

PPCH_{TEX}: Chemische Structuurformules in T_EX

J. Hagen & A.F. Otten

PRAGMA, Onderwijskundig Bureau voor Advies- en Ontwikkelwerk,
Postbus 125, 8000 AC Zwolle

Abstract

In dit artikel wordt een macropakket beschreven waarmee chemische (structuur)formules kunnen worden gezet. Dit pakket is te gebruiken bovenop Plain-T_EX, L^AT_EX en andere pakketten. Het pakket is in eerste instantie ontwikkeld bovenop CON_TE_XT

This article is about a package for typesetting chemical formulas. The package has a multi-lingual interface. This means that all all commands and keywords can be toggled to english. Some day, this article and the manual will be translated in english too.

1 Inleiding

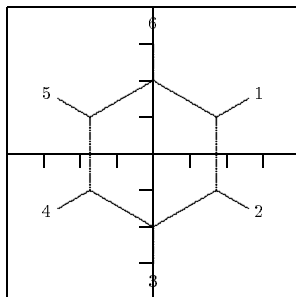
PPCH_{TEX} is een samenhangende serie macro's waarmee chemische formules kunnen worden gezet. De macro's vallen terug op P_CT_EX, een in een door M.J. Wichura in public domain gebracht macropakket, waarmee grafieken en andere lijnafbeeldingen kunnen worden getekend.

De macro's zijn te gebruiken binnen verschillende T_EX-omgevingen en vallen verder alleen terug op plain T_EX van D.E. Knuth. Wel wordt gebruik gemaakt van enkele algemene macro's uit de CON_TE_XT-bibliotheek. Daarnaast zijn de macro's zodanig opgezet dat uitbreiden (relatief) eenvoudig is. De interactie sluit aan op de binnen CON_TE_XT gebruikte interactie.

De macro's zijn in eerste instantie bedoeld om chemische structuurformules, zoals zesringen, te zetten. Bovendien kunnen reactiemechanismen worden weergegeven. De chemische structuren kunnen in verschillende formaten worden gezet, waarbij vergelijkbare formules optisch op elkaar aansluiten. Veel voorkomende structuren kunnen worden voorgedefinieerd en opgeroepen.

2 Structuren

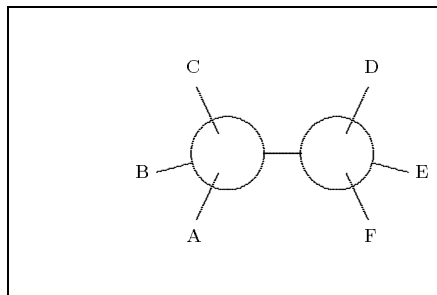
Het aantal commando's dat wordt gebruikt om chemische structuurformules te zetten is beperkt tot 4. In het volgende voorbeeld zijn al deze commando's gebruikt:



Voorbeeld 1

```
\stelchemiein[assenstelsel=aan,kader=aan]
\startchemie
  \chemie[SIX,B,R,RZ][1,2,3,4,5,6]
\stopchemie
```

Met `\stelchemiein` kunnen verschillende kenmerken van het zetwerk worden ingesteld. Als een en ander op deze manier wordt ingesteld, dan gelden de instellingen voor alle volgende formules.



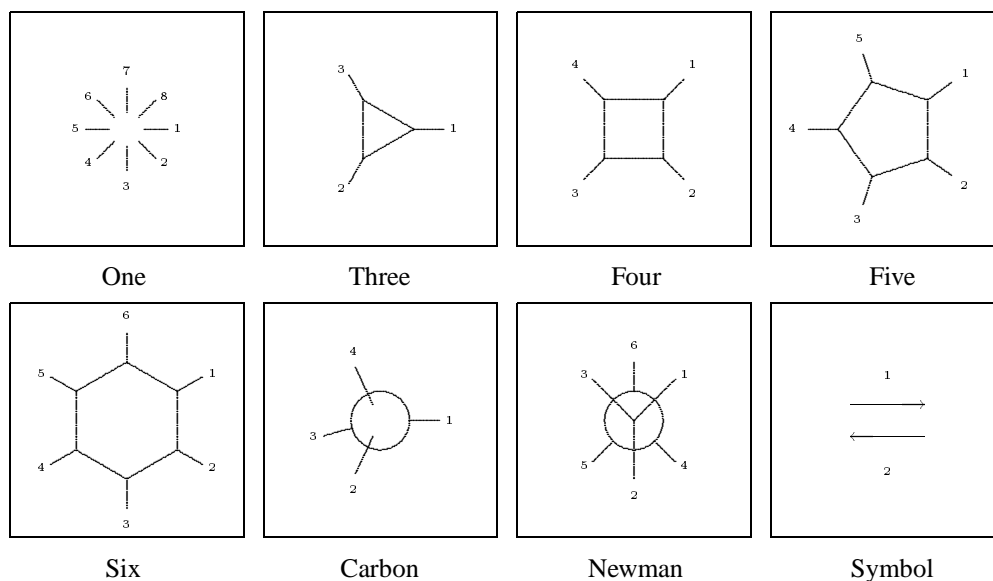
Voorbeeld 2

```
\startchemie[kader=aan,breedte=6000]
  \chemie[CARBON,CB1][A,B,C,D,E,F]
\stopchemie
```

Zoals uit beide voorbeelden blijkt, is `\chemie` het centrale commando. Dit commando, dat meerdere malen binnen een `\start`-`\stop`-paar kan worden opgegeven, krijgt een of twee argumenten mee. Deze worden tussen `[]` opgegeven. Het eerste argument heeft betrekking op de te tekenen bindingen, het tweede bevat de weer te geven atomen of moleculen. Tekst wordt in de wiskundige mode gezet, dat wil zeggen dat alles wat normaal gesproken tussen `$ $` is toegestaan, mag worden opgegeven.

We werken hier het eerste voorbeeld uit. Allereerst is het trefwoord `SIX` meegegeven. Hiermee geven we aan dat we een zesring tekenen. Analoog kennen we `ONE`, `THREE`, `FOUR` en `FIVE`, `NEWMAN` en `CARBON`.

⁰Hoe bij PRAGMA T_EX wordt gebruikt is beschreven in MAPS #12, pp. 100-102 (mei 1994).



Figuur 1: Een overzicht van de verschillende structuren.

