

Il bundle chemmacros

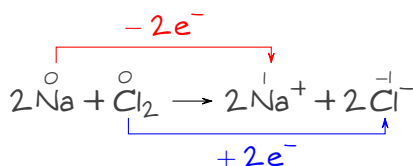
v3.6 2013/02/26

I pacchetti **chemmacros**, **chemformula** e **ghsystem**

Clemens NIEDERBERGER

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

documentazione in italiano



Indice	7.5. Versioni 3.5 e 3.6	9
I. Prima di cominciare	3	
1. Licenza, requisiti e LEGGIMI	3	
2. Motivazioni e ragioni	4	
3. Installazione e caricamento del bundle	5	
4. Opzioni globali	5	
5. Setup	7	
6. Impostazioni di lingua	7	
6.1. Lingue supportate	7	
6.2. Particolarità	8	
6.2.1. Tedesco	8	
6.2.2. Italiano	8	
7. Novità	8	
7.1. Versione 3.3	8	
7.2. Versione 3.3a	9	
7.3. Versione 3.3d	9	
7.4. Versione 3.4	9	
II. chemmacros	10	
8. Particelle, ioni e simboli	10	
8.1. Predefiniti	10	
8.2. Definire particelle proprie . . .	12	
9. Nomenclatura, stereodescrittori e termini in latino	12	
9.1. Nomi IUPAC	12	
9.1.1. Comandi predefiniti . .	13	
9.1.2. Comandi di nomenclatura propri	16	
9.2. Termini in latino	17	
10. Unità di misura per l'impiego con siunitx	18	
11. Acidi/basi	18	
12. Numeri di ossidazione, cariche reali e formali	19	
12.1. Cariche ioniche	19	
12.2. Numeri di ossidazione	20	
12.3. Cariche parziali e simili	22	

13. Meccanismi di reazione	23	25.3. Comandi	48
14. Reazioni redox	23	25.4. Cariche ed altri apici	48
15. Stati (standard), termodinamica	26	25.5. Legami	50
15.1. Grandezze termodinamiche	26	25.5.1. Legami nativi	50
15.1.1. Definire nuove grandezze	26	25.5.2. Legami flessibili	50
15.1.2. Ridefinire grandezze	27	25.6. Personalizzazione	51
15.2. Grandezze di stato	27	26. Tipi speciali di input	53
16. Spettroscopia e valori sperimentali	28	26.1. Token a input singolo	54
16.1. Il comando \NMR	28	26.2. Input di opzioni	54
16.2. Abbreviazioni	29	27. Input protetto	55
16.3. Un ambiente per elencare valori sperimentali	29	27.1. Testo	55
16.4. Personalizzazione	30	27.2. Matematica	55
16.5. Esempio di applicazione	31	28. Freccce	56
16.5.1. Quasi standard	32	28.1. Tipi di frecce	56
16.5.2. Lista formattata	32	28.2. Etichettazione	57
16.5.3. Buffo	32	28.3. Adattamento	57
17. Comandi per mhchem	33	28.4. Modificare i tipi di frecce	58
18. Ambienti di reazione	34	29. Didascalie di formule	59
18.1. Definiti da CHEMMACROS	34	29.1. Sintassi	59
18.2. Reazioni proprie	36	29.2. Personalizzazione	60
18.3. Lista delle reazioni	37	30. Formato e carattere	60
19. Fasi	38	31. Utilizzo in ambienti matematici	62
19.1. Principi	38	32. Ulteriori esempi	63
19.2. Definire fasi proprie	39	IV. ghsystem	65
20. Proiezioni di Newman	40	33. Setup	65
21. Orbitali s, p e ibridi	41	34. Richiamare le frasi di rischio (H) e sicurezza (P)	65
III. chemformula	44	34.1. Chiamata semplice	65
22. Impostazioni	44	34.2. Frasi con segnaposto	66
23. Principio di base	44	34.3. Frasi con buchi	67
24. Fattori stechiometrici	45	34.4. Frasi combinate	68
25. Formule brute	47	35. Pittogrammi	68
25.1. Addotti	47	35.1. Le immagini	68
25.2. Pedici	48	35.2. Il tipo dell'immagine dipende dal compilatore	70

36. Lingue disponibili	71	Suggerimenti e avvisi di bug	84
37. Lista delle frasi	71	Bibliografia	85
V. Appendice	81	Indice analitico	86
Panoramica delle opzioni e modalità di adattamento	81		

Parte I.

Prima di cominciare

1. Licenza, requisiti e LEGGIMI

Il bundle `CHEMMACROS` è pubblicato sotto la \LaTeX Project Public License (LPPL) versione 1.3 o successive (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>) ed ha lo stato “maintained”.

Il bundle `CHEMMACROS` richiede versioni attuali dei bundle `l3kernel`¹ e `l3packages`.² Inoltre sono richiesti i pacchetti `siunitx`,³ `mathtools`,⁴ `bm`,⁵ `nicefrac`⁶ ed `environ`⁷ come anche `tikz`⁸ e le sue librerie `calc` e `arrows`.

L’opzione globale del pacchetto (d’ora in poi indicata come “opzione globale”) `bpchem` (vedi paragrafo 4) richiede `bpchem`,⁹ l’opzione globale `xspace` richiede `xspace`¹⁰ e l’opzione globale `method = mhchem` richiede `mhchem`.¹¹

Dalla v3.0 il pacchetto `CHEMMACROS` è stato riunito con i nuovi pacchetti `CHEMFORMULA` e `GHSYSTEM`; `CHEMFORMULA` è un’alternativa a `mhchem`. Questo ha portato ad alcuni cambiamenti interni a `CHEMMACROS`. Contemporaneamente è stato totalmente rielaborato questo manuale.

Forse l’utente ricorderà che le opzioni di `CHEMMACROS` appartengono tutte a moduli diversi (per ulteriori informazioni a riguardo vedi il paragrafo 5). Questi vengono poste nel margine sinistro quando l’opzione viene citata per la prima volta. L’appendice (vedi la parte V) elenca tutte le opzioni di `CHEMMACROS` e i rispettivi moduli. In questo documento le opzioni sono contrassegnate dal colore verde e i moduli dal colore rosso.

Il pacchetto `GHSYSTEM` richiede i pacchetti `CHEMMACROS`, `tabu`,¹² `longtable`,¹³ `ifpdf`¹⁴ e `graphicx`.¹⁵

Il pacchetto riconosce alcuni comandi e opzioni obsolete, che non vengono più descritti in questo manuale; sono ancora definiti per garantire la compatibilità con documenti meno recenti. Questi comandi restituiscono un avviso; in futuro potrebbero non essere più definiti.

¹ CTAN: `l3kernel` ² CTAN: `l3packages` ³ CTAN: `siunitx` ⁴ CTAN: `mathtools` ⁵ CTAN: `bm` ⁶ CTAN: `nicefrac`
⁷ CTAN: `environ` ⁸ CTAN: `pgf` ⁹ CTAN: `bpchem` ¹⁰ CTAN: `xspace` ¹¹ CTAN: `mhchem` ¹² CTAN: `tabu` ¹³ CTAN: `longtable` ¹⁴ CTAN: `ifpdf` ¹⁵ CTAN: `graphicx`

2. Motivazioni e ragioni

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.

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

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

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.

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.

¹⁸ Con l'estensione `sty`.

4. Opzioni globali

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`
- 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 v1.*. 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 10). 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}}`.

¹⁹ Ringrazio Christoph Schäfer per avermi fatto notare che la v1.1 trattava le cariche in modo poco coerente! ²⁰ CTAN: `upgreek` ²¹ CTAN: `textgreek` ²² CTAN: `mathspec`

5. Setup

`option xspace = true|false` → Con questa opzione la maggior parte delle macro comprende un `\xspace`.
Default = true

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
```

$- + - + e^- p^+$
 $- + \ominus \oplus e^- p^+$
 $- + \ominus \oplus e^- p^+$
 $\ominus \oplus \ominus \oplus e^\ominus p^\oplus$
 $\ominus \oplus \ominus \oplus e^\ominus p^\oplus$

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>}
```

7. Novità

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 51.
- Nuova opzione `bond-style`, vedi a pagina 51.
- Nuova opzione `cip-kern`, vedi a pagina 15.

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).

7.5. Versioni 3.5 e 3.6

- Le interruzioni di riga che precedono o seguono i legami nelle formule non sono più possibili.
- Le interruzioni di riga seguenti le frecce di reazione nelle formule sono ora permesse.
- Alcuni degli spazi orizzontali nelle formule ora hanno dei componenti elastici.
- È ora possibile inserire un ambiente matematico protetto all'interno delle formule anche con `\(` e `\)`.
- Le nuove opzioni `radical-vshift`, `radical-hshift` e `radical-space` permettono un controllo fine sul punto di radicale.
- Nei fattori stechiometrici viene inserito uno zero iniziale quando mancante.
- Nuova opzione `stoich-paren-parse`.
- Numerose variazioni interne del codice.

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` \rightarrow H^+ (protone)

`\Hyd` \rightarrow OH^- (ione idrossido)

`\HtO` \rightarrow H_3O^+ (ione ossonio) (H three O)

`\water` \rightarrow H_2O

`\el` \rightarrow e^- (elettrone)

`\prt` \rightarrow p^+ (protone)

`\ntr` \rightarrow n^0 (neutrone)

`\Nu` \rightarrow Nu^- (nucleofilo). Anche il pacchetto `mathspec` definisce una macro di nome `\Nu`: selezionando l'opzione globale `Nu = mathspec`, **CHEMMACROS** definisce una macro sostitutiva `\Nuc`.

`\El` \rightarrow E^+ (elettrofilo)

`\ba` \rightarrow ba^- (base)

`\fplus` \rightarrow \oplus

`\fminus` \rightarrow \ominus

`\transitionstatesymbol` \rightarrow \ddagger

`\standardstate` \rightarrow \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` \rightarrow α

`\Chembeta` \rightarrow β

`\Chemgamma` \rightarrow γ

`\Chemdelta` \rightarrow δ

`\Chemepsilon` \rightarrow ϵ

²³ CTAN: `chemstyle` ²⁴ Molte grazie al suo autore Joseph Wright.

`\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`.

```

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.

²⁵ CTAN: `chemfig`

9. Nomenclatura, stereodescrittori e termini in latino

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$+}
3 \DeclareChemParticle{\photon}{\upgamma$}
4 \RenewChemParticle{\el}{\upbeta$-}
5 \positron\ \photon\ \el
```

$\beta^+ \gamma \beta^-$

`\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`.

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

```

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[2.2.2.1¹⁴]-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

`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.

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:

²⁷ CTAN: `cool`

9. Nomenclatura, stereodescrittori e termini in latino

	auto	restricted	strict
<code>\L</code>	L̄	L̄	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`.

`\a` → α

`\b` → β

`\g` → γ

`\d` → δ

`\k` → κ

`\m` → μ

`\n` → η

`\w` → ω

```

1 \iupac{5\a\androstano-3\b\olo} \\
2 \iupac{\a\-(tri\cloro\metil)\-\w\cloro\poli(1,4\fenilene\metilene)}
```

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

Eteroatomi e idrogeni aggiunti I legami agli eteroatomi e gli idrogeni aggiunti sono rappresentati da caratteri corsivi [Coh+08]. `CHEMMACROS` definisce alcune abbreviazioni:

`\H` → *H*

`\O` → *O*

`\N` → *N*

`\Sf` → *S*

`\P` → *P*

```

1 \iupac{\N\methyl\benz\amide} \\
2 \iupac{3\H\pyrrole} \\
3 \iupac{\O\ethyl hexanethioate}
```

N-methylbenzamide
3H-pyrrole
O-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(η^5 -cyclopentadienyl)iron
tetra- μ_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	<code>\iupac{\meta\-\xylene} \\\</code>	<i>m-xylene</i>
2	<code>\RenewChemIUPAC\meta{\textit{m}}</code>	<i>m-xylene</i>
3	<code>\iupac{\meta\-\xylene}</code>	

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>}`

1	<code>\DeclareChemLatin\ltn{latin text}</code>	<i>latin text</i>
2	<code>\ltn</code>	

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 CHEMMA-CROS 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; CHEMMA-CROS le definisce solo nel caso in cui chemstyle non sia stato caricato.

`\molar` → mol dm⁻³

`\moLar` → mol L⁻¹

`\Molar` → M

`\MolMass` → g mol⁻¹

`\normal` → N

`\torr` → torr

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

11. Acidi/basi

È possibile rappresentare semplicemente pH, pK_A ... (la resa dei comandi `\Ka` e `\pKa` dipende dall'opzione globale `language`).

`\pH` → pH

`\pOH` → pOH

`\Ka` → K_A

`\Kb` → K_B

`\Kw` → K_W

`\pKa[<num>]` → `\pKa`: pK_A, `\pKa[1]`: pK_{A1}

`\pKb[<num>]` → `\pKb`: pK_B, `\pKb[1]`: pK_{B1}

`\p{<anything>}` → p. es.: `\p{\Kw}` pK_W

12. Numeri di ossidazione, cariche reali e formali

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

<code>\pH, \pKa</code> <code>\chemsetup[acid-base]{p-style=slanted} \pH, \pKa</code> <code>\chemsetup[acid-base]{p-style=italics} \pH, \pKa</code>
--

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 (plus + charge)

`\mch[<number>]` → carica negativa (minus + charge)

<code>\pch, Na\pch, Ca\pch[2]\</code>	$^+, Na^+, Ca^{2+}$
<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

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

Esiste un'opzione che influenza il comportamento delle cariche:

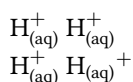
charges append = true|false → Quando è impostata a true, la carica viene appesa ad un gruppo vuoto.
Default = false

Questo ha delle conseguenze:

```

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

```

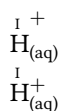


Nella maggior parte dei casi questo comportamento può essere indesiderato, anche se esistono delle occasioni dove può tornare utile:

```

1 \chemsetup{charges/append=false,phases/pos=sub}
2 \ce{\ox{1,H}\pch\aq}
3
4 \chemsetup[charges]{append=true}
5 \ce{\ox{1,H}\pch\aq}

```



12.2. Numeri di ossidazione

Inserimento di numeri di ossidazione:

\ox[<options>]{<number>,<atom>} → inserisce <number> al di sopra di <atom>; <number> deve essere un numero (razionale)!

