

CHEMICKÁ SADZBA S BALÍČKOM CHEMFIG

ALEŠ KOZUBÍK (SK)

Abstrakt. Chémia, rovnako ako matematika, so sebou prináša zvýšené nároky na počítačovú sadzbu. Na rozdiel od matematiky, však \LaTeX nedisponuje špecializovaným prostredím pre sadzbu chemických vzorcov a rovníc. V tomto článku autor predstavuje balíček `ChemFig`, ktorý pomáha riešiť tento problém.

Kľúčové slová. chémia, sadzba, \LaTeX , balíček `ChemFig`.

THE CHEMISTRY TYPESET WITH THE CHEMFIG PACKAGE

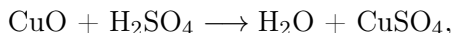
Abstract. Chemistry as well as mathematics, bring with it increased requests on the computer typesetting. Unlike mathematics but \LaTeX does not have a specialized environment for typesetting chemical formulas and equations. In this paper, the author introduces the `ChemFig` package that helps to solve this problem.

Key words and phrases. chemistry, typesetting, \LaTeX , `ChemFig` package.

Úvod

V predchádzajúcich ročníkoch sme sa oboznámili so základmi práce s typografickým systémom \TeX/\LaTeX . Naučili sme sa základy hladkej sadzby [1, 2], vysporiadali sme sa so spracovaním obrázkov [3, 5]. Taktiež sme si ukázali sadzbu matematických vzorcov a rovníc v rozsahu danom publikáciami [4, 6, 8]. V knihe [7] sa potom môžeme oboznámiť, ako poznatky využiť pre dosiahnutie skutočne kvalitnej úpravy dokumentu. Ďalšou oblasťou, ktorá si vyžaduje osobitnú pozornosť pri sadzbe a jej spracovanie možno označiť za neelementárne je sadzba chemického obsahu, a to najmä z oblasti chémie organickej.

Ak pri sadzbe anorganickej chémie si väčšinou vystačíme s matematickým prostredím napr. môžeme vysádzať rovnicu



či vytvoriť symbol $^{12}_6\text{C}$, tak v chémii organickej už toľko šťastia nemáme. Tu prichádzajú požiadavky na zobrazovanie molekúl, štruktúrnych vzorcov, cyklických zlúčenín a pod. Preto si predstavíme balíček `ChemFig`, ktorého autorom je Christian Tellechea a manuál ku nemu [9] je voľne dostupný na internete. Jedná sa o balíček, ktorý je založený na balíčku `TikZ` a oproti iným nástrojom pre sadzbu chémie, ako sú `ppctex` alebo `mhchem` sa vyznačuje jednoduchou syntaxe.

1. Predstavenie balíčka ChemFig

Balíček `ChemFig` zaradíme do TEX -ového dokumentu štandardným spôsobom, teda príkazom `\usepackage{chemfig}` ak používame $\text{L}\text{A}\text{T}\text{E}\text{X}$, pre $\text{C}\text{o}\text{n}\text{T}\text{E}\text{X}\text{t}$ použijeme `\usemodule{chemfig}` atď. `ChemFig` si vyžaduje balíček `TikZ` a pokiaľ nebol načítaný pred tým, `ChemFig` si ho sám automaticky načíta.

Základný príkaz balíčka `ChemFig` je `\chemfig{<kod>}`, kde argument `kod` predstavuje postupnosť znakov, ktorá charakterizuje molekulu, ktorej zobrazenie požadujeme. Molekula je následne vykreslená v prostredí `tikzpicture`. Pre zobrazenie výsledku môžeme použiť buď priamo kompiláciu cez `pdflatex` alebo staršiu cestu `tex` \rightarrow `dvi` \rightarrow `ps` \rightarrow `pdf`.

