è, infatti, rilasciato sotto GPL [4]. Questo rappresenta un aspetto molto importante che è bene tener presente.

Tuttavia, è interessante il fatto che il pacchetto possa essere anche utilizzato con il PLAIN TeX o conLaTeX, risultando uno strumento utilizzabile non solo dagli utilizzatori di CONTeX, ma anche dai puristi del PLAIN TeX e dalla moltitudine di utilizzatori di LaTeX. Quello che cambia è solo la modalità di caricamento dei pacchetti ed altri piccoli dettagli.

Se viene usato in CONTeX, il comando di attivazione è:

```
\usemodule[pictex,chemic]
```

Per quanto riguarda il PLAIN TeX il comando è:

```
\documentstyle[m-pictex,mchemie]{}
```

Infine, per LaTeX 2_ε si ha:

```
\usepackage{m-pictex}
\usepackage{mchemie}
```

La cotruzione delle formule non dipende dal sistema di macro con il quale viene utilizzato.

[2]Si tratta di una compagnia specializzata nella composizione tipografica automatizzata.

3 Formule chimiche di struttura

La dichiarazione di una formula avviene seguendo lo schema seguente:

```
\setupchemical[<opzioni>]
\startchemical
   \chemical[<argomenti-struttura>][<argomenti-sostituenti>]
\stopchemical
```

Come si può notare, i comandi essenziali sono quattro:

- `\setupchemical`, le cui opzioni permettono di definire l'aspetto "estetico" di default della formula (box di contenimento, assi, dimensioni, ...) per l'intero documento;
- `\startchemical`, che è il comando di inizio dell'ambiente. All'interno delle parentesi quadre si possono inserire le stesse opzioni del comando `\setupchemical` ma queste sono applicate solo per la formula in oggetto.
- `\chemical`, è il comando fondamentale ed è attraverso i suoi argomenti che viene descritta la formula;
- `\stopchemical`, che è il comando della fine dell'ambiente.

3.1 Formule "classiche" di strutture

L'uso di questi comandi viene introdotto riportando e descrivendo due esempi. Il primo esempio si riferisce, ad un classico in chimica organica e cioè alla struttura della molecola di Metano (CH_4). Il codice è il seguente:

```
\startchemical
\chemical[ONE,SB1,SB4,BB2,SB7,Z01247][C,H,H,H,H]
\stopchemical
```

Il risutlato delle tre righe di codice precedente è riportato nella figura 2.

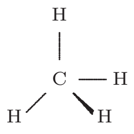

Figura 2: Formula di struttura della molecola di Metano

Si noti che il comando `\chemical` contiene:

- all'interno delle prime parentesi quadre, il numero degli atomi della struttura (come primo argomento), che nel caso specifico è uno (`ONE`) ed il tipo di legami (questo argomento è trattato più avanti nella sezione 4).

- i numeri presenti si riferiscono alla numerazione interna degli atomi;
- all'interno delle seconde parentesi quadre, i sostituenti.

Il secondo esempio, un po' più complesso, si riferisce alla molecola della Citosina:

```
\startchemical
\chemical[SIX,B1,EB1,+SB2,-SB3,+SB4,-SB5,EB5,B6,Z3,
Z5,SR3,ER4,R6,RZ3,RZ4,RZ6][N,N,H,O,NH_2]
\stopchemical
```

Il risultato che si ottiene è riportato nella figura 3.

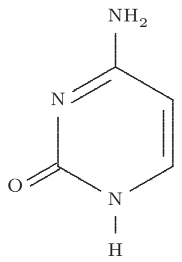

Figura 3: Formula di struttura della Citosina.

Si noti, semplicemente, come con poche istruzioni è possibile definire anche molecole di una certa complessità e come sia abbastanza immediato ritrovare nel codice sorgente le varie parti di costruzione della molecola. Questo perchè la logica di funzionamento è in linea con le convenzioni usate in chimica risultando intuitiva.

A titolo di esempio si riportano, nella figura 4 alcuni degli scheletri di struttura disponibili. Per la numerazione dei legami e per gli altri approfondimenti, si rimanda sempre al manuale d'uso [5] in particolare alla Parte 3.