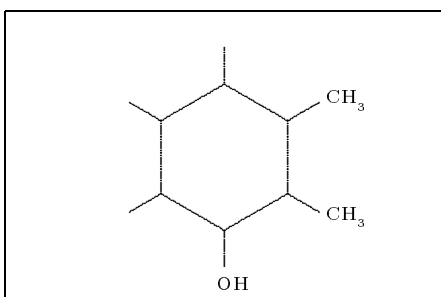
Binnen deze structuren worden de chemische bindingen tussen de C-atomen op een vergelijkbare wijze aangegeven. Zo gebruiken we in het voorbeeld B en R. Bindingen zijn genummerd en kunnen op verschillende manieren worden opgegeven:

```
\chemie[SIX,B1,B2,B3,B4,B5,B6]
\chemie[SIX,B135]
\chemie[SIX,B1..5]
```

Deze commando's tekenen delen van een zesring. Met R hebben we de mogelijkheid om substituenten aan de zesring te plaatsen. Het commando R tekent vanuit een hoekpunt van de zesring de aanzet tot een binding met een substituent ($\angle 120^\circ$). Het betreffende hoekpunt wordt aangegeven met een getal.

```
\chemie[SIX,B1..6,R1..6]
```

De bovenstaande aanroep plaatst alleen de binding naar de substituenten. De substituent zelf wordt met RZ aangegeven. Ook hier worden getallen gebruikt om de positie te markeren. De substituenten worden in het tweede, optionele argument als tekst meegegeven.



Voorbeeld 3

```
\startchemie[kader=aan,breedte=6000]
\chemie[SIX,B1..6,R1..6,RZ1..3][CH_3,CH_3,OH]
\stopchemie
```

Als het tweede argument wordt weggelaten, worden geen teksten geplaatst en heeft het commando RZ1..3 geen gevolg.

3 Definities

Het is mogelijk een bibliotheek van structuren op te bouwen. Deze structuren kunnen we, al naar gelang de behoefte, later oproepen en voorzien van extra componenten. Ook kunnen ze dienen als bouwstenen voor ingewikkelder structuren. Het voor-definiëren van structuren kan plaatsvinden met behulp van de T_EX-primitieve `\def`.

Als we een structuur, bijvoorbeeld [SIX,B,R,RZ], vaak gebruiken, dan kunnen we deze vooraf definiëren.

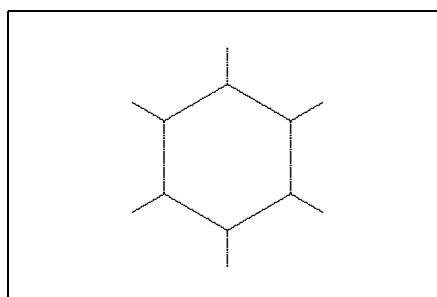
```
\def\zesring{\chemie[SIX,B,R,RZ]}
```

In plaats van `\def` kan ook het onderstaande commando worden gebruikt. In dat geval wordt een melding gegeven als de definitie reeds bestaat.

```
\definieerchemie[zesring]
{\chemie[SIX,B,R,RZ]}
```

Hoewel beide manieren van definiëren zijn toegestaan is de tweede manier robuuster, omdat achter de schermen beschermende maatregelen worden genomen om conflicten met bestaande commando's te voorkomen.

De aanroep `\chemie[zesring]` levert een zesring op zonder substituenten. Er is immers geen tweede argument gegeven.

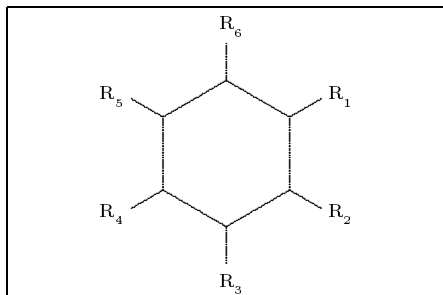


Voorbeeld 4

```
\definieerchemie[zesring]
  {\chemie[SIX,B,R,RZ]}

\startchemie[kader=aan,breedte=6000]
  \chemie[zesring]
\stopchemie
```

Als we zes substituenten willen plaatsen, dan kan dat als volgt:

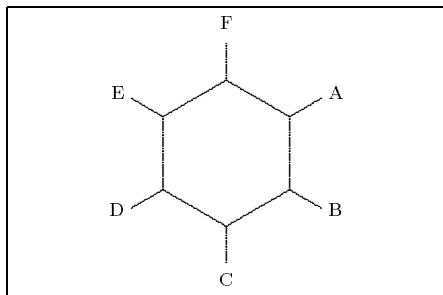


Voorbeeld 5

```
\definieerchemie[zesring]
  {\chemie[SIX,B,R,RZ]}

\startchemie[kader=aan,breedte=6000]
  \chemie[zesring][R_1,R_2,R_3,R_4,R_5,R_6]
\stopchemie
```

De structuur `zesring` kan ook zonder substituenten worden gedefinieerd. In dat geval worden bij de aanroep `\chemie[zesring]` geen substituenten verwacht. Wilen we deze toch plaatsen, dan kan dat bijvoorbeeld als volgt:



Voorbeeld 6

```
\definieerchemie[zesring]
  {\chemie[SIX,B,R]}

\startchemie[kader=aan,breedte=6000]
  \chemie[zesring,RZ][A,B,C,D,E,F]
\stopchemie
```

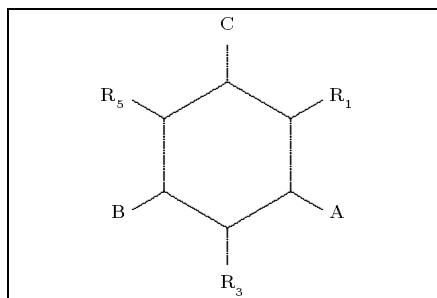
In principe is het aantal mogelijkheden onbegrensd. Men dient zich echter steeds te realiseren dat de atomen en moleculen uit het tweede argument worden opgehaald in de volgorde van het eerste argument.

In een definitie mogen ook atomen en moleculen (teksten) worden geplaatst.

```
\definieerchemie[zesring]
  {\chemie[SIX,B,R,RZ135][R_1,R_3,R_5]}
```

Hier worden dus altijd drie substituenten geplaatst. Als we bij het oproepen meer substituenten willen plaatsen, dan

dienen we expliciet aan te geven dat we doorgaan met de zesring (SIX).



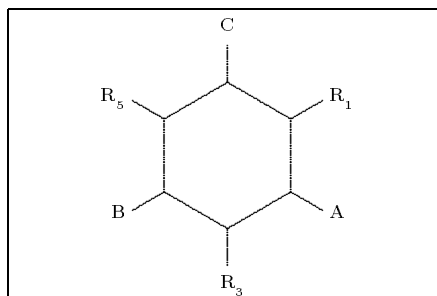
Voorbeeld 7

```
\definieerchemie[zesring]
  {\chemie[SIX,B,R,RZ135][R_1,R_3,R_5]}

\startchemie[kader=aan,breedte=6000]
  \chemie[zesring,SIX,RZ246][A,B,C]
\stopchemie
```

In definities werkt `\chemie[]` dus globaal en `\chemie[][]` lokaal. De idee hierachter is dat in het eerste geval een reeks commando's wordt tussengevoegd en in het tweede geval een complete, zelfstandige structuur.

