

Набор химических формул в системе $\text{\LaTeX} 2_{\epsilon}$ точка зрения практика

Миньковский Е. М.

19 декабря 2001 г.

Аннотация

В статье рассмотрены различные способы набора химических структур в системе $\text{\LaTeX} 2_{\epsilon}$. Статья не носит всеобъемлющего характера. Цель автора состояла лишь в том, чтобы поделиться *реальными* способами набора. Рассмотрены пакеты `bpchem`, `chemarrow`, `chemarr`, `chemcono`, `chemsum`, `хумtex` (\XmTeX), входящие в пакет $\text{MiKTeX} 2.1$ «total» (см. <http://www.miktex.org>)

Содержание

1	Где и зачем встречается химия в тексте?	2
2	Строчные химические формулы, без дополнительных пакетов	2
3	Пакет <code>chemsum</code>	7
4	Пакет <code>chemarrow</code>	9
5	Пакет <code>chemarr</code>	9
6	Пакет <code>bpchem</code>	10
7	Пакет <code>chemcono</code>	11
8	Пакет \XmTeX	12
9	Специализированные программы для набора химических формул, внедрение OLE объектов в документ \LaTeX	15

1 Где и зачем встречается химия в тексте?

В химической литературе встречается два основных вида химических формул. Пользуясь терминами укоренившимися в \TeX 'е для математических формул будем называть их строчными и выключными.

Строчными будем называть формулы, для создания которых не требуется никаких специальных символов и приёмов рисования. Грубо говоря, они не содержат никакой химической *специфики*.

Выключными формулами будем называть формулы требующие специальных «*химических*» приёмов, символов чертежей для своего создания.

Разница, согласитесь, капитальная. Первые без проблем могут быть набраны даже на пишущей машинке, а уж с использованием математической моды \TeX 'а, тем более. И всё же зачем-то пишутся и пишутся пакеты. . .

Здесь описаны простые приёмы набора химических формул с использованием матмоды (для тех, кто ещё сам не догадался как. . . И некоторые пакеты: `brchem`, `chemarrow`, `chemsono`, `chemsum`, \XmTeX . В пакетах могут быть кривизны. Краткое описание пакетов:

`brchem` — предназначен для ввода строчных химических формул с коэффициентами,

`chemarrow` — вводит 13 команд для набора, горизонтальных стрелок в химических уравнениях,

`chemarr` — пакет Хейко Обердиека (Heiko Oberdiek) для той же цели,

`chemsono` — пакет для набора списка химических формул, аналогичен Vi\TeX 'у,

`chemsum` — пакет предназначенный для ввода химических символов из таблицы Менделеева и коэффициентов к ним,

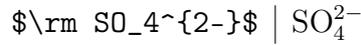
\XmTeX — мощное средство создания *выключных* формул.

2 Строчные химические формулы, без дополнительных пакетов

Очевидно, что большинство строчных формул запросто можно было бы набирать в \TeX 'е так же как и обычный текст, если бы не необходимость использования индексов над и под строкой. Такая возможность реализована в математической моде и вся премудрость заключается лишь в том, чтобы не забывать, что формулы пишутся прямым шрифтом:

`\rm`

Директива переводит шрифт в матмоду в прямой римский.



Обратите внимание: заряд написан непосредственно над коэффициентом, без смещения (SO_4^{2-} — неправильно, SO^{2-}_4 — ещё хуже!) В математической моде есть различные команды для рисования стрелок, двойных, тройных связей и т. п. Некоторые из них приведены в таблице 1.

Ниже на примерах показано как можно использовать математические окружения для набора уравнений и их выравнивания. Так, уравнения (1) и (2) выровнены по знаку равенства и по стрелке. Директива `\arraycolsep=1pt` использована для уменьшения зазоров вокруг стрелки, знак + отбит от окружающего текста при помощи `\;`. Использование пакета `amsmath` в этом случае нежелательно, так как длина стрелки значительно превышает длину знака равенства.



```
\newenvironment{Nothing}{}{}
\newcommand{\pl}{\;+\;}
\newcommand{\eq}{\;=\;}
\newcommand{\?}{\kern.1em}
```

<...skipped...>

```
\begin{Nothing}
\arraycolsep=1pt
\begin{eqnarray}
\rm 2Na \pl 2H_2O \&=& \rm H_2\uparrow \pl Na\?OH \label{eq:min.Na}\end{eqnarray}
```

Таблица 1: Некоторые математические команды, которые можно использовать в наборе строчных формул

—	—	одинарная связь	
+	+		
=	=		
≡	<code>\equiv</code>		
↑	<code>\uparrow</code>		см. ур-ние (1)
↓	<code>\downarrow</code>		см. ур-ние (2)
$\xrightarrow{k_a}$	<code>\xrightarrow{k_a}</code>	см. ур-ния (2) и (3)	

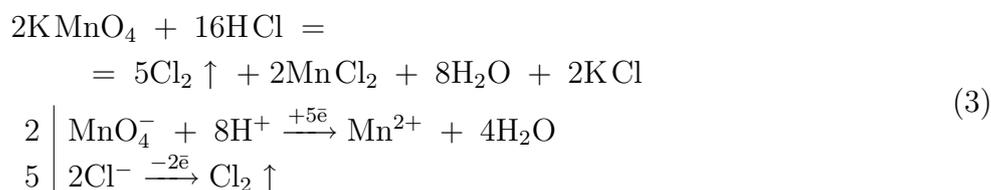
```

\rm Ba^{2+} \pl SO_4^{2-} &\rm\xrightarrow{H_2O}& \rm
Ba\?SO_4\downarrow \label{eq:min.BaSO4}
\end{eqnarray}
\end{Nothing}

```

Смысл окружения `Nothing` заключается в том, чтобы ограничить действие переопределения `\arraycolsep=1pt`. На странице 5 можно встретить ещё один пример употребления этого окружения.

