

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Окружение для набора химических уравнений</b>	<b>2</b>
1.1	Параметры настройки окружений <code>chemeq</code> и <code>chemmultline</code>	4
1.2	Известные Баги . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Другие команды</b>	<b>8</b>
2.1	Отбивки . . . . .	8
2.2	Стрёлки . . . . .	8
2.2.1	На базе <code>\xright(left)arrow</code> пакета <code>amsmath</code> . . .	8
2.2.2	На базе окружения <code>picture</code> . . . . .	9
2.2.3	На базе пакета <code>xy-pic</code> . . . . .	10
2.3	Символы . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Примеры форматирования</b>	<b>13</b>

# 1 Окружение для набора химических уравнений

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

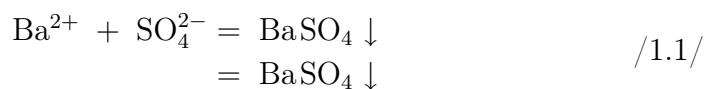
Служат для набора выключенных формул. Форма со звёздочкой не пораждаёт номера. Ниже дано несколько примеров того, как работают эти окружения. Все они используют математическую моду, где по умолчанию стоит прямой шрифт. Это не влияет на набор математических формул, которые продолжают набираться традиционным 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 Ba\?SO_4\downarrow \\
& \eq Ba\?SO_4\downarrow
\end{array}
\end{chemeq}
```

Команды `\pl`, `\eq` описаны ниже.

```
\begin{chemmultline}... \end{chemmultline}
\lline{} \cline{} \rline{}
```

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}
```

Упрощённым вариантом этой команды является команда

```
\chemalignment []{text}
```

необязательный аргумент управляет выравниванием и может принимать значения `r`, `c`, или `l` (по умолчанию — `c`).

Пример:

$\text{H}_2\text{O}$  /1.3/

$\text{H}_2\text{O}$  /1.4/

$\text{H}_2\text{O}$  /1.5/

Код:

```
\chemalignment[l]{H_2O}
```

```
\chemalignment{H_2O}
```

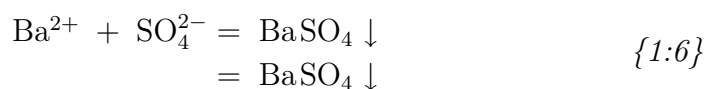
```
\chemalignment[r]{H_2O}
```

Варианта команды со звёздочкой пока не существует.

## 1.1 Параметры настройки окружений `chemeq` и `chemmultline`

```
\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 `{1:6}` 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`.

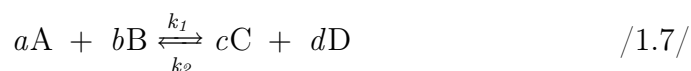
```
\chref{...}
```

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/.

```
\chemskip \chemwidth
```

Команда `\chemskip` несёт значение множителя межстрочного интервала внутри окружения `chemmultline`, по умолчанию — 1.4. Его можно переопределить командой `\renewcommand`. Например для плотного расположения строк можно записать в преамбуле `\renewcommand{\chemskip}{1}`. Командная длина `\chemwidth` соответствует ширине бокса в котором идёт набор уравнений в окружении `chemmultline` и команде `\chemalignment`.

Периодически бывает необходимость набирать математические уравнения (т. е. с математической нумерацией) в химическом стиле, и бывает необходимость применения знаков в математическом стиле в химическом уравнении. Для такого смешения стилей возможно два пути: либо применять специальные команды форматирования к символам, чьё оформление выходит за рамки текущего стиля, либо употребить «чужой стиль» но «свою» нумерацию. 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\mathrm{[D]}^d}
  {\mathrm{[A]}^a\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 /1.7/: команда `\mathit{}` применена здесь некорректно, так как она переключает шрифт не только букв, но и цифр (ср. уравнения /1.7/ и /1.8/).