In een definitie kan dus meerdere malen `\chemie` voorkomen. Het vorige voorbeeld had daarom ook kunnen worden opgeroepen met:



Voorbeeld 8

```
\definieerchemie[zesring]
  {\chemie[SIX,B,R,RZ135][R_1,R_3,R_5]
  \chemie[SIX,RZ246]}

\startchemie[kader=aan,breedte=6000]
  \chemie[zesring][A,B,C]
\stopchemie
```

Als T_EX met de melding komt dat er sprake is van een onbekend commando, dan is men waarschijnlijk vergeten SIX, FIVE of een vergelijkbaar structuur-commando mee te geven.

4 Bindingen

Hieronder is een overzicht opgenomen van de bindingen die men kan aantreffen bij de verschillende structuren. Uit de overzichten verderop in deze handleiding zal blijken waar de commando's voor staan.

In de linker kolom staan steeds de volledige bindingen weergegeven, in de rechter kolom de ingekorte bindingen. Deze laatste maken het mogelijk atomen en moleculen in

de binding op te nemen. Bindingen kunnen aan beiden kanten, links (-) of rechts (+) worden ingekort.

B	Bond	SB	Single Bond
		-SB	Left Single Bond
		+SB	Right Single Bond

Tabel 1: Enkelvoudige bindingen.

Een binding kan worden gevolgd door een of meer getallen of een range, bijvoorbeeld: B1, B135 en B1..5. Als alle bindingen nodig zijn, kan worden volstaan met B.

Binnen een ring kan een extra binding worden aangegeven en tussen atomen en moleculen dubbele of drievoudige bindingen.

EB	Extra Bond	DB	Double Bond
		TB	Triple Bond

Tabel 2: Meervoudige bindingen.

Een binding kan worden kortgesloten. Dit komt voor bij bijvoorbeeld zesringen. In dat geval wordt het atoom dat moet worden overgeslagen opgegeven. Daarnaast kan binnen een zesring een cirkel worden getekend.

S	Shortcut	C	Circle
---	----------	---	--------

Tabel 3: Bijzondere bindingen.

Aan de hoekpunten kunnen substituenten worden verbonden. Het begrip substituent mag hier overigens ruim worden opgevat. Afhankelijk van de aanwezigheid van atomen en moleculen, kunnen de bindingen kort of lang zijn.

R	Radical	SR	Single Radical
-R	Left Radical	-SR	Single Left Radical
+R	Right Radical	+SR	Single Right Radical

Tabel 4: Bindingen naar substituenten.

Natuurlijk kunnen substituenten ook door dubbele bindingen aan de structuur worden verbonden.

ER	Extra Radical	DR	Double Radical
----	---------------	----	----------------

Tabel 5: Dubbele bindingen naar substituenten.

Aan bindingen kunnen teksten worden gekoppeld. Deze teksten worden in de opgegeven volgorde uit de tweede set achter `\chemie` gehaald.

Z	Atom	RZ	Radical Atom
		-RZ	Left Radical Atom
		+RZ	Right Radical Atom

Tabel 6: Atomen en moleculen (radikalen).

De atomen/moleculen worden met de klok mee genummerd. Ook hier mogen combinaties worden opgegeven. Met z0 (z nul) kan een tekst in het midden van de structuur worden gezet.

Bij het plaatsen wordt zo goed mogelijk rekening gehouden met de (mogelijke) afmetingen van atomen en moleculen.

De breedte van de C en de hoogte van C_mⁿ spelen daarbij een rol. Dit mechanisme kan nog worden verfijnd.

5 Combinaties

Structuren kunnen worden gecombineerd tot complexe verbindingen. Het verplaatsen van de ene structuur ten opzichte van de andere structuur gebeurt met MOV, ROT, ADJ en SUB.

MOV	Move	het verplaatsen van eenzelfde structuur in de richting van een binding
ADJ	Adjace	het verplaatsen van een andere structuur in de richting van de x- of y-as, aanliggend aan een binding
SUB	Substitute	het verplaatsen van de ene structuur ten opzichte van een andere in de richting van de x- of y-as
ROT	Rotate	het roteren van een structuur

Tabel 7: Verplaatsingen en rotaties.

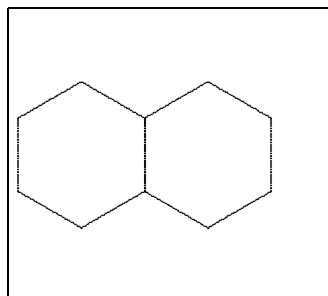
De bovenstaande vier commando's hebben binnen de verschillende structuren een ander effect. Zo is de hoek waarover wordt geroteerd bij `\chemie[FIVE,ROT1,B]` anders dan die bij `\chemie[SIX,ROT1,B]`.

Binnen CARBON is het bovendien mogelijk een structuur te spiegelen. Dit gebeurt met MIR.

MIR	Mirror	het spiegelen van de structuur
-----	--------	--------------------------------

Tabel 8: Spiegelen.

Met een cijfer geven we de richting van een verplaatsing of de mate van de rotatie aan. Omdat deze commando's nauw verbonden zijn met de actuele structuur, dienen deze commando's te worden gegeven voordat bindingen en teksten worden getekend. Het maakt dus uit of `\chemie[FIVE,B,ROT1,R]` wordt gegeven of `\chemie[FIVE,ROT1,B,R]`. De eerste aanroep levert een ongewenst resultaat.



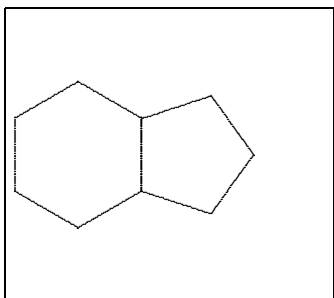
Voorbeeld 9

`\startchemie[kader=aan,breedte=4500,rechts=3500]`

```
\chemie[SIX,B,MOV1,B]
\stopchemie
```

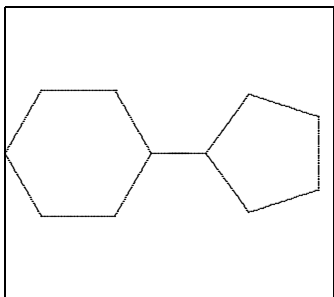
Achtereenvolgens wordt hier een zesring getekend: SIX,B, een verplaatsing in de richting van binding 1 van de als eerste geplaatste zesring gerealiseerd: MOV1 en een tweede zesring getekend: B. Een verplaatsing met MOV kan bij een zesring in zes richtingen plaatsvinden. Dit in tegenstelling tot een verplaatsing met ADJ, die in de vier as-richtingen plaatsvindt (x , $-x$, y , $-y$). Bij een zesring vallen enkele van deze verplaatsingen samen: het bovenstaande voorbeeld had ook kunnen worden gerealiseerd met: [SIX,B,ADJ1,B].