Ещё один пример на выравнивание:



```

\begin{equation}\label{eq:min.redox}
\begin{split}
& \rm 2K\?MnO_4 \pl 16H\?Cl \eq \ \\
& \qqquad \rm \eq 5Cl_2\uparrow \pl 2Mn\?Cl_2 \pl 8H_2O \pl 2K\?Cl\ \\
& \begin{array}{r|l}
2 & \rm MnO_4^- \pl 8H^+ \xrightarrow{+5\bar e} Mn^{2+} \pl 4H_2O \\
5 & \rm 2Cl^- \xrightarrow{-2\bar e} Cl_2\uparrow
\end{array}
\end{split}
\end{equation}

```

Для употребления кириллицы в индексах следует воспользоваться командой `\text` из пакета `amsmath`, которая, в отличие от `\mbox` поможет правильно уменьшить размер шрифта в индексе:

$$\text{\rm S}_{\text{\mbox{уд.}}}\text{\rm S}_{\text{\text{уд.}}} \mid \text{S}_{\text{уд.}} \text{S}_{\text{уд.}}$$

Ниже приведён не короткий пример команды рисующей стрелки. Эта команда использует исключительно возможности базового L^AT_EX'a плюс пакеты `ifthen` и `calc`. Синтаксис команды:

```

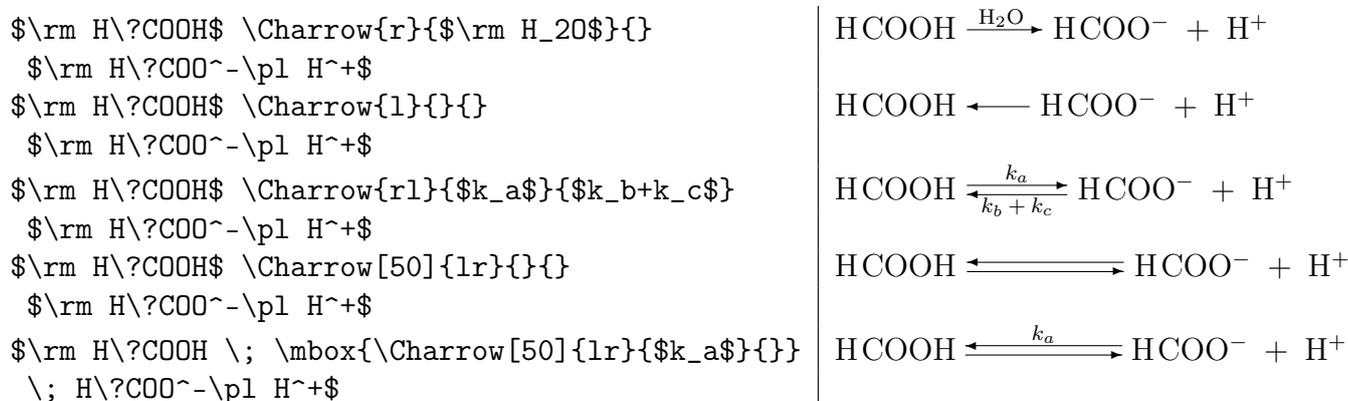
\Charrow[длина]{формат}{надпись1}{надпись2}

```

где *длина* — необязательный параметр — длина стрелки в десятых долях em (примерно 1 pt) размерность не указывается(!) по умолчанию 20*[0.1 em], то есть фактически 2 em; *формат* — вид стрелки; Допустимые значения: `l` — стрелка влево, `r` — стрелка вправо, `lr` — двойная

стрелка налево-направо и `rl` — наоборот; *надпись1,2* — надписи, которые будут помещены над и под стрелками. Если хотя бы один из последних двух аргументов не пуст, длина стрелок подстраивается под него, если оба не пусты — под наибольший. При непустых последних аргументах, высота и глубина строки соответственно изменяются. Команда работает в текстовой моде, для употребления в матмоде должна забираться внутрь команды `\mbox{}`. Если значение факультативного первого аргумента отлично от 20 [0.1 em] (значение по умолчанию), то он имеет приоритет перед длинами строк. То есть именно он отвечает за длину стрелок. Это видно из последней строки в примере. Пробелы до и после команды не игнорируются.

Пример:



А теперь листинг этой величайшей команды (окружение `Nothing` описано выше, на стр. 3. Как и раньше её смысл — произведение пустых командных скобок ограничивающих действие переопределяемых внутри них параметров):

```
%Need \usepackage{ifthen,calc};
%Written by Eugene M. Minkovskii,
%mailto:emin@petrol.chem.msu.ru

%uncomment if this string not above
%\newenvironment{Nothing}{}{}

\newcounter{Carrow}\newcounter{CarrowW}
\newlength{\suparrow}
\newlength{\subarrow}
\newcommand{\Charrow}[4][20]{%
  \settowidth{\suparrow}{\scriptsize #3}%
  \settowidth{\subarrow}{\scriptsize #4}%
  \ifthenelse{\lengthtest{\suparrow>\subarrow}}
```

```

{\setcounter{CarroW}{10+1*\ratio{\suparrow}{.1em}}}
{\setcounter{CarroW}{10+1*\ratio{\subarrow}{.1em}}}%
\ifthenelse{\lengthtest{\suparrow=\subarrow}}
{\ifthenelse{\equal{#3}{}}
{\setcounter{CarroW}{#1}}
{\setcounter{CarroW}{10+1*\ratio{\suparrow}{.1em}}}}
{}%
\ifthenelse{\equal{#1}{20}}
{}
{{\setcounter{CarroW}{#1}}}%
\setcounter{CarroWW}{\value{CarroW}/2}%
\begin{Nothing}%
\unitlength=.1em%
\ifthenelse{\equal{#2}{1}}
{\addtocounter{CarroWW}{1}}%
{\begin{picture}(\value{CarroW},0)
\put(\value{CarroW},3){\vector(-1,0){\value{CarroW}}}
\put(\value{CarroWW},4){\makebox(0,0)[b]{\scriptsize #3}}
\put(\value{CarroWW},2){\makebox(0,0)[t]{\scriptsize #4}}
\end{picture}}
{}%
\ifthenelse{\equal{#2}{r}}
{\addtocounter{CarroWW}{-1}}%
{\begin{picture}(\value{CarroW},0)
\put(0,3){\vector(1,0){\value{CarroW}}}
\put(\value{CarroWW},4){\makebox(0,0)[b]{\scriptsize #3}}
\put(\value{CarroWW},2){\makebox(0,0)[t]{\scriptsize #4}}
\end{picture}}
{}%
\ifthenelse{\equal{#2}{lr}}
{\begin{picture}(\value{CarroW},0)
\put(\value{CarroW},4.5){\vector(-1,0){\value{CarroW}}}
\put(0,1.5){\vector(1,0){\value{CarroW}}}
\put(\value{CarroWW},5.5){\makebox(0,0)[b]{\scriptsize #3}}
\put(\value{CarroWW},.5){\makebox(0,0)[t]{\scriptsize #4}}
\end{picture}}
{}%
\ifthenelse{\equal{#2}{rl}}
{\begin{picture}(\value{CarroW},0)
\put(\value{CarroW},1.5){\vector(-1,0){\value{CarroW}}}
\put(0,4.5){\vector(1,0){\value{CarroW}}}