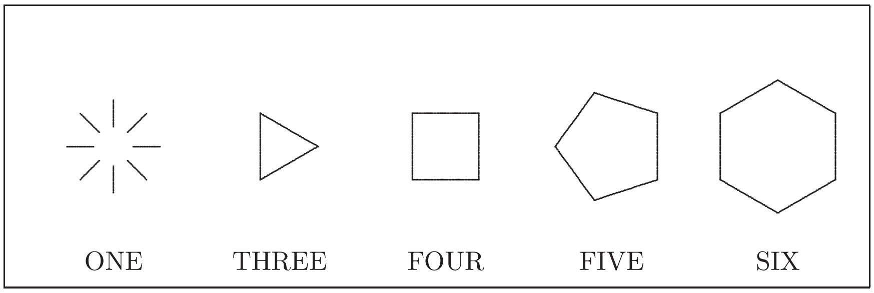

Figura 4: Alcuni scheletri di struttura disponibili

3.2 Viste frontali

Le molecole cicliche a cinque o sei termini, possono essere disegnate in vista frontale utilizzando l'opzione `FRONT` come mostra il seguente codice e la struttura (figura 5) che ne scaturisce.

```
\startchemical
\chemical[FIVE,FRONT,BB125,+SB3,-SB4,Z4][O]
\chemical[FIVE,FRONT,+R1235,+RZ1235][\SR{HO},H,\SR{HOH_2C},CH_2OH]
\chemical[FIVE,FRONT,-R1235,-RZ1235][OH,H,\SR{HO},H,CH_2OH]
\stopchemical
```

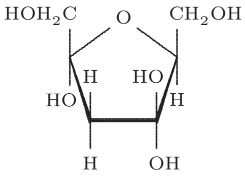

Figura 5: Vista frontale dell'α-D-Fruttofuranosio

Sono interessanti due aspetti. Il primo è che la struttura viene ad essere creata per sovrapposizione di tre parti di molecola. La prima introduce l'eteroatomo di Ossigeno, la seconda i legami sopra il piano della molecola e la terza quelli sotto il piano. L'altro aspetto riguarda l'uso dei segni + e − (per esempio `+R1235` e `-R1235`) che specificano la posizione dei legami rispetto al piano.

3.3 Proiezioni di Newman

Tra le strutture disponibili vi sono anche le proiezioni di Newman che si ottengono specificando l'opzione `NEWMAN`. Per differenziare la configurazione stellata ed eclissata di utilizzano, rispettivamente, le opzioni `STAGGER` e `ECLIPLE`. L'esempio seguente mostra l'uso delle opzioni:

```
\startchemical
\chemical[NEWMAN,STAGGER,ROT1,CB][1,3,4,5,6]
\stopchemical
```

```
\startchemical
\chemical[NEWMAN,ECLIPSE,ROT1,CB][1,3,4,5,6]
\stopchemical
```

La figura 6 riporta, affiancate, le due proiezioni relative al sopra riportato codice.

4 Legami

Per la costruzione delle strutture sono disponibili molti tipi di legami (singoli, doppi, tripli, radicali, aromatici, ...). Il tipo di legame viene creato tramite

Stellata (STAGGER) Eclissata (ECLIPLE)

Figura 6: Esempi di proiezioni di Newman (Stallata ed eclissata)

appositi *specificatori* che definiscono il tipo di legame; ad esempio `SB` per Singol Bond (legame singolo.) La tabella1 riposta una parte dei tipi di legami disponibili. Una dettagliata descrizione ed dei relativi specificatori è riportata nel capitolo 2 del manuale [5]: è di rapida e semplice consultazione.

Singolo	Doppio	triplo
Idrogeno	Aromatico	Risonanza
Radicale	Singolo tratteggiato	Singolo sopra il piano
Singolo sotto il piano	A ponte	...

Tabella 1: Elenco di alcuni dei tipi di legami disponibili.

Accanto al descrittore vanno inseriti i numeri degli atomi a cui si riferisce il legame. Se non vi è alcun numero, il legame si riferisce a tutti gli atomi dello scheletro della molecola. Quanto appena detto risulta più chiaro se visto applicato alla costruzione di una molecola con lo scheletro del Cicloesano di chi si riporta di seguito il sorgente:

```
\startchemical
\chemical[SIX,B,R14,RD25,RB36]
\stopchemical
```

Quanto sopra produce la struttura in figura 7, dove:

- `B`, crea i legami della struttura dello scheletro del Cicloesano;
- `R14`, crea i legami singoli (tratto continuo);
- `RD25`, crea i legami sotto il piano (tratto tratteggiato);

`RB36`, crea i legami sopra il piano (tratto spesso).