```

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

12. Numeri di ossidazione, cariche reali e formali

ox decimal-marker = comma|point → Sceglie il tipo di segno decimale per i numeri di ossidazione come
^{1,2}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} \\
2 \ox[pos=super]{3,Fe}-oxide \\
3 \ox[pos=side]{3,Fe}-oxide \\
4 \ox[parse=false]{?,Mn} \\
5 \ox[align=right]{2,Ca}

```

²Ca ^{II}Ca
 Fe^{III}-oxide
 Fe(III)-oxide
 ?
 Mn
^{II}Ca

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

```

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

```

^{III}Fe ^{III}Fe

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, ⁰F₂

Si confronti ad esempio O_2^{-1} con $\text{O}_2^{-1,0}$

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-fraction.

```

1 \DeclareInstance{xfrac}{chemmacros-ox-fraction}{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.

²⁸ CTAN: xfrac

12.3. Cariche parziali e simili

Sono poco usate, ma possono risultare utili:

`\delp` $\rightarrow \delta+$ (delta + plus)

`\delm` $\rightarrow \delta-$ (delta + minus)

`\fdelp` $\rightarrow \delta\oplus$

`\fdelm` $\rightarrow \delta\ominus$

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

```

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

```

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

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

`\scrip` $\rightarrow +$ (scriptstyle + plus)

`\scrm` $\rightarrow -$ (scriptstyle + minus)

`\fscrip` $\rightarrow \oplus$

`\fscrm` $\rightarrow \ominus$

`\fssscrip` $\rightarrow \oplus$ (impiega `\scriptscriptstyle`)

`\fssscrm` $\rightarrow \ominus$

```

1 \setatomsep{1.8em}\chemfig{CH_3-\chemabove{C}{\scrip}(-[6]C|H_3)-\vphantom{H_3}CH
2   _3}
3 \chemfig{\fmch{}}|0-\chemabove{N}{\fscrip}(-[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 E_1

`\mech[e2]` → eliminazione bimolecolare E_2

`\mech[cb]` → eliminazione unimolecolare “conjugated base”, cioè via carbanione E_{1cb}

14. Reazioni redox

`CHEMMACROS` mette a disposizione due comandi con cui mostrare il trasferimento di elettroni nelle reazioni redox.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*.

```

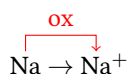
1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b){ossidazione}
ossidazione
┌
Na → Na+

```

²⁹ Ringrazio Peter Cao, che ha proposto questa funzione.

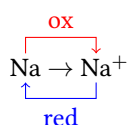
Questa linea può essere adattata con chiavi **TikZ** entro [`<tikz>`]:

```
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}
```

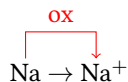


Con la chiave

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

è possibile aggiustare il valore predefinito delle linee verticali:

```
1 \chemsetup{redox/dist=1em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}
```

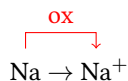


Inoltre l'opzione

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

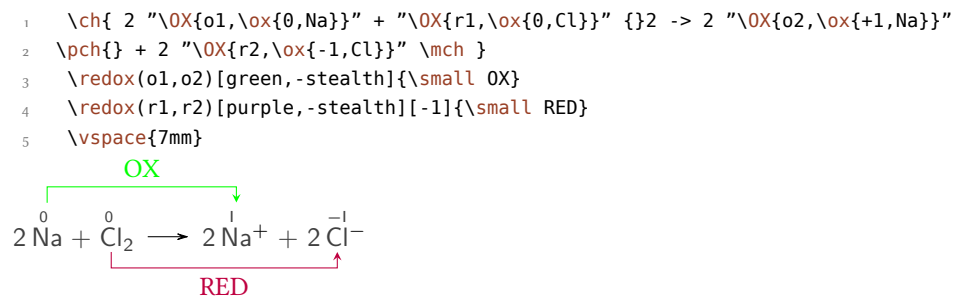
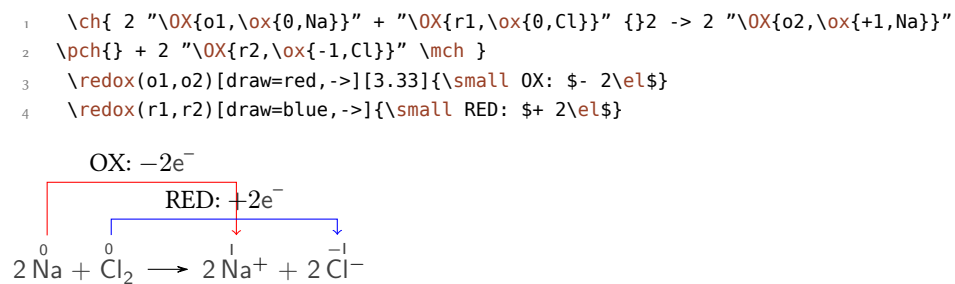
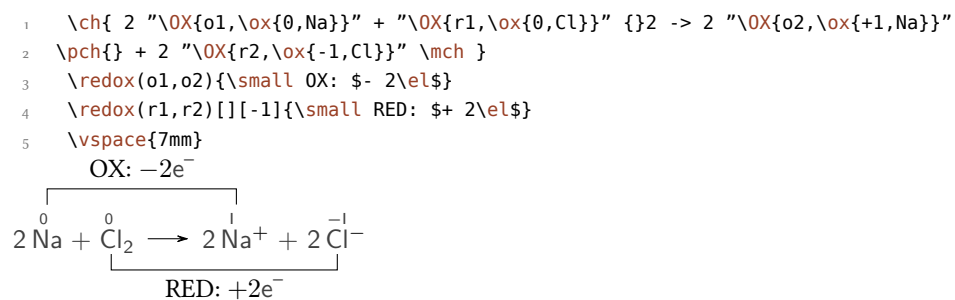
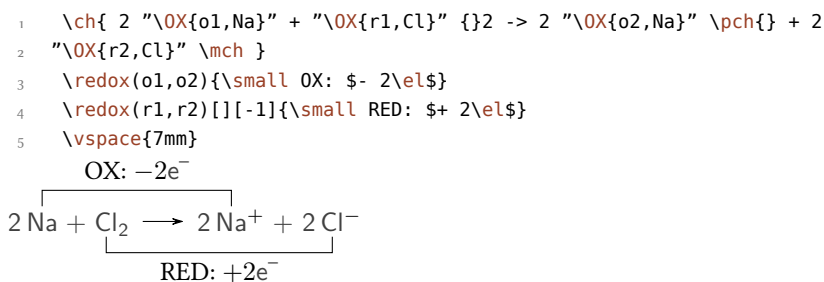
permette di variare la distanza tra atomo e inizio della linea.

```
1 \chemsetup{redox/sep=.5em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}
```



14. Reazioni redox

Esempi:



15. Stati (standard), termodinamica

15.1. Grandezze termodinamiche

I comandi seguenti impiegano siunitx:

`\Enthalpy[<options>](<subscript>){<value>}`

`\Entropy[<options>](<subscript>){<value>}`

`\Gibbs[<options>](<subscript>){<value>}`

Il loro utilizzo si spiega da sé:

1	<code>\Enthalpy{123} \\\</code>	$\Delta H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$
2	<code>\Entropy{123} \\\</code>	$S^\ominus = 123 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
3	<code>\Gibbs{123}</code>	$\Delta G^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$

(`<subscript>`) aggiunge un pedice descrittivo: `\Enthalpy(r){123}` $\Delta_r H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Questi comandi possono essere adattati tramite diverse opzioni:

`-none- exponent = <anything>`

`-none- delta = <anything>/false`

`-none- subscript = left/right`

`-none- unit = <unit>`

Il valore predefinito dipende dal relativo comando:

1	<code>\Enthalpy[unit=\kilo\joule]{-285} \\\</code>	$\Delta H^\ominus = -285 \text{ kJ}$
2	<code>\Gibbs[delta=false]{0} \\\</code>	$G^\ominus = 0 \text{ kJ mol}^{-1}$
3	<code>\Entropy[delta=\Delta,exponent=]{56.7}</code>	$\Delta S = 56.7 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Numero e unità vengono composti secondo le regole di siunitx e dipendono dalle sue impostazioni:

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

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

15.1.1. Definire nuove grandezze

Con il comando

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

è possibile definire nuove grandezze.

```

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

```

$$\Delta A^\ominus = 123.4 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta E = -1.1 \text{ V}$$

$$\Delta E_{\text{Sn}|\text{Sn}^{2+}||\text{Pb}^{2+}|\text{Pb}}^0 = 0.01 \text{ V}$$

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}{\kilo\joule\per\mole}% molar
2 \RenewChemState[exponent=]{Enthalpy}{H}{\kilo\joule}% 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>}`

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

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

Esempi:

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

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

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>]`

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

Tutti gli argomenti sono opzionali! Senza argomenti³¹ si ottiene:

1	<code>\NMR \</code>	$^1\text{H-NMR}$: δ
2	<code>\NMR*</code>	$^1\text{H-NMR}$

Il primo argomento specifica il tipo di analisi NMR eseguito:

1	<code>\NMR{13,C}</code>	$^{13}\text{C-NMR}$: δ
---	-------------------------	--------------------------------

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

1	<code>\NMR(400)</code>	$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz): δ
---	------------------------	--------------------------------------

Anche munita della sua unità:

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

```
\NMR(4e8,\hertz)
```

¹H-NMR (4×10^8 Hz): δ

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

```
\sisetup{exponent-product=\cdot}\NMR(4e8,\hertz)
```

¹H-NMR ($4 \cdot 10^8$ Hz): δ

Con il terzo argomento può essere indicato il solvente:

```
\NMR[CDCl3]
```

¹H-NMR (CDCl₃): 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 \DeclareChemNMR\HNMR{1,H}%
2 \DeclareChemNMR\CNMR{13,C}%
3 \CNMR*(100) \
4 \HNMR*(400)
```

¹³C-NMR (100 MHz)
¹H-NMR (400 MHz)

16.3. Un ambiente per elencare valori sperimentali

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

\begin{experimental} Dati **\end{experimental}** → Ambiente per l'elenco di dati sperimentali. All'interno di questo ambiente sono definiti i comandi seguenti:

\data{<tipo>[<specifiche>]} → Tipo dei dati, p.es. IR, MS... Nell'argomento opzionale possono essere inserite specifiche ulteriori che vengono stampate in parentesi tonde.

\data*{<tipo>[<specifiche>]} → Come **\data**, ma restituisce = anziché : se vale **use-equal = true**.

\NMR{<num>,<elem>[<coupling core>]}(<num>,<unit>)[<solvent>] → questo comando prende un argomento aggiuntivo: **\NMR{13,C[^1H]}** 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.

```

1 \begin{experimental}
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.

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
4 {13}{\percent}).
5 %
6 \data{P.f.} \SI{277}{\celsius} (DSC).
7 %
8 \NMR(600)[CDCl3] \val{2.01} (s, \#{24}, \pos{5}), \val{2.31} (s, \#{12}, \
9 pos{1}), \val{6.72--6.74} (m, \#{2}, \pos{11}), \val{6.82} (s, \#{8}, \pos
10 {3}), \val{7.05--7.07} (m, \#{2}, \pos{12}), \val{7.39--7.41} (m, \#{4}, \
11 pos{9}), \val{7.48--7.49} (m, \#{4}, \pos{8}).
12 %
13 \NMR{13,C}{150}[CDCl3] \val{21.2} ($+$, \#{4}, \pos{1}), \val{23.4} ($+$,
14 \#{8}, \pos{5}), \val{126.0} ($+$, \#{4}, \pos{9}), \val{128.2} ($+$,
15 \#{8}, \pos{3}), \val{130.8} ($+$, \#{2}, \pos{12}), \val{133.6} ($+$,
16 \#{2}, \pos{11}), \val{137.0} ($+$, \#{4}, \pos{8}), \val{138.6} (q,
17 \#{4}, \pos{2}), \val{140.6} (q, \#{2}, \pos{10}), \val{140.8} (q, \#{8},
18 \pos{4}), \val{141.8} (q, \#{4}, \pos{6}), \val{145.6} (q, \#{2}, \pos{7})
19 .
20 %
21 \data{MS}[DCP, EI, \SI{60}{\electronvolt}] \val{703} (2, \ch{M+}), \val
22 {582} (1), \val{462} (1), \val{249} (13), \val{120} (41), \val{105} (100).
23 %
24 \data{MS}[\ch{MeOH + H2O + KI}, ESI, \SI{10}{\electronvolt}] \val{720}
25 (100, \ch{M+ + OH-}), \val{368} (\ch{M+ + 2 OH-}).
26 %
27 \data{IR}[KBr] \val{3443} (w), \val{3061} (w), \val{2957} (m), \val{2918} (
28 m), \val{2856} (w), \val{2729} (w), \val{1725} (w), \val{1606} (s), \val
29 {1592} (s), \val{1545} (w), \val{1446} (m), \val{1421} (m), \val{1402} (m)
30 , \val{1357} (w), \val{1278} (w), \val{1238} (s), \val{1214} (s), \val
31 {1172} (s), \val{1154} (m), \val{1101} (w), \val{1030} (w), \val{979} (m),
32 \val{874} (m), \val{846} (s), \val{818} (w), \val{798} (m), \val{744} (w)
33 , \val{724} (m), \val{663} (w), \val{586} (w), \val{562} (w), \val{515} (w)
34 ).
35 %