Ook verschillende structuren kunnen worden gecombineerd. Aan een structuur FIVE kan bijvoorbeeld SIX worden gekoppeld. Het mechanisme dat voor de koppeling zorgt is voor de gebruiker grotendeels verborgen. In het volgende voorbeeld wordt achtereenvolgens een zesring getekend: SIX,B, een verplaatsing langs de positieve x -as gerealiseerd: ADJ1, en een geroteerde vijfring getekend: FIVE,ROT3,B.



Voorbeeld 10

```
\startchemie[kader=aan,breedte=4500,rechts=3500]
\chemie[SIX,B,ADJ1,FIVE,ROT3,B]
\stopchemie
```



Voorbeeld 11

```
\startchemie[kader=aan,breedte=4500,rechts=3500]
\chemie[SIX,ROT2,B,R6,SUB1,FIVE,B,R4]
\stopchemie
```

Een overgang naar een aansluitende structuur vindt dus plaats met ADJ. Vaak zal, om een goede aansluiting te krijgen, een van de twee structuren moeten worden geroteerd met ROT. Als een structuur niet direct maar via een binding wordt gekoppeld, gebruikt men SUB. Rotaties vinden plaats in stappen van 90°, met de klok mee. Verplaatsingen met ADJ en SUB vinden plaats in de vier as-richtingen.

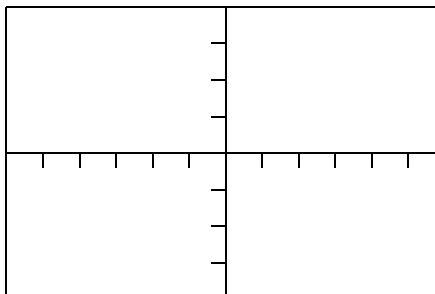
We zien dus dat de volgorde van de opgegeven commando's uitmaakt. Een voor de hand liggende volgorde van commando's is de volgende:

```
\chemie
[structuur, % SIX, FIVE, ...
 bindingen binnen de structuur, % B, C, EB, ...
 bindingen buiten de structuur, % R, DR, ...
 te plaatsen atomen, % Z
 te plaatsen substituenten] % RZ, -RZ, ...
[atomen,
 substituenten]
```

Het aaneenschakelen van structuren komt in de regel neer op enkele translaties en rotaties. Hoewel dit misschien niet direct zo lijkt, zit hierin een zekere systematiek. Het proces zou dan ook kunnen worden vereenvoudigd. De in eerdere versies reeds gerealiseerde automatisering is weer ongedaan gemaakt, omdat gebleken is dat 'verborgen' rotaties leiden tot misverstanden met betrekking tot de plaats van bindingen. Bovendien is het eenvoudiger een niet geroteerde structuur van bindingen, atomen en moleculen te voorzien dan een geroteerde. Een samengestelde structuur kan beter eerst per onderdeel worden gedefinieerd, eventueel met translaties, en pas als laatste stap worden geroteerd.

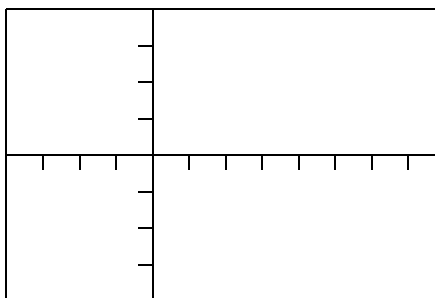
6 Assenstelsel

Structuren worden gezet in een afgeperkte ruimte, gemakshalve aangeduid als assenstelsel. De afmetingen van dit stelsel en de plaats van het nulpunt zijn in te stellen. Bovendien kan het assenstelsel, ten behoeve van het positioneren in de tekst, zichtbaar worden gemaakt en kan een kader worden getrokken.



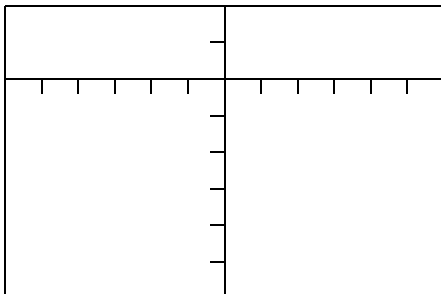
Voorbeeld 12

```
\startchemie
[assenstelsel=aan,
 breedte=6000,hoogte=4000]
...
\stopchemie
```



Voorbeeld 13

```
\startchemie
[assenstelsel=aan,
 breedte=6000, rechts=4000]
...
...
\stopchemie
```

**Voorbeeld 14**

```
\startchemie
[assenstelsel=aan,
 breedte=6000, boven=1000, onder=3000]
...
...
\stopchemie
```

De afmetingen van het assenstelsel bepalen de afmeting van de totale structuur. Als aan breedte en/of hoogte de instelling passend wordt meegegeven, dan worden de afmetingen van de totale structuur bepaald door de werkelijke afmetingen. Waar voor gekozen wordt, hangt mede af van de manier waarop structuren in de tekst worden geplaatst: los van elkaar, naast elkaar, onder elkaar enz. Voorbeeld 12 toont de standaardinstellingen.

Binnen een `\start`–`\stop`–paar kunnen P_{CT}E_X–macro's worden gebruikt. Enige voorzichtigheid is daarbij natuurlijk wel geboden.

7 Instellingen

Achter `\startchemie` en `\stelchemie` in kunnen verschillende instellingen worden meegegeven.

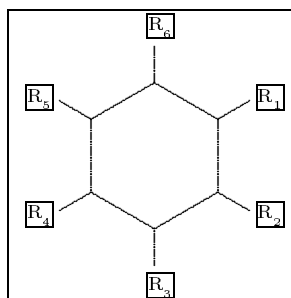
variabele	instellingen	default
breedte	getal	4000
hoogte	getal	4000
links	getal	
rechts	getal	
boven	getal	
onder	getal	
korps	8pt 9pt 10pt 11pt 12pt	<code>\systeemkorps</code>
resolutie	<getal>	<code>\systeemresolutie</code>
schaal	<getal> klein middel groot	middel
formaat	klein middel groot	middel
status	start stop	start
optie	test	
assenstelsel	aan uit	uit
kader	aan uit	uit
variant	1 2	1

Tabel 9: Instellingen bij structuurformules.

Standaard loopt het assenstelsel van –2000 tot +2000, zowel in de hoogte als in de breedte. Het punt z0 ligt daarbij op (0,0). Andere verdelingen kunnen worden ingesteld met behulp van `links`, `rechts`, `boven` en/of `onder` in combinatie met `breedte` en `hoogte`.

Met `formaat` kan de afmeting van de karakters worden ingesteld. Er wordt daarbij achter de schermen gebruik gemaakt van de T_EX–primitieven `\textsize`, `\scriptsize` en `\scriptscriptsize`. Met `schaal` stelt men de afmetingen van de structuur zelf in (1..1000). De schaal wordt mede bepaald door `korps`. De trefwoorden `klein`, `middel` en `groot` zijn op elkaar afgestemd.

