

PPCHTEX

een serie macro's voor het zetten
van chemische structuur formules

J. Hagen & A.F. Otten
Pragma ADE, Hasselt NL
oktober 2001

Inhoud

Deel 1: Uitleg

- 1 Structuren 1–1
- 2 Bindingen 1–4
- 3 Vooraanzichten 1–10
- 4 Definities 1–11
- 5 Combinaties 1–14
- 6 Versieren 1–23
- 7 Assenstelsel 1–27
- 8 Instellingen 1–29
- 9 Symbolen 1–33
- 10 Positioneren 1–35
- 11 Lopende tekst 1–42
- 12 Subscripts 1–45

Deel 2: Achtergronden

- 1 Installatie 2–1
- 2 Uitbreidbaarheid 2–3
- 3 Fonts 2–4
- 4 Definities 2–5
- 5 Kleur 2–6
- 6 Interactie 2–7

Deel 3: Overzichten

- 1 One 3–1
- 2 Three 3–3
- 3 Four 3–6
- 4 Five 3–10
- 5 Six 3–15
- 6 Eight 3–21
- 7 Five Front 3–22
- 8 Six Front 3–23
- 9 Carbon 3–24
- 10 Newman Stagger 3–26
- 11 Newman Eclipse 3–27
- 12 Symbol 3–28

Inleiding

PPCH_TE_X is een samenhangende serie macro's waarmee chemische formules kunnen worden gezet. De macro's vallen terug op P_TCTE_X, een in een door Michael Wichura in public domain gebracht macropakket, waarmee grafieken en andere lijnafbeeldingen kunnen worden getekend. Hoewel PPCH_TE_X in eerste instantie is ontwikkeld voor P_TCTE_X, kan inmiddels ook gebruik worden gemaakt van PSTricks van Timothy Van Zandt, zij het met enige beperkingen. Overigens gebiedt de eerlijkheid te zeggen dat P_TCTE_X de mooiste resultaten biedt.

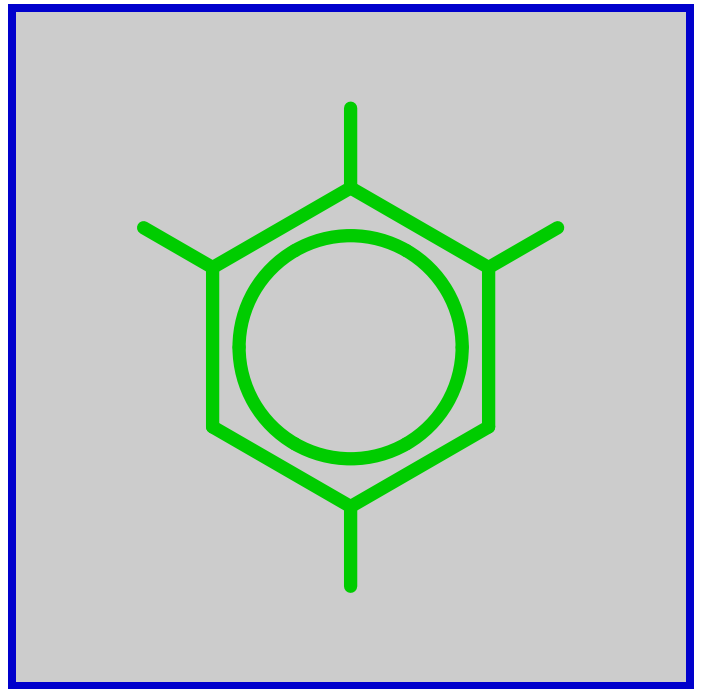
De macro's zijn te gebruiken binnen verschillende T_EX-omgevingen. Daarbij wordt gebruik gemaakt van enkele CON_TE_XT-modules. De macro's zijn zodanig opgezet dat uitbreiden relatief eenvoudig is. De interactie sluit aan op de binnen CON_TE_XT gebruikte interactie.

Hoewel PPCH_TE_X in eerste instantie is bedoeld om chemische structuurformules, zoals zesringen, te zetten, kunnen ook 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.

Bij de ontwikkeling van de macro's is snelheid ondergeschikt gemaakt aan flexibiliteit, eenvoud en kwaliteit. Er is geen gebruik gemaakt van het binnen P_TCTE_X beschikbare mechanisme om delen van figuren op te slaan in een file. Gebleken is dat daarmee nauwelijks tijdswinst wordt geboekt. Het is niet anders.

De eerste versie van PPCH_TE_X kwam beschikbaar in 1995. Deze handleiding beschrijft de tweede versie, die dankzij de vele suggesties van Tobias Burnus, Dirk Kuypers en Ton Otten een vrijwel dubbele functionaliteit kent.

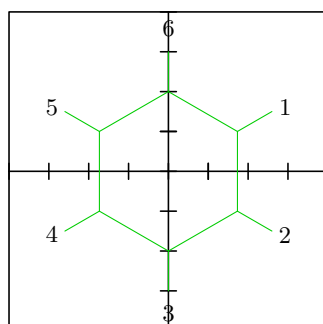
De source van PPCH_TE_X is op dit moment geen schoolvoorbeeld van goed gedocumenteerde code. Te zijner tijd zullen de macro's nog eens onder de loep worden genomen en gedocumenteerd.



Deel 1
Uitleg

1 | Structuren

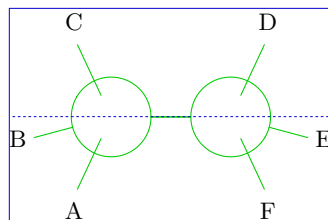
Het aantal commando's dat wordt gebruikt om chemische structuurformules te zetten is, afgezien van wat macro's om toeters en bellen toe te voegen, beperkt tot vier.¹ In het volgende voorbeeld zijn al deze commando's gebruikt:



Voorbeeld 1.1

```
\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 netwerk worden ingesteld. De met dit commando ingestelde waarden gelden voor alle volgende formules.²



Voorbeeld 1.2

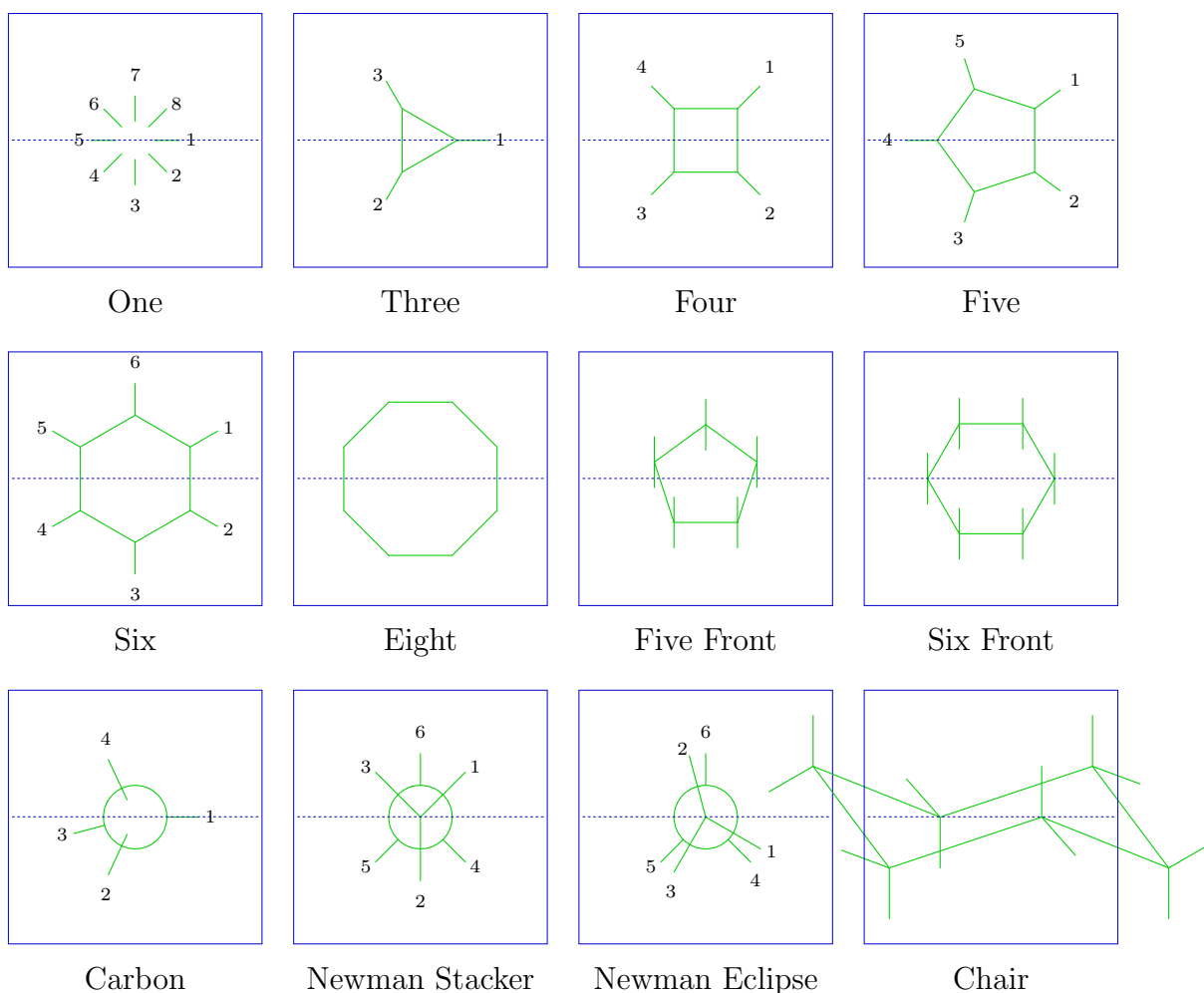
```
\startchemie[kader=aan,breedte=passend,hoogte=passend]
  \chemie[CARBON,CB1] [A,B,C,D,E,F]
\stopchemie
```

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.

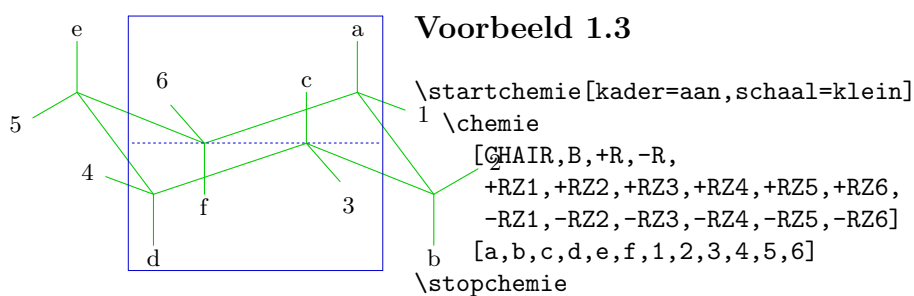
We werken hier het eerste voorbeeld uit. Allereerst is het trefwoord `SIX` meegegeven. Hiermee geven we aan dat we een zesring tekenen. Analoog kennen we `ONE`, `THREE`, `FOUR` en `FIVE`, `EIGHT`, `CARBON`, `NEWMAN`, `CHAIR`, enkele varianten hierop en wat symbolen.

¹ Het begrip structuur heeft in deze handleiding alleen betrekking op de chemische structuur en niet op de structuur van de tekst waarin deze formule wordt gezet.

² Natuurlijk kan de scope worden beperkt met behulp van `{ }` en de groeperingsmacro's `..group`. De instellingen kunnen ook direct achter `\startchemie` worden opgegeven. In dat geval blijven de instellingen beperkt tot `n` structuurformule.



Qua afmetingen spring CHAIR er duidelijk uit. Ook in andere opzichten wijkt deze structuur wat af van de andere structuren. Zo is hier roteren en combineren niet mogelijk.



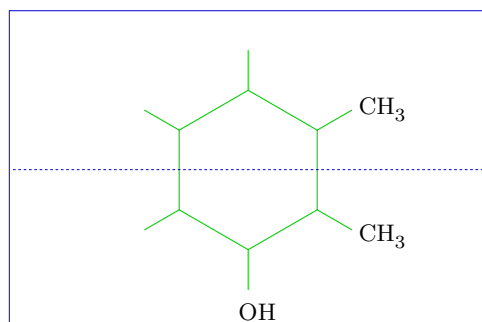
Binnen structuren worden de chemische bindingen tussen de C-atomen op een vergelijkbare wijze aangegeven. Zo gebruiken we in het voorbeeld B en R. Bindingen zijn genummerd en kunnen op verschillende manieren worden opgegeven:

```
\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 en RZ kunnen we substituenten aan de zesring 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 1.4

```
\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.

2 | Bindingen

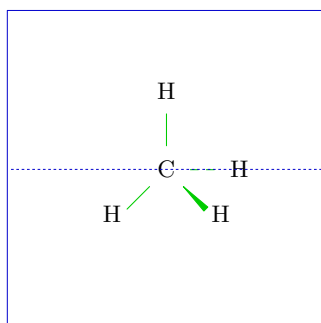
Hieronder zijn overzichten opgenomen van de bindingen die men kan aantreffen bij de verschillende structuren. Uit de voorbeelden en overzichten verderop in deze handleiding zal blijken waar de commando's voor staan.

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. Een aantal bindingen kan aan beiden kanten, links (-) of rechts (+) worden ingekort.

B	Bond	SB	Single Bond
BB	Bold Bond	-SB	Left Single Bond
HB	Hydrogen Bond	+SB	Right Single Bond

Tabel 2.1 Enkelvoudige bindingen.

In het onderstaande voorbeeld zien we een aantal bindingen gecombineerd:



Voorbeeld 2.1

```
\startchemie[kader=aan]
  \chemie[ONE,SD1,SB4,BB2,SB7,Z01247][C,H,H,H,H]
\stopchemie
```

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

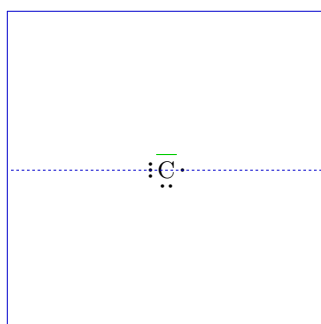
Tabel 2.2 Meervoudige bindingen.

We kunnen extra ladingen op verschillende manieren oproepen. De betreffende commando's beginnen met een E.

ES	Extra Single	ED	Extra Double
EP	Extra Pair	ET	Extra Triple

Tabel 2.3 Ladingen.

Het onderstaande koolstofatoom is uit demonstratieoogpunt voorzien van maar liefst 8 buitenelektronen.

**Voorbeeld 2.2**

```
\startchemie[kader=aan]
  \chemie[ONE,Z0,ES1,ED3,ET5,EP7] [C]
\stopchemie
```

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.

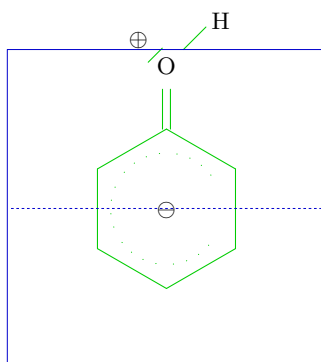
SS	Short Shortcut	S	Shortcut
-SS	Left Short Shortcut	MID	Open Mid Shortcut
+SS	Right Short Shortcut	MIDS	Closed Mid Shortcut

Tabel 2.4 Bijzondere bindingen.

C	Circle	CD	Dashed Circle
CC	Shifted Circle	CCD	Dashed Shifted Circle

Tabel 2.5 Circelvormige bindingen.

Hoewel de circelvormige C.. commando's zich laten raden, tonen we hier toch een voorbeeld.

**Voorbeeld 2.3**

```
\startchemie[kader=aan]
\chemie
[SIX,B,ER6,CCD12346,Z0,PB:RZ6,ONE,SB8,EP6,Z0,ZT6,Z8,PE]
[\ominus,0,\oplus,H]
\stopchemie
```

Aan alle 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. We zullen deze commando's vaak tegenkomen.

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

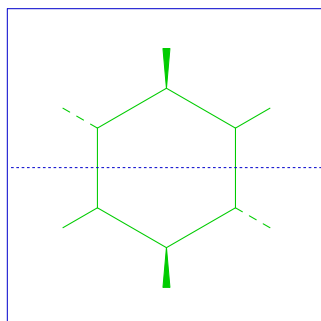
Tabel 2.6 Bindingen naar substituenten.

Naast deze eenvoudige lijntjes zijn er wat alternatieven om bruggen aan te geven.

RD	Radical Dashed	RB	Radical Bold
-RD	Left Radical Dashed	-RB	Left Radical Bold
+RD	Right Radical Dashed	+RB	Right Radical Bold

Tabel 2.7 Bijzondere substituenten.

Radicalen kunnen steeds op drie manieren worden getekend. De linker en rechter variant zullen echter zelden worden gebruikt.

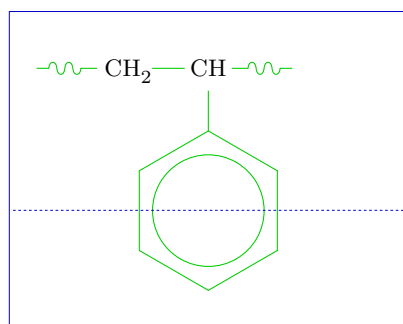
**Voorbeeld 2.4**

```
\startchemie[kader=aan]
\chemie[SIX,B,R14,RD25,RB36]
\stopchemie
```

SD	Single Dashed	LDD	Left Double Dashed
OE	Open Ended	RDD	Right Double Dashed

Tabel 2.8 Nog meer bijzondere substituenten.

Hieronder is een voorbeeld van een *Open End* weergegeven. We zien hier een zesring (SIX) met daaraan een aaneenschakeling van ONE's. Lees voor het moment maar even over het gebruik van PB heen.



Voorbeeld 2.5

```
\startchemie
  [breedte=5000,boven=2500,onder=1500,kader=aan]
\chemie
  [SIX,B,C,R6,
  PB:RZ6,ONE,CZ0,OE1,SB5,MOV5,CZ0,OFF5,OE5,PE]
  [CH,CH_2]
\stopchemie
```

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

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

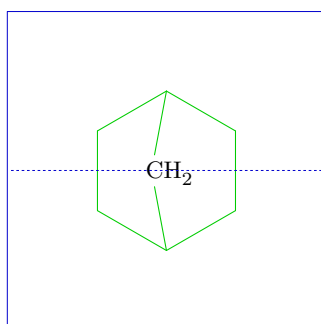
Tabel 2.9 Dubbele bindingen naar substituenten.

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
CRZ	Center Atom	-RZ	Left Radical Atom
MIDZ	Mid Atom	+RZ	Right Radical Atom

Tabel 2.10 Atomen en moleculen (radikalen).

Van deze commando's is RZ, dat aansluit op R, de meest voor de hand liggende. Het eerder genoemde MID commando is alleen beschikbaar bij een zesring (SIX). In het voorbeeld hieronder zien we zowel MID als MIDZ in actie. Deze commando's krijgen geen positie mee.

**Voorbeeld 2.6**

```
\startchemie[kader=aan]
  \chemie[SIX,B,MID,MIDZ][\SL{CH_2}]
\stopchemie
```

De atomen/moleculen worden met de klok mee genummerd. Ook hier mogen combinaties worden opgegeven. De positie 0 (nul) valt samen met het midden van een structuur.

We kunnen aan een atoom of binding labels en nummers toevoegen. Dit doen we met **ZN** en **ZT**:

ZN	Atom Number	ZT	Atom Text
-----------	-------------	-----------	-----------

Tabel 2.11 Labels en nummers.

Bij **SIX** en **FIVE** kan dat ook bij radicalen. In dat geval gebruiken we **RN** en **RT**.

RN	Radical Number	RT	Radical Text
RTN	Radical Top Number	RTT	Radical Top Text
RBN	Radical Bottom Number	RBT	Radical Bottom Text

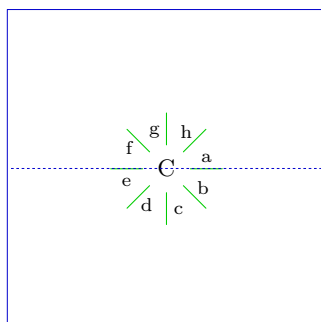
Tabel 2.12 Labels en nummers.

In geval van **ONE** hebben we bovendien nog boven (top) en onder (bottom) varianten.

ZTN	Atom Top Number	ZTT	Atom Top Text
ZBN	Atom Bottom Number	ZBT	Atom Bottom Text

Tabel 2.13 Extra labels en nummers.

Bij **ZTN** en **ZBN** worden de nummers automatisch gegenereerd. De andere commando's gebruiken de opgegeven tekst

**Voorbeeld 2.7**

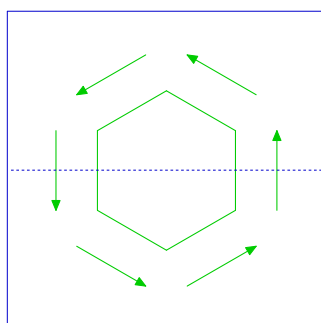
```
\startchemie[kader=aan]
  \chemie[ONE,SB,ZO,ZTT][C,a,b,c,d,e,f,g,h]
\stopchemie
```

Resten ons nog wat symbolen om de structuur aan te kleden.

AU	Arrow Up	AD	Arrow Down
----	----------	----	------------

Tabel 2.14 Indicaties.

De pijlen worden getekend tussen de radicalen.

**Voorbeeld 2.8**

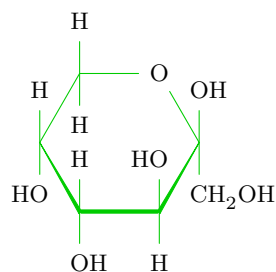
```
\startchemie[kader=aan]
  \chemie[SIX,B,AU]
\stopchemie
```

We merken nog op dat bij het plaatsen van atomen en moleculen zo goed mogelijk wordt rekening gehouden met de (mogelijke) afmetingen van atomen en moleculen. De breedte van de C en de hoogte van C_m^n spelen daarbij een rol. Dit mechanisme kan nog worden verfijnd.

3 | Vooraanzichten

De structuren FIVE en SIX zijn ook als vooraanzicht beschikbaar, zij het met wat beperkingen. We tonen hieronder twee voorbeelden van zo'n vooraanzicht.

Vooraanzichten kunnen niet worden geroteerd. Ook zijn er beperkingen ten aanzien van het koppelen aan andere structuren. Dit hangt samen met het karakter van de weergave.

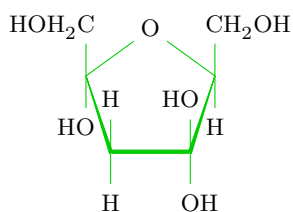


β -D-Fructopyranose

Voorbeeld 3.1