```

```

        \put(\value{CarroWW},5.5){\makebox(0,0)[b]{\scriptsize #3}}
        \put(\value{CarroWW},.5){\makebox(0,0)[t]{\scriptsize #4}}
\end{picture}}
{ }%
\end{Nothing}%
\settoheight{\suparrow}{\scriptsize #3}%
\settoheight{\subarrow}{\scriptsize #4}%
\addtolength{\suparrow}{.6em}%
\addtolength{\subarrow}{-.1em}%
\makebox[0pt]{\raisebox{0pt}[\suparrow] [\subarrow] {}}%
}

```

Листинг совсем не короткий... но поучительный. Стоит самому написать нечто подобное, чтобы потом не быть зависимым от разных пакетов. К этой идее мы ещё вернёмся...

3 Пакет chemsym

Автор — Mats Dahlgren. <mailto:matsd@physchem.kth.se> (Кстати, создатель пакета `floatflt` — для набора рисунков в оборку — см. рис. 1, стр. 16.) Пакет `chemsym` предназначен для ввода символов химических элементов таблицы Менделеева и индексов к ним.

`\Elm`

Где `Elm` — название элемента. Например:

$$\begin{array}{l|l} \backslash H_2 \backslash \backslash N \backslash_0_2 \text{ HCl } \backslash N \backslash Cl & \text{H}_2\text{O NO}_2 \text{ HCl HCl} \\ \backslash \text{Cu} \backslash \backslash_0_4 \backslash \text{cdot} 5 \backslash H_2 \backslash_0 \backslash \backslash S \backslash_0^{2-} \backslash_4 & \text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O SO}_4^{2-} \end{array}$$

Обратите внимание: Элементы отбиты друг от друга примерно на 0.1em, поэтому запись `\N\Cl` не эквивалентна `HCl`. Команды работают как в текстовой, так и в математической модах, прочные. Символы `^` и `_` образуют верхние и нижние индексы соответственно:

$$\backslash H_3 \backslash_0^{+} \quad | \quad \text{H}_3\text{O}^+$$

Двойные коэффициенты корректно работают только в математической моде!

$$\begin{array}{l|l} \backslash S \backslash_0_4^{2-} & \text{SO}_4^{2-} \quad \text{но} \\ \$ \backslash S \backslash_0_4^{2-} \$ & \text{SO}_4^{2-} \end{array}$$

Поскольку некоторые командные последовательности, такие как `\H`, зарезервированы `ЛТЭХ`’ом, автору пришлось их переопределить. Тем не менее переопределения проделаны не полностью и после установки пакета пользователю придётся отыскать в файле `chemsym.sty` фрагмент:

```

\let\h=\H
\let\Oo=\O
\let\PP=\P
\let\Ss=\S
\let\re=\Re
\let\pr=\Pr

```

И добавить к этим шести строкам ещё три:

```

\let\CC=\C
\let\UU=\U
\let\Noo=\No

```

А затем, соответствующие команды `\newcommand` переименовать в `\renewcommand`.
Если Вам надо определить «свой» элемент, для этого используйте команду:

```
\kemtkn{elm}
```

У команды `\kemtkn` один обязательный аргумент — соответствующий элемент.

```
\nsrrm{elm}
```

передаёт свой аргумент в аргумент `\mathrm`.

```
\nsrrms{elm}
```

делает тоже самое, добавляя отступ за элементом. Кроме того, пакет делает доступной в текстовой моде команду `\cdot`.

Пакет не любит кириллицу в индексах (если она не подключена в математических шрифтах), но масштабирует их правильно:

$$\text{нм}^2 \text{ S}_{\text{уд.}} \mid \text{нм}^2 \text{ S}.$$

Возможны конфликты с окружениями использующими символы `^` и `_`, для борьбы с этим явлением пакет загружается с необязательным аргументом `collision`:

`\usepackage[collision]{chemsym}` опыт показал, что с этим аргументом пакет работает весьма неадекватно.

Выводы: Всё что делает пакет `chemsym` можно сделать самостоятельно, через математическую моду. Для отбивки символов друг от друга можно использовать команду типа: `\newcommand{\?}{\kern.1em}` и вставлять команду `\?` между символами элементов как в текстовой, так и в математической моде. Хотя это является некоторым противоречием с идеологией логического дизайна, эффект будет достигнут аналогичный (главное — не лениться), а устойчивость и совместимость `TEX`'а останутся на прежнем уровне. Кстати сказать, лично мне не нравится идея отбивок внутри иона. По моему должно быть: CuSO_4 (`\rm Cu\?SO_4`), но не CuSO_4 (`\rm Cu\?S\?O_4`). Или в терминах пакета `chemsym` `\Cu\}SO_4` вместо `\Cu\S\O_4`, тоже глаз да глаз нужен — на то и наборщики. . .

4 Пакет chemarrow

Автор — Thomas Schroeder (вероятно Schröder). Пакет предназначен для употребления в химических текстах соответствующих стрелок. Для этой цели вводится 13 команд из которых только одна работает в текстовой моде.