Un altro esempio, un po' più complesso, è la costruzione della molecola di Etene CH_2CH_2 riportata di seguito:

```
\startchemical
\chemical[ONE,SB46,DB1,Z0146,MOV1,SB28,Z28][C,C,H,H,H,H]
\stopchemical
```

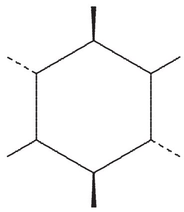

Figura 7: Alcuni tipi di legami sullo scheletro del Cicloesano.

Dove:

- `SB6`, disegna un legame singolo in posizione 4 e 6;
- `DB1`, disegna il doppio legame in posizione 1;
- `Z0146`, aggiunge il nome degli atomi in posizione 0 (al centro del nodo), 1, 4 e 6.
- `SB28 e Z28`, disegnano i legami 2 ed 8 del secondo atomo di Carbonio (dopo che il nodo è stato "mosso" (`MOVE`) nella posizione 1.

Il risultato del codice appena descritto è riportato nella figura 8.

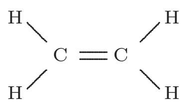

Figura 8: Molecola di Etene.

5 Equazioni chimiche

Il pacchetto mette a disposizione anche la possibilità di creare reazioni ed equilibri chimici. Questo viene fatto utilizzando il comando `\chemical` nel seguente modo:

```
\chemical{formula}
\chemical{formula}{testo superiore}
\chemical{formula}{testo superiore}{testo inferiore}
```

I comandi `\chemical` vanno piazzati all'interno della seguente struttura se si utilizza CONTEXT:

```
\placeformula
\startformula
...
...
\stopformula
```

e, all'interno dell'ambiente matematico se si utilizza LaTeX.

Il seguente codice viene riportato come semplice esempio:

```
$$
\chemical{2H_2}{Idrogeno}
\chemical{PLUS}
\chemical{O_2}{Ossigeno}
\chemical{GIVES}
\chemical{2H_2O}{Acqua}
$$
```

e genera l'equazione in figura 9.

$$\underset{\text{Idrogeno}}{2H_2} \quad + \quad \underset{\text{Ossigeno}}{O_2} \quad \longrightarrow \quad \underset{\text{Acqua}}{2H_2O}$$

Figura 9: Reazione chimica tra Idrogeno ed Ossigeno.

Rimane evidente che all'interno del comando `\chemical` può essere inserita una qualsiasi struttura di struttura e non, esclusivamente, semplici formule brute

6 Conclusioni

La creazione di formule di struttura è un lavoro molto complesso data la vastità delle molecole esistenti e le molteplici convenzioni per rappresentarle. Il pacchetto descritto ed il suo interessante modo di approccio mettono a disposizione uno strumento flessibile, rapido e dai risultati eccellenti. Tuttavia, la conoscenza dell'uso dei comandi richiede un certo periodo di apprendimento soprattutto per la gestione delle strutture più complesse.

Quanto descritto nell'articolo è solo una parte di tutte le caratteristiche di questo pacchetto. Tra le più importanti non descritte vi sono le seguenti possibilità:

- l'aggiunta di testo extra in qualsiasi parte;
- la combinazione di parti di molecole a formarne una;
- la creazione di definizioni, una caratteristica all'omonimo comando, particolarmente utile quando si devono rappresentare molecole simili ma che differiscono per una piccola parte.

Si ricorda, infine, che il manuale del pacchetto [5] contiene tutto ciò di cui si ha bisogno per lavorare appieno con questo pacchetto.

References

[1] The Free Software Definition - GNU Project - Free Software Foundation (FSF). `http://http://www.gnu.org/philosophy/free-sw.html/` Word Wide Web. Free Software Foundation,Inc..

[2] XDrawChem @ sourceforge.net http://xdrawchem.sourceforge.net/

[3] Word Wide Web. PRAGMA POD web page. https://www.pragma-pod.com/

[4] Richard M. Stallman. The GNU General Public License. Technical report, Free Software Foundation, Inc., 1989,1991. http://www.gnu.org/copyleft/gpl.html.

[5] A macropackage for typesetting chemical structure formulas. J. Hagen and A.F. Otten. Pragama ADE, Hasselt NL. Ottobre 2001.