```

```

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).

¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 21.2 (+, 4 C, C-1), 23.4 (+, 8 C, C-5), 126.0 (+, 4 C, C-9), 128.2 (+, 8 C, C-3), 130.8 (+, 2 C, C-12), 133.6 (+, 2 C, C-11), 137.0 (+, 4 C, C-8), 138.6 (q, 4 C, C-2), 140.6 (q, 2 C, C-10), 140.8 (q, 8 C, C-4), 141.8 (q, 4 C, C-6), 145.6 (q, 2 C, C-7).

MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M⁺), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

MS (MeOH + H₂O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M⁺ + OH⁻), 368 (M⁺ + 2 OH⁻).

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

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

Resa quantica: Φ = 0.74 ± 0.10.

16.5.3. Buffo

Output per <opzioni>:

```

1 format=\color{red}\itshape,
2 list=true,
3 delta=\textcolor{green}{\ch{M+ + H2O}},

```


17. Comandi per mhchem

```

4 pos-number=side,
5 coupling-unit=\mega\gram\per\square\second,
6 list-setup=,
7 use-equal

```

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

P.f. = 277 °C (DSC).

¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ $M^+ + H_2O$ = 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).

¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): 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 + 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.

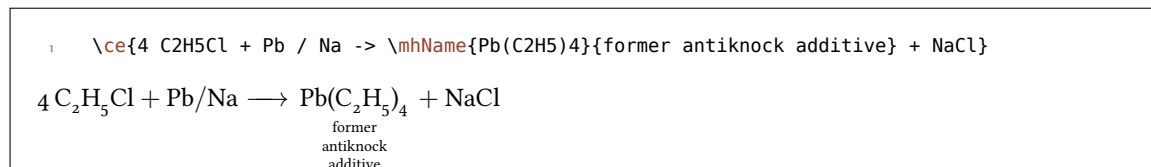
17. Comandi per mhchem

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:



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

`\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

```

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

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

```

18. Ambienti di reazione

18.1. Definiti da CHEMMACROS

Sono disponibili i seguenti ambienti per reazioni numerate...

`\begin{reaction} <formula or mhchem code> \end{reaction}`

`\begin{reactions} <formula or mhchem code> \end{reactions}`

...e le loro versioni asteriscate per reazioni non numerate.

`\begin{reaction*} <formula or mhchem code> \end{reaction*}`

`\begin{reactions*} <formula or mhchem code> \end{reactions*}`

In questo modo è possibile inserire reazioni (non) numerate in modo analogo alle equazioni matematiche.

Per rappresentare le reazioni gli ambienti `reaction/reaction*` internamente utilizzano ambienti `equation/equation*`, e gli ambienti `reactions/reactions*` utilizzano gli ambienti `align/align*`.

<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>
--	---

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

```

1 \begin{reactions}
2 A + 2 B &&-> 3 C + D \label{rxn:test}
3 \intertext{Un po' di testo tra due reazioni allineate.}
4 3 E + F &&-> G + 1/2 H
5 \end{reactions}
6 Vedi reazione~\ref{rxn:test}.

```

³³ Messo a disposizione dal pacchetto mathtools.



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:

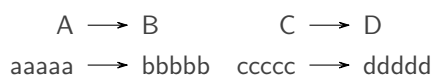
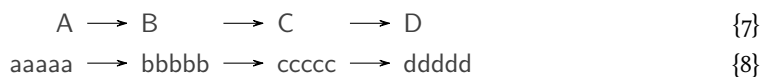
```
1 \DeclareChemReaction[star,arg]{reactionsat}{alignat}
```

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}	35
Reazione {2}	35
Reazione {3}	35
Reazione [R 4]	35
Reazione {5}	36
Reazione {6}	36
Reazione {7}	37
Reazione {8}	37
Reazione {9}: Autoprotolisi	38
Reazione {10}: first step of chain	38
Reazione {11}: second step of chain	38
Reazione {12}: Sintesi di alcani	63

L'output può essere adattato con le opzioni seguenti:

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

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

option Entrambi i valori predefiniti reagiscono all'opzione di lingua **italian**, variando rispettivamente a "Elenco delle reazioni" e "Reazione". Un'alternativa all'impostazione dell'opzione **list-name** è di ridefinire `\reactionlistname`.

Nell'elenco vengono elencate esclusivamente tutte le reazioni numerate. Tutte le reazioni non asteriscate hanno un argomento opzionale, attraverso il quale è possibile aggiungere una descrizione della reazione nell'elenco.

```

1 \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}

```

$$\text{Cl}\cdot + \text{CH}_4 \longrightarrow \text{HCl} + \cdot\text{CH}_3 \quad \{10\}$$

$$\cdot\text{CH}_3 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}\cdot \quad \{11\}$$

Nota bene: non è necessario impiegare i comandi "phantom", se il formato degli atomi non è stato variato (vedi il paragrafo 30 a pagina 60).

19. Fasi

19.1. Principi

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

`\sld` → (s)

`\lqd` → (l)

`\gas` → (g)

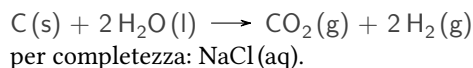
`\aq` → (aq)

Il comportamento predefinito dei comandi di fase è variato per seguire le raccomandazioni IUPAC. Sia `\sld` che `\lqd` non hanno più nessun argomento opzionale.

```

1 \ch{C\sld{}} + 2 H2O\lqd{} -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{}\
2 per completezza: NaCl\aq.

```



La raccomandazione 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:

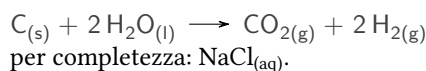
phases pos = side|sub → Cambia la posizione dell'indicatore di fase. Default = side

phases space = <dim> → Varia l'interspazio tra formula e indicatore di fase per **pos** = side. Una grandezza di TeX. Default = .1333em

```

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

```



19.2. Definire fasi proprie

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

\DeclareChemPhase{<cmd>}[<german>]{<english>}

\RenewChemPhase{<cmd>}[<german>]{<english>}

\phase{<phase>} → Quando è necessario impiegare la fase solo poche volte.

\DeclareChemPhase definisce la fase solamente se <cmd> non esiste ancora; altrimenti **CHEMMA-CROS** dà un avvertimento o un errore, dipendentemente dall'opzione **strict**. **\RenewChemPhase** 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

```

³⁴ Ringrazio Paul King del suggerimento.

$\text{NaOH}_{(\text{aq},\infty)} \text{H}_2\text{O}_{(\text{cd})} \text{U}_{(\text{cr})} \text{A}_{(\text{lc})}$ $\text{NaOH}_{(\text{aq},\infty)} \text{H}_2\text{O}_{(\text{cd})} \text{U}_{(\text{cr})} \text{A}_{(\text{lc})}$
--

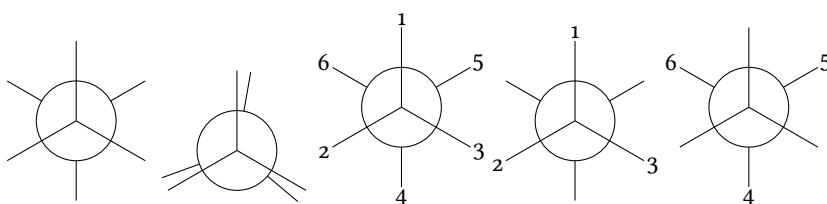
20. Proiezioni di Newman

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

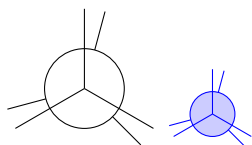
newman scale = <factor> → Scala l'intera proiezione. Default = 1

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

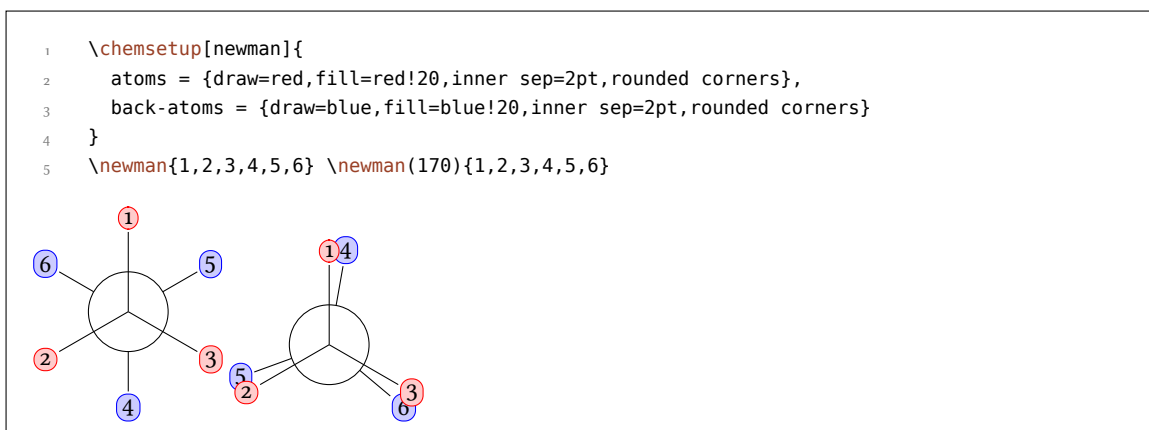
newman atoms = <tikz> → Adatta l'aspetto dei nodi contenenti gli atomi con chiavi di **TikZ**.

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}
```

21. Orbitali s, p e ibridi

CHEMMACROS mette a disposizione un comando per rappresentare alcuni orbitali:

`\orbital[<options>]{<type>}`

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

s

p

sp

sp²

sp³



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

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

21. Orbitali s, p e ibridi

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

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

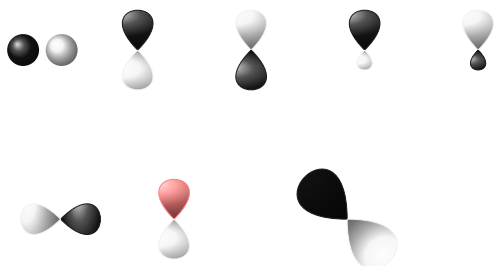
orbital angle = <angle> → Ruota gli orbitali con un contributo p in senso antiorario (tutti i tipi tranne s).

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**:

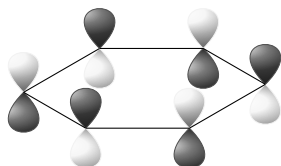
orbital overlay = true|false → L'orbitale “non ha bisogno di spazio”; viene disegnato con la chiave di **TikZ** `overlay`.

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

```

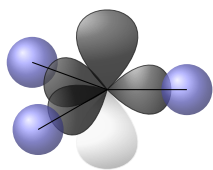
1 \hspace{1cm}
2 \chemsetup{orbital}{
3   overlay,
4   p/color = black!70
5 }
6 \setbondoffset{0pt}
7 \chemfig{?\orbital{p}-[,1.3]{\orbital[phase=-]{p}}-[:30,1.1]\orbital{p}
8   }-[:150,.9]{\orbital[phase=-]{p}}-[4,1.3]\orbital{p}-[:150,1.1]{\orbital[phase
9   =-]{p}}??}
10 \vspace{7mm}

```



21. Orbitali s, p e ibridi

```
1 \hspace{2cm}
2 \setbondoffset{0pt}
3 \chemsetup[orbital]{
4   overlay ,
5   opacity = .75 ,
6   p/scale = 1.6 ,
7   s/color = blue!50 ,
8   s/scale = 1.6
9 }
10 \chemfig{\orbital{s}-[: -20]{\orbital[scale=2]{p}}{\orbital[half,angle=0]{p}}{\orbital[half,angle=170]{p}}{\orbital[half,angle=-150]{p}}(-[: -150]\orbital{s})-\orbital{s}}
11 \vspace{1cm}
```



Parte III.

chemformula

22. Impostazioni

Tutte le opzioni di `CHEMFORMULA` appartengono al modulo `chemformula`. Quindi possono essere impostate attraverso

```
1 \chemsetup[chemformula]{<options>} oppure
2 \chemsetup{chemformula/<option1>,chemformula/<option2>}
```

Possono inoltre essere passate direttamente come opzioni al comando `\ch`.

23. Principio di base

`CHEMFORMULA` ha un comando di base.

`\ch[<options>]{<input>}`

Il suo utilizzo sarà intuitivo per l'utente pratico di mhchem:

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.

24. Fattori stechiometrici

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>	
3		2
4	<code>% decimals:</code>	12
5	<code>\ch{.5} \\\</code>	0.5
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>	$(1/2)$
10	<code>\ch{1_1/2}</code>	
11		
12	<code>% 'iupac':</code>	
13	<code>\ch{(1/2)}</code>	

Come nell'esempio per le frazioni decimali viene introdotto uno zero iniziale quando manca nell'input.

Nell'input è necessario badare alla sintassi giusta, anche se ritengo che sia piuttosto intuitiva.

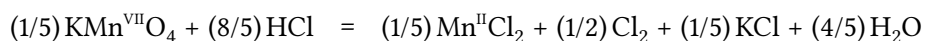
1 questo non funzionerà, ma darà invece un errore: `\ch{1/1_1}`

24. Fattori stechiometrici

Quando i fattori stechiometrici sono scritti tra parentesi le frazioni non vengono convertite e gli eventuali zeri iniziali non vengono aggiunti. Il testo inserito tra parentesi viene reso allo stesso modo dell'input.