Základná syntax príkazu `\chemfig` je:

```
\chemfig{<atom1><vazba>[<uhol>,<koef>,<n1>,<n2>,<tikz kod>]<atom2>}
```

kde:

- `<uhol>` je uhol väzby medzi atómami,
- `<koef>` je koeficient, ktorý násobí základnú dĺžku väzby,
- `<n1>` a `<n2>` sú počty atómov vstupujúcich a vystupujúcich z väzby,
- `<tikz kod>` príkazy balíčka `Tikz`, napr. nastavenie farby a pod.

Široké možnosti príkazu `\chemfig` si krátko predstavíme v ďalších odstavcoch.

Kód	Výsledok
<code>\chemfig{X-Y}</code>	X — Y
<code>\chemfig{X=Y}</code>	X = Y
<code>\chemfig{X~Y}</code>	X ≡ Y
<code>\chemfig{X>Y}</code>	X ► Y
<code>\chemfig{X<Y}</code>	X ◄ Y
<code>\chemfig{X>:Y}</code>	X ... Y
<code>\chemfig{X<:Y}</code>	X ... Y
<code>\chemfig{X> Y}</code>	X ▷ Y
<code>\chemfig{X< Y}</code>	X ◁ Y

Tabuľka 1. Prehľad zobrazení chemických väzieb

2. Zobrazenie chemickej väzby – základ sadzby chémie

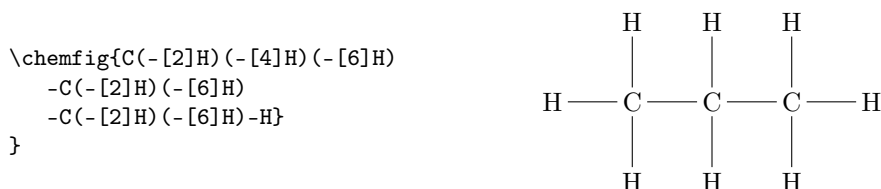
Na ilustráciu si ukážme jednoduchú molekulu propánu $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_3$, ktorú sáďeme príkazom `\chemfig{CH_3-CH_2-CH_3}`. Samozrejme, tu uvedené

jednoduché väzby nie sú ani zďaleka všetkými typmi väzby a jej zobrazenia, s ktorými sa pri sadzbe chémie môžeme stretnúť. Podrobnejší zoznam rôznych typov väzby a ich zobrazenia uvádza tabuľka 1.

Rozostup medzi čiarami slúžiacimi k znázorneniu viacnásobnej väzby je možné upraviť príkazom `\setdoublesep{<veľkosť>}`. Jej štandardná veľkosť je prednastavená na hodnotu 2pt.

Samotné zobrazenia väzby sa však, najmä v organickej chémii, často vyskytujú v rámci kompletných štruktúrnych vzorcov, ktoré znázorňujú detailnú štruktúru zlúčeniny. Neraz sa štruktúra molekuly znázorňuje aj s príslušnými uhlami medzi väzbami jednotlivých atómov.

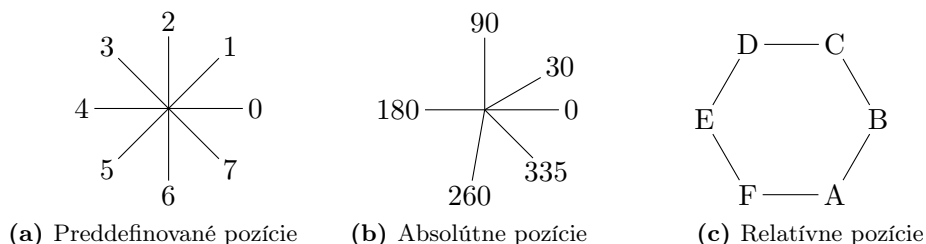
Tak napríklad uvedenú jednoduchú molekulu propánu $\text{CH}_3\text{---CH}_2\text{---CH}_3$ môžeme vysádzať aj v podobe štruktúrneho vzorca nasledovným spôsobom:



Významným voliteľným argumentom každej väzby je `<uhol>`. Jeho implicitnou hodnotou je 0° . Pre jeho zmenu môžeme použiť buď niektorú z ôsmich preddefinovaných pozícií 0–8, tak ako to zobrazuje obrázok 1a.