```
\startchemie[hoogte=4500,onder=2500]
\bottext{\beta-D-Fructopyranose}
\chemie
[SIX,FRONT,BB1236,+SB4,-SB5,Z5][0]
\chemie
[SIX,FRONT,+R12346,+RZ12346][\SR{HO},H,H,H,OH]
\chemie
[SIX,FRONT,-R12346,-RZ12346][H,OH,\SR{HO},H,CH_2OH]
\stopchemie
```

De positionering van de radicalen is een mix tussen haalbaarheid en kwaliteit. In het volgende voorbeeld blijkt dit nog duidelijker.



α -D-Fructofuranose

Voorbeeld 3.2

```
\startchemie[hoogte=4500,onder=2500]
\bottext{\alpha-D-Fructofuranose}
\chemie
[FIVE,FRONT,BB125,+SB3,-SB4,Z4][0]
\chemie
[FIVE,FRONT,+R1235,+RZ1235][\SR{HO},H,\SR{HOH_2C},CH_2OH]
\chemie
[FIVE,FRONT,-R1235,-RZ1235][OH,H,\SR{HO},H,CH_2OH]
\stopchemie
```

4 | 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 voordefinieren van structuren kan plaatsvinden met behulp van de $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -primitieve `\def`.

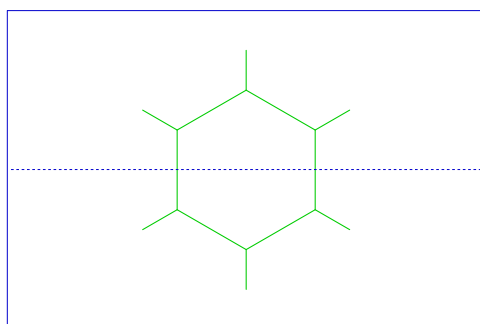
```
\def\zesring{\chemie[SIX,B,R,RZ]}
```

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 definieren zijn toegestaan is de tweede manier robuuster, omdat in dat geval 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.

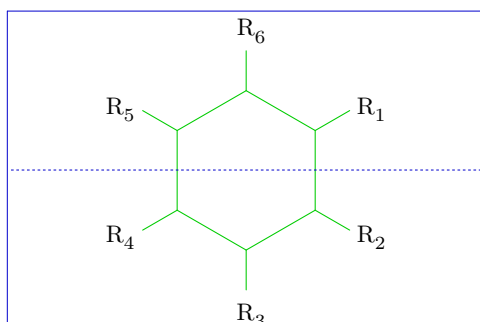


Voorbeeld 4.1

```
\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:

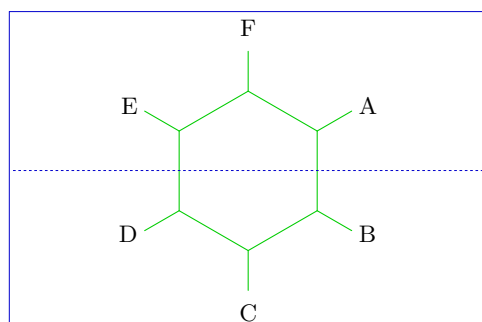


Voorbeeld 4.2

```
\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 (RZ) worden gedefinieerd. In dat geval worden bij de aanroep `\chemie[zesring]` geen substituenten verwacht. Dat we deze alsnog kunnen plaatsen toont het onderstaande voorbeeld.



Voorbeeld 4.3

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

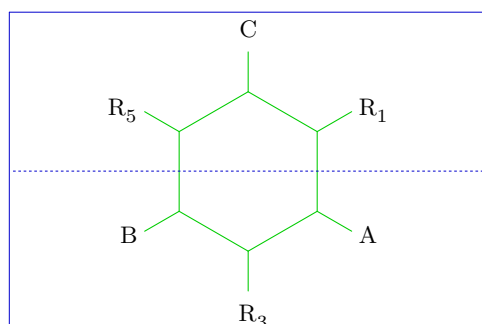
\startchemie[kader=aan,breedte=6000]
  \chemie[zesring,RZ][A,B,C,D,E,F]
\stopchemie
```

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).



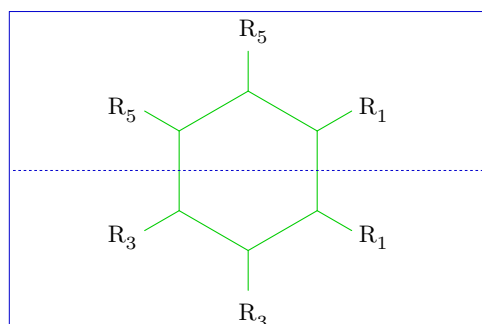
Voorbeeld 4.4

```
\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 (dat wil zeggen dat SIX wordt onthouden) 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 4.5**

```

\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 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ 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.

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 een zelfde 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 5.1 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]`.

Bij ONE is naast MOV ook DIR beschikbaar. Beide commando's hebben dezelfde werking maar verschillen in spatiering. Kleine verplaatsingen zijn daarnaast mogelijk, met OFF.

DIR	Direction	Een MOV, bedoeld voor diagonaal positioneren van structuren
OFF	Offset	Een kleine verplaatsing van een atoom of molecuul

Tabel 5.2 Verplaatsingen en rotaties.

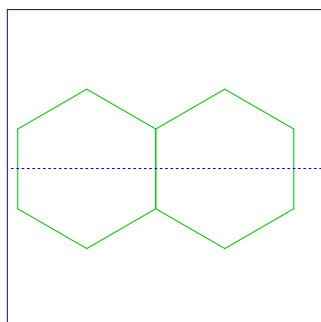
Binnen CARBON is het bovendien mogelijk een structuur te spiegelen. Dit gebeurt met MIR.

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

Tabel 5.3 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 ze te

worden gegeven voordat bindingen en teksten worden getekend. Het maakt dus uit of `\chemie[FIVE,B,ROT1,R]` wordt opgegeven of `\chemie[FIVE,ROT1,B,R]`. De eerste aanroep levert een ongewenst resultaat.

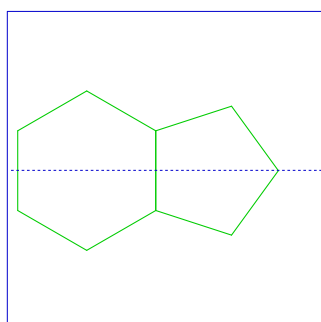


Voorbeeld 5.1

```
\startchemie[kader=aan,breedte=4000,rechts=3000]
\chemie[SIX,B,MOV1,B]
\stopchemie
```

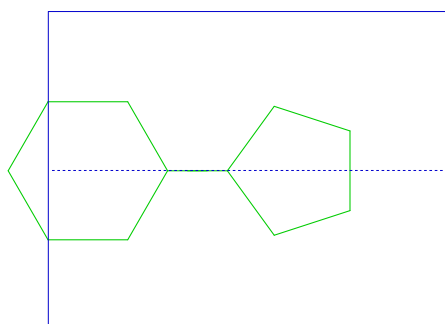
Achtereenvolgens wordt hier een zesring getekend: `SIX,B`, een verplaatsing in de richting van binding 1 gerealiseerd: `MOV1` en een tweede zesring getekend: `B`. Een verplaatsing met `MOV` kan bij een zesring in zes richtingen plaatsvinden. Dit in tegenstelling tot een verplaatsing met `ADJ`, die in 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 kunnen verschillende structuren 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 5.2

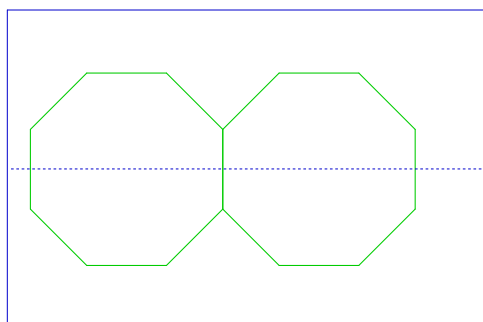
```
\startchemie[kader=aan,breedte=4000,rechts=3000]
\chemie[SIX,B,ADJ1,FIVE,ROT3,B]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 5.3**

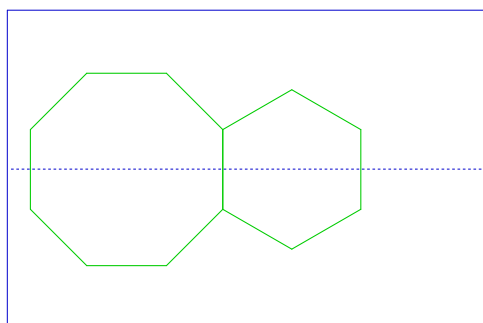
```
\startchemie[kader=aan,breedte=5000,rechts=4500]
  \chemie[SIX,ROT2,B,R6,SUB1,FIVE,B,R4]
\stopchemie
```

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 gerooteerd 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 asrichtingen.

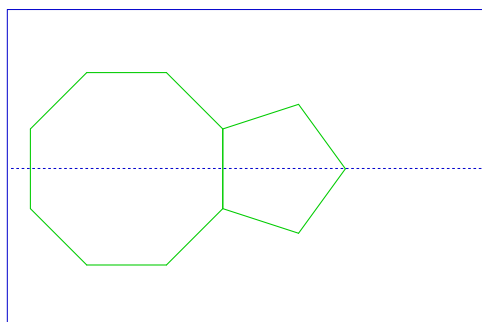
De volgende voorbeelden illustreren nog eens duidelijk dat de afmetingen van de kleinere structuren bepaald zijn door die van de grote, met name SIX. De hieronder getoonde EIGHT heeft overigens wat minder mogelijkheden heeft dan bijvoorbeeld SIX.

**Voorbeeld 5.4**

```
\startchemie[breedte=6000,links=1500,kader=aan]
  \chemie[EIGHT,B,MOV1,B]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 5.5**

```
\startchemie[breedte=6000,links=1500,kader=aan]
  \chemie[EIGHT,B,ADJ1,SIX,B]
\stopchemie
```



Voorbeeld 5.6

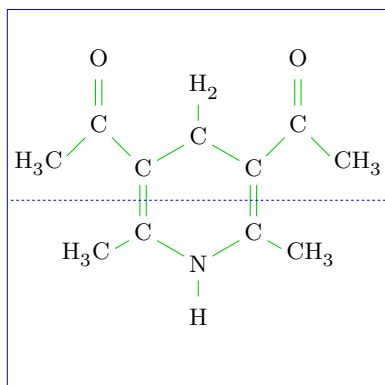
```
\startchemie[breedte=6000,links=1500,kader=aan]
  \chemie[EIGHT,B,ADJ1,FIVE,ROT3,B]
\stopchemie
```

Inmiddels zal duidelijk zijn dat het uitmaakt in welke volgorde we de commando's geven. Een voor de hand liggende volgorde is:

```
\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 translateren en roteren. Hoewel dit misschien niet direct zo lijkt, zit hierin een zekere systematiek. Het proces zou dan ook kunnen worden vereenvoudigd. De in experimentele 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.

Vaak zal een zesring een of meerdere uitlopers samengesteld uit ONE hebben. Dergelijke ketens zig-zaggen als het ware om een centrale as. In zulke situaties gebruiken we DIR.

**Voorbeeld 5.7**