```
\ch{(1/2) H2O} \ch{1/2 H2O} \ch{0.5 H2O} (1/2) H2O  $\frac{1}{2}$  H2O 0.5 H2O
```

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

stoich-paren-parse = true|false → Quando l'opzione è impostata a true anche i fattori stechiometrici compresi tra parentesi vengono elaborati, cioè le frazioni convertite e gli zeri iniziali inseriti. Default = false

```
\ch[decimal-marker={,}]{3.5} \ch[decimal-marker={\cdot}]{3,5}
```

3,5 3·5

L'opzione **frac-style** = xfrac utilizza il comando **\sfrac** del pacchetto xfrac; l'output può dipendere fortemente dal carattere impiegato.

```
\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:

```
\DeclareInstance{xfrac}{chemformula-text-fraction}{text}
{
  slash-left-kern = -.15em ,
  slash-right-kern = -.15em
}
```

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

25. Formule brute

```
1 \DeclareInstance{xfrac}{chemformula-text-frac}{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`.

```
1 \ch[frac-style=nicefrac]{3/2} \ch[frac-style=nicefrac]{1_1/2}
```

$\frac{3}{2}$ $1\frac{1}{2}$

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

```
1 \ch{2 H2O} \\\qquad\qquad\qquad 2 H_2O
2 \ch[stoich-space=.3em]{2 H2O} \qquad\qquad\qquad 2 H_2O
```

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 \ch{H2SO4} \\\qquad\qquad\qquad H_2SO_4
2 \ch{[Cu(NH3)4]^2+} \qquad\qquad\qquad [Cu(NH_3)_4]^{2+}
```

25.1. Addotti

CHEMFORMULA riconosce due identificatori che creano addotti.

`\ch{A.B}` → A·B

`\ch{A*B}` → A·B

```
1 \ch{CaSO4.H2O} \\\qquad\qquad\qquad CaSO_4\cdot H_2O
2 \ch{CaSO4*H2O} \qquad\qquad\qquad CaSO_4\cdot H_2O
```

Dato che le cifre all'interno di una formula brutta vengono considerate sempre come pedici (vedi il paragrafo 25.2), talvolta è necessario lasciare uno spazio in modo che il numero venga riconosciuto come fattore stechiometrico:

1	<code>\ch{Na3PO4*12H2O} \\\</code>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch{Na3PO4* 12 H2O} \\\</code>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$
3	<code>\ch{Na3PO4 * 12 H2O}</code>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

25.2. Pedici

Tutte le cifre in una sostanza vengono considerate come pedici.

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

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

1	<code>\ch{A_nB_m}</code>	A_nB_m
---	--------------------------	----------

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

1	<code>\ch{A_{n\$}B_{m\$}} \\\</code>	A_nB_m
2	<code>\ch{NaCl_{(aq)}}</code>	$\text{NaCl}_{(\text{aq})}$

25.3. Comandi

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

1	<code>\ch{\textbf{A2}B3} \ch{A2\color{red}B3}</code>	$A_2B_3 \quad A_2B_3$
---	--	-----------------------

Quando però un comando richiede come argomento un numero, ad esempio comandi regolanti la spaziatura oppure il comando `\ox`, l'utilizzo diretto fallirà. Questo deriva dal fatto che le cifre verranno riconosciute come pedice *prima* dell'espansione del comando.

1	<code>\ch{A\hspace{2mm}B}</code> darà un errore, dato che <code>\hspace</code> vedrà qualcosa del genere: <code>\hspace{\$_2\$mm}</code> .
---	--

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

25.4. Cariche ed altri apici

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

25. Formule brute

Per gruppi di carica più lunghi oppure altri apici è possibile utilizzare la sintassi matematica, che riconosce i gruppi e permette il modo matematico al loro interno. Entro questi gruppi né il simbolo + né - vengono interpretati come legami. Quando ad apice si trova un punto . non indica un addotto bensì un radicale. Un asterisco * indica uno stato eccitato.

1	<code>\ch{A^{x-}} \\\</code>	A^{x-}
2	<code>\ch{A^x-} \\\</code>	A^{x-}
3	<code>\ch{A^{x}-} \\\</code>	A^{x-}
4	<code>\ch{A^{x-}} \\\</code>	A^{x-}
5	<code>\ch{RNO2^{-.}} \\\</code>	$RNO_2^{\cdot-}$
6	<code>\ch{^31H} \\\</code>	3_1H
7	<code>\ch{^{14}6C} \\\</code>	$^{14}_6C$
8	<code>\ch{^{58}_{26}Fe} \\\</code>	$^{58}_{26}Fe$
9	<code>\ch{NO^*} \\\</code>	NO^*

Ioni e composti ionici con più di una carica vengono inseriti in modo analogo:

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

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

1	<code>\chemsetup[option]{circled=all}</code>	$H^{\oplus} + OH^{\ominus} \rightleftharpoons H_2O$
2	<code>\ch{H+ + OH- <=> H2O}</code>	

Comportamento Nel caso apice e pedice siano direttamente consecutivi in una formula brutta gli apici si comportano diversamente in base alla loro posizione.

1	<code>\ch{^33B} \ch{{}^33B} \ch{3^3B} \ch{B^3} \ch{B3^3} \\\</code>	
2	<code>\ch{^{23}_{123}B} \ch{{}^{23}_{123}B} \ch{{}_{123}^{23}B} \ch{B^{23}} \ch{B_{123}^{23}} \\\</code>	
3	<code>\ch{^{123}_{23}B} \ch{{}^{123}_{23}B} \ch{{}_{23}^{123}B} \ch{B^{123}} \ch{B_{23}^{123}} \\\</code>	

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

- 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 515).

Il secondo punto segue l'indicazione IUPAC:

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

In writing the formula for a complex ion, spacing for charge number can be added (staggered arrangement), as well as parentheses: SO_4^{2-} , $(\text{SO}_4)^{2-}$. The staggered arrangement is now recommended. *IUPAC Green Book [Coh+08, p. 51]*

25.5. Legami

25.5.1. Legami nativi

Vi sono tre tipi di quelli chiamati d’ora in poi “legami nativi”.

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

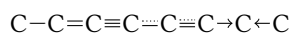
25.5.2. Legami flessibili

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

`\bond{<bond name>}`

I tipi predefiniti sono mostrati nella tabella 3.

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



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

`\DeclareChemBond{<name>}{<code>}`

`\RenewChemBond{<name>}{<code>}`

`\DeclareChemBondAlias{<new name>}{<old name>}`

`\ShowChemBond{<name>}`

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

```

1 \DeclareChemBond{single}
2 { \draw[chembond] (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond-end) ; }
3 \DeclareChemBond{coordright}
4 { \draw[chembond,butt cap->] (chemformula-bond-start) -- (chemformula-
   bond-end) ; }
5 \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
   pt}}]
9     (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond-end) ;
10  }
11 \makeatother
12 \chemsetup[chemformula]{bond-length=2ex}
13 \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

radical-hshift = <dim> → Spazio orizzontale precedente il punto radicalico. Default = .15em

radical-vshift = <dim> → Posizione verticale del punto radicalico riferita all'attuale linea di base. Default = .5ex

radical-space = <dim> → Spazio orizzontale seguente il punto radicalico. Default = .15em

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**.

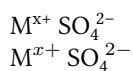
<pre>1 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\ 2 \chemsetup{chemformula}{charge-hshift=.5ex} \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\ 3 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\ 4 \chemsetup{chemformula}{charge-hshift=.5pt} \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\ 5 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}</pre>	$\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+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

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**.

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

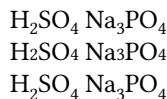
Se non si desidera rendere le cariche in modo testuale è possibile passare al modo matematico:

<pre>1 \ch{M^x+} \ch{SO4^2-} \\ 2 \chemsetup{chemformula}{charge-style = math} 3 \ch{M^x+} \ch{SO4^2-}</pre>	$\text{M}^x+ \text{SO}_4^{2-}$
--	--------------------------------



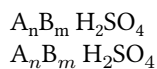
L'opzione `subscript-vshift` può essere impiegata per adattare lo spostamento verticale dei pedici.

```
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}
```



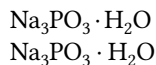
Si può inoltre selezionare in quale modo verranno composti i pedici:

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



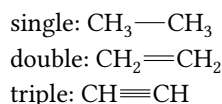
Con l'opzione `adduct-space` è possibile variare lo spazio a sinistra e destra del segno di addotto.

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



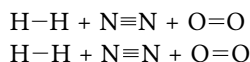
La lunghezza dei legami va modificata con:

```
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:

`\ch{2 Na + Cl2}` 2 Na + Cl₂

`\ch{ v } → ↓` Simbolo per una precipitazione o la formazione di un solido: `\ch{BaSO4 v}` BaSO₄↓

`\ch{ ^ } → ↑` Simbolo per la formazione di gas: `\ch{H2 ^}` H₂↑

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

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

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

26.2. Input di opzioni

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

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

H₂O + H₂SO₄ → H₃O⁺ + HSO₄⁻
H₂O + H₂SO₄ → 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 bruta.

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

H₂O + H₂SO₄ → H₃O⁺ + HSO₄⁻
H₂O + H₂SO₄ → H₃O⁺ + HSO₄⁻
o naturalmente:
H₂O + H₂SO₄ → H₃O⁺ + HSO₄⁻

H₂O + H₂SO₄ → H₃O⁺ + HSO₄⁻
H₂O + H₂SO₄ → H₃O⁺ + HSO₄⁻

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'}

II
CaO
...Na + ...Cl2 → ...NaCl
A → B

```

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

27.2. Matematica

Quando si ha dell'input matematico, è sufficiente porlo tra \$ \$. L'output si distingue dal testo protetto (oltre che per il modo matematico) anche per la presenza di uno spazio in seguito. Il motivo è che suppongo che l'input matematico venga utilizzato soprattutto in luogo dei fattori stechiometrici.

`\ch{ $<escaped math>$ }`

`\ch{ \(<escaped math>\) }`

1	escaped text: <code>\ch{"\$x\$" H2O} \</code>	escaped text: $x\text{H}_2\text{O}$
2	escaped math: <code>\ch{\$x\$ H2O} \</code>	escaped math: $x\text{H}_2\text{O}$
3	also escaped math: <code>\ch{\(x\) H2O} \</code>	also escaped math: $x\text{H}_2\text{O}$
4	<code>\ch{\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl}</code>	$2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$

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

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

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

28. Frecce

28.1. Tipi di frecce

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

`\ch{ -> }` → freccia semplice a destra

`\ch{ <- }` ← freccia semplice a sinistra

`\ch{ -/> }` → ↗ non reagisce (destra)

`\ch{ </- }` ← ↖ non reagisce (sinistra)

`\ch{ <-> }` ↔ doppia freccia di mesomeria

`\ch{ <> }` → ⇌ la reazione avviene in entrambe le direzioni

`\ch{ == }` → = equazione stechiometrica

`\ch{ <=> }` → ⇌ doppia freccia di equilibrio

`\ch{ <=>> }` → ⇌ equilibrio spostato a destra

`\ch{ <=>< }` → ⇌ equilibrio spostato a sinistra

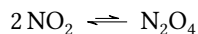
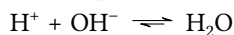
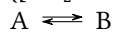
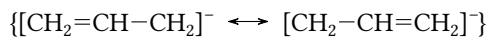
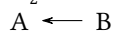
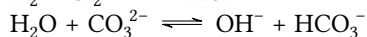
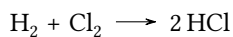
`\ch{ <o> }` → ↯ freccia isolobale

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

```

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

```



28.2. Etichettazione

Le frecce hanno due argomenti opzionali per essere etichettate.

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

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

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

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

Quando sono presenti degli spazi **CHEMFORMULA** elabora dapprima la parte tra parentesi come un input normale. Le frecce leggono i loro argomenti solo *dopo* l'elaborazione. Come si può vedere, le frecce "crescono" con la lunghezza dell'etichetta, mentre rimane costante la parte eccedente. Nell'ultimo esempio si può inoltre vedere che le parentesi quadre all'interno degli argomenti dei comandi freccia devono essere inserite con `\[e \]`; naturalmente al di fuori di `\ch` mantengono il loro comportamento normale. Questi comandi sono necessari perché il metodo solitamente impiegato di racchiudere le parentesi quadre tra parentesi graffe non funziona a causa del modo in cui `\ch` legge il suo argomento.