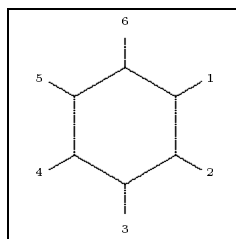
Met `status` kan het tijdrovende rekenwerk worden kortgesloten. De variabelen `kader` en `assenstelsel` spreken voor zich. Met `optie=test` wordt om de tekst een kader getekend, zodat men kan zien hoe wordt uitgelijnd. Met `variant` stellen we de kwaliteit van de lijnen in. Standaard gebruikt P_{CT}E_X een 5 punts . om lijnen te tekenen. Als variant 2 wordt gekozen, worden kleinere punten gebruikt en dus dunnere lijnen getekend.

**Voorbeeld 15**

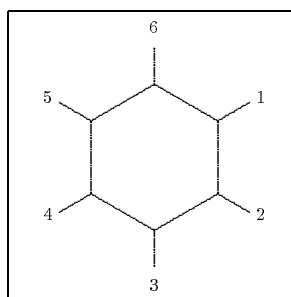
```
\startchemie[kader=aan, optie=test, variant=2pt]
\chemie[SIX, B, R, RZ][R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6]
\stopchemie
```

8 Afmetingen

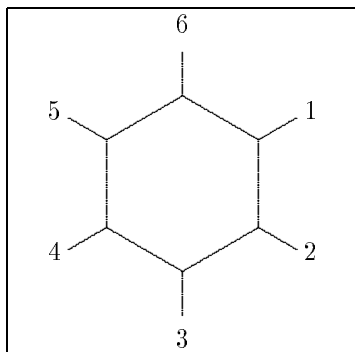
Een structuur kan in verschillende formaten worden weergegeven. Het instellen gebeurt met `formaat` en `schaal`.

**Voorbeeld 16**

```
\startchemie[schaal=klein, formaat=klein]
\chemie[SIX, B, R, RZ][1, 2, 3, 4, 5, 6]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 17**

```
\startchemie[schaal=middel,formaat=middel]
\chemie[SIX,B,R,RZ][1,2,3,4,5,6]
\stopchemie
```



Voorbeeld 18

```
\startchemie[schaal=groot,formaat=groot]
\chemie[SIX,B,R,RZ][1,2,3,4,5,6]
\stopchemie
```

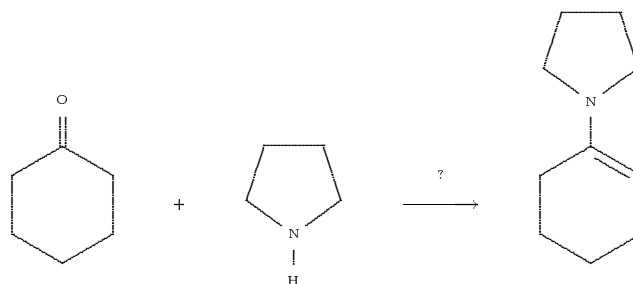
Eventueel kan bij `schaal` een getal tussen 1 en 1000 worden ingevuld. De waarden die bij de trefwoorden `klein`, `middel` of `groot` horen zijn op elkaar afgestemd.

9 Symbolen

Er zijn enkele symbolen beschikbaar ten behoeve van het zetten van reactievergelijkingen. In de onderstaande figuur wordt een vergelijking getoond. Deze vergelijking is als volgt gedefinieerd:

```
\stelchemiein
[breedte=passend,hoogte=5500,onder=1500,
formaat=klein,schaal=klein]
\hbox
{\startchemie
\chemie[SIX,B,ER6,RZ6][O]
\stopchemie
\startchemie
\chemie[SPACE,PLUS,SPACE]
\stopchemie
\startchemie
\chemie[FIVE,ROT4,B125,+SB3,-SB4,Z4,ZR4,
ZR4][N,H]
\stopchemie
\startchemie
\chemie[SPACE,GIVES,SPACE][?]
\stopchemie
\startchemie
\chemie[SIX,B,EB6,R6,SUB4,FIVE,ROT4,B125,
+SB3,-SB4,Z4][N]
\stopchemie}
```

De `\hbox` is nodig om de structuren achter elkaar te zetten. De symbolen `GIVES` en `PLUS` spreken voor zich. Met `SPACE` kan extra ruimte worden afgedwongen.



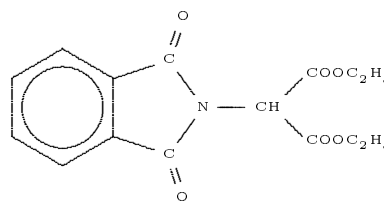
Een evenwicht kan worden weergegeven met `EQUILIBRIUM`. Boven `GIVES` en `EQUILIBRIUM` kan een tekst worden gezet. In het voorbeeld is dat een ‘?’.

10 Bijzonderheden

Bij `ONE` kan `Z0` uit meer dan een atoom bestaan. In dat geval is de gereserveerde ruimte ontoereikend. Als voor `Z0` meer ruimte nodig is, dan kunnen de bindingen 1, 2 en 8 worden opgeschoven met het commando `OFF`, wat staat voor ‘offset’. Hieronder is een voorbeeld gegeven van het gebruik van dit commando.

```
\startchemie[breedte=passend]
\chemie
[SIX,B,C,ADJ1,
FIVE,ROT3,SB34,+SB2,-SB5,Z345,DR35,SR4,RZ35,
SUB1,ONE,OFF1,SB258,Z0,Z28]
[C,N,C,O,O,
CH,COOC_2H_5,COOC_2H_5]
\stopchemie
```

De `offset` is hier 1, wat wil zeggen dat we een karakter extra gebruiken. Dergelijke, op het eerste oog vrij ingewikkelde, definities kunnen worden gedefinieerd door eerst de afzonderlijke delen te definiëren. Het roteren kan daarbij voor het laatst worden bewaard.



Er duikt hier nog een nieuw commando op: `CRZ`. Dit commando kan worden gebruikt om een atoom of molecuul in het verlengde van de binding te plaatsen, wat in dit geval gewenst is. Hetzelfde had kunnen worden bereikt met het commando `RZ`, omdat men via de tweede set de spatiering kan beïnvloeden: `{\,o}` in plaats van `o`.

OFF	Offset	CRZ	Centered Atom	Radical

Tabel 10: Bijzondere commando's.

11 Lopende tekst

Naast het zetten van structuurformules wordt ook het zetten van reactievergelijkingen ondersteund. Het hiervoor beschreven commando `\chemie` heeft daarom nog twee uitvoeringen:

```
\chemie{formule}
\chemie{formule}{tekst}
```

Dit commando past zich aan de plaats in de tekst aan. Dat wil zeggen dat onderscheid wordt gemaakt tussen:

- tekst-mode
- wiskundige tekst-mode
- wiskundige display-mode

Als het commando in de lopende tekst wordt gegeven, dan worden automatisch $\$ \$$ om het commando geplaatst. Zo levert `\chemie{NH_4^+}` de formule NH_4^+ op. Sub- en superscripts worden, zoals door Knuth in het T_EXBook wordt aanbevolen, wat lager geplaatst. Zo is het in het T_EXBook op pagina 179 gegeven, chemisch gezien wat vreemde, voorbeeld te zetten door in de tekst `\chemie{Fe_2^{+2}Cr_2O_4}` op te nemen. Dit levert: $\text{Fe}_2^{+2}\text{Cr}_2\text{O}_4$. Zonder correctie zou dit zijn geweest: $\text{Fe}_2^{+2}\text{Cr}_2\text{O}_4$.

Hetzelfde resultaat wordt bereikt als het commando tussen $\$ \$$ wordt geplaatst. In beide gevallen wordt het tweede argument dus weggelaten. Als we het commando tussen $\$ \$ \$$ plaatsen, dan is het tweede argument wel verplicht. Dit tweede argument mag leeg zijn:

```
$$
\chemie{2H_2}{} \chemie{PLUS}{} \chemie{O_2}{}
\chemie{GIVES}{} \chemie{2H_2O}{}
$$
```

levert:



Dit kan ook korter worden gedefinieerd:

```
$$\chemie{2H_2, PLUS, O_2, GIVES, 2H_2O}{}$$
```

of zelfs:

```
$$\chemie{2H_2, +, O_2, ->, 2H_2O}{}$$
```

Het zal de T_EX-kenner opvallen dat zowel het plus-teken als de pijl op de baseline staan. Vergelijk + maar eens met +. Er is voor gezorgd dat, onafhankelijk van het formaat van weergeven, de + en de \longrightarrow in elkaars verlengde liggen.

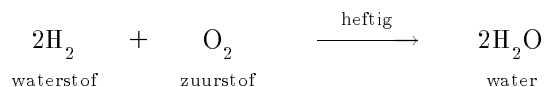
Naast PLUS en GIVES kan EQUILIBRIUM (\rightleftharpoons) worden opgegeven, wat de dubbele pijlen \rightleftharpoons oplevert.

Deze formule kan ook in de lopende tekst worden opgenomen. In dat geval wordt een wat minder ruime layout gekozen: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 2\text{H}_2\text{O}$. Het is ook mogelijk bindingen weer te geven. Zo resulteert `\chemie{H, SINGLE, CH, DOUBLE, HC, SINGLE, H}` in de chemische formule $\text{H}-\text{CH}=\text{HC}-\text{H}$. Ook dit kan korter: `\chemie{H, -, CH, --, HC, -, H}`. Een drievoudige binding is op te roepen met TRIPLE of ---: $\text{HC}\equiv\text{CH}$.

We keren nog even terug naar de display-mode. Het tweede argument kan worden gebruikt om een toelichting op de formule te geven:

```
$$
\chemie{2H_2}{waterstof} \chemie{PLUS}{}
\chemie{O_2}{zuurstof}
\chemie{GIVES}{heftig} \chemie{2H_2O}{water}
$$
```

levert:



Het formaat van de in de tekst opgenomen formules kan worden met het setup-commando:

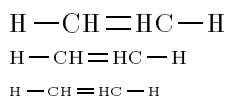
variabele	instellingen	default
tekstformaat	klein middel groot	groot

Tabel 11: Instellingen bij tekstformules.

Het commando

```
\chemie{H, SINGLE, CH, DOUBLE, HC, SINGLE, H}
```

levert bij achtereenvolgens de instellingen groot, middel en klein de formules:



12 Installatie

De macro's staan in de file `m-chemie.tex`, waarbij de `m` staat voor module. Omdat gebruik wordt gemaakt van de module `cont-00a.tex`, is een stylefile opgezet die voor de aansluiting zorgt bij andere pakketten dan CON_TE_XT.

Het activeren van PPCH_{TEX} vindt binnen L^AT_EX plaats door middel van het commando `\documentstyle`:

```
\documentstyle[m-chemie]{}

```

Naast de eerder beschreven Nederlandstalige interface is ook een Engelstalige interface beschikbaar. De Engelstalige versie wordt geladen met

```
\documentstyle[m-chemie]{}

```

13 Some english

PPCH_{TEX} has an english interface too. This interface is switched on by:

```
\setinterface[english]

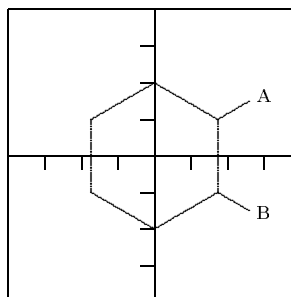
```

Switching back to dutch can be done with:

```
\resetinterface

```

Although more interfaces are possible, only the english one is implemented. The file `m-chemie.sty` shows how an interface is defined.



Voorbeeld 20


```
\setinterface[english]
\startchemical[axis=on,border=on]
  \chemical[SIX,B,R12,RZ12][A,B]
\stopchemical
\resetinterface
```

14 Uitbreidbaarheid

Het staat de gebruikers van PPCH_{TEX} natuurlijk vrij de macro's die er aan ten grondslag liggen ook op een andere, niet commerciële, wijze in te zetten. Enige voorzichtigheid is echter geboden omdat de macro's nog steeds worden uitgebreid, worden geoptimaliseerd en meer robuust worden gemaakt. Sommige macro's lijken misschien nodeloos ingewikkeld, maar schijn bedriegt. Commando's met de vorm `\stel...in` maken bijvoorbeeld gebruik van macro's die nesting en verschillende ASCII-layouts ondersteunen.

Vergelijk bijvoorbeeld:

```
\stelchemiein[formaat=klein]
```

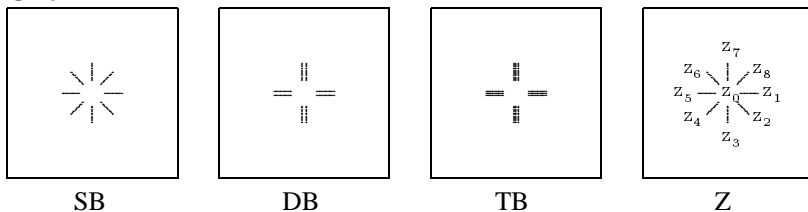
met:

```
\stelchemiein
  [formaat=klein,
   schaal=500,
   tekstformaat=groot]
```

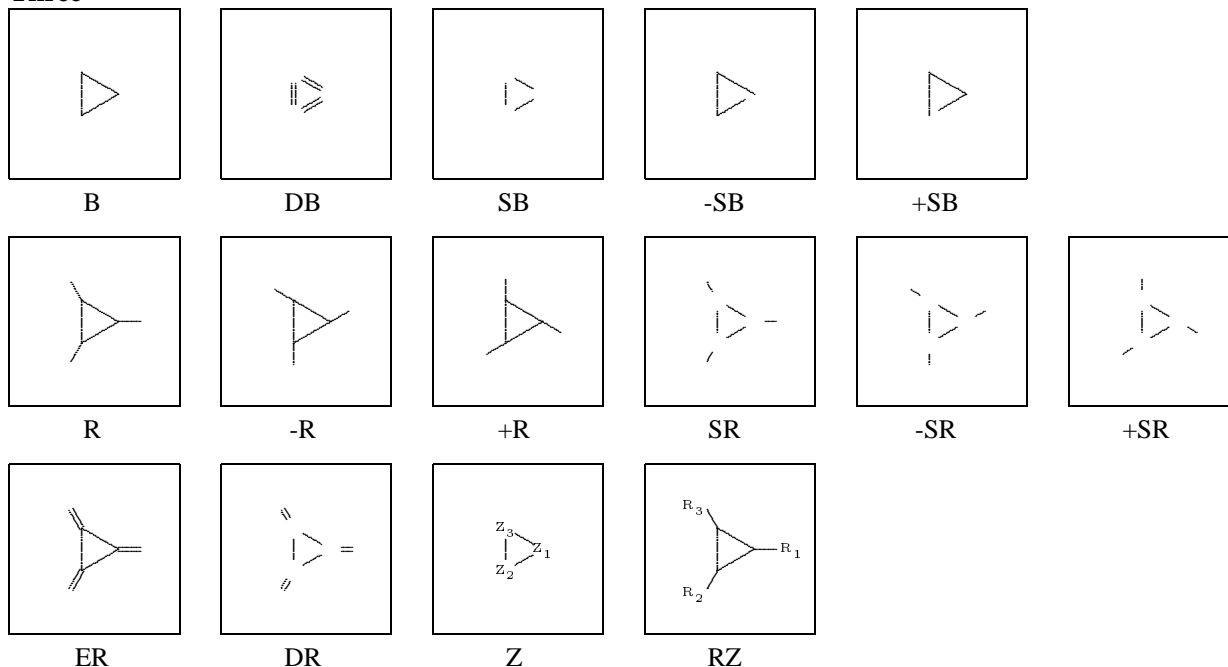
De instellingen mogen in een willekeurige volgorde worden opgegeven. Waar mogelijk worden spaties en regelovergangen onderdrukt en worden meldingen gegenereerd met betrekking tot fouten.

Hieronder is een (beperkt) overzicht gegeven van de verschillende structuren. In de handleiding zijn ook de gerooteerde en verplaatste varianten opgenomen. Om ruimte te besparen is gebruik gemaakt van een wat kleiner korps dan wellicht wenselijk is.

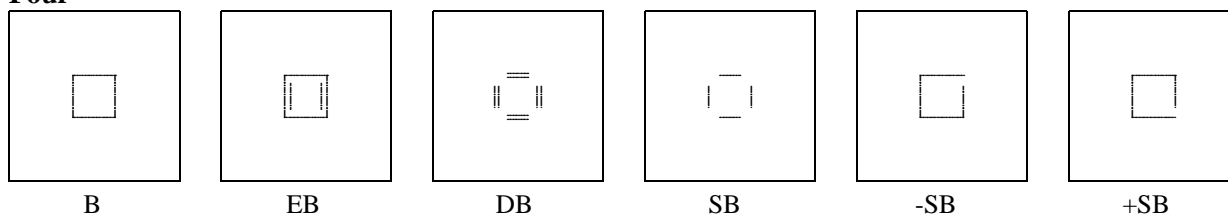
One

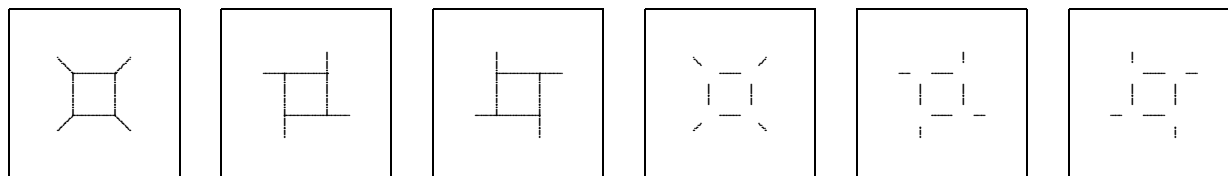


Three



Four





R

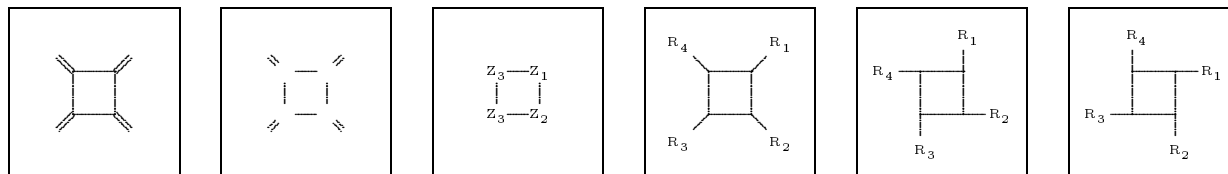
-R

+R

SR

-SR

+SR



ER

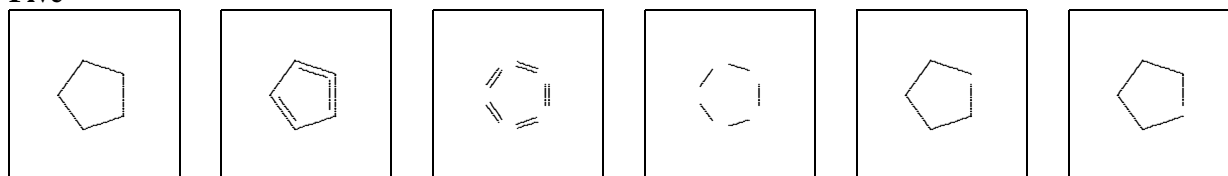
DR

Z

RZ

-RZ

+RZ

Five

B

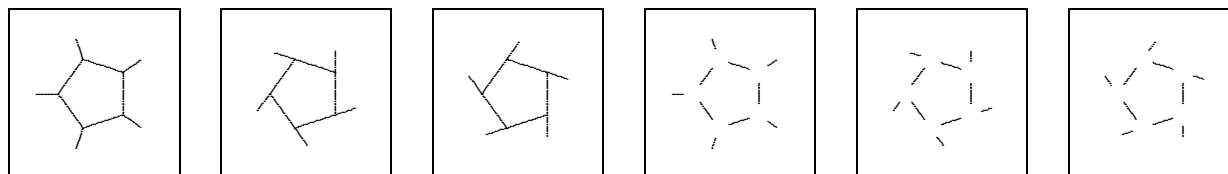
EB

DB

SB

-SB

+SB



R

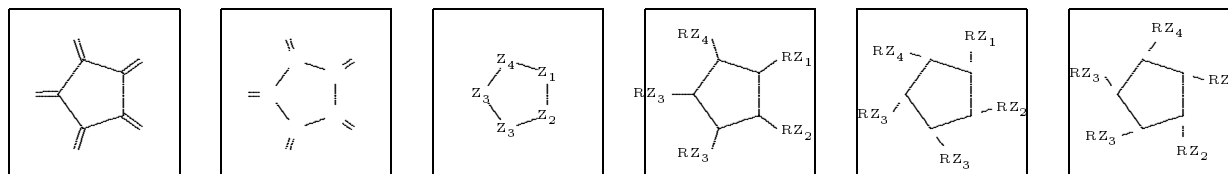
-R

+R

SR

-SR

+SR



ER

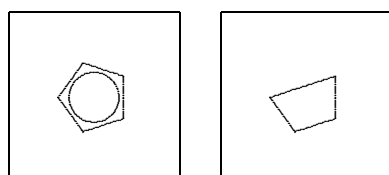
DR

Z

RZ

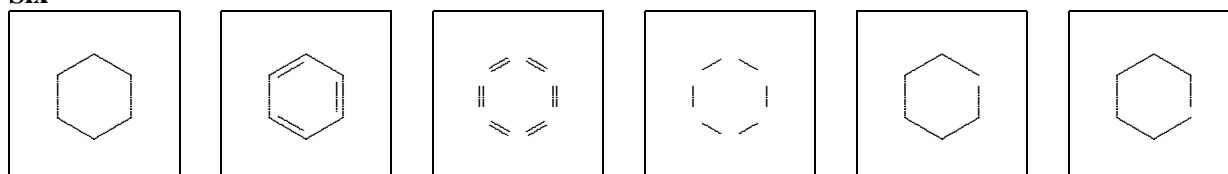
-RZ

+RZ



C

S

Six

B

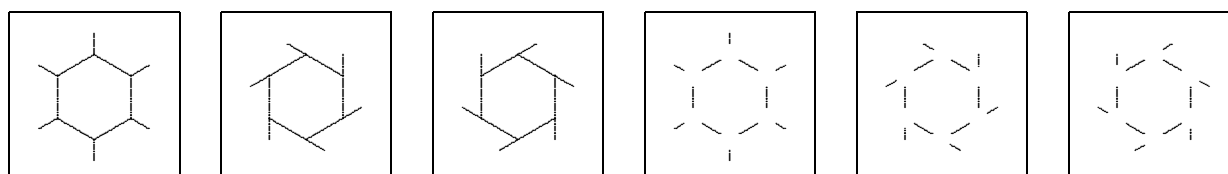
EB

DB

SB