Absolútnu hodnotu uhla zadávame v tvare `[:<číslo>]`, kde veličina `<číslo>` je absolútna veľkosť uhla v stupňoch, meraná proti smeru hodinových ručičiek od pozície nula. Jej hodnota sa môže pohybovať v intervale $(0, 360)$. Niekoľko pozícií s absolútnym vyjadrením uhla je na obrázku 1b.

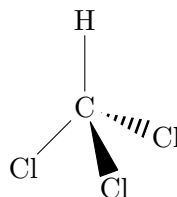
Poslednou možnosťou je relatívna hodnota, vzhľadom na aktuálnu pozíciu poslednej zobrazenej väzby. Zadáva sa v tvare `[::<číslo>]`. Táto hodnota môže byť kladná aj záporná a môže obsahovať aj desatinné čísla. Obrázok 1c zobrazuje šesť pozícií a väzieb, ktoré sa posúvajú vždy o rovnaký uhol 60° .



Obr. 1. Ukážky rôznych možností zadania uhla väzby

Ako príklad, aj so zdrojovým kódom, si zobrazme štruktúrny vzorec molekuly chloroformu:

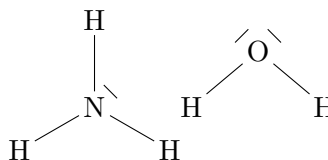
```
\chemfig{C(-[5]Cl)(-[2]H)(<[: -70]Cl)(<[: -20]Cl)}
```



Podrobnejšou verziou štruktúrneho vzorca je tzv. elektrónový vzorec, ktorý okrem samotných väzieb vyznačuje aj ostatné elektróny vo valenčnej sfére. Konfigurácia elektrónov sa zobrazí príkazom `\lewis{<pozícia>,<stav>,<atom>}`.¹ Pritom <pozícia> je určená hodnotou 0–7, rovnako ako pri preddefinovanej pozícii väzby, <stav> určuje či ide o elektrónový pár, samostatný elektrón alebo elektrónovú dieru. Implicitnou hodnotou je dvojica elektrónov.

Použitie si ilustrujeme na molekulách amoniaku a vody. U vody si všimnime kumuláciu dvoch pozícií elektrónových párov na pozíciách 1 a 3 v molekule kyslíka.

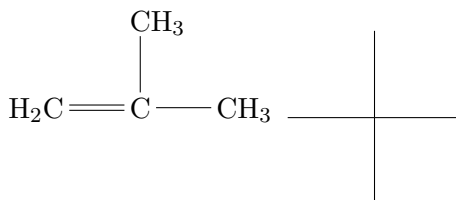
```
\chemfig{\lewis{1,N}(-[2]H)(-[:210]H)(-[: -30]H)}
\chemfig{[:40]H-\lewis{13,O}(-[: -80]H)}
```



3. Rozvetvené molekuly

Pre zobrazenie štruktúry zložitejších molekúl potrebujeme mať k dispozícii možnosť vetvenia väzieb v štruktúrnom vzorci. Kód vetvenia jednoducho zapíšeme do zátvoriek v rámci špecifikácie väzieb v parametri príkazu `\chemfig`. Ako príklad z kategórie jednoduchších si ukážme kumulovaný štruktúrny vzorec izobutylénu, čiže 2-metylpropénu. Pre priblíženie polohy základného riadku pri vetvení je zobrazený samostatný kríž väzieb bez atómov.

```
\chemfig{H_2C=C(-[2]CH_3)-CH_3}
\hspace{.2cm}
\chemfig{-(-[2])(-[6]) -}
```