```

\startchemie
[schaal=klein,breedte=6000,hoogte=6000,kader=aan]
\chemie[SIX,SB2356,DB14,Z2346,SR36,RZ36]
[C,N,C,C,H,H_2]
\chemie[PB:Z1,ONE,Z0,DIR8,Z0,SB24,DB7,Z27,PE]
[C,C,CH_3,0]
\chemie[PB:Z5,ONE,Z0,DIR6,Z0,SB24,DB7,Z47,PE]
[C,C,H_3C,0]
\chemie[SR24,RZ24]
[CH_3,H_3C]
\stopchemie

```

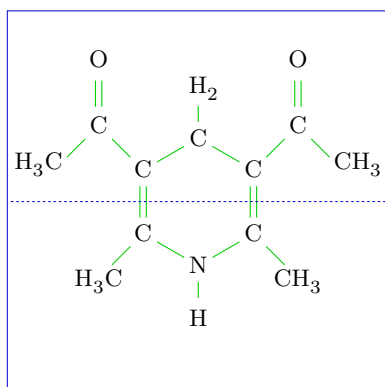
Omdat de ketens geen vaststaande formaten hebben, worden ze opgebouwd en gepositioneerd als substructuur. We gebruiken voor de positionering de commando's PB en PE.

PB: ..	Picture Begin	het starten van een substructuur
PE	Picture End	het afsluiten van een substructuur

Tabel 5.4 Positioneren.

Direct na PB volgt de positie waarop de substructuur wordt geplaatst. Het is belangrijk in de gaten te houden dat het eerstvolgende atoom gecentreerd wordt op deze positie. Gebruik daarom bij voorkeur een centraal atoom.

De aanleiding voor het introduceren van deze commando's lag in het feit dat de getoonde structuur moet kunnen worden gezet op een optisch acceptabele wijze. Er zijn echter verschillende manieren om dergelijke structuren te maken. De volgende variant levert ook resultaat:

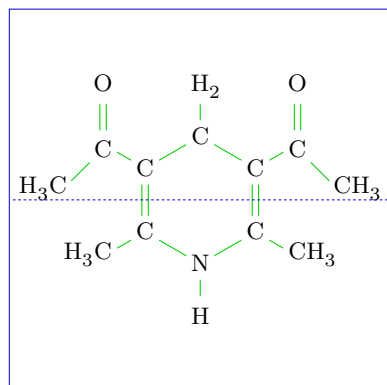
**Voorbeeld 5.8**

```

\startchemie
[schaal=klein,breedte=6000,hoogte=6000,kader=aan]
\chemie
[SIX,SB2356,DB14,Z36,SR36,RZ36] [N,C,H,H_2]
\chemie
[PB:Z1,ONE,Z0,DIR8,Z0,SB24,DB7,Z27,PE] [C,C,CH_3,0]
\chemie
[PB:Z5,ONE,Z0,DIR6,Z0,SB24,DB7,Z47,PE] [C,C,H_3C,0]
\chemie
[PB:Z2,ONE,Z0,DIR2,SB6,CZO,PE] [C,CH_3]
\chemie
[PB:Z4,ONE,Z0,DIR4,SB8,CZO,PE] [C,H_3C]
\stopchemie

```

De meest efficiënte wijze om een dergelijke structuur te definiëren is echter de volgende. Deze laatste oplossing is niet bij voorbaat de typografisch mooiste.

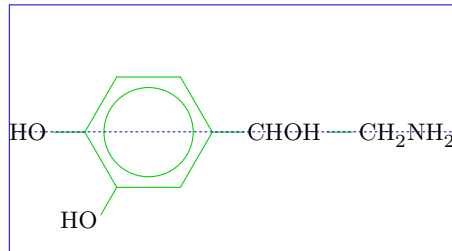


Voorbeeld 5.9

```
\startchemie
[schaal=klein,breedte=6000,hoogte=6000,kader=aan]
\chemie[SIX,SB2356,DB14,Z,SR36,RZ36,SR1245,RZ24]
[C,C,N,C,C,C,H,H_2,CH_3,H_3C]
\chemie[PB:RZ1,ONE,ZO,SB2,DB7,Z27,PE]
[C,CH_3,0]
\chemie[PB:RZ5,ONE,ZO,SB4,DB7,Z47,PE]
[C,H_3C,0]
\stopchemie
```

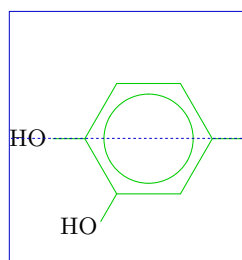
Het is misschien al opgevallen dat de maat van de structuur wordt bepaald door de substituenten. De ketens tellen, afgezien van het start-atoom, niet mee. Dit bevordert een consistente opbouw.

De verschillen tussen SUB en PB zijn subtiel maar niet te verwaarlozen. Vergelijk bijvoorbeeld de volgende formules:



Voorbeeld 5.10

```
\startchemie
[breedte=passend,kader=aan,schaal=klein]
\chemie
[SIX,ROT2,B,C,R236,RZ23,
SUB1,ONE,OFF1,ZO,4OFF1,SB1,Z1]
[HO,HO,CHOH,CH_2NH_2]
\stopchemie
```



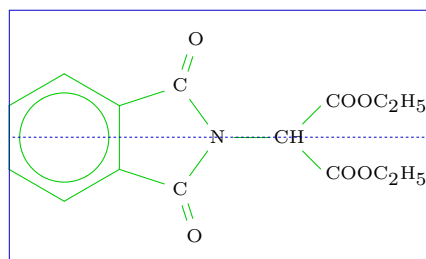
Voorbeeld 5.11

```
\startchemie
[breedte=passend,kader=aan,schaal=klein]
\chemie
[SIX,ROT2,B,C,R236,RZ23,
PB:RZ6,ONE,ZO,3OFF1,SB1,Z1,PE]
[HO,HO,CHOH,CH_2NH_2]
\stopchemie
```

Het gebruik van PB: is wat lastiger, maar geeft mooiere resultaten. We zien hier overigens duidelijk dat we in dat geval de breedte zelf moeten opgeven. Dit komt omdat substituenten nooit meetellen bij de beoaling van de afmetingen. Zou dit wel het geval zijn, dan

zouden in veel gevallen structuren inconsistente afmetingen krijgen. Ze zijn dan moeilijk te combineren.

We gaan eerst wat neder in op `OFF`. 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'. Hoewel we dit commando al in eerdere voorbeelden zagen, is hieronder nog een voorbeeld opgenomen.



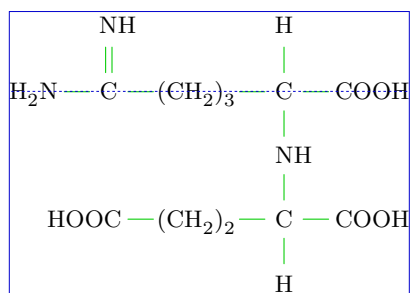
Voorbeeld 5.12

```
\startchemie
[breedte=passend,formaat=klein,schaal=klein,kader=aan]
\chemie
[SIX,B,C,ADJ1,
 FIVE,ROT3,SB34,+SB2,-SB5,Z345,DR35,SR4,CRZ35,SUB1,
 ONE,OFF1,SB258,Z0,Z28]
[C,N,C,O,O,
 CH,COOC_2H_5,COOC_2H_5]
\stopchemie
```

Een verplaatsing biedt ruimte voor een extra karakter. We hadden meer ruimte gekregen als we bijvoorbeeld `3OFF1` hadden gebruikt. Dergelijke, op het eerste oog vrij ingewikkelde, definities kunnen worden gerealiseerd door eerst de afzonderlijke delen te definieren. 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: `{\,0}` in plaats van `0`, maar mooi is anders.

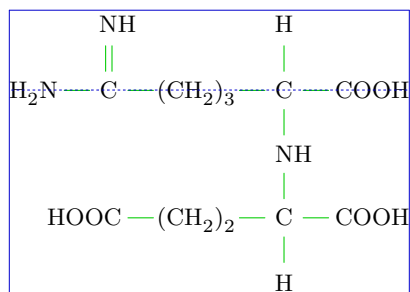
We laten nog een voorbeeld zien. Ook hier leiden meer wegen naar Rome. Bij een keuze voor een methode dient men de consistentie van weergeven door een document heen te bewaken.

**Voorbeeld 5.13**

```

\startchemie
[breedte=passend,hoogte=passend,kader=aan,
schaal=klein]
\chemie
[ONE,SB15,DB7,Z057,30FF1,MOV1,Z0,30FF1,MOV1,
Z017,SB1357,MOV3,Z0,MOV3,SB1357,Z013,30FF5,
MOV5,Z0,30FF5,SB5,Z5]
[C,H_2N,NH,(CH_2)_3,C,COOH,H,\SL{NH},C,COOH,H,
(CH_2)_2,HOOC]
\stopchemie

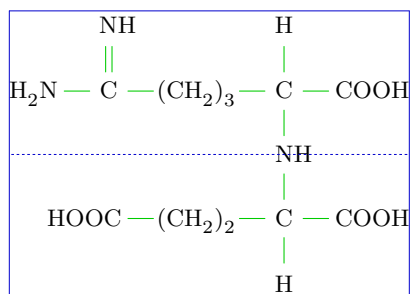
```

**Voorbeeld 5.14**

```

\startchemie
[breedte=passend,hoogte=passend,kader=aan,
schaal=klein]
\chemie [ONE,SB15,DB7,Z057,30FF1] [C,H_2N,NH]
\chemie [MOV1,Z0,30FF1] [(CH_2)_3]
\chemie [MOV1,Z017,SB1357] [C,COOH,H]
\chemie [MOV3,Z0] [\SL{NH}]
\chemie [MOV3,SB1357,Z013,30FF5] [C,COOH,H]
\chemie [MOV5,Z0,30FF5,SB5,Z5] [(CH_2)_2,HOOC]
\stopchemie

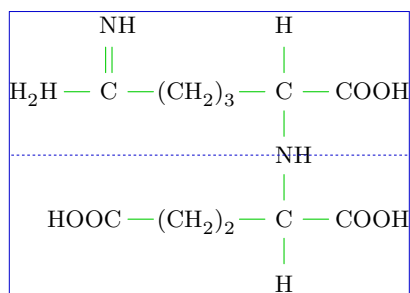
```

**Voorbeeld 5.15**

```

\startchemie
[breedte=passend,hoogte=passend,kader=aan,
schaal=klein]
\chemie
[ONE,Z0,SAVE,MOV7,SB1357,Z017,30FF5,MOV5,Z0,
30FF5,MOV5,SB15,DB7,Z057,RESTORE,
MOV3,SB1357,Z013,MOV5,30FF5,Z0,60FF5,SB5,Z5]
[\SL{NH},C,COOH,H,(CH_2)_3,C,H_2N,NH,C,COOH,H,
(CH_2)_2,HOOC]
\stopchemie

```

**Voorbeeld 5.16**

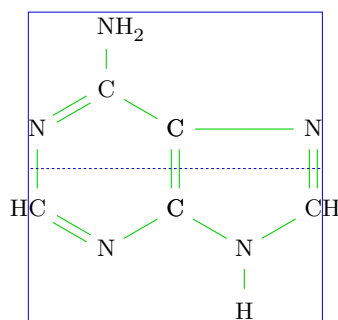
```