```
1 \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}
```

$A \xrightarrow{a} B$ $A \xrightarrow{ab} B$ $A \xrightarrow{abc} B$ $A \xrightarrow{abc\ abc} B$ $A \xrightarrow{\text{OH}} B$ $A \xrightarrow{[]}]B \text{ vs. } A \xrightarrow{[\[]}] B$

28.3. Adattamento

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

`arrow-offset = <dim> →` La lunghezza della freccia eccedente l'etichetta (a sinistra e destra). La lunghezza di una freccia vuota è il doppio di `arrow-offset`. Una lunghezza di `TeX. Default = .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 `<=>`:

```

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 $\xrightarrow[y]{x}$ B
più lunga: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
più alta: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
più bilanciata: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
etichetta più distante: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
distanza maggiore dalle formule: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
etichette più piccole: A $\xrightarrow[y]{x}$ 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

```

1 \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.

³⁵ Si rimanda alla guida pgfmanual.

(cf_arrow_end) La fine della freccia.

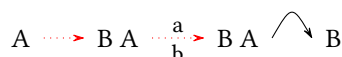
(cf_arrow_mid) La metà della freccia.

(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 n>[a][b] B} \ch{A n> B}
```



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

\RenewChemArrow{<tokens>}{<tikz>}

\ShowChemArrow{<tokens>}

Il secondo mostra la definizione attuale, il primo ridefinisce la freccia.

```
1 \texttt{\ShowChemArrow{->}} \
2 \RenewChemArrow{->}{\draw[->,red] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end) ;}
3 \texttt{\ShowChemArrow{->}} \
4 \ch{A -> B}

\draw [-cf](cf_arrow_start)-(cf_arrow_end);
\draw [->,red] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end) ;
A → B
```

29. Didascalie di formule

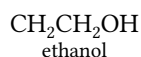
29.1. Sintassi

CHEMFORMULA ha una propria sintassi per scrivere del testo sotto ad una formula chimica, che funziona in modo analogo agli argomenti opzionali delle frecce.

\ch{ !(<name>)(<formula>) }

Quando un punto esclamativo viene seguito da una coppia di parentesi tonde, **CHEMFORMULA** fa il seguente:

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



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

```

1 \ch{!(water)(H2O)} \quad
2 \ch{!( "\textcolor{blue}{water}" )( H2O )} \quad
3 \ch{!( $2n-1$ )( H2O )} \quad
4 \ch{!( H2O )( H2O )} \quad
5 \ch{!(oxonium)( H3O+ )}

```

H₂O H₂O H₂O H₂O H₃O⁺
 water water 2n - 1 H₂O oxonium

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

```

1 \ch{H2O~(!)} \qquad H2O (!)
2 \ch{A!{ }{ }{ }} \qquad 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} \qquad
2 \ch[name-format=\sfamily\small]{!(acido)( H2SO4 ) -> B} \qquad
3 \ch[name-format=\scriptsize N:~]{!(acido)( H2SO4 ) -> B} \qquad
4 \ch[name-width=3em,name-format=\scriptsize\raggedright]{!(acido)( H2SO4 ) -> B}

```

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

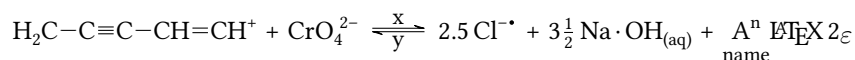
30. Formato e carattere

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

```

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

```

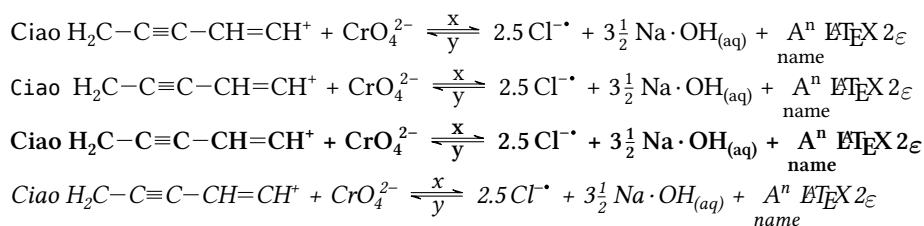


Ora variamo alcuni aspetti del testo e osserviamo i risultati:

```

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

```



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

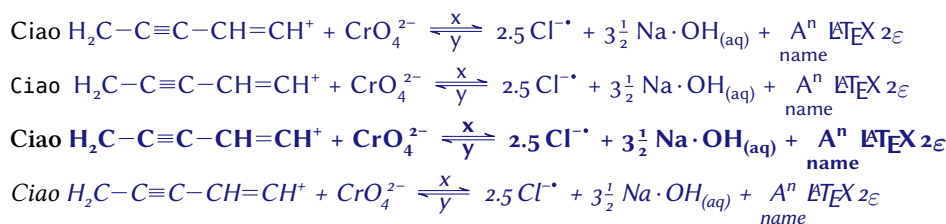
Quando si vuole cambiare questo comportamento preimpostato oppure il formato di default è possibile usare la seguente opzione:

format = <anything> → Inserisce il codice desiderato all'inizio del comando **\ch**.

```

1 % blu e privo di grazie:
2 \definecolor{newblue}{rgb}{.1,.1,.5}\chemsetup[chemformula]{format=\color{
  newblue}\sffamily}
3 \sffamily Ciao \sample \\
4 \ttfamily Ciao \sample \normalfont \\
5 \bfseries Ciao \sample \normalfont \\
6 \itshape Ciao \sample

```



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

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

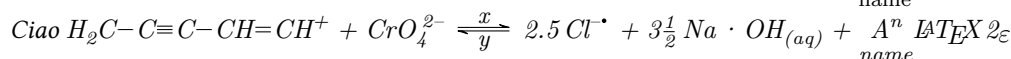
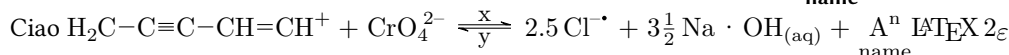
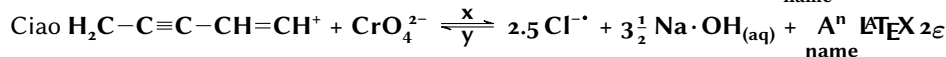
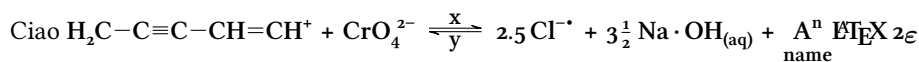
font-series = <series> → Varia la serie con: **\fontseries{<series>}\selectfont**.

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

```

1 % sempre in nero:
2 \chemsetup[chemformula]{font-series=bx}
3 Ciao \sample \
4 \sffamily Ciao \sample \normalfont \
5 \chemsetup[chemformula]{font-family=lmr,font-series=m} Ciao \sample \normalfont
6 \itshape Ciao \sample

```



Quando si impiegano $\text{X}_{\text{Y}}\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ 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:

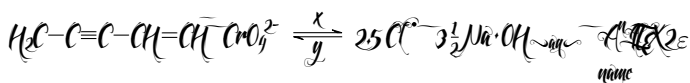
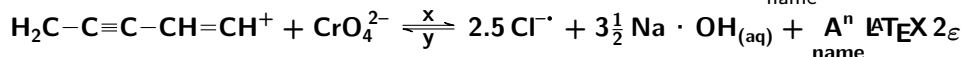
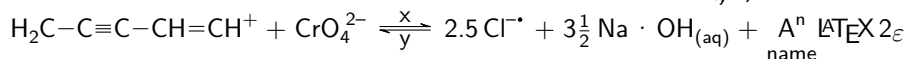
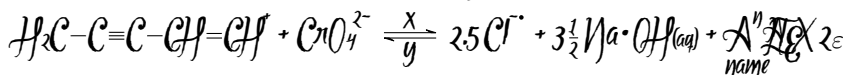
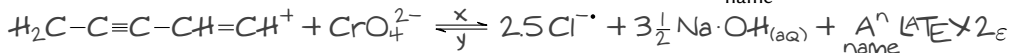
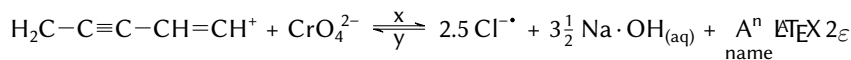
`font-spec` = {} oppure con opzioni

`font-spec` = {[<options>]}

```

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`.

³⁶ CTAN: `fontspec`

```

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*}

```

$$H_2O \xrightarrow{a} H_2SO_4 \quad (1)$$

$$Cl_2 \xrightarrow[x]{y} CH_4 \quad (2)$$

$$RNO_2 \rightleftharpoons[+ e^-] RNO_2^{\cdot-}$$

$$RNO_2^{\cdot-} \rightleftharpoons[+ e^-] RNO_2^{2-}$$

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}

```

$$n \underset{\substack{\text{gas} \\ \text{di} \\ \text{sintesi}}}{CO} + (2n + 1) H_2 \xrightarrow[\text{[CoNi]}]{200\text{ }^\circ\text{C}} C_n H_{2n+2} + n H_2O \quad \{12\}$$

```

1 \begin{reactions*}
2 "a)" && CH4 + Cl2 &-> CH3Cl + HCl && "{\small clorometano/cloruro-di-metile}" \\
3 "b)" && CH3Cl + Cl2 &-> CH2Cl2 + HCl && "{\small diclorometano/cloruro-di-metilene}" \\
4 "c)" && CH2Cl2 + Cl2 &-> CHCl3 + HCl && "{\small triclorometano/cloroformio}" \\
5 "d)" && CHCl3 + Cl2 &-> CCl4 + HCl && "{\small tetraclorometano/tetracloruro-di-carbonio}" \\
6 \end{reactions*}

```

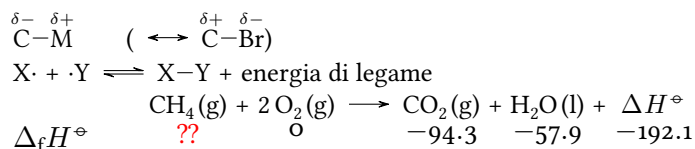
- | | | |
|----|--|---|
| a) | $CH_4 + Cl_2 \longrightarrow CH_3Cl + HCl$ | clorometano/cloruro di metile |
| b) | $CH_3Cl + Cl_2 \longrightarrow CH_2Cl_2 + HCl$ | diclorometano/cloruro di metilene |
| c) | $CH_2Cl_2 + Cl_2 \longrightarrow CHCl_3 + HCl$ | triclorometano/cloroformio |
| d) | $CHCl_3 + Cl_2 \longrightarrow CCl_4 + HCl$ | tetraclorometano/tetracloruro di carbonio |

32. Ulteriori esempi

```

1 \chemsetup[ox]{parse=false}\ch{"\ox{\delm,C}" -{\} "\ox{\delp,M}" \quad ( <-> "\
ox{\delp,C}" -{\} "\ox{\delm,Br}" )} \\\
2 \ch[adduct-space=0pt]{X. + .Y <=> X-Y + energia-di-legame} \\\
3 \ch[name-format=\normalsize]{!(\State{H}{f}\quad)}!(\textcolor{red}{???})( CH
4 gas{g}) + !(\num{0})( 2 02 gas{g}) -> !(\num{-94.3})( C02 gas{g}) + !(\num
{-57.9})( H2O\lq{d}) + !(\num{-192.1})( "\State{H}")}

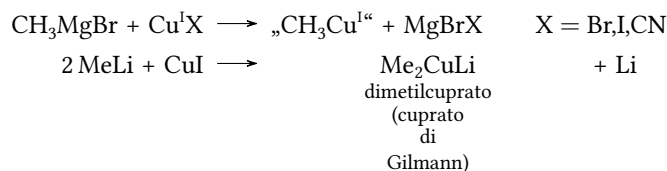
```



```

1 \begin{reactions*}
2 CH3MgBr + "\ox*{1,Cu}" X &-> "\glqq" CH3 "\ox*{1,Cu}\grqq" + MgBrX "\quad X
   ~$=-Br,I,CN" \\\
3 2 MeLi + CuI &-> !(dimetilcuprato~(cuprato-di-Gilmann))( Me2CuLi )
   + Li
4 \end{reactions*}

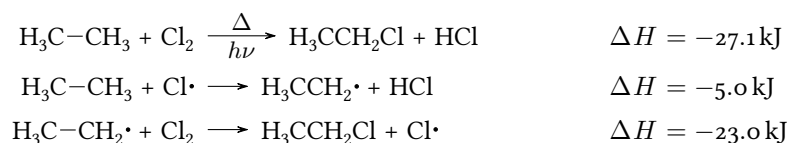
```



```

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*}

```



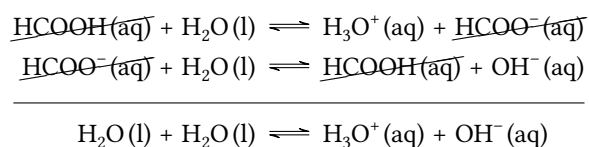
L'esempio seguente mostra come si può rappresentare la semplificazione di sistemi di reazioni.³⁷

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


```

1 % needs 'cancel'
2 \begin{align*}
3 \centering
4 \ch{\cancel{HCOOH}\aq} + H2O\lqd{} &\rightleftharpoons H3O^+\aq{} + \cancel{HCOO^-\aq{}} \\\
5 \ch{\cancel{HCOO^-\aq{}} + H2O\lqd{}} &\rightleftharpoons \cancel{HCOOH\aq} + OH^-\aq{}\\[-1ex]
6 \cline{1-2}
7 \ch{H2O\lqd{}} + H2O\lqd{} &\rightleftharpoons H3O^+\aq{} + OH^-\aq{}
8 \end{align*}

```



Parte IV.

ghsystem

33. Setup

Tutte le opzioni di **GHSYSTEM** appartengono al modulo **ghsystem**. Possono essere impostate anche con

`\chemsetup[ghsystem]{<options>}` oppure

`\chemsetup{ghsystem/<option1>,ghsystem/<option2>}`

Inoltre possono essere passate anche localmente ai comandi come argomenti opzionali.