<code>\H_2\O + \H_2\O \chemarrow \H_3\O^+ + \H\O^-</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_2\O + \H_2\O \$\rarrowfill{2em}\$</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_3\O^+ + \H\O^-</code>	
<code>\H_2\O + \H_2\O \$\larrowfill{2em}\$</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \longleftarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_3\O^+ + \H\O^-</code>	
<code>\H_2\O + \H_2\O \$\rightleftharpoonsfill{2em}\$</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_3\O^+ + \H\O^-</code>	
<code>\H_2\O + \H_2\O \$\leftrightharpoonsfill{2em}\$</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \leftrightharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_3\O^+ + \H\O^-</code>	
<code>\H_2\O + \H_2\O \$\autorightleftharpoons{k_a}{k_b}\$</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \xrightleftharpoons[k_b]{k_a} \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_3\O^+ + \H\O^-</code>	
<code>\H_2\O + \H_2\O \$\autoleftrightharpoons{k_a}{k_b}\$</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \xleftarrow[k_b]{k_a} \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_3\O^+ + \H\O^-</code>	
<code>\H_2\O + \H_2\O \$\autorightarrow{k_a}{k_b}\$</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \xrightarrow[k_b]{k_a} \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_3\O^+ + \H\O^-</code>	
<code>\H_2\O + \H_2\O \$\autoleftarrow{k_a}{k_b}\$</code>	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \xleftarrow[k_b]{k_a} \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$
<code>\H_3\O^+ + \H\O^-</code>	

Для рисования стрелок Thomas Schröder создал специальный шрифт. Но создал он его не достаточно качественно. Стрелки пристойно выглядят на распечатке, но с экрана лишь при достаточно большом увеличении. Пользователю опять-таки можно порекомендовать воспользоваться командами основного L^AT_EX'a. (См. описание команды `\Charrow`) на странице 5.

5 Пакет chemarr

Автор — Heiko Oberdiek. В пакете (который ставится по умолчанию в MiKTeX 2.1 в каталог oberdiek) определена одна единственная команда:

`\xrightleftharpoons [под] {над}`

$$\frac{k_b+k_c^2}{k_a} \quad \left| \quad \backslash\mathrm{xrightleftharpoons}[k_a]{k_b+k_c^2}$$

Команда может употребляться как в текстовой так и в математической моде. Оба её аргумента обрабатываются в математическом режиме, поэтому, знаки \$ не должны встречаться внутри аргументов ($\backslash\mathrm{xrightleftharpoons}[\$k_a\$]{\$k_b+k_c^2\$}$ недопустимо), а кириллический шрифт должен защищаться командой $\backslash\mathrm{mbox}\{$. Пакет `chemarr` требует загруженного пакета `amsmath`.

На мой взгляд результат выглядит отвратительно — видно, что автор не химик, ему лишь бы стрелки ставить...

6 Пакет `bpchem`

Автор неизвестен. Команда загружается «не по имени»: $\backslash\mathrm{usepackage}\{\mathrm{chem}\}$ Определяет следующие команды:

$\backslash\mathrm{BPChem}\{\mathrm{string}\}$

Внутри команды $\backslash\mathrm{BPChem}\{$ и только там, могут употребляться команды $_$ и $\^$ — для индексов. Команда $\backslash\mathrm{BPChem}\{$ работает как в матмоде, так и в текстовой, но в матмоде её надо предварять директивой rm , а русские буквы защищать. Никаких «коллизий» с употреблением символов $_$ и $\^$.

$\backslash\mathrm{IUPAC}\{\mathrm{string}\}$

В этой команде дополнительно к $_$ и $\^$ определены команды $\-$ и $\|$. Первая вводит символ «дефис», а вторая указывает допустимые точки переноса:

$\backslash\mathrm{BPChem}\{\mathrm{H}_20\ \mathrm{SO}_4\^{\{2-\}}$	$\mathrm{H}_2\mathrm{O}\ \mathrm{SO}_4^{2-}\ \mathrm{HCl}\ \mathrm{S}_{\mathrm{уд.}}$	определение $\?$ см. стр. 3
$\mathrm{H}\?Cl\ \mathrm{S}_{\mathrm{уд.}}\}$		
$\$\backslash\mathrm{BPChem}\{\mathrm{H}_20\ \mathrm{SO}_4\^{\{2-\}}$	$\mathrm{H}_2\mathrm{O}\mathrm{SO}_4^{2-}\ \mathrm{HCl}\mathrm{S}$	
$\mathrm{H}\?Cl\ \mathrm{S}_{\mathrm{уд.}}\}\$$		
$\$\mathrm{rm}\ \backslash\mathrm{BPChem}\{\mathrm{H}_20\backslash;\mathrm{SO}_4\^{\{2-\}}\backslash;$	$\mathrm{H}_2\mathrm{O}\ \mathrm{SO}_4^{2-}\ \mathrm{HCl}\ \mathrm{S}_{\mathrm{уд.}}$	
$\mathrm{H}\?Cl\backslash;\mathrm{S}_{\backslash\mathrm{text}\{\mathrm{уд.}\}}\}\}\$$		
$\backslash\mathrm{BPChem}\{\mathrm{H}_30\^+ + \mathrm{HO}\^{\{-\}}\}$ или $\mathrm{HO}\^{\{\$-\$}\}$	$\mathrm{H}_3\mathrm{O}^+ + \mathrm{HO}^-$ или HO^-	
$\backslash\mathrm{IUPAC}\{\mathrm{Строка}\backslash\text{-}\mathrm{строка}\dots\backslash\text{-}\mathrm{строка}\}$	Строка-строка-строка-строка-строка	
$\backslash\mathrm{IUPAC}\{\mathrm{Стро}\ \mathrm{ка}\backslash\text{-}\mathrm{стро}\ \mathrm{ка}\dots\backslash\text{-}\mathrm{стро}\ \mathrm{ка}\}$	Строка-строка-строка-строка	

Как видно, команда $\-$ не мешает $\mathrm{L}^{\mathrm{A}}\mathrm{T}_{\mathrm{E}}\mathrm{X}$ 'у самостоятельно находить возможные точки переноса. Кстати, полезно знать что, при использовании пакета `babel` лигатура "=" вставляет дефис при этом разрешает перенос слова во всех допустимых местах кроме места с дефисом. (Вставка дефиса в слово приводит прямо к противоположному эффекту.)