```
\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 /1.7/ 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:

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

```
\begingroup
\mathversion{chemistry}
\begin{equation}
  \mit{K}_{\text{равн.}}=
  \frac{[C]^{\mit{c}}\mathrm{[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 берутся из 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

### 2.1 Отбивки

```
\?
```

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 CuSO4 -CHCH2 |
| HCl CuSO4 -CHCH2 |
```

```
\sign{...} \pl \eq
```

Команда `\sign{...}` работает в матмоду 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.

### 2.2 Стрёлки

#### 2.2.1 На базе `\xright(left)arrow` пакета `amsmath`

```
\xrlarrow{}{} \xllarrow{}{}
```

Эти две команды предназначены для набора стрелок направленных в разные стороны. Пример употребления одной из команд можно было видеть в уравнении /1.7/. Ограничение: команда требуют загруженных пакетов `amsmath` и `ifthen`.

```
|          +H2O          -H2O          |
|          <=>          <=>          |
|          -H2O          +H2O          |
| $\xrlarrow{+H_20}{-H_20}$ $\xrlarrow{-H_20}{+H_20}$ |
```

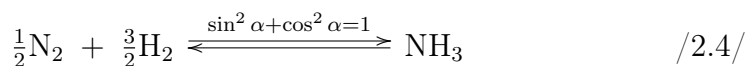
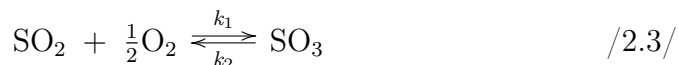
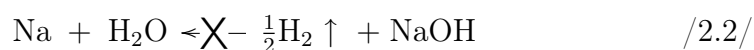
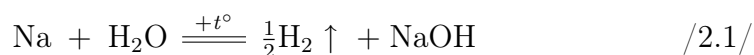




2.2.3 На базе пакета *xu-pic*

`\xuchararrow[1..4]{type(r,l,r1,lr,=,rx,lx,r1x,lrx,=x)}{up}{down}`

Команда `\xucharrow` делает тоже самое, за исключением того, что не умеет рисовать стрелок заданной длины. Длина стрелок квантуется, один квант —  $\approx 24\text{pt}$ . Первый аргумент — количество квантов (по умолчанию 1). Значение параметров `r`, `l`, `r1`, `lr` то же; новый параметр `=` — рисует знак равенства. Наличие `x` — перечёркнутые стрелки. Команда может употребляться в любой моде, её аргументы будут восприниматься как набранные в матмоде. Команда требует пакетов *xu-pic* и *ifthen* Примеры:



Код:

```
\begin{chemeq}
Na\pl H_2O\sign{\xucharrow{=}{+\mit{t}\grad[]}{}}
\tfrac{1}{2}H_2\uparrow\pl NaOH
\end{chemeq}
```

```
\begin{chemeq}
Na\pl H_2O\sign{\xucharrow{lx}{}{}} \tfrac{1}{2}H_2\uparrow\pl
NaOH
\end{chemeq}
```

```
\begin{chemeq}
SO_2\pl \tfrac{1}{2}O_2
```

```
\sign{\xycharrow{rl}{\mit{k}_1}{\mit{k}_2}} SO_3
\end{chemeq}
```

```
\begin{chemeq}
\tfrac{1}{2}N_2\text{pl} \tfrac{3}{2}H_2
\sign{\xycharrow[3]{rl}{\sin^2\alpha+\cos^2\alpha=1}{}} NH_3
\end{chemeq}
```

<code>\XYup \XYdelta \arXrow</code>
-------------------------------------

Параметры настройки: длина `\XYup` — поднятие стрелки над базовой линией (по умолчанию `0pt`). Длина `\XYdelta` — зазор между стрелками (но не в знаке равенства!), по умолчанию `0.5ex`. Команда `\arXrow` — символ употребляемый для перечёркивания стрелок. По умолчанию `\mbox{\Large\textsf{X}}`. В командах рисующих две разнонаправленные стрелки символ помещается в `\raisebox` и потому интерпретируется как текстовый, а в остальных случаях как математический. Поэтому вводя пользовательский символ надо помещать его внутрь `\mbox`. Например:  $\rightleftharpoons\beta\rightleftharpoons$  получено так:

```
\begin{group}
\renewcommand{\arXrow}{\mbox{\$beta\$}}
\xycharrow[2]{rlx}{}{}
\end{group}
```

Внешние командные скобки «не выпускают» переопределение, повторный вызов команды `\xycharrow[2]{rlx}{}{}` вне скобок приводит к стандартному результату:  $\rightleftharpoons X \rightleftharpoons$ . Обратите внимание: пробел за командой игнорируется, поэтому он вставлен после закрывающихся скобок.