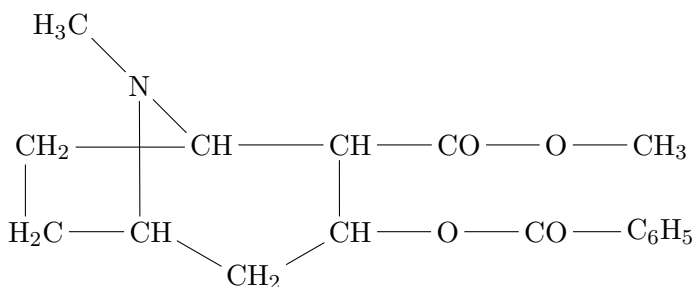


¹Odvodené z anglického pomenovania týchto vzorcov ako Lewis diagram.

Pri zložitejších molekulách sa vyskytuje potreba spojiť aj vzdialené atómy. K tomu slúži operátor „háčika“² `?[<meno><väzba><tikz>]`, kde `<meno>` umožňuje pomenovať háčiky, ak je ich potrebné vytvoriť viac, a pomenovaním tak špecifikovať, ktoré atómy majú byť spojené, `<väzba>` udáva typ väzby a `<tikz>` je nejaký dopĺňajúci kód TikZ-u, ktorým možno napr. špecifikovať farbu. Ako ukážku si zobrazme pomerne zložitú molekulu kokaínu. Najskôr zdrojový kód:

```
\chemfig{H_2C(-C?[a]H-[: -30]CH_2-[: 30]C?[b]H-O-CO-C_6H_5)-[2]
  CH_2-[ , 1.7]CH(-[3]N?[a]-[3]H_3C)(-[ , 1.35]C?[b]H-CO-OCH_3)}
```

a teraz výsledok, t. j. vzorec molekuly kokaínu:

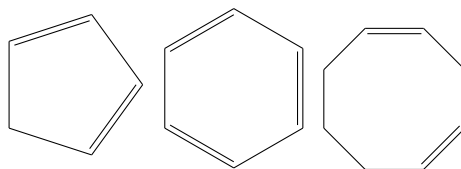


4. Cyklické zlúčeniny

Balíček `ChemFig` disponuje nástrojmi, pre jednoduché kreslenie n -uholníkov. Základná syntax tohto príkazu je `\chemfig{*n(<molekula>)}`, kde `<molekula>` predstavuje kód zloženia príslušnej molekuly v duchu vyššie uvedených pravidiel. Pre ilustráciu si ukážme niekoľko n -uholníkov:

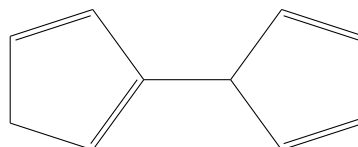
```
\chemfig{*5(-----)}
\chemfig{*6(=-----)}
\chemfig{*8(-----)}

```



Rovnako ako u acyklických zlúčenín, aj u vzorcov cyklických zlúčenín môžeme vykresliť vetvenie molekuly. Situáciu si ilustrujeme na príklade:

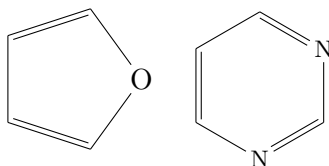
```
\chemfig{*5(=
  (-[0]*5(-----))---)}
```



²V anglickom originále hook.

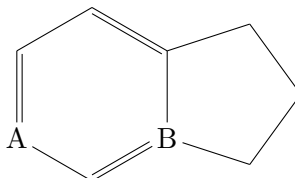
Do jednotlivých vrcholov je možné vložiť ľubovoľný text, čo je významné najmä pre potreby vykreslenia heterocyklických zlúčenín. Opäť ilustrujme na príklade furánu a pyrimidínu:

```
\chemfig{*5(=O--)}
\hspace{0.5cm}
\chemfig{*6(-N=-N=-)}
```