`\CNlabel{str}` `\CNlabelnoref{str}` `\CNref{str}`

Эти команды организуют ссылки на химические формулы. Стиль по умолчанию:
`\textbf{\arabic{\counter}}`

`\CNlabelsub{str1}{str2}` `\CNlabelsubnoref{str1}{str2}` `\CNrefsub{str1}{str2}`

Тоже, добавляется вложенный индекс. Стиль по умолчанию основного счётчика тот же, а вложенный — жирным шрифтом стока 2: `\textbf{\arabic{\counter}#2}`

<code>\BPChem{H_20}\CNlabel{water}</code>		H ₂ O 1
<code>\BPChem{Na\?Cl}\CNlabelsub{water}{salt}</code>		NaCl 1salt
<code>\BPChem{H\?Cl}\CNlabelnoref{acid}</code>		HCl
<code>\BPChem{H_2SO_4}\CNlabelsubnoref{acid}{sulfur acid}</code>		H ₂ SO ₄

А вот как работают ссылки на эти соединения:

Вода --- <code>\CNref{water}</code>		Вода — 1
Поваренная соль --- <code>\CNrefsub{water}{salt}</code>		Поваренная соль — 1salt
Соляная кислота --- <code>\CNref{acid}</code>		Соляная кислота — 2
Серная кислота --- <code>\CNrefsub{acid}{sulfur acid}</code>		Серная кислота — 2sulfur acid

7 Пакет chemcono

Автор — Stefan Schulz. Назначение пакета: формирование в конце документа списка упомянутых веществ, аналогичного библиографическому списку. По неизвестной мне причине пакет *обязательно* должен загружаться с необязательной опцией [tight]:

`\usepackage[tight]{chemcono}`

Аналогично командам

`\cite` `\thebibliography` `\bibitem`

ВВОДЯТСЯ команды

`\fcite` `\theffbibliography` `\ffbibitem`

<code>\$_\rm H_20\$ (\fcite{water})</code>		H ₂ O (1)
<code>\$_\rm Na\?Cl\$ (\fcite{salt})</code>		NaCl (2)
<code>\$_\rm H\?Cl\$ (\fcite{acid})</code>		HCl (3)
<code>\$_\rm H_2SO_4\$ (\fcite{sulfuracid})</code>		H ₂ SO ₄ (4)

После ввода команд:

```
\begin{theffbibliography}{99}
\ffbibitem{water} Вода
\ffbibitem{salt} Поваренная соль
\ffbibitem{acid} Соляная кислота
\ffbibitem{sulfuracid} Серная кислота
\end{theffbibliography}
```

... получаем:

Compound numbers

- 1 Вода
- 2 Поваренная соль
- 3 Соляная кислота
- 4 Серная кислота

Для переопределения стиля меток рекомендуют использовать команду

```
\renewcommand{\fcite}[1]{\underline{\ffcite{#1}}}
```

В таком виде, жирный шрифт будет заменён на подчёркивание. При использовании `drftcite.sty` (написан на базе аналогичного стилевого файла D. Arseneau) верхние индексы будут показывать порядок упоминания веществ в документе. (Не проверял.) `drftcite.sty` должен быть загружен после `chemsoo`. Перед финальной компиляцией эту строчку надо просто закомментировать.

8 Пакет $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$

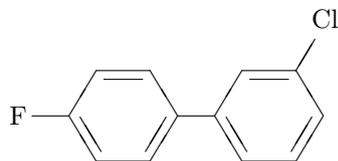
Автор пакета — Shinsaku Fujita, Факультет химии и материаловедения технологического института Киото. Версия 2.00 от 25 декабря 1998 года, исправлена — 20 марта 1999 года. Ранние версии выходили с 1993-го года: 1.00—1993; 1.01—1996; 1.02—1998. Несмотря на это, в путеводителе по \LaTeX у М. Гуссенса Ф. Миттельбаха и А. Самарина (Изд-во Мир 1999) про этот пакет нет ни слова. Зато упомянут гораздо более скромный пакет Роситы Хос, которого нет в стандартном пакете \MiKTeX , но его без труда можно найти в каталогах CTAN.

Это единственный из упомянутых здесь пакетов, который предназначен для рисования выключных химических формул. Я не могу описать здесь весь пакет, во первых, это слишком масштабная задача: руководство по пакету $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ занимает 111 страниц. Ниже приведены некоторые формулы, набранные с применением пакета, и соответствующий код. Опыт показал, что $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ не считает нужным сообщать \LaTeX у границы объектов, а скорее всего, просто не умеет их вычислять. Я не знаток $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 'а, поэтому для решения этой проблемы избрал довольно топорный метод: сохранил результаты работы $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ 'а в отдельных PDF-ках и вставил их в текст. (Кстати логос $\mathcal{X}\mathcal{M}\mathcal{T}\mathcal{E}\mathcal{X}$ мне пришлось переписать, чтобы он выглядел как у Автора).

Просто поразительно, сколько сил потрачено для того, чтобы вся эта машина заработала. И ведь это некоммерческий проект! Следует объяснить читателю, через какие ограничения приходится продираться авторам подобных макросов:

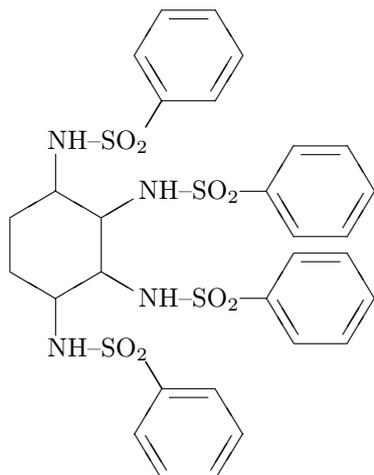
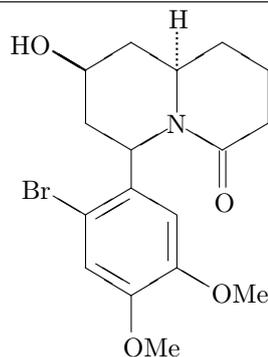
- \LaTeX в графической моде имеет ограниченное количество допустимых наклонов линий.
- \LaTeX ограничивает диаметры окружностей некоторым фиксированным числом.
- \LaTeX вслед за \TeX 'ом может оперировать командами с не более чем 9-ю аргументами. . .
Список можно продолжать.

