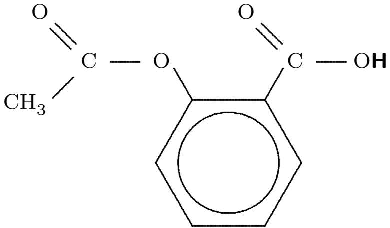
Formule chimiche in TEX con il pacchetto PPCHTEX

Gabriele Zucchetta

GuIT meeting 2005
22 Ottobre 2005

Formule di struttura: un esempio



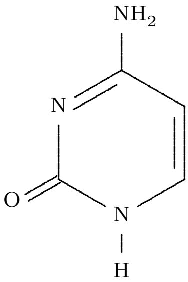
La formula di struttura del'Acido acetil salicidico (Aspirina).

Caratteristiche

Le caratteristiche principali di PPCHTEX sono:

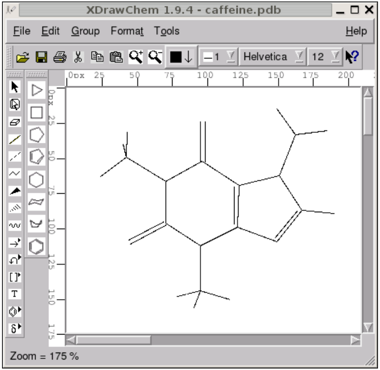
- è un pacchetto (di macro) con il quale è possibile creare formule chimiche di struttura in documenti TEX;
- l'autore del pacchetto è Hans Hagen;
- è un modulo (una parte) di CONTEX,
- è un *software libero* come inteso dalla Free Software Foundation;
- può anche essere usato con il PLAIN TEX o con LATEX.

Esempio: la molecola 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
```

Xdrawchem



Un programma grafico (Xdrawchem) per il disegno delle formule di struttura al lavoro sulla molecola di Caffeina.

Caricamento del pacchetto

Il pacchetto ha le modalità di caricamente riportate di seguito.
In CONTEXT:

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

In PLAIN TEX:

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

In LATEX:

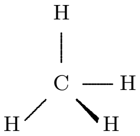
```
\usepackage{m-pictex}
\usepackage{mchemie}
```

La dichiarazione di una formula avviene seguendo lo schema seguente:

```
\setupchemical[<opzioni>]
...
...
...
\startchemical
   \chemical[<opzioni>][<opzioni>]
\stopchemical
```

Un semplice esempio: il Metano

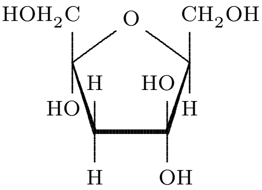
La schema precedente è ora applicato ad un esempio pratico.




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

Ponendo attenzione al sorgente si può capire il sistema di costruzione delle strutture.

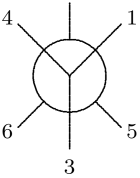
Viste Frontali

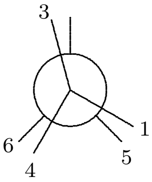



```
\startchemical
\chemical[FIVE,FRONT,BB125,+SB3,-SB4,Z4][O]
\chemical[FIVE,FRONT,+R1235,+RZ1235]
[\SR{HO},H,\SR{HOH_2C},CH_2OH]
\chemical[FIVE,FRONT,-R1235,-RZ1235]
[OH,H,\SR{HO},H,CH_2OH]
\stopchemical
```

Proiezioni di Newman

Tra le strutture disponibili vi sono anche le proiezioni di Newman.






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

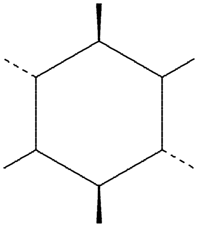
I Legami

Per la costruzione delle strutture sono disponibili molti tipi di legami (singoli, doppi, tripli, radicali, aromatici, ...):

- il tipo di legame viene creato tramite appositi *specificatori* che definiscono il tipo di legame; ad esempio `SB` per Singol Bond (legame singolo.) ;
- 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;
- una dettagliata descrizione ed dei relativi specificatori è riportata nel capitolo 3 del manuale del pacchetto.

Legami: Esempio

Rimandando alla sezione del manuale sopracitato si riporta, come esempio, la costruzione di una molecola con lo scheletro del Cicloesano.



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

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}
```

Struttura delle equazioni chimiche

Le equazioni chimiche hanno la seguente struttura in CONTEXT:

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

mentre vanno all'interno dell'ambiente matematico se si utilizza LATEX.

Equazioni chimiche:esempio

Come semplice esempio viene riportato il seguente:

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

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

Manuale e sorgenti

In rete non è presente molta documentazione riguardo questo pacchetto. Il punto di partenza è l'homepage della PRAGMA POD:

`https://www.pragma-pod.com/`

dove si possono reperire i sorgenti del pacchetto è tutta la documentazione necessaria (compreso un ottimo manuale di riferimento).