## 2.3 СИМВОЛЫ

<code>\grad[]</code>
----------------------

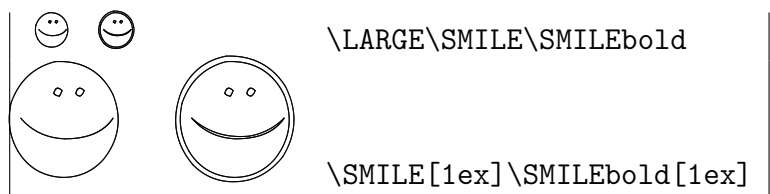
Команда `\grad[]` вставляет символ градуса и ставит за ним по умолчанию символ `C`. Требуется пакетов `ifthen` и `amsmath`. Если нужен другой символ, или символ не нужен вообще, то это можно указать в необязательном аргументе. Пример:

угол 90° называется прямым	угол 90\grad[] наз..
ниже 0 °С 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.

```
\SMILE[] \SMILEbold[] ☺ ☺
```

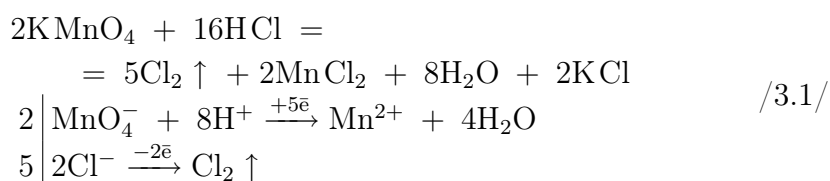
Рисует улыбку. Размер улыбки соответствует текущему шрифту. При необходимости можно задать его в необязательном аргументе. Размер улыбки будет в девять раз больше (шире ☺) указанной длины. По умолчанию 0.08em.



Хорошо видно, что жирный смайл состоит из двойных линий, а потому его лучше не увеличивать чрезмерно.

*Smile Italic under construction*

### 3 Примеры форматирования



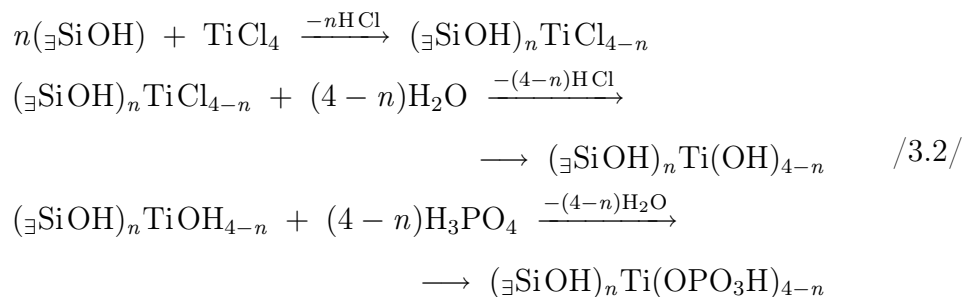
Код:

```

\begin{chemeq}\label{chem:redox}
\begin{array}{l}
 2K\?MnO_4 \pl 16H\?Cl \eq \\\
 \quad \eq 5Cl_2\uparrow \pl 2Mn\?Cl_2 \pl 8H_2O \pl 2K\?Cl\ \\
 \begin{array}{l}
 \end{array} \\
 \restorearray \\
 \begin{array}{r|l}
 2 & MnO_4^- \pl 8H^+ \xrightarrow{+5\bar{e}} Mn^{2+} \pl 4H_2O \\
 5 & 2Cl^- \xrightarrow{-2\bar{e}} Cl_2\uparrow
 \end{array} \\
 \end{array} \\
 \end{group}
 \end{array}
 \end{chemeq}