Таблица 2: Примеры картинок нарисованных в пакете Shinsaku Fujita



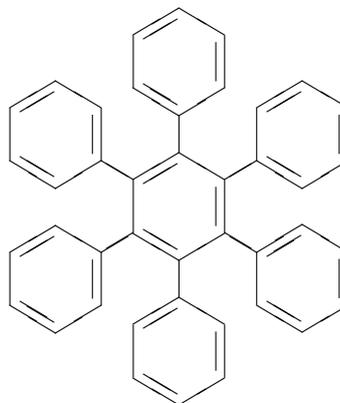
```
\bzdrv{1==F;4==\bzdrv{1==(y1)};3==Cl}}
```

```
\bzdrv{3==OMe;4==OMe;6==Br;%  
1==\decaheterov[] {4a==N}{4D==O;7B==HO;%  
{10}A}==H;5==(y1)}
```



```
\cyclohexanev[] {%  
1==\ryl(8==NH--SO$_{2}$){1==\bzdrv{6==(y1)}};%  
2==\ryl(5==NH--SO$_{2}$){4==\bzdrv{1==(y1)}};%  
3==\ryl(3==NH--SO$_{2}$){4==\bzdrv{1==(y1)}};%  
4==\ryl(0==NH--SO$_{2}$){7==\bzdrv{2==(y1)}}}
```

```
\bzdrv{1==\bzdrv{4==(y1)}};%  
2==\bzdrv{5==(y1)};3==\bzdrv{6==(y1)};%  
4==\bzdrv{1==(y1)};5==\bzdrv{2==(y1)};%  
6==\bzdrv{3==(y1)}}}
```



По сравнению с конструкциями показанными на предыдущей странице, макрос `\Charrow` со страницы 5 просто ничтожен! И ведь они работают, подумаешь не так центрируются, да это ж ерунда, поместить их в конструкцию типа:

```
\makebox[x]{\raisebox{0pt}[y][z]{#1}}
```

да подогнать параметры xyz . Очень вероятно, что их даже удастся масштабировать командой `\scalebox{h-scale}[v-scale]{box}` из пакетов `graphics` или `graphicx`. И уж точно удастся масштабировать если поступать с ними как здесь: через PDF-ки прогонять...

Но не лежит у меня душа к тому, чтобы овладевать подобной ерундой. Ограничения \LaTeX 'а привели в частности к тому, что связь уходящая за плоскость чертежа показана Бог знает как, простым пунктирчиком. Слава Богу в нашем арсенале есть специализированные «рисовалки». Им посвящается следующий раздел.

9 Специализированные программы для набора химических формул, внедрение OLE объектов в документ \LaTeX

В задачи данного обзора не входит изложение методики общения \LaTeX 'а с графикой. По умолчанию считается, что читатель знаком с этим вопросом, тем не менее кратко задекларируем следующее:

Если это возможно, в документы \LaTeX (и не только \LaTeX , но и в тот же MS Word, вообще *езде*) следует вставлять графику в *векторных* форматах. Например: EPS (Encapsulated PostScript¹), PDF (Portable Document Format²), WMF (Windows MetaFile).

В отличие от \LaTeX 'а в MS Word и во многих других WYSIWYG³ редакторах работающих под управлением OS семейств Windows 9X, Windows NT, предусмотрена возможность вставки OLE объектов (Object Linking and Embedding⁴) Поскольку OLE объект наследует

¹PostScript — язык описания страниц — специализированный язык программирования, разработанный фирмой Adobe Systems, поддерживающий масштабируемые шрифты и высококачественную графику

²В принципе тоже самое, но несколько более универсальный формат.

³What You See Is What You Get что видишь на экране, то и получишь при печати (принцип построения экранного редактора текстов)

⁴... с 1996 года аббревиатура применяется для обозначения технологий на основе COM, используемых для создания составных документов внедрением и связыванием. COM — Component Object Model — модель компонентных объектов Microsoft (стандартный механизм, включающий интерфейсы, с помощью которых одни объекты предоставляют свои сервисы другим, — является основой многих объектных технологий, в том числе OLE и ActiveX). **Теперь ещё проще:** когда Вы копируете картинку, табличку и т. п. в одной программе, а потом вставляете её в MS Word, в нём появляется объект (Ваша картинка, табличка или что-там у Вас, график какой-то...) двойной щелчок на нём позволяет Вам его редактировать пользуясь инструментами той программы, из которой Вы его скопировали. Этот объект называется OLE объектом, он с собой зацепил все (или не все, но многие) средства редактирования из родительской программы, от чего Ваш документ и стал более пухлый. Впрочем причины пухлости документов весьма разнообразны и я их здесь рассматривать не буду.

всю информацию (все *методы*) родительского приложения, в том числе информацию о векторных шрифтах, OLE объект можно рассматривать как разновидность векторной графики. Из этого следует, что в принципе любой OLE объект можно преобразовать к какому-нибудь векторному формату и вставить в документ \LaTeX . Разумеется при этом будет утеряна всякая возможность управлять OLE объектом «при помощи даблклика» — все методы родительского объекта будут утеряны. В конце концов, \LaTeX это текстовый редактор, система предназначенная для вёрстки, не более того.

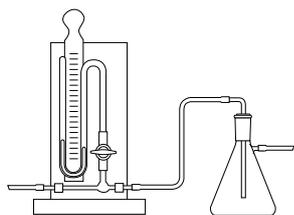


Рис. 1: Манометр из библиотеки лабораторного стекла программы ChemWindow 5.11

В документы \LaTeX , конечно можно вставлять и растровую графику. Данный документ обрабатывается при помощи компилятора pdf \LaTeX . Этот компилятор создаёт файлы в формате PDF, которые можно просматривать и печатать из программы Adobe Acrobat Reader (FreeWare), на мой взгляд чрезвычайно удобной, в сравнении с другими некоммерческими программами предназначенными для работы с PostScript файлами. Это (на мой взгляд) одна из основных причин распространённости формата PDF. Компилятор pdf \LaTeX распознаёт графику в форматах PDF, JPEG, TIFF, PNG. Последние три формата — растровые. Поскольку в результате компиляции получается другой PDF-файл, который в свою очередь можно вставить в новый PDF документ,⁵ следует понимать, что растровая картинка вставленная в PDF документ не станет от этого векторной, и при масштабировании растр вылезет обязательно.

