

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Окружение для набора химических уравнений</b>	<b>2</b>
1.1	Параметры настройки окружения <code>chemeq</code> . . . . .	4
1.2	Известные Баги . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Другие команды</b>	<b>7</b>
<b>3</b>	<b>Примеры форматирования</b>	<b>10</b>

# 1 Окружение для набора химических уравнений

```
\begin{chemeq}... \end{chemeq}
\begin{chemeq*}... \end{chemeq*}
```

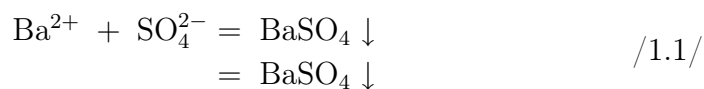
Служат для набора выключенных формул. Форма со звёздочкой не пораждаёт номера. Ниже дано несколько примеров того, как работают эти окружения. Все они используют математическую моду, где по умолчанию стоит прямой шрифт. Это не влияет на набор математических формул, которые продолжают набираться традиционным курсивным шрифтом, и имеют отдельную нумерацию, что иллюстрирует уравнение (1.1). Внутри окружения `chemeq` можно использовать команду `\label{}`. Для выравнивания рекомендуется окружение `array`. Длина `\arraycolsep` при этом равна нулю, поэтому лишнего пространства не возникнет.

```
\restorearray[]
```

Команда `\restorearray[]` восстанавливает (точнее приравнивает к `3pt`) старое значение длины `\arraycolsep`. В необязательном аргументе можно указать другую длину. *Не рекомендуется* применять для выравнивания окружение `split`. Примеры выравнивания можно видеть в уравнениях `/1.1/`, `/3.1/`.

```
\CH{...}
```

Команда `\CH{...}` — строчный аналог окружения `chemeq`. Пример: `\CH{H_3O^+}` —  $\text{H}_3\text{O}^+$ . Команда не может употребляться в математической моде!



$$\int \frac{1}{x} dx = \ln x \quad (1.1)$$

Уравнение /1.1/ набрано следующим образом:

```
\begin{chemeq}\label{chem:test}
\begin{array}{cc}
Ba^{2+}\pl SO_4^{2-} & \eq BaSO_4\downarrow \\
& \eq BaSO_4\downarrow
\end{array}
\end{chemeq}
```

Команды `\pl`, `\eq` описаны ниже.

<pre>\begin{chemmultline}...\end{chemmultline} \lline{} \cline{} \rline{}</pre>
---

Окружение `\begin{chemmultline}...\end{chemmultline}` можно употреблять внутри окружения `\begin{chemeq}...\end{chemeq}`. Внутри него выравнивание осуществляется командами `\lline{}`, `\cline{}`, `\rline{}` Содержимое которых будет выровнено соответственно по левому краю, по центру и по правому краю. Пример:

H<sub>2</sub>O

H<sub>2</sub>O

/1.2/

H<sub>2</sub>O

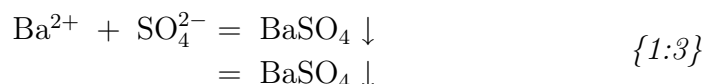
Код:

```
\begin{chemeq}
\begin{chemmultline}
\lline{H_2O} \cline{H_2O} \rline{H_2O}
\end{chemmultline}
\end{chemeq}
```

## 1.1 Параметры настройки окружения `chemeq`

```
\setchemdelim[in]{open}{close}
\setchemlabelfont{font}
```

В номере химического уравнения можно задать символ разделяющий номер главы и номер уравнения, открывающий символ и закрывающий символ, они устанавливаются командой `\setchemdelim[in]{open}{close}`. По умолчанию задано `\setchemdelim[.]{/}{/}`. Команда `\setchemlabelfont{font}` позволяет задать шрифт для отображения номера уравнения. Например:



Уравнение `{1:3}` предваряется командами

```
\setchemdelim[:]{\}{\}
\setchemlabelfont{\itshape}
```

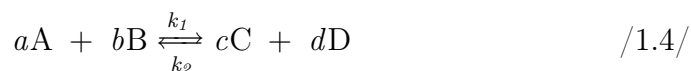
```
\setchemnumberpos{\eqno or \leqno}
```

Команда `\setchemnumberpos{}` может принимать два значения: либо `\eqno`, либо `\leqno`, в зависимости от этого номер уравнения располагается либо справа, либо слева соответственно. Значение по умолчанию — `\eqno`.

```
\chref{...}
```

Ссылки на уравнения можно задавать через стандартную команду `\ref{}`, но она не будет учитывать заданного форматирования номера химического уравнения. Вместо неё рекомендуется использовать команду `\chref{}`: ссылка через `\ref{}` — 1.1; ссылка через `\chref{}` — /1.1/.