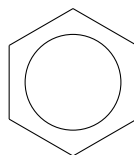
Len mierna je odlišnosť spájania viacerých cyklov v rámci jednej molekuly. Je potrebné špecifikovať vrchol, v ktorom sa začína pripojený cyklus. Nasledujúci príklad ilustruje pripojenie päťčlánkoveho cyklu na tretom atóme šesťčlánkoveho cyklu:

```
\chemfig{A*6(=B*5(-----)===)}
```



Pre úplnosť symbolov používaných vo vzorcoch cyklických zlúčenín si ešte ukážme syntax pre vykreslenie benzénového jadra:

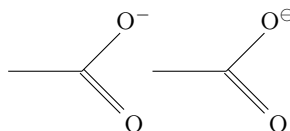
```
\chemfig{**6(-----)}
```



5. Zobrazovanie iónov

Príkaz `\chemfig` využíva matematické prostredie $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -u, čo umožňuje aj jednoduchú sadzbu iónov. Treba však mať na pamäti, že pre zobrazenie záporného náboja treba znamienko mínus vždy uzavrieť do skupinových zátvoriek, aby nedošlo k zámene so symbolom jednoduchej väzby. Pokiaľ ste puritánmi, je možné znamienka plus a mínus vysádzať uzavreté do krúžkov pomocou príkazov `\ominus` a `\oplus`. Rozdiel ilustruje nasledujúca ukážka:

```
\footnotesize \chemfig{(-[1]O^{-})=[7]O}
\hspace{1em}
\footnotesize \chemfig{(-[1]O^{\ominus})=[7]O}
```



6. Rovnice chemických reakcií

Pre účely zápisu chemických reakcií v podobe rovníc prináša balíček ChemFig dva nové príkazy. Sú to `\chemsign` a `\chemrel`. Príkaz `\chemsign` má jeden voliteľný argument, ktorý udáva veľkosť nezlomiteľnej medzery, ktorou je na oboch stranách oddelené znamienko, zadávané ako povinný parameter príkazu. Implicitná hodnota je medzera vo veľkosti 0.5em. Príkaz `\chemrel` má dva nepovinné parametre, kde prvý umožňuje umiestniť popis nad znamienko relácie a druhý parameter pod znamienko relácie. Povinným parametrom je potom symbol relácie, pričom sa zadáva v syntaxi bežnej pre TikZ. Možné typy šípok sú ilustrované v tabuľke 2.

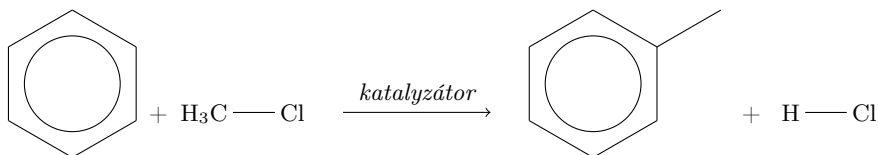
Kód	Výsledok
<code>A\chemrel{->}B</code>	A \longrightarrow B
<code>A\chemrel{<-}B</code>	A \longleftarrow B
<code>A\chemrel{<->}B</code>	A \longleftrightarrow B
<code>A\chemrel{<>}B</code>	A \rightleftharpoons B
<code>A\chemrel{->,red,thick}B</code>	A $\xrightarrow{\text{red,thick}}$ B

Tabuľka 2. Ukážky typov šípok v chemickej rovnici

Na ilustráciu ich použitia si ukážeme dve chemické reakcie. Najskôr zdrojový kód:

```
\setchemrel{0pt}{1.2em}{6em}
\chemfig{*6(-----)}\chemsign+\chemfig{H_3C-Cl}
\chemrel[\itshape\footnotesize katalyzátor]{->}
\chemfig{*6(---(-)---)} \chemsign+ \chemfig{H-Cl}
```