Итак, нам нужна векторная графика, как же это сделать? Лично я пользуюсь для этого программой Adobe Acrobat. Поскольку в основном я компилирую в формат PDF, то и графика нужна мне именно в этом формате. Adobe Acrobat содержит в своём составе виртуальные принтеры «распечатывающие» внутрь PDF-файла. Рисунок 1 получен путём внедрения картинки в MS Word как OLE объекта и дальнейшей конвертации средствами Adobe Acrobat. Способ хорош своей универсальностью, относительной надёжностью и простотой; плох тем, что сохраняет информацию исключительно в формате PDF. Мне неизвестны конвертеры PDF → PostScript. Обрато конвертировать нет проблем: тот же Adobe Acrobat (либо Adobe Page Maker) содержит в своём составе программу Adobe Distiller, конвертирующую файлы EPS, PS в PDF. Существуют бесплатные конвертеры делающие тоже самое. Так в документации к pdf \TeX 'у рекомендуется скрипт написанный на языке Perl — `epstopdf`, автор Sebastian Rahtz. Таким образом, для функционирования этого конвертера необходимо инсталлировать Perl. Скрипт можно найти в архивах CTAN.

Наилучшее решение проблемы — использование программ умеющих сохранять информацию в формате EPS. Такая графика наиболее универсальна. Мне известна только одна программа для создания химических формул, позволяющая сохранять структуры в этом формате — CS ChemDraw Pro из состава CS ChemOffice. Я имел дело с версиями 4.5 и 5.0,

⁵Таким способом была вставлена моя визитная карточка в конце этого документа. Поскольку она целиком состоит исключительно из векторной графики и векторных шрифтов, её можно масштабировать как угодно. В данном случае её ширина в точности равна 20% ширины текста.

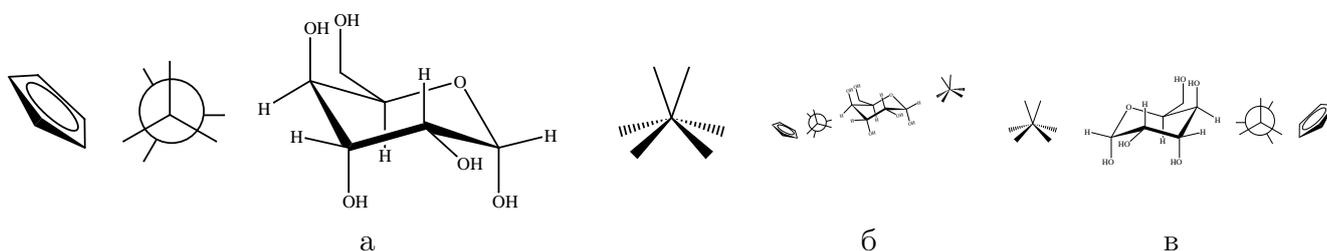


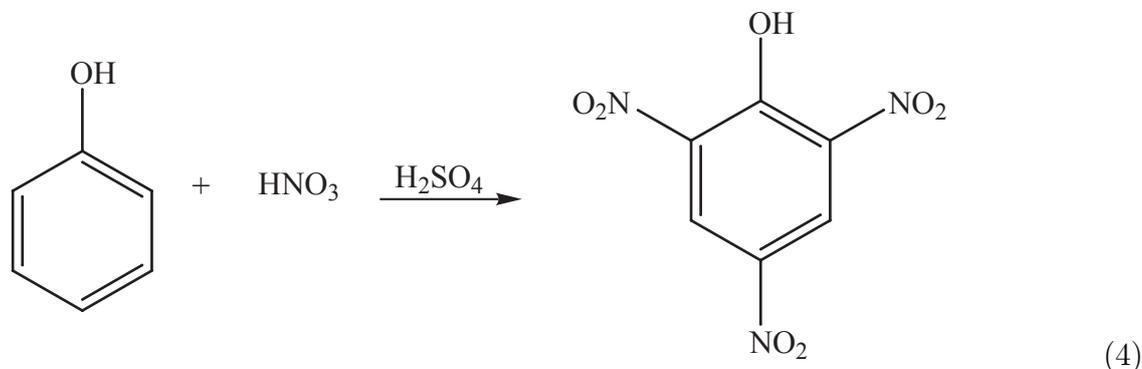
Рис. 2: Пример применения рисунка из программы CS ChemDraw Pro. Рисунок был сохранён в формате EPS, в результате имел размер 15 484 byte, затем конвертирован в формат PDF программой Adobe Distiller, после чего имела размер 6 427 byte. Здесь показаны некоторые возможности пакета **graphics** в отношении векторных рисунков. а)—рисунок, ширина которого равна точно 55% ширины текста. б)—рисунок шириной 15% ширины текста, повернутый на 15°. в)—рисунок шириной 25% ширины текста, отражённый в вертикальной плоскости.

обе функционируют нормально. На рисунке 2 можно видеть пример вставки графики из этой программы.

Строго говоря, с растровыми можно делать тоже самое, но есть опасность того, что при чрезмерном увеличении размера растр станет безобразен, а при уменьшении размера некоторые тонкие линии вообще исчезнут. Тут стоит сделать ещё одно замечание: на печать рисунок выводится всё равно в растровом виде, где размер растра лимитирован разрешающей способностью принтера, если Вы уменьшаете векторный рисунок, не надо думать, что принтер сможет напечатать линию тоньше чем его разрешающая способность — для 600 dpi ≈ 0.05 мм, для 300 dpi ≈ 0.09 мм. Кроме того, напечатанную линию толщиной менее 0.5 мкм не будет видно ни в один оптический микроскоп (Почему?) Наконец растровые картинки занимают очень много места. Если Вы думаете, что у Вас очень «крутая тачка», то Вы просто никогда не имели дело с рисунком размером 80 Mbyte, либо всего лишь с текстовым файлом в который вставлено несколько картиночек на 790 kbyte (ч/б рисунок с разрешением 300 dpi размером 3 × 3 дюйма (7.62 × 7.62 см)). А если у Вас и впрямь крутая тачка, подумайте есть ли такая у того, кому адресован Ваш труд...