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

34.1. Chiamata semplice

È generalmente semplice richiamare le frasi:

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

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

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

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

1	<code>\ghs{h}{200} \\\</code>	H200: Esplosivo instabile.
2	<code>\ghs{H}{224} \\\</code>	H224: Liquido e vapori altamente infiammabili.
3	<code>\ghs{euh}{001} \\\</code>	EUH001: Esplosivo allo stato secco.
4	<code>\ghs{Euh}{202} \\\</code>	EUH202: Cianoacrilato. Pericolo. Incolla la pelle e gli occhi in pochi secondi. Tenere fuori dalla portata dei bambini.
5	<code>\ghs{p}{201}</code>	P201: Procurarsi istruzioni specifiche prima dell'uso.

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: Esplosivo instabile.
2	<code>\ghs[space=\,]{h}{200} \\\</code>	H 200: Esplosivo instabile.
3	<code>\ghs*{h}{200} \\\</code>	Esplosivo instabile.
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`

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

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

H340: Può provocare alterazioni genetiche.
H340: Può provocare alterazioni genetiche <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo>.
H360: Può nuocere alla fertilità o al feto.
H360: Può nuocere alla fertilità o al feto <indicare l'effetto specifico, se noto> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo>.
H370: Provoca danni agli organi.
H370: Provoca danni agli organi <o indicare tutti gli organi interessati, se noti> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo>.
EUH208: Contiene <denominazione della sostanza sensibilizzante>. Può provocare una reazione allergica.
EUH208: Contiene <denominazione della sostanza sensibilizzante>. Può provocare una reazione allergica.

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: Può provocare alterazioni genetiche In questo modo si è esposti al pericolo..
H360: Può nuocere alla fertilità o al feto Questi sono gli effetti..
H370: Provoca danni quest'organo.
EUH208: Contiene sostanza. Può provocare una reazione allergica.

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: IN CASO DI INGESTIONE:

P401: Conservare

P411: Conservare a temperature non superiori a °C.

P413: Conservare le rinfuse di peso superiore a kg a temperature non superiori a °C.

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: IN CASO DI INGESTIONE:

P401: Conservare

P411: Conservare a temperature non superiori a 50 °C.

P413: Conservare le rinfuse di peso superiore a 5.0 kg a temperature non superiori a 50 °C.

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: Tenere in luogo fresco. Proteggere dai raggi solari.

P301 + P330 + P331: IN CASO DI INGESTIONE: sciacquare la bocca. NON provocare il vomito.

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	
flame-2-black		flame-3-white	
flame-3-black		flame-4-1	

nome	pittogramma	nome	pittogramma
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 `babel`³⁸ o `polyglossia`.³⁹

È possibile scegliere la lingua anche in modo esplicito.

```
language = english|german|italian
```

1	<code>\ghs{h}{201}</code>	H201: Esplosivo; pericolo di esplosione di massa.
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
```