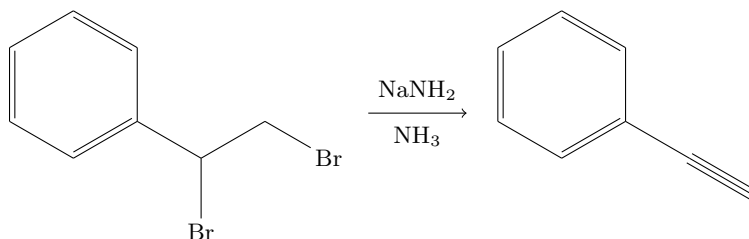
a výsledný zápis katalytickej reakcie:



Ako druhú ukážku si uvedieme rovnicu syntézy fenylacetylénu. najskôr opäť zdrojový kód rovnice:

```
\chemfig{*6(==*6(-(-Br)-(-Br))--=)}
\chemrel[\chemfig{NaNH_2}][\chemfig{NH_3}]{->}
\chemfig{*6(=-(~)-==)}
```

a po ňom výsledný zápis reakcie:



7. Záver

V článku sme si predstavili základné prvky balíčka **ChemFig**, ktoré umožňujú zvládnuť sadzbu dokumentov s obsahom materiálu z oblasti chémie. Podané základné informácie akiste nie sú vyčerpávajúce a chemický profesionál by iste hľadal mnohé iné prvky. Postačí však pre základnú orientáciu a ako základ k samostatnému rozširujúcemu štúdiu manuálu [9].

Literatúra

- [1] BLAŠKO, R.: *L^AT_EX nie je farba na maľovanie*. Zborník príspevkov medzinárodnej konferencie OSSConf 2010, 1.–4. júla 2010, Žilina, str. 43–52. ISBN 978-80-970457-0-8.
- [2] BLAŠKO, R.: *L^AT_EX nie je farba na maľovanie, ale na písanie*. Zborník príspevkov medzinárodnej konferencie OSSConf 2011, 6.–9. júla 2011, Žilina, str. 223–236. ISBN 978-80-970457-1-5.
- [3] BLAŠKO, R.: *Nebojme sa obrázkov v L^AT_EX-u*. Zborník príspevkov medzinárodnej konferencie OSSConf 2011, 2.–4. júla 2012, Žilina, str. 79–85. ISBN 978-80-970457-2-2.
- [4] KOPKA, H. – DALY, P. W.: *L^AT_EX – podrobný príručce*. Computer Press, Brno, 2004. ISBN 80-722-6973-9.
- [5] KOZUBÍK, A.: *Naučím vás kresliť alebo predstavenie balíčka TikZ*. Zborník príspevkov medzinárodnej konferencie OSSConf 2011, 2.–4. júla 2012, Žilina, str. 91–96. ISBN 978-80-970457-2-2.
- [6] RYBIČKA, J.: *L^AT_EX pro začátečníky*. KONVOJ, Brno, 2003. ISBN 80-7302-049-1.
- [7] RYBIČKA, J. – ČAČKOVÁ, P. – PŘICHYSTAL, J.: *Průvodce tvorbou dokumentů*. NAKLADATELSTVÍ MARTIN STRÍŽ, Bučovice, 2011. ISBN 80-7302-049-1.
- [8] STRÍŽ, P.: *Sazba v T_EXu a kresba v METAPOSTu*. NAKLADATELSTVÍ MARTIN STRÍŽ, Bučovice, 2011. ISBN 978-80-87106-51-8.
- [9] TELLESCHEA, CH.: *ChemFig: A T_EX package for drawing molecules*. http://www.ctan.org/pkg/chemfig/chemfig_doc_en.pdf.

Kontaktná adresa

RNDr. Aleš Kozubík, PhD., Katedra matematických metód, Fakulta riadenia a informatiky, Žilinská univerzita, Univerzitná 8215/1, 010 26 Žilina, Slovenská Republika,
E-mailová adresa: alesko@frcatel.fri.uniza.sk