\startchemie
  [breedte=passend,hoogte=passend,kader=aan,
  schaal=klein]
\chemie
  [ONE,Z0,MOV7,SB1357,Z017,30FF5,MOV5,Z0,
  30FF5,MOV5,SB15,DB7,Z057,MOV0,MOV3,SB1357,
  Z013,MOV5,30FF5,Z0,60FF5,SB5,Z5]
  [\SL{NH},C,COOH,H,(CH_2)_3,C,H_2H,NH,C,COOH,H,
  (CH_2)_2,HOOC]
\stopchemie

```

Waar de voorkeur naar uitgaat hangt af van de smaak van programmeren en natuurlijk de gewenste typografische kwaliteit. Let op het gebruik van **SAVE** en **RESTORE**. Met deze commando's kan de huidige toestand worden vastgelegd en opgeroepen.

Tot slot laten we nog een voorbeeld zien van een combinatie van **SIX** en **FIVE**. Let op het gebruik van **SS**.

**Voorbeeld 5.17**

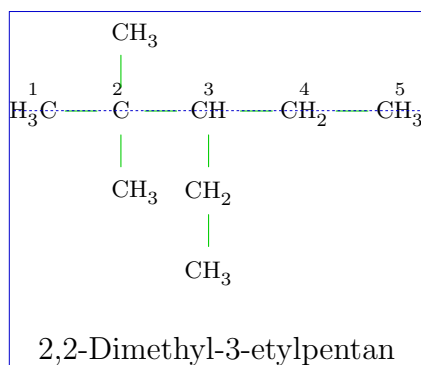
```

\startchemie
  [breedte=passend,hoogte=passend,kader=aan]
\chemie
  [SIX,DB135,SB246,Z,SR6,RZ6] [C,C,N,\SR{HC},N,C,NH_2]
\chemie
  [SIX,MOV1,DB1,SB23,SS6,Z1..5,SR3,RZ3] [N,\SL{CH},N,C,C,H]
\stopchemie

```

6 | Versieren

We kunnen structuurformules voorzien van symbolen en teksten. Neem bijvoorbeeld:



Voorbeeld 6.1

```
\startchemie
  [hoogte=4500,boven=1250,breedte=passend,kader=aan]
  \ondertekst
    {2,2-Dimethyl-3-ethylpentan}
  \chemie
    [ONE,Z3570,SB1357]
    [CH_3,\T{1}{H_3C},CH_3,\SR{\LT{2}{C}}]
  \chemie
    [MOV1,OFF1,Z0,SB3]
    [\T{3}{CH}]
  \chemie
    [MOV3,Z0,SB3,MOV3,Z0,MOV7,MOV7]
    [CH_2,CH_3]
  \chemie
    [OFF1,SB1,MOV1,OFF1,Z0,2OFF1,SB1,Z1]
    [\T{4}{CH_2},\T{5}{CH_3}]
\stopchemie
```

Er is een hele reeks commando's als `\T`. Hierbij zijn in een aantal gevallen de argumenten optioneel. Zo kunnen we ladingsgetallen in romeinse cijfers plaatsen met behulp van `\+` en `\-` of direct met `\1` tot en met `\7`.

<code>\+{nummer}</code>	positief romeins ladinggetal
<code>\-{nummer}</code>	negatief romeins ladinggetal
<code>\1</code>	het romeinse cijfer 1 (zonder teken)
<code>\7</code>	idem voor 2, 3, 4, 5, 6 en 7

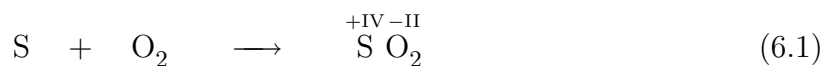
Tabel 6.1 Versieringen: ladinggetallen

Een ladinggetal wordt gecentreerd boven het atoom waar het betrekking op heeft. Zo resulteert:

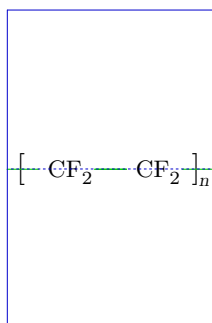
```
\plaatsformule
  \startformule
    \chemie{S}\chemie{O_2}
```

```
\chemie{GIVES}
\chemie{\+{4}{S}\-{2}{O_2}}
\stopformule
```

in:



We kunnen (eindeloze) reeksen weergeven met `\[` en `\]`. Hierbij zijn beide argumenten optioneel, zoals bijvoorbeeld blijkt in de onderstaande weergave van PTFE of Polytetrafluorethaan, beter bekend onder de naam Teflon.



Voorbeeld 6.2

```
\startchemie[breedte=passend,kader=aan]
\chemie
  [ONE,ZT5,SB5,OFF1,Z0,OFF1,SB1,MOV1,SB5,OFF1,Z0,OFF1,SB1,ZT1]
  [\[,CF_2,CF_2,\]\s1 n]
\stopchemie
```

<code>\[{\onder}</code>	<code>\[{\boven}{\onder}</code>	rechter herhalingsteken
<code>\]{\onder}</code>	<code>\]{\boven}{\onder}</code>	linker herhalingsteken

Tabel 6.2 Versieringen: herhalen

Natuurlijk kunnen we teksten links, rechts, boven of onder plaatsen. We kunnen de commando's `\L`, `\R`, `\T` en `\B` laten voorafgaan door `\X` als we de afstand wat kleiner willen hebben dan normaal.

<code>\L{tekst}</code>	tekst links plaatsen
<code>\R{tekst}</code>	tekst rechts plaatsen
<code>\T{tekst}</code>	tekst boven plaatsen
<code>\B{tekst}</code>	tekst onder plaatsen

Tabel 6.3 Versieringen: aan de kanten

Naast deze vier commando's kunnen we ook alle voor de hand liggende combinaties gebruiken, waaronder een centreeer optie.

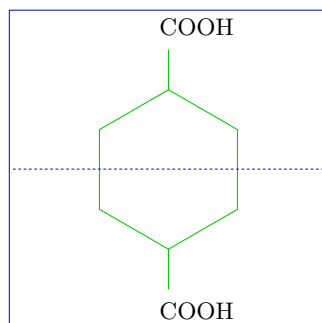
\oplus `\TL` \oplus `\L` \oplus `\LC` \oplus `\BL` `\TR` \oplus `\R` \oplus `\RC` \oplus `\BR` \oplus `\LT` \oplus `\T` \oplus `\RT` \oplus `\LB` \oplus `\B` \oplus `\RB`
 \oplus `\X\TL` \oplus `\X\L` \oplus `\X\LC` \oplus `\X\BL` `\X\TR` \oplus `\X\R` \oplus `\X\RC` \oplus `\X\BR` \oplus `\X\LT` \oplus `\X\T` \oplus `\X\RT` \oplus `\X\LB` \oplus `\X\B` \oplus `\X\RB`

Weer een ander geval is wat we in T_EX terminologie *smashed* tekst noemen.

<code>\SL{tekst}</code>	links uitlijnen
<code>\SM{tekst}</code>	midden uitlijnen
<code>\SR{tekst}</code>	rechts uitlijnen

Tabel 6.4 Versieringen: *smashed* tekst

De midden variant is hieronder weergegeven, de andere laten zich hieruit afleiden. De tekst wordt wel gecentreerd rond het eerste karakter.



Voorbeeld 6.3

```

\startchemie[kader=aan]
  \chemie[SIX,B,R36,RZ36][\SL{COOH},\SL{COOH}]
\stopchemie

```

We kunnen teksten boven, onder of midden in structuren plaatsen met de commando's `\boventekst`, `\midentekst` en `\ondertekst`. De exacte positie wordt bepaald door de hoogte en diepte van de structuurformule.

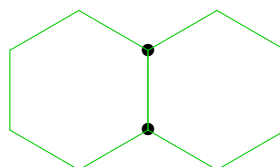
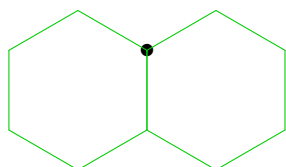
```

\plaatsformule
  \startformule
    \startchemie[breedte=passend]
      \chemie[SIX,B,Z1,MOV1,B][\hbox{\$bullet\$}]
      \boventekst{\sl trans}-Decalin
    \stopchemie
    \hskip 24pt
    \startchemie[breedte=passend]
      \chemie[SIX,B,Z12,MOV1,B][\hbox{\$bullet\$},\hbox{\$bullet\$}]
      \ondertekst{\sl cis}-Decalin
    \stopchemie
  \stopformule

```

Beide *Decalin* formules zien er als volgt uit:

trans-Decalin

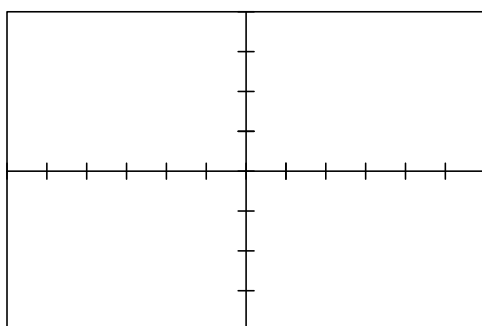


(6.2)

cis-Decalin

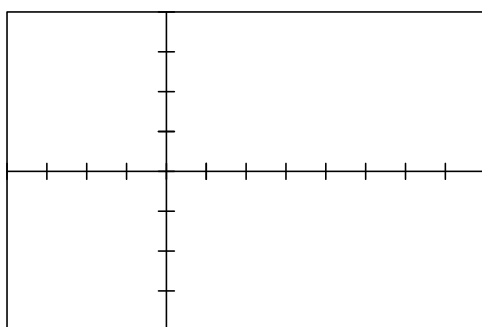
7 | Assenstelsel

Structuren worden gezet in een afgeperkte ruimte, gemakshalve aangeduid als assenstelsel. De afmetingen van dit stelsel en de plaats van de oorsprong 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.



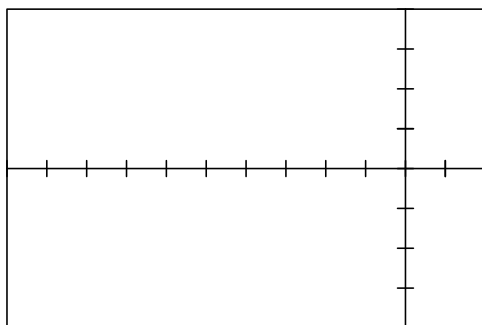
Voorbeeld 7.1

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



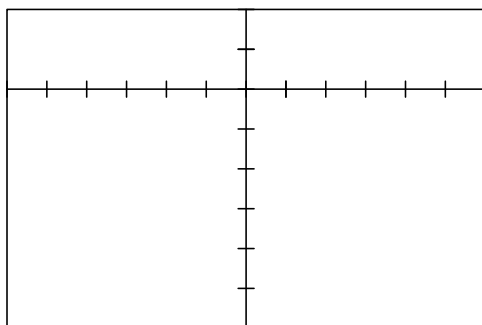
Voorbeeld 7.2

```
\startchemie
  [assenstelsel=aan,
   links=2000,rechts=4000]
\stopchemie
```



Voorbeeld 7.3

```
\startchemie
  [assenstelsel=aan,
   breedte=6000,rechts=1000]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 7.4**

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

De afmetingen van het assenstelsel bepalen de afmeting van de totale structuur. Als echter **breedte=passend** en/of **hoogte=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 7.1** toont de standaardinstellingen.