Кроме программы CS ChemDraw Pro в формате EPS могла сохранять картинки старенькая версия программы ChemWindow, написанная ещё для Windows 3.1. Жаль, что у меня есть только её демо-версия. В последствии продукты компании BioRad утратили это важное свойство. Когда я задал соответствующий вопрос группе технической поддержки на сайте компании <http://www.chemwindow.com> <mailto:support@softshell.bio-rad.com> на меня отреагировали как на лунатика. Тем не менее, их продукция обладает отрадной совместимостью с CS ChemDraw Pro, то есть ChemWindow 5.11 умеет сохранять информацию в формате CS ChemDraw Pro. Но не всякую информацию, а только химические формулы. Поэтому рисунок 1 пришлось сохранять через MS Word, как описано выше.

Ну и наконец надо нарисовать какое-нибудь уравнение реакции:



Набор этого уравнения осуществлялся в программе CS ChemDraw Pro. Результат был сохранён в формате EPS. А теперь **внимание, мантры:** открываем файл PicricAcid.eps Adobe Acrobat Distiller'ом и убеждаемся, что он не компилируется. в лог файле читаем:

```
%%[ Error: Times-Roman not found. Font cannot be embedded. ]%%
```

Лечение: открываем файл PicricAcid.eps любым текстовым редактором, NotePad годится, и заменяем все вхождения Times-Roman, на что-нибудь из файла

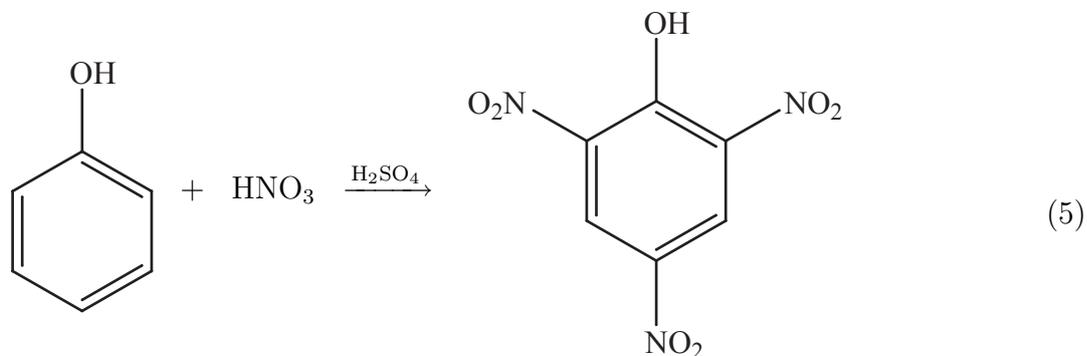
```
c:\Program Files\Adobe\Acrobat 5.0\Resource\Font\AdobeFnt.lst
```

В нашем случае на TimesNewRomanPSMT (содержимое рубрики FontName). Если это была единственная проблема, то она должна устраниться. Оптимальное решение — суметь прописать в этом месте тот шрифт, которым был набран основной текст.

Теперь вставляем конвертированный PDF файл:

```
\begin{equation}\label{eq:PicricAcid1}
  \includegraphics{Picric.pdf}
\end{equation}
```

Как видим, команда `\includegraphics` применима в матмоде, и у нас получилась сквозная нумерация. Возможно пользователь предпочтёт отдельную нумерацию для математических уравнений и для химических реакций, в этом случае ему может помочь обсуждавшийся выше пакет `brchem`.



Да... смешение стилей...

Код:

```
\begin{equation}\label{eq:PicricAcid2}
  \begin{split}
    & \begin{array}{m{20mm}ccc{50mm}}
      \includegraphics{Phenol.pdf} & & \\
      + & \text{HNO}_3 & \xrightarrow{\text{H}_2\text{SO}_4} & \\
      \includegraphics{PicricAcid.pdf} & & & \\
    \end{array} \\
    & \text{\mbox{Да\ldots смешение стилей\ldots}}
  \end{split}
\end{equation}
```

Обратите внимание на позиционирование номера в уравнениях (4) и (5). Для правильного положения номера в уравнении (4), на мой взгляд проще всего употребить тоже окружение `array`.

В заключение посмотрим, как наша «панацея» сказалась на объёме файла? (См. таблицу 3)

Таблица 3: Размеры некоторых файлов

Название файла	Размер (byte)	Комментарий
eVizit.pdf	112 283	Картинка, которая находится в конце документа в правом нижнем углу. Содержит массу шрифтов.
NotSimple.eps	15 484	Из этого файла был сконvertирован следующий. Формат PDF поддерживает внутреннее сжатие, поэтому размер файла уменьшился.
NotSimple.pdf	6 427	Рис. 2 на стр. 17
Picric.pdf	23 197	Рис. 4 на стр. 18 Следующие два файла были вырезаны из этого, но не уменьшились. По всей видимости львиная доля информации в нём относится к подключенным шрифтам. Мораль: меньше шрифтов — меньше файл.
Phenol.pdf	22 328	Рис. 5 на стр. 19
PicricAcid.pdf	22 318	Рис. 5 на стр. 19
press.pdf	9 659	Таков размер векторной графики в которой вообще нет шрифтов.
ХуМTeX1.pdf	33 536	Табл. 2 на стр. 14
ХуМTeX2.pdf	19 408	Табл. 2 на стр. 14
ХуМTeX3.pdf	19 368	Табл. 2 на стр. 14
ХуМTeX4.pdf	15 719	Табл. 2 на стр. 14
Этот файл	≈752kbyte	
хумtx200.pdf	400 443	Руководство по \LaTeX на 111 страницах.
PicricAcid.chm	514	Размер рисунка 4 (стр. 18) в собственном формате

19 декабря 2001 г.

mailto:emin@petrol.chem.msu.ru