Периодически бывает необходимость, тем не менее, набирать математические уравнения (с математической нумерацией) в химическом стиле, и бывает необходимость применения знаков в математическом стиле в химическом уравнении. Пример:



$$K_{\text{равн.}} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad (1.2)$$

Эти уравнения набраны следующим образом:

```
\begin{chemeq}\label{chem:ABCD}
\mit{a}A\pl \mit{b}B \sign{\xrlarrow{\mit{k}_1}{\mit{k}_2}}
\mit{c}C\pl \mit{d}D
\end{chemeq}

\begin{equation}\label{eq:Kp}
K_{\text{равн.}}=
\frac{\mathrm{[C]}^c\cdot \mathrm{[D]}^d}
{\mathrm{[A]}^a\cdot \mathrm{[B]}^b}
\end{equation}
```

```
\mit{}
```

`\mit{}` — сокращение для `\mathit{}`. Команды `\sign`, `\pl`, `\eq`, `\xrlarrow` описаны ниже.

Обратите внимание на индексы  $k_1$  и  $k_2$  в уравнении /1.4/: команда `\mathit{}` применена здесь некорректно, так как она переключает шрифт не только букв, но и цифр (ср. уравнения /1.4/ и /1.5/).

```
\mathversion{chemistry} \cheqno
```

Команда `\mathversion{chemistry}` употребляется перед математическим окружением, которое должно набираться в химическом стиле (прямой шрифт), её действие желательно ограничивать командными скобками, например `\begingroup...\endgroup`. Команда `\cheqno` порождает номер химического уравнения и должна употребляться внутри скобок типа `\[...\]`. Таким образом, формулы /1.4/ и (1.2) можно переписать следующим образом:



$$K_{\text{равн.}} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad (1.3)$$

Код:

```
\[
a\mathrm{A}\pl b\mathrm{B} \sign{\xrightarrow{k_1}{k_2}}
c\mathrm{C}\pl d\mathrm{D} \cheqno \label{chem:ABCD2}
\]
```

```
\begingroup
\mathversion{chemistry}
\begin{equation}
\mit{K}_{\text{равн.}}=
\frac{[C]^{\mit{c}}\cdot [D]^{\mit{d}}}{
[A]^{\mit{a}}\cdot [B]^{\mit{b}}}
\end{equation}
\endgroup
```

Команды `\sign`, `\pl`, `\eq`, `\xrightarrow` описаны ниже.

## 1.2 Известные Баги

<code>\bugdiv</code>
----------------------

Известен БАГ: как в команде `\CH{...}`, так и в окружении `chemeq` неправильно интерпретируется символ «/» Вместо него можно применить команду `\bugdiv`.

Греческие буквы оказались недоступны в химической матверсии. Чтобы защитить их, пришлось переопределить все эти команды. Поэтому греческие буквы теперь ВСЕГДА употребляются нормальной матверсии. Следствие: после команды `\mathversion{bold}` и после директивы `\boldmath` греческие буквы всё равно останутся нормальной насыщенности. Кроме того, для нормального масштабирования греческих букв в индексах пришлось применить команду из пакета `amsmath`. Теперь пакет `amsmath` *необходим* для функционирования греческих букв.

## 2 Другие команды

`\?`

Промежуток размером в 0.1 em. Рекомендуется употреблять между катионами и анионами, и вообще везде, где может быть полезна подобная разбивка. Действует как в текстовой, так и в математической модах.

Сравните	HCl	CuSO <sub>4</sub>	-CHCH <sub>2</sub>
	HCl	CuSO <sub>4</sub>	-CHCH <sub>2</sub>

`\sign{...}`   `\pl`   `\eq`

Команда `\sign{...}` работает в матмоде и, соответственно, внутри команды `\CH{...}`, её аргументом является какой-нибудь знак, вокруг которого она производит отбивку `\;`. Команды `\pl` и `\eq` определены как `\sign{+}` и `\sign{=}` соответственно.

`\xrlarrow{}{}`   `\xlrarrow{}{}`

Эти две команды предназначены для набора стрелок направленных в разные стороны. Пример употребления одной из команд можно было видеть в уравнении /1.4/. Ограничение: команда требуют загруженных пакетов `amsmath` и `ifthen`.