Binnen een `\start`–`\stop`–paar kunnen `PfCTEX`–macro's worden gebruikt. Enige voorzichtigheid is daarbij natuurlijk wel geboden.

8 | Instellingen

Achter `\startchemie` en `\stelchemiein` kunnen verschillende instellingen worden meegegeven.

variabele	instellingen	default
breedte	getal	4000
hoogte	getal	4000
links	getal	
rechts	getal	
boven	getal	
onder	getal	
resolutie	getal	<code>\outputresolution</code>
korps	8pt 9pt 10pt enz.	<code>\bodyfontsize</code>
letter	<code>\rm \bf</code> enz.	<code>\rm</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
offset	HIGH LOW	LOW

Tabel 8.1 Instellingen bij structuurformules.

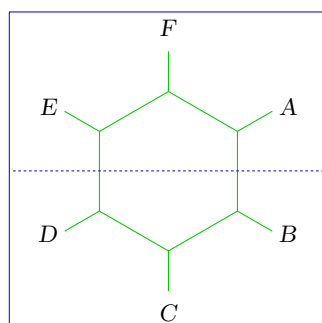
Standaard loopt het assenstelsel van -2000 tot $+2000$, zowel in de hoogte als in de breedte. Het punt Z0 ligt daarbij op $(0,0)$. Andere verdelingen kunnen worden ingesteld met behulp van `links`, `rechts`, `boven` en/of `onder` in combinatie met `breedte` en `hoogte`.

Met `formaat` kan de afmeting van de karakters worden ingesteld. Er wordt daarbij achter de schermen gebruik gemaakt van de \TeX -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.

De instelling `korps` wordt gebruikt voor berekeningen en heeft geen gevolgen voor de lopende tekst. Binnen `CONTEX`T en `LATEX` is deze instelling gekoppeld aan het mechanisme dat het `korps` instelt.

Zowel in `TEX` als in `CONTEX`T kan in de wiskundige mode gebruik gemaakt worden van commando's als `\rm`, `\bf` en `\sl`. Standaard maakt `PPCHTEX` gebruik van `\rm`. Met de instelling `letter` kan een andere variant worden ingesteld. In **voorbeeld 8.1** zijn de substituenten bijvoorbeeld *slanted* gezet.

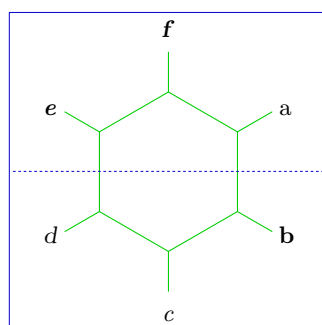


Voorbeeld 8.1

```
\startchemie[kader=aan,letter=\sl]
  \chemie[SIX,B,R,RZ][A,B,C,D,E,F]
\stopchemie
```

De instelling `letter` geldt (vooral nog) voor zowel chemische formules in de tekst als die in een figuur. De sub- en superscripts veranderen mee, zoals blijkt uit: CH_4 , **CH_4** en *CH_4* , waarbij de instellingen achtereenvolgens zijn: `\rm`, `\bf` en `\sl`. Italic `\it` formules leiden tot grotere regelafstanden. Binnen `CONTEX`T zijn standaard ook bold-slanted (`\bs`) en bold-italic (`\bi`) beschikbaar. Deze commando's passen zich automatisch aan de actuele stijl aan: *CH_4* , ***CH_4*** , ***CH_4*** enz. (`\ss`, `\rm`, `\tt`).

Natuurlijk kunnen we ook direct lettertypes instellen, zoals uit het volgende voorbeeld blijkt.

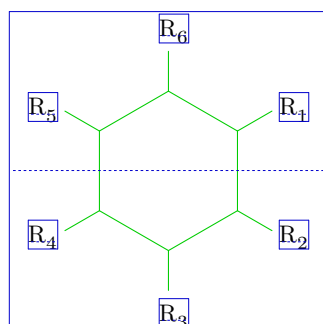


Voorbeeld 8.2

```
\startchemie[kader=aan]
  \chemie[SIX,B,R,RZ][\tf a,\bf b,\it c,\sl d,\bi e,\bs f]
\stopchemie
```

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.³ Met `variant` stellen we de kwaliteit van de lijnen in. Standaard gebruikt $\text{P}\text{T}\text{E}\text{X}$ een 5 punts `.` om lijnen te tekenen. Als variant 2 wordt gekozen, worden kleinere punten gebruikt en dus dunnere lijnen getekend.

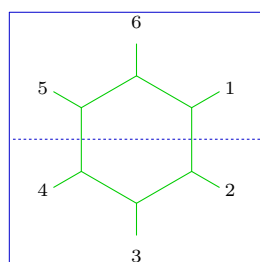


Voorbeeld 8.3

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

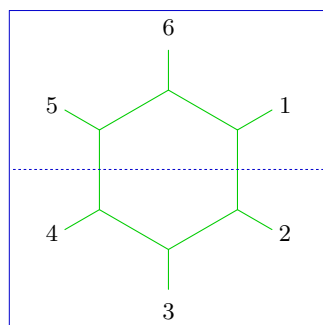
De offset heeft betrekking op de positie van de sub- en superscripts. Bij `HIGH` worden de subscripts hoog geplaatst (H_2O) en bij `LOW` vanzelfsprekend wat lager (H_2O).

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



Voorbeeld 8.4

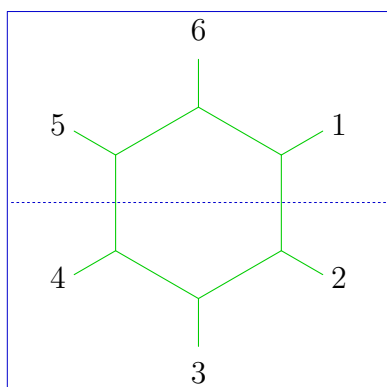
```
\startchemie[kader=aan,schaal=klein,formaat=klein]
  \chemie[SIX,B,R,RZ] [1,2,3,4,5,6]
\stopchemie
```



Voorbeeld 8.5

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

³ Binnen $\text{CON}\text{T}\text{E}\text{X}\text{T}$ wordt gebruik gemaakt van de weergave in de visuele debugger. Deze toont de baseline als een stippellijn. De module `supp-vis` is overigens ook in andere systemen te gebruiken.

**Voorbeeld 8.6**

```
\startchemie[kader=aan,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.

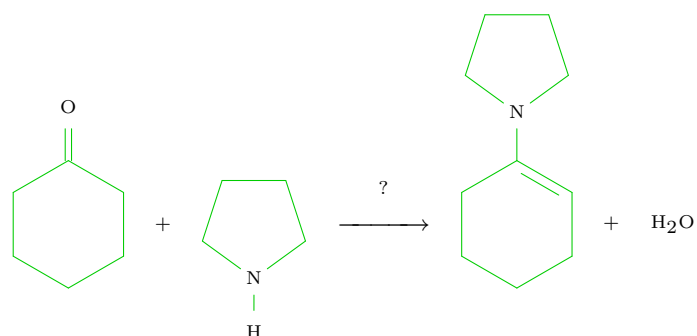
9 | Symbolen

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
  [formaat=klein,
   schaal=klein,
   breedte=passend,
   hoogte=5500,
   onder=1500]

\hbox
  {\startchemie
   \chemie[SIX,B,ER6,RZ6] [O]
   \stopchemie
   \startchemie
   \chemie[SPACE,PLUS,SPACE]
   \stopchemie
   \startchemie
   \chemie[FIVE,ROT4,B125,+SB3,-SB4,Z4,SR4,RZ4] [N,H]
   \stopchemie
   \startchemie
   \chemie[SPACE,GIVES,SPACE] [?]
   \stopchemie
   \startchemie
   \chemie[SIX,B,EB6,R6,SUB4,FIVE,ROT4,B125,+SB3,-SB4,Z4] [N]
   \stopchemie
   \startchemie
   \chemie[SPACE,PLUS,SPACE,CHEM] [H_20]
   \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 '??'.

Naast **GIVES** en **EQUILIBRIUM** is ook **MESOMERIC** beschikbaar. Daarnaast kunnen complexen worden gezet met behulp van **OPENCOMPLEX** en **CLOSECOMPLEX**.

10 | Positioneren

Bij het combineren van moleculen, bijvoorbeeld met `SUB`, wisselen een aantal kenmerkende maten en posities, zoals het middelpunt. Het is daarom mogelijk de oude toestand te bewaren en weer op te roepen met `SAVE` en `RESTORE`.

<code>SAVE</code>	Save Status	het opslaan van de huidige toestand
<code>RESTORE</code>	Restore Status	het herstellen van de huidige toestand

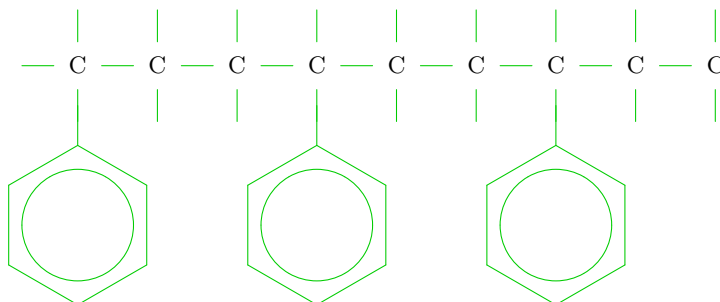
Tabel 10.1 Positioneren.

We gebruiken de commando's `SAVE` en `RESTORE` vooral bij substituenten, Bij radicalen vallen we veelal terug op `PB` en `PE`, wat in feite positioneringscommando's zijn.

```
\definieerchemie[molecuul]
  {\chemie
    [ONE,ZO,SB1357,
     SAVE,SUB2,SIX,B,R6,C,RESTORE,
     MOV1,ZO,SB137,
     MOV1,ZO,SB37,
     MOV1]
    [C,C,C]}

\startchemie[breedte=passend,hoogte=passend]
  \chemie[molecuul,molecuul,molecuul]
\stopchemie
```

Dit voorbeeld toont tevens de mogelijkheid verschillende moleculen aaneen te schakelen tot ketens.



Het onderstaande voorbeeld is wat geavanceerder en toont tevens de mogelijkheid formules te zetten. Bij dergelijke formules is het instellen van de hoogte belangrijk.