```
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>}.
```

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

`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: Elenco di tutte le frasi H, EUH e P.

Numero	Frase
H200	Esplosivo instabile.
H201	Esplosivo; pericolo di esplosione di massa.
H202	Esplosivo; grave pericolo di proiezione.
H203	Esplosivo; pericolo di incendio, di spostamento d’aria o di proiezione.
H204	Pericolo di incendio o di proiezione.
H205	Pericolo di esplosione di massa in caso d’incendio.
H220	Gas altamente infiammabile.
H221	Gas infiammabile.
H222	Aerosol altamente infiammabile.
H223	Aerosol infiammabile.
H224	Liquido e vapori altamente infiammabili.
H225	Liquido e vapori facilmente infiammabili.
H226	Liquido e vapori infiammabili.
H228	Solido infiammabile.

Continua nella prossima pagina

⁴¹ CTAN: `booktabs`

37. Lista delle frasi

Numero	Frase
H240	Rischio di esplosione per riscaldamento.
H241	Rischio d'incendio o di esplosione per riscaldamento.
H242	Rischio d'incendio per riscaldamento.
H250	Spontaneamente infiammabile all'aria.
H251	Autoriscaldante; può infiammarsi.
H252	Autoriscaldante in grandi quantità; può infiammarsi.
H260	A contatto con l'acqua libera gas infiammabili che possono infiammarsi spontaneamente.
H261	A contatto con l'acqua libera gas infiammabili.
H270	Può provocare o aggravare un incendio; comburente.
H271	Può provocare un incendio o un'esplosione; molto comburente.
H272	Può aggravare un incendio; comburente.
H280	Contiene gas sotto pressione; può esplodere se riscaldato.
H281	Contiene gas refrigerato; può provocare ustioni o lesioni criogeniche.
H290	Può essere corrosivo per i metalli.
H300	Letale se ingerito.
H301	Tossico se ingerito.
H302	Nocivo se ingerito.
H304	Può essere letale in caso di ingestione e di penetrazione nelle vie respiratorie.
H310	Letale per contatto con la pelle.
H311	Tossico per contatto con la pelle.
H312	Nocivo per contatto con la pelle.
H314	Provoca gravi ustioni cutanee e gravi lesioni oculari.
H315	Provoca irritazione cutanea.
H317	Può provocare una reazione allergica cutanea.
H318	Provoca gravi lesioni oculari.
H319	Provoca grave irritazione oculare.
H330	Letale se inalato.
H331	Tossico se inalato.
H332	Nocivo se inalato.
H334	Può provocare sintomi allergici o asmatici o difficoltà respiratorie se inalato.
H335	Può irritare le vie respiratorie.
H336	Può provocare sonnolenza o vertigini.

Continua nella prossima pagina

37. Lista delle frasi

Numero	Frase
H340	Può provocare alterazioni genetiche <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H341	Sospettato di provocare alterazioni genetiche <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H350	Può provocare il cancro <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H351	Sospettato di provocare il cancro <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H360	Può nuocere alla fertilità o al feto <i><indicare l'effetto specifico, se noto> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H361	Sospettato di nuocere alla fertilità o al feto <i><indicare l'effetto specifico, se noto> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H362	Può essere nocivo per i lattanti allattati al seno.
H370	Provoca danni agli organi <i><o indicare tutti gli organi interessati, se noti> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H371	Può provocare danni agli organi <i><o indicare tutti gli organi interessati, se noti> <indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H372	Provoca danni agli organi <i><o indicare tutti gli organi interessati, se noti></i> in caso di esposizione prolungata o ripetuta <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H373	Può provocare danni agli organi <i><o indicare tutti gli organi interessati, se noti></i> in caso di esposizione prolungata o ripetuta <i><indicare la via di esposizione se è accertato che nessun'altra via di esposizione comporta il medesimo pericolo></i> .
H400	Molto tossico per gli organismi acquatici.
H410	Molto tossico per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata.
H411	Tossico per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata.
H412	Nocivo per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata.

Continua nella prossima pagina

Numero	Frase
H413	Può essere nocivo per gli organismi acquatici con effetti di lunga durata.
H350i	Può causare il cancro se inalato.
H360F	Può nuocere alla fertilità.
H360D	Può nuocere al feto.
H361f	Sospettato di nuocere alla fertilità.
H361d	Sospettato di nuocere al feto.
H360FD	Può nuocere alla fertilità. Può nuocere al feto.
H361fd	Sospettato di nuocere alla fertilità. Sospettato di nuocere al feto.
H360Fd	Può nuocere alla fertilità. Sospettato di nuocere al feto.
H360Df	Può nuocere al feto. Sospettato di nuocere alla fertilità.
EUH001	Esplosivo allo stato secco.
EUH006	Esplosivo a contatto o senza contatto con l'aria.
EUH014	Reagisce violentemente con l'acqua.
EUH018	Durante l'uso può formarsi una miscela vapore-aria esplosiva/inflammabile.
EUH019	Può formare perossidi esplosivi.
EUH044	Rischio di esplosione per riscaldamento in ambiente confinato.
EUH029	A contatto con l'acqua libera un gas tossico.
EUH031	A contatto con acidi libera gas tossici.
EUH032	A contatto con acidi libera gas molto tossici.
EUH066	L'esposizione ripetuta può provocare secchezza o screpolature della pelle.
EUH070	Tossico per contatto oculare.
EUH071	Corrosivo per le vie respiratorie.
EUH059	Pericoloso per lo strato di ozono.
EUH201	Contiene piombo. Non utilizzare su oggetti che possono essere masticati o succhiati dai bambini.
EUH201A	Attenzione! Contiene piombo.
EUH202	Cianoacrilato. Pericolo. Incolla la pelle e gli occhi in pochi secondi. Tenere fuori dalla portata dei bambini.
EUH203	Contiene cromo(VI). Può provocare una reazione allergica.
EUH204	Contiene isocianati. Può provocare una reazione allergica.
EUH205	Contiene componenti epossidici. Può provocare una reazione allergica.
EUH206	Attenzione! Non utilizzare in combinazione con altri prodotti. Possono liberarsi gas pericolosi (cloro).

Continua nella prossima pagina

Numero	Frase
EUH207	Attenzione! Contiene cadmio. Durante l'uso si sviluppano fumi pericolosi. Leggere le informazioni fornite dal fabbricante. Rispettare le disposizioni di sicurezza.
EUH208	Contiene <denominazione della sostanza sensibilizzante>. Può provocare una reazione allergica.
EUH209	Può diventare facilmente infiammabile durante l'uso.
EUH209A	Può diventare infiammabile durante l'uso.
EUH210	Scheda dati di sicurezza disponibile su richiesta.
EUH401	Per evitare rischi per la salute umana e per l'ambiente, seguire le istruzioni per l'uso.
P101	In caso di consultazione di un medico, tenere a disposizione il contenitore o l'etichetta del prodotto.
P102	Tenere fuori dalla portata dei bambini.
P103	Leggere l'etichetta prima dell'uso.
P201	Procurarsi istruzioni specifiche prima dell'uso.
P202	Non manipolare prima di avere letto e compreso tutte le avvertenze.
P210	Tenere lontano da fonti di calore/scintille/fiamme libere/superfici riscaldate. —Non fumare.
P211	Non vaporizzare su una fiamma libera o altra fonte di accensione.
P220	Tenere/conservare lontano da indumenti/.../materiali combustibili.
P221	Prendere ogni precauzione per evitare di miscelare con sostanze combustibili
P222	Evitare il contatto con l'aria.
P223	Evitare qualsiasi contatto con l'acqua: pericolo di reazione violenta e di infiammazione spontanea.
P230	Mantenere umido con
P231	Manipolare in atmosfera di gas inerte.
P232	Proteggere dall'umidità.
P233	Tenere il recipiente ben chiuso.
P234	Conservare soltanto nel contenitore originale.
P235	Conservare in luogo fresco.
P240	Mettere a terra/massa il contenitore e il dispositivo ricevente.
P241	Utilizzare impianti elettrici/di ventilazione/d'illuminazione/.../a prova di esplosione.
P242	Utilizzare solo utensili antiscintillamento.
P243	Prendere precauzioni contro le scariche elettrostatiche.

Continua nella prossima pagina

37. Lista delle frasi

Numero	Frase
P244	Mantenere le valvole di riduzione libere da grasso e olio.
P250	Evitare le abrasioni/gli urti/.../gli attriti.
P251	Recipiente sotto pressione: non perforare né bruciare, neppure dopo l'uso.
P260	Non respirare la polvere/i fumi/i gas/la nebbia/i vapori/gli aerosol.
P261	Evitare di respirare la polvere/i fumi/i gas/la nebbia/i vapori/gli aerosol.
P262	Evitare il contatto con gli occhi, la pelle o gli indumenti.
P263	Evitare il contatto durante la gravidanza/l'allattamento.
P264	Lavare accuratamente ... dopo l'uso.
P270	Non mangiare, né bere, né fumare durante l'uso.
P271	Utilizzare soltanto all'aperto o in luogo ben ventilato.
P272	Gli indumenti da lavoro contaminati non devono essere portati fuori dal luogo di lavoro.
P273	Non disperdere nell'ambiente.
P280	Indossare guanti/indumenti protettivi/Proteggere gli occhi/il viso.
P281	Utilizzare il dispositivo di protezione individuale richiesto.
P282	Utilizzare guanti termici/schermo facciale/Proteggere gli occhi.
P283	Indossare indumenti completamente ignifughi o in tessuti ritardanti di fiamma.
P284	Utilizzare un apparecchio respiratorio.
P285	In caso di ventilazione insufficiente utilizzare un apparecchio respiratorio.
P231 + P232	Manipolare in atmosfera di gas inerte. Tenere al riparo dall'umidità.
P235 + P410	Tenere in luogo fresco. Proteggere dai raggi solari.
P301	IN CASO DI INGESTIONE:
P302	IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE:
P303	IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE (o con i capelli):
P304	IN CASO DI INALAZIONE:
P305	IN CASO DI CONTATTO CON GLI OCCHI:
P306	IN CASO DI CONTATTO CON GLI INDUMENTI:
P307	IN CASO di esposizione:
P308	IN CASO di esposizione o di possibile esposizione:
P309	IN CASO di esposizione o di malessere:
P310	Contattare immediatamente un CENTRO ANTIVELENI o un medico.

Continua nella prossima pagina

37. Lista delle frasi

Numero	Frase
P311	Contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico.
P312	In caso di malessere, contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico.
P313	Consultare un medico.
P314	In caso di malessere, consultare un medico.
P315	Consultare immediatamente un medico.
P320	Trattamento specifico urgente (vedere ... su questa etichetta).
P321	Trattamento specifico (vedere ... su questa etichetta).
P322	Misure specifiche (vedere ... su questa etichetta).
P330	Sciacquare la bocca.
P331	NON provocare il vomito.
P332	In caso di irritazione della pelle:
P333	In caso di irritazione o eruzione della pelle:
P334	Immergere in acqua fredda/avvolgere con un bendaggio umido.
P335	Rimuovere le particelle depositate sulla pelle.
P336	Sgelare le parti congelate usando acqua tiepida. Non sfregare la parte interessata.
P337	Se l'irritazione degli occhi persiste:
P338	Togliere le eventuali lenti a contatto se è agevole farlo. Continuare a sciacquare.
P340	Trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione.
P341	Se la respirazione è difficile, trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione.
P342	In caso di sintomi respiratori:
P350	Lavare delicatamente e abbondantemente con acqua e sapone.
P351	Sciacquare accuratamente per parecchi minuti.
P352	Lavare abbondantemente con acqua e sapone.
P353	Sciacquare la pelle/fare una doccia.
P360	Sciacquare immediatamente e abbondantemente gli indumenti contaminati e la pelle prima di togliersi gli indumenti.
P361	Togliersi di dosso immediatamente tutti gli indumenti contaminati.
P362	Togliersi di dosso gli indumenti contaminati e lavarli prima di indossarli nuovamente.
P363	Lavare gli indumenti contaminati prima di indossarli nuovamente.

Continua nella prossima pagina

37. Lista delle frasi

Numero	Frase
P370	In caso di incendio:
P371	In caso di incendio grave e di quantità rilevanti:
P372	Rischio di esplosione in caso di incendio.
P373	NON utilizzare mezzi estinguenti se l'incendio raggiunge materiali esplosivi.
P374	Utilizzare i mezzi estinguenti con le precauzioni abituali a distanza ragionevole.
P375	Rischio di esplosione. Utilizzare i mezzi estinguenti a grande distanza.
P376	Bloccare la perdita se non c'è pericolo.
P377	In caso d'incendio dovuto a perdita di gas, non estinguere a meno che non sia possibile bloccare la perdita senza pericolo.
P378	Estinguere con
P380	Evacuare la zona.
P381	Eliminare ogni fonte di accensione se non c'è pericolo.
P390	Assorbire la fuoriuscita per evitare danni materiali.
P391	Raccogliere il materiale fuoriuscito.
P301 + P310	IN CASO DI INGESTIONE: contattare immediatamente un CENTRO ANTIVELENI o un medico.
P301 + P312	IN CASO DI INGESTIONE accompagnata da malessere: contattare un CENTROANTIVELENI o un medico.
P301 + P330 + P331	IN CASO DI INGESTIONE: sciacquare la bocca. NON provocare il vomito.
P302 + P334	IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: immergere in acqua fredda/avvolgere con un bendaggio umido.
P302 + P350	IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: lavare delicatamente e abbondantemente con acqua e sapone.
P302 + P352	IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE: lavare abbondantemente con acqua e sapone.
P303 + P361 + P353	IN CASO DI CONTATTO CON LA PELLE (o con i capelli): togliersi di dosso immediatamente tutti gli indumenti contaminati. Sciacquare la pelle/fare una doccia.
P304 + P340	IN CASO DI INALAZIONE: trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione.
P304 + P341	IN CASO DI INALAZIONE: se la respirazione è difficile, trasportare l'infortunato all'aria aperta e mantenerlo a riposo in posizione che favorisca la respirazione.

Continua nella prossima pagina

37. Lista delle frasi

Numero	Frase
P305 + P351 + P338	IN CASO DI CONTATTO CON GLI OCCHI: sciacquare accuratamente per parecchi minuti. Togliere le eventuali lenti a contatto se è agevole farlo. Continuare a sciacquare.
P306 + P360	IN CASO DI CONTATTO CON GLI INDUMENTI: sciacquare immediatamente e abbondantemente gli indumenti contaminati e la pelle prima di togliersi gli indumenti.
P307 + P311	IN CASO di esposizione, contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico.
P308 + P313	IN CASO di esposizione o di possibile esposizione, consultare un medico.
P309 + P311	IN CASO di esposizione o di malessere, contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico.
P332 + P313	In caso di irritazione della pelle: consultare un medico.
P333 + P313	In caso di irritazione o eruzione della pelle: consultare un medico.
P335 + P334	Rimuovere le particelle depositate sulla pelle. Immergere in acqua fredda/avvolgere con un bendaggio umido.
P337 + P313	Se l'irritazione degli occhi persiste, consultare un medico.
P342 + P311	In caso di sintomi respiratori: contattare un CENTRO ANTIVELENI o un medico.
P370 + P376	In caso di incendio: bloccare la perdita se non c'è pericolo.
P370 + P378	In caso di incendio: estinguere con
P370 + P380	Evacuare la zona in caso di incendio.
P370 + P380 + P375	In caso di incendio: evacuare la zona. Rischio di esplosione. Utilizzare i mezzi estinguenti a grande distanza.
P371 + P380 + P375	In caso di incendio grave e di grandi quantità: evacuare la zona. Rischio di esplosione. Utilizzare i mezzi estinguenti a grande distanza.
P401	Conservare
P402	Conservare in luogo asciutto.
P403	Conservare in luogo ben ventilato.
P404	Conservare in un recipiente chiuso.
P405	Conservare sotto chiave.
P406	Conservare in recipiente resistente alla corrosione/... provvisto di rivestimento interno resistente.
P407	Mantenere uno spazio libero tra gli scaffali/i pallet.
P410	Proteggere dai raggi solari.
P411	Conservare a temperature non superiori a °C.
P412	Non esporre a temperature superiori a 50 °C.

Continua nella prossima pagina

Numero	Frase
P413	Conservare le rinfuse di peso superiore a kg a temperature non superiori a °C.
P420	Conservare lontano da altri materiali.
P422	Conservare sotto
P402 + P404	Conservare in luogo asciutto e in recipiente chiuso.
P403 + P233	Tenere il recipiente ben chiuso e in luogo ben ventilato.
P403 + P235	Conservare in luogo fresco e ben ventilato.
P410 + P403	Proteggere dai raggi solari. Conservare in luogo ben ventilato.