```

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



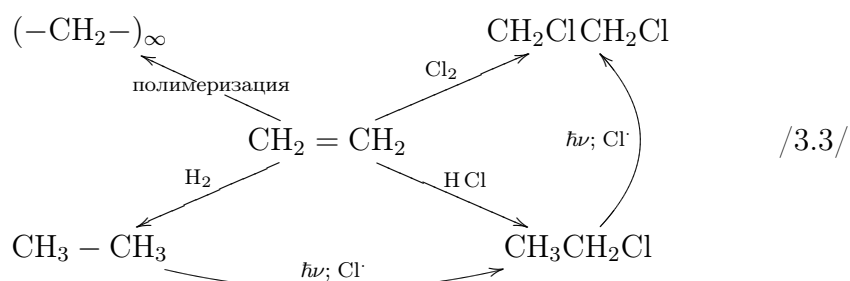
Код:

```

\begin{chemeq}
\begin{chemmultline}
\Lline{\mit{n}(\exists Si\?OH)\pl Ti\?Cl_4
\sign{\xrightarrow{\mit{n}H\?Cl}}
(\exists Si\?OH)_\mit{n}Ti\?Cl_{4-\mit{n}}}
\Lline{(\exists Si\?OH)_\mit{n}Ti\?Cl_{4-\mit{n}}\pl (4-\mit{n})H_2O
\sign{\xrightarrow{-(4-\mit{n})H\?Cl}}}
\Rline{\sign{\longrightarrow}
(\exists Si\?OH)_\mit{n}Ti(OH)_{4-\mit{n}}}
\Lline{(\exists Si\?OH)_\mit{n}Ti\?OH_{4-\mit{n}}\pl (4-\mit{n})H_3PO_4
\sign{\xrightarrow{-(4-\mit{n})H_2O}}}
\Rline{\sign{\longrightarrow}
(\exists Si\?OH)_\mit{n}Ti(OPO_3H)_{4-\mit{n}}}
\end{chemmultline}
\end{chemeq}

```

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



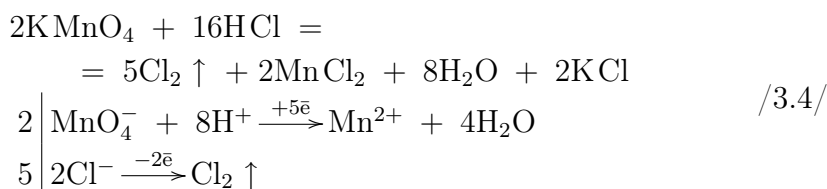
Код:

```

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



Код:

```

\begin{chemeq}\label{chem:xyredox}
\begin{array}{l}
2K\?MnO_4 \pl 16H\?Cl \eq \ \
\qqquad \eq 5Cl_2\uparrow \pl 2Mn\?Cl_2 \pl 8H_2O \pl 2K\?Cl\ \
\begin{group}
\restorearray
\begin{array}{r|l}
2 & MnO_4^- \pl 8H^+ \xycharrow{r}{+5\bar{e}} Mn^{2+} \pl 4H_2O\ \
5 & 2Cl^- \xycharrow{r}{-2\bar{e}} Cl_2\uparrow
\end{array}
\end{group}
\end{array}
\end{chemeq}

```

Уравнение /3.4/ переписано из /3.1/ с употреблением команды \xrightarrow.



**МИНЬКОВСКИЙ  
Евгений  
Михайлович**

Химия поверхности кремнезёма  
Компьютерная  $\pi\text{-}\rho\text{-}\sigma\text{-}\pi$  в ИГХ 2с

939-5257(4638) раб., 336-8921 дом.  
emin@petrol.chem.msu.ru 8-910-4017176

ХИМИК  
Chemist

издательство версия 2.2