```

\plaatsformule
\startformule
\stelchemiein
[breedte=passend,boven=2000,onder=2000,
schaal=klein,formaat=klein]
\startchemie
\chemie
[ONE,
SAVE,
Z0,SB7,SB3,SB1,MOV1,Z0,SB1,MOV1,Z0,DB8,CZ8,SB1,Z1,
RESTORE,
SAVE,
SUB4,ONE,Z0,SB3,SB1,MOV1,Z0,SB1,MOV1,Z0,DB8,CZ8,SB1,Z1,
RESTORE,
SUB2,ONE,Z0,SB7,SB1,MOV1,Z0,SB1,MOV1,Z0,DB8,CZ8,SB1,Z1]
[\SR{HC},0,C,0,C_{19}H_{39},
\SR{H_{2}C},0,C,0,C_{17}H_{29},
\SR{H_{2}C},0,C,0,C_{21}H_{41}]
\stopchemie
\startchemie
\chemie[SPACE,PLUS,SPACE]
\stopchemie
\startchemie[rechts=600]
\chemie[ONE,CZ0][3CH_{3}OH]
\stopchemie
\startchemie
\chemie[SPACE,GIVES,SPACE,SPACE][H^{+}/H_{20}]
\stopchemie
\startchemie
\chemie
[ONE,
SAVE,
Z0,SB7,SB3,SB1,Z1,
RESTORE,
SAVE,
SUB4,ONE,Z0,SB3,SB1,Z1,
RESTORE,
SUB2,ONE,Z0,SB7,SB1,Z1]
[\SR{HC},OH,

```

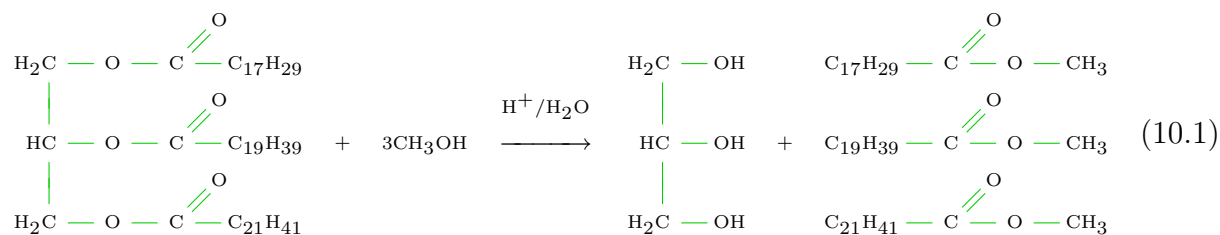


```

\SR{H_{2}C},OH,
\SR{H_{2}C},OH]
\stopchemie
\startchemie
\chemie[SPACE,PLUS,SPACE]
\stopchemie
\startchemie
\chemie
[ONE,
SAVE,
Z0,DB8,CZ8,SB1,SB5,Z5,MOV1,Z0,SB1,Z1,
RESTORE,
SAVE,
SUB4,ONE,Z0,DB8,CZ8,SB1,SB5,Z5,MOV1,Z0,SB1,Z1,
RESTORE,
SUB2,ONE,Z0,DB8,CZ8,SB1,SB5,Z5,MOV1,Z0,SB1,Z1]
[C,O,C_{19}H_{39},O,CH_{3},
C,O,C_{17}H_{29},O,CH_{3},
C,O,C_{21}H_{41},O,CH_{3}]
\stopchemie
\stopformule

```

Deze definitie zou wat compacter kunnen (SB731 in plaats van SB7,SB3,SB1) maar dit komt de leesbaarheid niet altijd ten goede. Dergelijke omvangrijke structuren kan men overigens het best stapsgewijs opbouwen in een aparte file (eventueel lekker snel in PLAIN T_EX).



We geven nog twee voorbeelden waarin we bovendien tekst plaatsen onder de structuur.

```

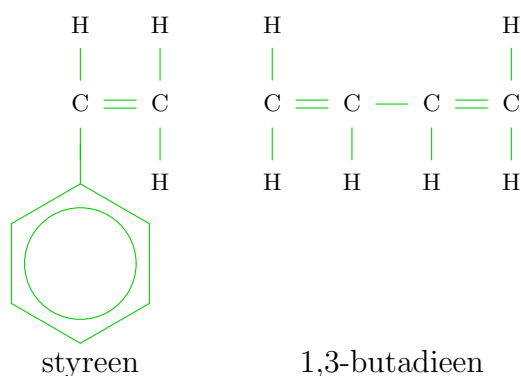
\plaatsformule
\startformule
\stelchemiein
[breedte=passend,boven=1500,onder=3500]
\startchemie
\chemie

```

```

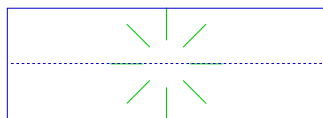
[ONE,ZO,DB1,SB3,SB7,Z7,MOV1,ZO,SB3,SB7,Z3,Z7,
MOV0,SUB2,SIX,B,R6,C]
[C,H,C,H,H]
\ondertekst{styreen}
\stopchemie
\quad\quad\quad
\startchemie
\chemie
[ONE,ZO,DB1,SB3,SB7,Z3,Z7,
MOV1,ZO,SB1,SB3,Z3,
MOV1,ZO,DB1,SB3,Z3,
MOV1,ZO,SB3,SB7,Z3,Z7]
[C,H,H,C,H,C,H,C,H,H]
\ondertekst{1,3-butadien}
\stopchemie
\stopformule

```



(10.2)

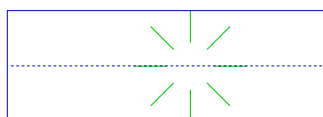
Het gebruik van `OFF` kijkt soms nauw. De onderstaande voorbeelden laten zien dat subtiële verplaatsingen mogelijk zijn.

**Voorbeeld 10.1**

```

\startchemie[hoogte=passend,kader=aan]
\chemie[ONE,SB]
\stopchemie

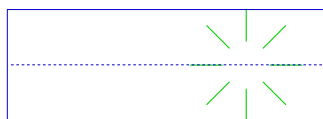
```

**Voorbeeld 10.2**

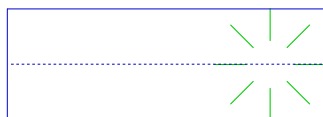
```

\startchemie[hoogte=passend,kader=aan]
\chemie[ONE,3OFF1,SB]
\stopchemie

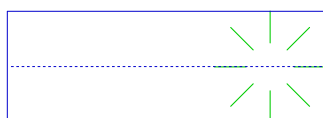
```

**Voorbeeld 10.3**

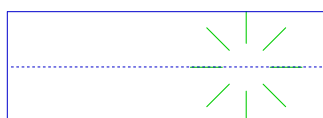
```
\startchemie[hoogte=passend,kader=aan]
\chemie[ONE,MOV1,SB]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 10.4**

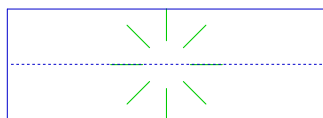
```
\startchemie[hoogte=passend,kader=aan]
\chemie[ONE,3OFF1,MOV1,SB]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 10.5**

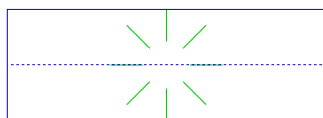
```
\startchemie[hoogte=passend,kader=aan]
\chemie[ONE,MOV1,3OFF1,SB]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 10.6**

```
\startchemie[hoogte=passend,kader=aan]
\chemie[ONE,MOV1,3OFF1,OFF0,SB]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 10.7**

```
\startchemie[hoogte=passend,kader=aan]
\chemie[ONE,MOV1,3OFF1,MOV0,SB]
\stopchemie
```

**Voorbeeld 10.8**

```
\startchemie[hoogte=passend,kader=aan]
\chemie[ONE,MOV1,MOV0,SB]
\stopchemie
```

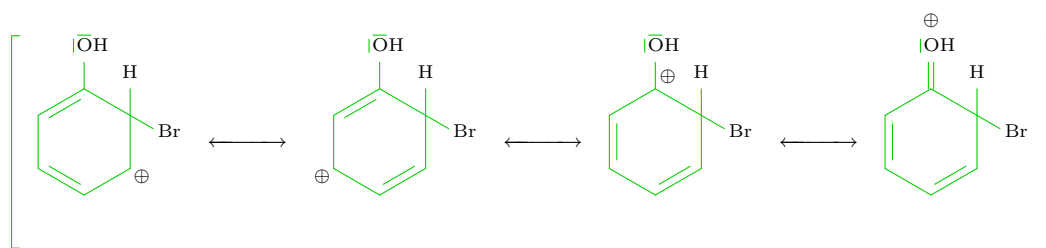
Het volgende voorbeeld laat zien hoe complexen kunnen worden weergegeven. Let op het gebruik van `RBT`. Normaal is de extra spatiring niet nodig, maar hier gebruiken we —het commando is niet zichtbaar— een nog kleiner lettertype omdat de figuur anders te breed wordt.

```

\startformule
\stelchemiein[schaal=klein,breedte=passend]
\startchemie
  \chemie[OPENCOMPLEX,SPACE]
\stopchemie
\startchemie
  \chemie[SIX,B,EB35,R6,-R1,+R1]
  \chemie[SIX,PB:RZ6,ONE,OFF1,Z0,EP57,PE][\SL{OH}]
  \chemie[SIX,-RZ1,+RZ1,RT2][H,Br,\oplus]
\stopchemie
\startchemie
  \chemie[SPACE,MESOMERIC,SPACE]
\stopchemie
\startchemie
  \chemie[SIX,B,EB25,R6,-R1,+R1]
  \chemie[SIX,PB:RZ6,ONE,OFF1,Z0,EP57,PE][\SL{OH}]
  \chemie[SIX,-RZ1,+RZ1,RT4][H,Br,\oplus]
\stopchemie
\startchemie
  \chemie[SPACE,MESOMERIC,SPACE]
\stopchemie
\startchemie
  \chemie[SIX,B,EB24,R6,-R1,+R1]
  \chemie[SIX,PB:RZ6,ONE,OFF1,Z0,EP57,PE][\SL{OH}]
  \chemie[SIX,-RZ1,+RZ1,RBT6][H,Br,\ \oplus]
\stopchemie
\startchemie
  \chemie[SPACE,MESOMERIC,SPACE]
\stopchemie
\startchemie
  \chemie[SIX,B,EB24,ER6,-R1,+R1]
  \chemie[SIX,PB:RZ6,ONE,OFF1,Z0,EP5,ZT7,PE][\SL{OH},\oplus]
  \chemie[SIX,-RZ1,+RZ1][H,Br]
\stopchemie
\startchemie
  \chemie[SPACE,CLOSECOMPLEX]
\stopchemie
\stopformule

```

Zonder het gebruik van `SPACE` zouden de verschillende afbeeldingen te dicht op elkaar komen te staan. Het optimaliseren van het afbeelden van dergelijke reactievergelijkingen is meestal een iteratief proces.



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}{onder tekst}
\chemie{formule}{boven tekst}{onder tekst}
```

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

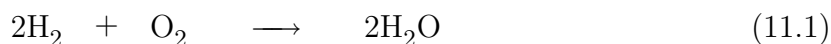
- tekst-mode
- wiskundige tekst-mode
- wiskundige display-mode

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.

Hetzelfde resultaat wordt bereikt als het commando tussen `$ $` wordt geplaatst. In beide gevallen wordt het tweede en derde argument dus weggelaten. Als we het commando tussen `$$ $$` (of `\startformule` en `\stopformule`) plaatsen, dan hebben de extra (maar facultatieve) argumenten wel een functie. Eerst laten we de eenvoudige variant zien.

```
\plaatsformule
  \startformule
    \chemie{2H_2} \chemie{PLUS} \chemie{O_2}
    \chemie{GIVES} \chemie{2H_2O}
  \stopformule
```

levert:



Het chemische deel kan ook korter worden gespecificeerd:

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

of zelfs:

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

Het zal de $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -kenner opvallen dat zowel het plus-teken als de pijl op de baseline staan. Vergelijk $+$ maar eens met $+$. Er is namelijk voor gezorgd dat, onafhankelijk van het formaat van weergeven, de $+$ en de \longrightarrow in elkaars verlengde liggen.