P410 + P412	Proteggere dai raggi solari. Non esporre a temperature superiori a 50 °C.
P411 + P235	Conservare in luogo fresco a temperature non superiori a °C.
P501	Smaltire il prodotto/recipiente in

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:				
bpchem	option	<u>true</u> false	false	pagina 6
circled	option	<u>formal</u> all none	formal	pagina 6
circletype	option	chem math	chem	pagina 6
cmversion	option	1 2 bundle	bundle	pagina 6
ghssystem	option	<u>true</u> false	true	pagina 6
iupac	option	auto restricted strict	auto	pagina 6
language	option	<language>	english	pagina 6
method	option	chemformula mhchem	chemformula	pagina 6

Panoramica delle opzioni e modalità di adattamento

opzione	modulo	valori	default	
Nu	option	chemmacros mathspec	chemmacros	pagina 6
strict	option	<u>true</u> false	false	pagina 6
synchronize	option	<u>true</u> false	false	pagina 6
greek	option	math textgreek <u>upgreek</u>	upgreek	pagina 6
xspace	option	<u>true</u> false	true	pagina 7
\ba, \Nu:				
elpair	particle	<u>dots</u> dash false	false	pagina 11
comandi IUPAC:				
break-space	iupac	<dim>	.01em	pagina 13
bridge-number	iupac	sub super	sub	pagina 16
cip-kern	iupac	<dim>	.075em	pagina 15
coord-use-hyphen	iupac	<u>true</u> false	true	pagina 16
hyphen-pre-space	iupac	<dim>	.01em	pagina 13
hyphen-post-space	iupac	<dim>	-.03em	pagina 13
\DeclareChemLatin:				
format	latin	<anything>	\itshape	pagina 17
\pch, \mch, \fpch, \fmch:				
append	charges	<u>true</u> false	false	pagina 20
acido/base:				
p-style	acid-base	slanted italics upright	upright	pagina 19
\ox:				
align	ox	center right	center	pagina 21
parse	ox	<u>true</u> false	true	pagina 20
roman	ox	<u>true</u> false	true	pagina 20
pos	ox	top super side	top	pagina 20
explicit-sign	ox	<u>true</u> false	false	pagina 20
decimal-marker	ox	comma point	point	pagina 21
align	ox	center right	center	pagina 21
\OX, \redox:				
dist	redox	<dim>	.6em	pagina 24
sep	redox	<dim>	.2em	pagina 24
\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:				
exponent		<anything>	\standardstate	pagina 26
delta		<anything> false		pagina 26
subscript		left right		pagina 26
unit		<unit>		pagina 26
\DeclareChemState, \RenewChemState:				
exponent		<anything>	\standardstate	pagina 26
delta		<anything> false		pagina 26
subscript		<anything>		pagina 26
subscript-left		<u>true</u> false		pagina 27
\State:				
exponent	state	<anything>	\standardstate	pagina 28
delta	state	<anything> false		pagina 28
subscript-left	state	<u>true</u> false		pagina 28
\NMR, \begin{spectroscopy} \end{spectroscopy}:				
unit	nmr	<unit>	\mega\hertz	pagina 30
nucleus	nmr	{<num>, <atom symbol>}	{1,H}	pagina 30
format	nmr	<anything>		pagina 30
pos-number	nmr	side sub	side	pagina 30

opzione	modulo	valori	default	
<code>coupling-unit</code>	<code>nmr</code>	<code><unit></code>	<code>\hertz</code>	pagina 30
<code>parse</code>	<code>nmr</code>	<code>true false</code>	<code>true</code>	pagina 30
<code>delta</code>	<code>nmr</code>	<code><anything></code>		pagina 30
<code>list</code>	<code>nmr</code>	<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 30
<code>list-setup</code>	<code>nmr</code>		(vedi il testo)	pagina 30
<code>use-equal</code>	<code>nmr</code>	<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 30
<code>\DeclareChemReaction:</code>				
<code>star</code>		<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 36
<code>arg</code>		<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 36
<code>list-name</code>	<code>reaction</code>	<code><anything></code>	Elenco delle reazioni	pagina 37
<code>list-entry</code>	<code>reaction</code>	<code><anything></code>	Reazione	pagina 38
<code>\mhName:</code>				
<code>align</code>	<code>mhName</code>	<code><alignment></code>	<code>\centering</code>	pagina 34
<code>format</code>	<code>mhName</code>	<code><commands></code>		pagina 34
<code>fontsize</code>	<code>mhName</code>	<code><fontsize></code>	<code>\tiny</code>	pagina 34
<code>width</code>	<code>mhName</code>	<code><dim></code>	<code>auto</code>	pagina 34
fasi:				
<code>pos</code>	<code>phases</code>	<code>side sub</code>	<code>side</code>	pagina 39
<code>space</code>	<code>phases</code>	<code><dim></code>	<code>.1333em</code>	pagina 39
<code>\newman:</code>				
<code>angle</code>	<code>newman</code>	<code><angle></code>	<code>0</code>	pagina 40
<code>scale</code>	<code>newman</code>	<code><factor></code>	<code>1</code>	pagina 40
<code>ring</code>	<code>newman</code>	<code><tikz></code>		pagina 40
<code>atoms</code>	<code>newman</code>	<code><tikz></code>		pagina 40
<code>back-atoms</code>	<code>newman</code>	<code><tikz></code>		pagina 40
<code>\orbital <type> = s p sp sp2 sp3:</code>				
<code>phase</code>	<code>orbital/<type></code>	<code>+ -</code>	<code>+</code>	pagina 41
<code>scale</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><factor></code>	<code>1</code>	pagina 42
<code>color</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><color></code>	<code>black</code>	pagina 42
<code>angle</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><angle></code>	<code>90</code>	pagina 42
<code>half</code>	<code>orbital/p</code>	<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 42
<code>overlay</code>	<code>orbital</code>	<code>true false</code>	<code>false</code>	pagina 42
<code>opacity</code>	<code>orbital</code>	<code><num></code>	<code>1</code>	pagina 42

Comandi di personalizzazione

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

`\DeclareChemArrow` → Definisce una nuova freccia; vedi a pagina 58.

`\RenewChemArrow` → Modifica una freccia già esistente.

`\DeclareChemBond` → Definisce un nuovo legame; vedi a pagina 50.

`\RenewChemBond` → Ridefinisce un legame.

`\DeclareChemBondAlias` → Definisce un alias per un legame esistente.

`\DeclareChemIUPAC` → Definisce un nuovo comando IUPAC; vedi a pagina 16.

- `\RenewChemIUPAC` → Ridefinisce un comando IUPAC.
- `\DeclareChemLatin` → Definisce un nuovo termine latino; vedi a pagina 17.
- `\RenewChemLatin` → Ridefinisce un termine latino.
- `\DeclareChemNMR` → Definisce un nuovo comando NMR; vedi a pagina 29.
- `\RenewChemNMR` → Ridefinisce un comando NMR.
- `\DeclareChemParticle` → Definisce una nuova particella; vedi a pagina 12.
- `\RenewChemParticle` → Ridefinisce una particella.
- `\DeclareChemPhase` → Definisce un nuovo comando di fase; vedi a pagina 39.
- `\RenewChemPhase` → Ridefinisce un comando di fase.
- `\DeclareChemReaction` → Definisce un nuovo ambiente di reazione; vedi a pagina 36.
- `\DeclareChemState` → Definisce una nuova grandezza di stato; vedi a pagina 26.
- `\RenewChemState` → Ridefinisce una grandezza di stato.

Suggerimenti e avvisi di bug

Ogni feedback riguardante `CHEMMACROS`, `CHEMFORMULA` e `GHSYSTEM` è il benvenuto! Se avete proposte, se mancano delle funzionalità oppure vengono notati dei bug, non esitate a contattarmi. Se trovate degli errori, siano essi di natura chimica, di documentazione sbagliata ecc. sarei grato di una breve e-mail.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
- Jonas Rivetti (traduzione delle frasi H e P in italiano; molte grazie anche per la traduzione del manuale!)
- Christoph Schäfer
- Timo Stein

⁴² contact@mychemistry.eu

Bibliografia

- [Coh+08] E. Richard Cohan, Tomislav Cvitaš, Jeremy G. Frey, Bertil Holmström, Kozo Kuchitsu, Roberto Marquardt, Ian Mills, Franco Pavese, Martin Quack, Jürgen Stohner, Herbert L. Strauss, Michio Takami e Anders J Thor. *“Quantities, Symbols and Units in Physical Chemistry”*, *IUPAC Green Book*. 3rd Edition. 2nd Printing. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 2008.
- [Con+05] Neil G. Connelly, Ture Damhus, Richard M. Hartshorn e Alan T. Hutton. *“Nomenclature of Inorganic Chemistry”*, *IUPAC Red Book*. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 2005. ISBN: 0-85404-438-8.
- [Eur12] United Nations Economic Commission for Europe. *GHS Implementation*. 20 Mar. 2012. URL: http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation_e.html (visitato il 20/03/2012).
- [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 f.
\[..... 57
\] 57
\^ 12 f.

A

\a 14
\abinitio 17
acid-base
 p-style 19
Acidi/basi 18
Acido/base 19
\AddRxnDesc 38
adduct-space 51, 53
align 21, 34
Ambienti
 experimental ... 8, 29
 nmr 30
 reaction 8, 34
 reaction* 34
 reactions 34
 reactions* 34
 spectroscopy 82

Ambienti di reazione

34-38

Ambienti matematici

62 f.
angle 40, 42
\anti 15
append 20
APPENDICE 81
\aq 38
arg 36
arrow-offset 57
arrow-ratio 58

arrow-yshift 58
\atm 18
\atmosphere 18
atoms 40

B

\b 14
\ba 10 f., 82
babel 71
back-atoms 40
bm 3
\bond 9, 50
bond-length 51 f.
bond-offset 52
bond-style 9, 52
booktabs 72
bpchem 3, 6
bpchem 3, 6, 12
break-space 13
\bridge 9, 16
bridge-number 16

C

C-temperature 67
Cahn-Ingold-Prelog 15
\cal 18
\calory 18
Caricamento del bundle . 5
Caricamento del pacchetto 5
Cariche ioniche 19 f.
Cariche parziali 22
\centering 83
\ch . 44 f., 47, 49, 54-57, 59, 61 f.
charge-hshift 49, 51 f.
charge-style 51
charges
 append 20
\Chemalpha 6, 10 f.
\Chembeta 10 f.
\ChemDelta 11
\Chemdelta 10
\Chemepsilon 10

\Chemeta 11
chemfig 11, 22
CHEMFORMULA .. 44-65
\Chemgamma 10
\Chemkappa 11
CHEMMACROS 10-43
\Chemmu 11
\Chemnu 11
\Chemomega 11
\Chempi 11
\Chemrho 11
\chemsetup . 7, 31, 45, 65, 81
\Chemsigma 11
chemstyle 10, 17 f.
\cip 15
cip-kern 9, 15
circled 6, 12, 36
circletype 6
\cis 15
cis/trans 15
\cmc 18
cmversion 6
color 42

Comandi per mhchem

33 f.

compound-sep 58
Configurazione assoluta 16
cool 13, 15
coord-use-hyphen 16
coupling-unit 30

D

\D 13, 15
\d 14
\data 29 ff.
\data* 29
decimal-marker 21, 46
\DeclareChemArrow . 58, 83
\DeclareChemBond .. 50, 83
\DeclareChemBondAlias 51, 83
\DeclareChemIUPAC 16 f., 83

- `\DeclareChemLatin` . 17, 82, 84
`\DeclareChemNMR` 29, 31, 84
`\DeclareChemParticle` . 12, 84
`\DeclareChemPhase` . 39, 84
`\DeclareChemReaction` . 36, 83 f.
`\DeclareChemState` . 26 f., 82, 84
`\delm` 22
`\delp` 22
`delta` 26 ff., 30
Didascalie di formule . 59 f.
 Personalizzazione . 60
 sintassi 59
`dist` 24
`dots` 67
- E**
`\E` 13, 15
`effect` 67
`\El` 10
`\el` 10
`elpair` 11
`\Enthalpy` 26, 82
`\Entropy` 26, 82
`environ` 3
`experimental (amb.)` . 8, 29
`explicit-sign` 20 f.
`exponent` 26 ff.
`exposure` 67
- F**
`F-temperature` 68
Fasi 38
 Principi 38
 proprie 39
Fattori stechiometrici 45 ff.
 nicefrac 47
 space 47
 xfrac 46
`\fdelm` 22
`\fdelp` 22
`fill-in` 66
Fischer 15
- `\fmch` 19, 82
`\fminus` 10
`font-family` 61
`font-series` 61
`font-shape` 61
`font-spec` 62
`fontsize` 34
`fontspec` 62
`format` 17, 30, 34, 61
Formato e carattere . 60 ff.
Formle brute
 Pedici 48
Formule brute 47–53
 Addotti 47
 Apici 48
 Comandi di carica 49
 Comportamento . 49
 Cariche 48
 Spostamento 52
 Comandi 48
 Legami 50
 Lunghezza 53
 Pedici
 Spostamento 53
 Personalizzazione . . 51
`\fpch` 19, 82
`\fplus` 6, 10
`frac-style` 46 f.
Frase di rischio e sicurezza
 65–68
Frecce 56–59
 Adattamento 57
 Etichettazione 57
 Tipi 56
 tipi
 modificare 58
`\fscrm` 22
`\fscrp` 22
`\fsscrm` 22
`\fsscrp` 22
- G**
`\g` 14
`\gas` 38
`german` 8
`ghs` 6
`\ghs` 65
`\ghs*` 65
`\ghslistall` 71
`\ghspic` 68
GHSYSTEM 65–81
 Chiamata 65
 Frase combinate . . . 68
 Frase con buchi 67
 Segnaposto 66
`ghsystem` 6
`\Gibbs` 26, 82
`graphicx` 3
`greek` 6, 8, 11
- H**
`\H` 14
`half` 42
`\hapto` 9, 16
`\hertz` 82
`hide` 66
`\Hpl` 10
`\Ht0` 10
`\Hyd` 10
`hyphen-post-space` . . . 13
`hyphen-pre-space` 13
- I**
`ifpdf` 3
Impostazioni di lingua . 7 f.
`includegraphics` 69
Input protetto 56
 math 55
 text 55
Input protetto 55
`\insitu` 17
Installazione 5
`\intertext` 35
`\invacuo` 17
`italian` 38, 71
`iupac` 6, 13 f., 17
`iupac`
 break-space 13
 bridge-number 16
 cip-kern 15
 coord-use-hyphen . 16
 hyphen-post-space 13

hyphen-pre-space...13
\iupac 12 f., 15
J
\J 29
K
\k 14
\Ka 18
\Kb 18
kg-mass 68
\Kw 18
L
\L 13, 15
l₃kernel 3
l₃packages 3
label-offset 58
label-style 58
language 6, 8, 18, 71
latin
 format 17
\latin 17
lbs-mass 68
list 30
list-entry 38
list-name 37 f.
list-setup 30
Lista delle frasi 71–81
\listofreactions 37
longtable 3, 71
\lqd 8, 38
M
\m 14
math-space 55
mathspec 6, 10
mathtools 3, 35
\mch 19, 36, 49, 82
Meccanismi di reazione 23
\mech 23
\mega 82
\meta 13, 15
method 3, 6, 12, 33, 36
mhchem .. 3 f., 6, 12, 30, 33,
 36, 44, 56
mhName

align 34
fontsize 34
format 34
width 34
\mhName 33 f., 83
\Molar 18
\moLar 18
\molar 18
\MolMass 18
N
\N 14
\n 14
name-format 60
name-width 60
newman
 angle 40
 atoms 40
 back-atoms 40
 ring 40
 scale 40
\newman 40, 83
ngerman 8
nicefrac 3, 47
\NMR 6, 28–31, 82
nmr
 coupling-unit 30
 delta 30
 format 30
 list 30
 list-setup 30
 nucleus 30
 parse 30
 pos-number 30
 unit 30
 use-equal 30
nmr (amb.) 30
*\NMR** 28
Nomi IUPAC 12–17
 Cahn-Ingold-Prelog. 15
 caratteri greci 13
 cis/trans 15
 Eteroatomi 14
 Fischer 15
 orto/meta/para 15
 predefiniti 13

propri 16
sin/anti 15
tert 15
zusammen/entgegen 15
\normal 18
Novità 8 f.
\ntr 10
Nu 6, 10
\Nu 6, 10 f., 82
\Nuc 10
nucleus 30
Numeri di ossidazione 20 f.
O
\O 14
opacity 42
option
 bpchem 6
 circled 6
 circletype 6
 cmversion 6
 ghsystem 6
 greek 6, 11
 italian 38, 71
 iupac 6, 13, 17
 language 6
 method 6, 33
 Nu 6, 10
 strict 6
 synchronize 6
 xspace 7
Opzioni globali 5 ff.
orbital
 angle 42
 color 42
 half 42
 opacity 42
 overlay 42
 phase 41
 scale 42
\orbital 41, 83
Orbitali 41 ff.
organs 67
\ortho 15
orto/meta/para 15
overlay 42

\OX 23, 82
ox
 align 21
 decimal-marker 21
 explicit-sign ... 20 f.
 parse 20
 pos 20 f.
 roman 20
\ox 4, 20, 22, 82
\ox* 4, 21

P
\P 14
\p 18
p-style 19
Panoramica delle opzioni
 (chemmacros)
 81–84
\para 15
parse 20, 30
Particelle, ioni e simboli
 10 ff.
 predefiniti 10
 proprie 12
particle
 elpair 11
\pch 19, 82
\pH 18
phase 41
\phase 39
Phasen 40
phases
 pos 39
 space 39
pic-type 71
Pittogrammi 68–71
\pKa 8, 18
\pKb 18
plus-space 54
\pOH 18
polyglossia 71
pos 20 f., 39
\pos 30
pos-number 30
PRIMA DI COMINCIARE
 3–9

Proiezioni di Newman 40 f.
\prt 10

R
\R 13, 15
\Rad 11
radical-hshift 9, 52
radical-radius 52
radical-space 9, 52
radical-style 52
radical-vshift 9, 52
\Rconf 16
reaction
 list-entry 38
 list-name 37
 reaction (amb.) 8, 34
 reaction* (amb.) 34
\reactionlistname 38
 reactions (amb.) 34
 reactions* (amb.) 34
Reazioni redox 23 ff.
redox
 dist 24
 sep 24
\redox 23, 82
\RenewChemArrow ... 59, 83
\RenewChemBond ... 50, 83
\RenewChemIUPAC ... 17, 84
\RenewChemLatin ... 17, 84
\RenewChemNMR 29, 84
\RenewChemParticle 12, 39,
 84
\RenewChemPhase ... 39, 84
\RenewChemState 27, 82, 84
\renewtagform 35
ring 40
roman 20

S
\S 13, 15
scale 40, 42, 69
\Sconf 16
\scrm 22
\scrp 22
sep 24
Setup 7

\Sf 14
\ShowChemArrow 59
\ShowChemBond 51
\sin 8
siunitx 3, 18, 26, 28 ff.
\sld 8, 38
space 39, 66
spectroscopy (amb.) ... 82
Spettroscopia 28–33
\standardstate 10, 82
star 36
\State 27, 82
state
 delta 28
 exponent 28
 subscript-left ... 28
Stereodescrittori e
 nomenclatura
 13–16
stoich-paren-parse . 9, 46
stoich-space 46 f.
strict 6, 12, 17, 39
subscript 26 f.
subscript-left 27 f.
subscript-style 51
subscript-vshift ... 51, 53
substance 67
\syn 15
synchronize 6

T
table-caption 71
table-caption-short .. 71
table-foot-rule 72
table-head-number 71
table-head-rule 72
table-head-text 71
table-label 72
table-last-foot-rule . 72
table-next-page 71
table-row-sep 72
table-rules 72
table-top-head-rule . 72
tabu 3
\ter 8
Termini in latino 17

INDICE ANALITICO

Termodinamica	26 ff.	<code>\torr</code>	18	W	
<code>tert</code>	15	<code>\trans</code>	13, 15	<code>\w</code>	14
<code>\tert</code>	15	<code>\transitionstatesymbol</code>		<code>\water</code>	10
<code>text</code>	67	10		<code>width</code>	34
<code>textgreek</code>	6, 11, 13	U		X	
<code>TikZ</code> . . 16, 23 f., 40, 42, 51 f.,		<code>unit</code>	26, 30	<code>xfrac</code>	21, 46
56, 58		Unità di misura	18	<code>xspace</code>	3, 7
<code>tikz</code>	3	<code>upgreek</code>	8	<code>xspace</code>	3
<code>\tiny</code>	83	<code>upgreek</code>	6, 11, 13	Z	
Tipi di input speciali	55	<code>use-equal</code>	29 f.	<code>\Z</code>	15
Input di opzioni	54	V		<code>zusammen/entgegen</code>	15
Tipi speciali di input	53	<code>\val</code>	30		
Token a input singolo					
54					