-SB

+SB



R

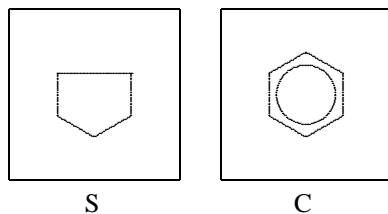
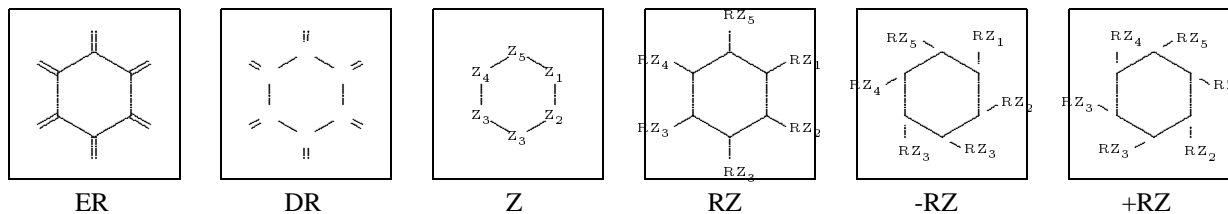
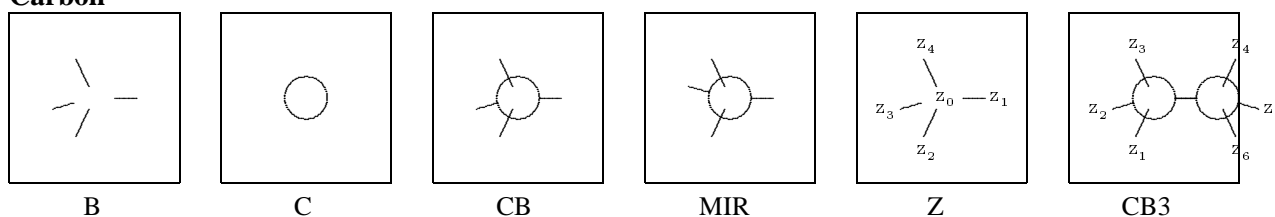
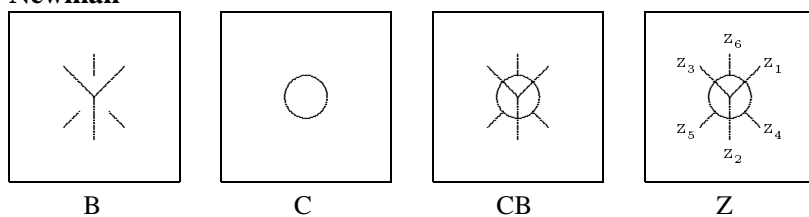
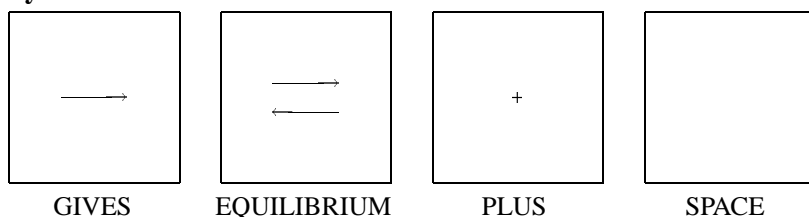
-R

+R

SR

-SR

+SR

**Carbon****Newman****Symbol****15 Tot slot**

De bovenstaande tekst komt in grote lijnen overeen met de handleiding bij PPCH_{TEX}. In aanvulling op het bovenstaande wordt in de handleiding ook aandacht besteed aan:

- de mogelijkheid om (in CON_TE_XT) delen van een structuur in kleur weer te geven
- de aansluiting met het in CON_TE_XT geïntegreerde mechanisme ten behoeve van interactieve teksten
- de mogelijkheid het formaat van structuurformules te koppelen aan de korpsgrootte in een omhullend pakket

- de mogelijkheid de resolutie van structuurformules te koppelen aan de resolutie in een omhullend pakket
- de wijze waarop de Engelstalige interface is gedefinieerd
- de wijze waarop hoogte van de super- en subscripts wordt gemanipuleerd

Bovendien zijn in de handleiding wat uitgebreider overzichten opgenomen, met name met betrekking tot rotaties en verplaatsingen.