$\begin{array}{c} \xrightarrow{+\text{H}_2\text{O}} \\ \xleftarrow{-\text{H}_2\text{O}} \end{array}$	$\begin{array}{c} \xleftarrow{-\text{H}_2\text{O}} \\ \xrightarrow{+\text{H}_2\text{O}} \end{array}$
$\text{\xrlarrow{+H}_20}{-H}_20\text{\}$	$\text{\xrlarrow{-H}_20}{+H}_20\text{\}$

Кроме них удобно употреблять непосредственно команды пакета `amsmath` `\xrightarrow[ ]{ }` и `\xleftarrow[ ]{ }`

$\text{\xrightarrow[ ]{+\mit{t}\grad[ ]}}{-H}_20\text{\}$	$\begin{array}{c} \xrightarrow{-\text{H}_2\text{O}} \\ +t^\circ \\ \xleftarrow{+\text{H}^+} \\ k_n \end{array}$
$\text{\xleftarrow[ ]{\mit{k}_n}{+H^+}\}$	

`\grad[]`

Команда `\grad[]` вставляет символ градуса и ставит за ним по умолчанию символ `C`. Требуется пакет `ifthen`. Если нужен другой символ, или символ не нужен вообще, то это можно указать в необязательном аргументе. Пример:

угол 90° называется прямым	угол 90\grad[] наз..
ниже 0 °C вода твёрдая	ниже 0\grad\ вод..
температура тела — 99 °F	..ела --- 99\grad[F]
ниже 0° Цельсия...	ниже 0\grad[] Цельсия\ldots

Отбивки у символа градуса зависят от наличия символа размерности. Так в последней строчке отбивка перед градусом, по типографским правилам, не положена.

`\Charrow[length]{r or l or rl or lr}{up}{down}`

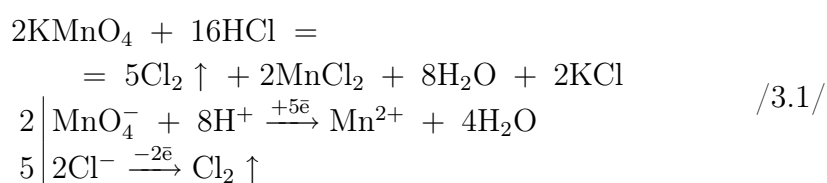
Ещё один макрос для рисования химических стрелок. Требуется пакет `ifthen`, `calc`. Первый, необязательный, аргумент — длина стрелки в отсутствии индексов, по умолчанию — 20pt. Если аргумент не задан, длина выравнивается по наибольшему индексу. Если аргумент задан, проверка на длину индекса не осуществляется, поэтому лучше не пытаться задавать в нём длины меньше длины индекса. Обязательные аргументы — первый — тип стрелки. Допустимые значения: `r`, `l`, `rl`, `lr`, объявляют направление соответственно направо, налево, напра-налево и нале-направо. Последние два аргумента — индексы над и под стрелками. Индексы набираются в текстовой моде, но в них можно объявить и матмоду через `$..$`. Сама команда может употребляться в любой моде. Пример:

$\xrightarrow{+H_2O}$	<code>\CH{\Charrow{rl}{\${+H_2O}\$}{\textsc{text}}}</code>
$\xleftarrow{\text{ТЕХТ}}$	<code>\Charrow{lr}{\${\sin(\alpha)^2 + \cos(\alpha)^2 = 1}}</code>
$\xrightarrow{\sin(\alpha)^2 + \cos(\alpha)^2 = 1}$	<code>\Charrow{lr}{\${\sin(\alpha)^2 + \cos(\alpha)^2 = 1}\$}</code>
$\xrightarrow{k_a}$	<code>\Charrow[50]{r}{\${k_a}\$}</code>
$\xleftarrow{\sin(\alpha)^2 + \cos(\alpha)^2 = 1}$	<code>\Charrow[50]{l}{\${\sin(\alpha)^2 + \cos(\alpha)^2 = 1}\$}</code>
$\longrightarrow$	<code>\Charrow{r}{}</code>



В первой строке команда вложена в команду `\CH{..}`. Что сказалось на форматировании во вложенной матмоде. Старайтесь избегать ситуации описанной в предпоследней строке. По документу не должно быть разносортцы, не смешивайте в одном документе команды типа `\Charrow` и `\xrightarrow` или `\lrrarrow`.

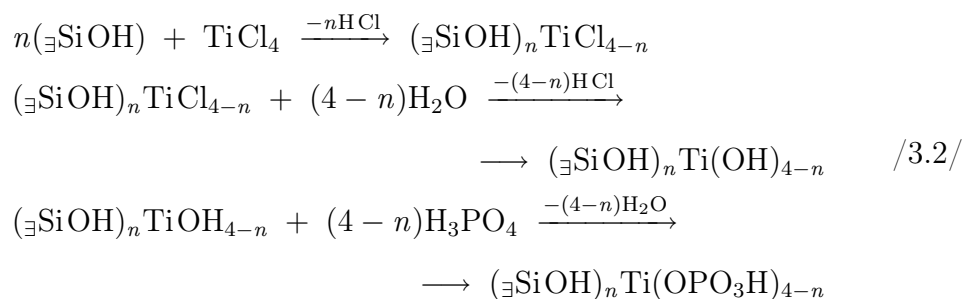
### 3 Примеры форматирования



Код:

```
\begin{chemeq}\label{chem:redox}
\begin{array}{l}
  2\text{MnO}_4 \ \pl 16\text{HCl} \ \eq \ \
  \qqquad \eq 5\text{Cl}_2\uparrow \ \pl 2\text{MnCl}_2 \ \pl 8\text{H}_2\text{O} \ \pl 2\text{KCl}\ \
  \begingroup
  \restorearray
  \begin{array}{r|l}
    2 & \text{MnO}_4^- \ \pl 8\text{H}^+ \ \xrightarrow{+5\bar{e}} \text{Mn}^{2+} \ \pl 4\text{H}_2\text{O}\ \
    5 & 2\text{Cl}^- \ \xrightarrow{-2\bar{e}} \text{Cl}_2\uparrow
  \end{array}
  \end{array}
\end{chemeq}
```

Здесь внешний `array` употреблён для рассечения строк, а отступ сделан при помощи команды `\qqquad`. Верхняя строчка слегка (на 3pt) выступает влево относительно последних двух. Это легко исправить, поставив команду `\restorearray` до начала внешнего массива `array`. Командные скобки `\begingroup... \endgroup` употреблённые для того, чтобы ограничить действие команды `\restorearray`, в данном конкретном случае избыточны.



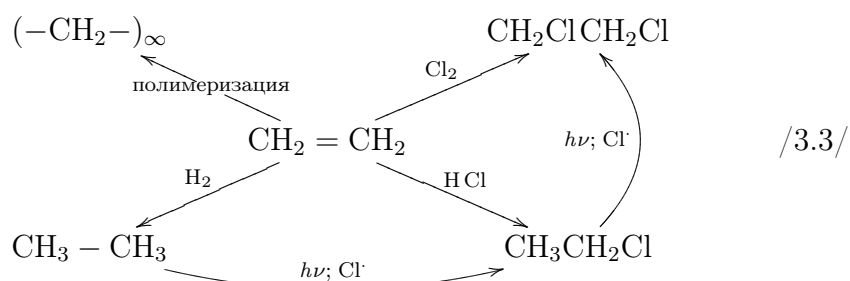
Код:

```

\begin{chemeq}
\begin{chemmultline}
\Lline{\mit{n}(\exists\text{Si}\?OH)\p1\text{Ti}\?Cl_4}
\sign{\xrightarrow{-\mit{n}H\?Cl}}
(\exists\text{Si}\?OH)_\mit{n}\text{Ti}\?Cl_{4-\mit{n}}}
\Lline{(\exists\text{Si}\?OH)_\mit{n}\text{Ti}\?Cl_{4-\mit{n}}}\p1(4-\mit{n})H_2O}
\sign{\xrightarrow{-(4-\mit{n})H\?Cl}}}
\Rline{\sign{\longrightarrow}
(\exists\text{Si}\?OH)_\mit{n}\text{Ti}(\text{OH})_{4-\mit{n}}}}
\Lline{(\exists\text{Si}\?OH)_\mit{n}\text{Ti}\?OH_{4-\mit{n}}}\p1(4-\mit{n})H_3PO_4}
\sign{\xrightarrow{-(4-\mit{n})H_2O}}
(\exists\text{Si}\?OH)_\mit{n}\text{Ti}(\text{OPO}_3\text{H})_{4-\mit{n}}}}
\end{chemmultline}
\end{chemeq}

```

Сложные схемы можно чертить при помощи коммутативных диаграмм, однако пакет `xypic` предоставляет значительно больше возможностей.



Код:

```

\begin{chemeq}
\begin{chemmultline}
\хmatrix{%
(-CH_2-)_\infty \&\& CH_2Cl\?CH_2Cl\
&CH_2=CH_2\ar[u1] | -{полимеризация}\ar[ur]^{\{Cl_2\}\ar[dl]_{H_2}}
\ar[dr]^{\{H\?Cl\} \
CH_3-CH_3\ar@/_3ex/[rr]^{\mit{h}\nu;\ ;Cl^{\cdot}}
&\&CH_3CH_2Cl\ar@/_2em/[uu]^{\mit{h}\nu;\ ;Cl^{\cdot}}
}
\end{chemmultline}
\end{chemeq}

```

Назначение окружения `\begin{chemmultline}... \end{chemmultline}` в этом примере — центрировать номер формулы. Без них номер поднимается на верхнюю строчку.