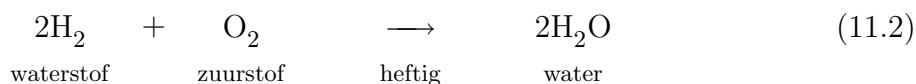
Naast PLUS en GIVES kan EQUILIBRIUM ($\langle - \rangle$) worden opgegeven, wat de dubbele pijlen \rightleftharpoons oplevert. Met MESOMERIC of $\langle \rangle$ krijgt men \longleftrightarrow .

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 daarnaast mogelijk bindingen weer te geven. Zo levert `\chemie{H,SINGLE,CH,DOUBLE,HC,SINGLE,H}` 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 en derde argument kunnen worden gebruikt om een toelichting op de formule te geven:

```
\plaatsformule
\startformule
\chemie{2H_2}{waterstof} \chemie{PLUS} \chemie{O_2}{zuurstof}
\chemie{GIVES}{heftig} \chemie{2H_2O}{water}
\stopformule
```

We kunnen dus ook onder (en boven) symbolen plaatsen!



Er zijn maximaal drie argumenten mogelijk, waarbij het laatste argument onder wordt geplaatst.



De bovenstaande formule is gezet met:

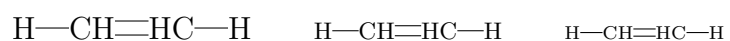
```
\plaatsformule
\startformule
\chemie{H_2O}{liquid}{water}
\hbox{c.q.}
\chemie{H_2O}{water}
\stopformule
```

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

variabele	instellingen	default
tekstformaat	klein middel groot	groot

Tabel 11.1 Instellingen bij tekstformules.

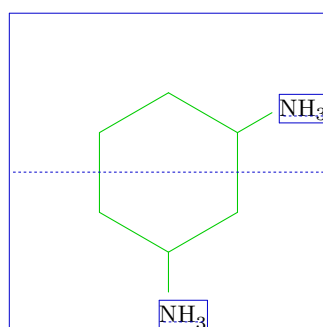
Het commando `\chemie{H,SINGLE,CH,DOUBLE,HC,SINGLE,H}` levert bij achtereenvolgens de instellingen `groot`, `middel` en `klein` de formules:



12 | Subscripts

Sub- en superscripts worden, zoals door Knuth in het $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ Book wordt aanbevolen, wat lager geplaatst. Zo is het in het $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ Book 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: $\text{Fe}_2^{+2}\text{Cr}_2\text{O}_4$.

De plaats van het subscript wordt standaard bepaald door de instelling van `offset`: `HIGH` of `LOW`. Deze instelling kan worden overruled door de gelijknamige commando's.

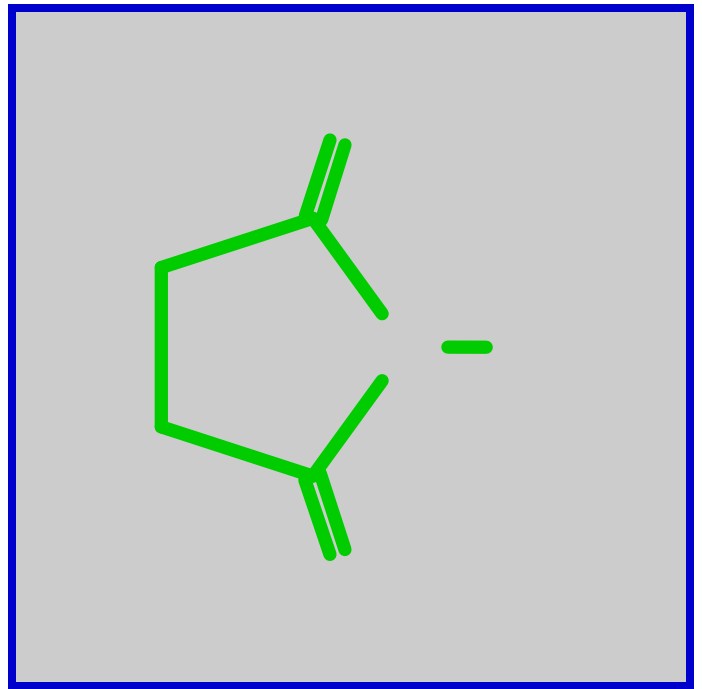


Voorbeeld 12.1

```
\startchemie[kader=aan,optie=test,variant=2]
  \chemie[SIX,B,R13,HIGH,RZ1,LOW,RZ3][NH_3,NH_3]
\stopchemie
```

Hoewel dus per substituent de plaats van het subscript kan worden ingesteld, verdient het aanbeveling deze instelling globaal te doen, zodat de formules onderling consistent worden gezet.

De keywords `LOW` en `HIGH` kunnen ook worden gebruikt in tekstformules, zo resulteert `\chemie{HIGH,H_2O}` in H_2O en `\chemie{LOW,H_2O}` in H_2O .



Deel 2
Achtergronden

1 | Installatie

Het pakket `PPCHTEX` is in eerste instantie ontwikkeld voor gebruik binnen `CONTEX`. Binnen dit macropakket kan `PPCHTEX` worden geactiveerd met het commando:¹

```
\gebruikmodules[pictex,chemie]
```

Dit commando laad eerst de `PCTEX` macros zodat `PPCHTEX` weet welke output gewenst is. De chemie macro's zijn dus niet standaard beschikbaar.

Daarnaast kan het pakket worden gebruikt in combinatie met `PLAIN TEX` of `LATEX`. In dat geval wordt tevens de file `m-chemie.sty` gebruikt. Het activeren van `PPCHTEX` vindt in dat geval plaats door middel van `\documentstyle`:

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

In `LATEX2ε` ziet het er wat anders uit:

```
\usepackage{m-pictex}
\usepackage{m-chemie}
```

De file `m-pictex` zorgt er voor dat `PCTEX` zo efficiënt mogelijk wordt geladen. Dit is nodig omdat `LATEX`, zeker als er wat style files worden geladen, nogal wat `\dimen`'s allocceert. Overigens is als gevolg van de gebruikersinterface een wat grotere versie van `TEX` nodig dan de standaard implementatie. Meestal is deze wel voorradig.

`PPCHTEX` kan in verschillende talen worden toegesproken. De actuele taal hangt af van de wijze van laden:

versie	files
nederlandstalige versie	<code>m-che-nl = m-chemie.sty</code>
engelstalige versie	<code>m-che-en = m-chemic.sty</code>
duitstalige versie	<code>m-che-de</code>

In de file `ppchtex.noc` is te zien hoe buiten `CONTEX` de koppeling met het omhullende macropakket (kan) worden gelegd. Deze file laad bovendien een van de systeem modules van `CONTEX` en sluit wat zaken kort die niet beschikbaar zijn buiten dit pakket.

¹ De eigenlijke macro's staan in de file `ppchtex.tex`, die wordt geladen in `m-chemie.tex` (de `m` staat hier voor module).

De totale distributie bestaat dus uit de definitie-files `ppchtex.tex` en `ppchtex.noc` de opstart-files `m-che-nl.tex`, `m-che-en.tex` en `m-che-de.tex` en de alternatieve opstart-files `m-chemie.tex` en `m-chemic.tex`.

2 | Uitbreidbaarheid

Het staat de gebruikers van PPCH_TE_X natuurlijk vrij de macro's die eraan ten grondslag liggen ook op een andere 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.

Omdat PPCH_TE_X in eerste instantie is bedoeld (en ontwikkeld) als een module bij CON_TE_XT, verstaat het pakket meerdere talen. Op dit moment worden een nederlands-, engels- en duitstalige interface ondersteund.

Een blik in de file `ppchtex.tex` leert dat bij het interpreteren van de in `\chemie` tussen `[]` opgegeven commando's, gebruik wordt gemaakt van `\processaction`-macro's. Deze macro's zijn, omdat ook hier zowel nesting als een overzichtelijke layout mogelijk moet zijn, relatief traag. Daar staat tegenover dat de PPCH_TE_X-macro's inzichtelijk blijven. Inmiddels zijn zowel de macro's zelf als het gebruik van de macro's binnen PPCH_TE_X redelijk geoptimaliseerd. Testen met de stopwatch hebben geleerd dat verdere optimalisatie nauwelijks tijdwinst oplevert en wel ten koste gaat van de flexibiliteit.

Bij het ontwikkelen van PPCH_TE_X is rekening gehouden met de wijze waarop commando's binnen de produktie-omgeving T_EXEDIT worden weergegeven. In dit programma worden T_EX-commando's en symbolen met een speciale functie in kleur weergegeven, zoals hierboven.

3 | Fonts

De macro's maken gebruik van de wiskundige mode en dientengevolge van `\textfont`, `\scriptfont` en `\scriptscriptfont`. Wanneer dat nodig is, worden de `\fontdimen`'s 14, 16 en 17 van `\font2` aangepast. Daarbij wordt rekening gehouden met de actuele korps-grootte, die wordt afgeleid uit de x -height (`\fontdimen5`).

Wijzigingen in de `\fontdimen`'s hebben een globaal karakter, zodat groeperen geen zin heeft. Vandaar dat de dimensies steeds worden geset en gereset. De huidige oplossing is misschien niet de beste, maar andere oplossingen geven problemen met geschaalde fonts.

Het plaatsen van de atomen en moleculen (tekst) kost relatief veel procestijd. Deze snelheid hangt mede af van de complexiteit van de aangeropen macro `\rm`. Een meer efficiënte implementatie is mogelijk.

4 | Definities

PPCH_TE_X sluit voor wat betreft de interactie aan bij CON_TE_XT. Dit betekent dat de interface meertalig is. Tegenover het voordeel dat een ieder in zijn eigen taal kan communiceren met het pakket, staat het nadeel dat gemeenschappelijk gebruik van macro's wat lastiger is.

Op dit moment zijn veel onderliggende commando's van CON_TE_XT nederlandstalig. Hetzelfde geldt voor de parameters. PPCH_TE_X heeft echter al wel engelstalige commando's. Om internationaal gebruik mogelijk te maken, moeten bibliotheken worden gedefinieerd met engelstalige commando's, bijvoorbeeld:

```
\startchemical
  \chemical[SIX,B,C]
\stopchemical
```

Instellingen zijn wat lastiger. We gebruiken daarvoor systeemconstanten en variabelen, die helaas op dit moment nog nederlandstalig zijn. Op niet al te lange termijn zullen echter ook deze engelstalig zijn. Gelukkig zijn de constanten en variabelen goed te herkennen, zodat aanpassen niet moeilijk is.

```
\setupchemical[\c!breedte=10cm,\c!hoogte=\v!passend]
```

Parameters worden voorafgegaan door `\c!` en instellingen met `\v!`. Dit gaat alleen goed als `!` een letter is. Daarom moeten dergelijke instellingen worden omringt door `\unprotect` en `\protect`. We krijgen dus bijvoorbeeld:

```
\unprotect

\setupchemical[\c!breedte=10cm,\c!hoogte=\v!passend]

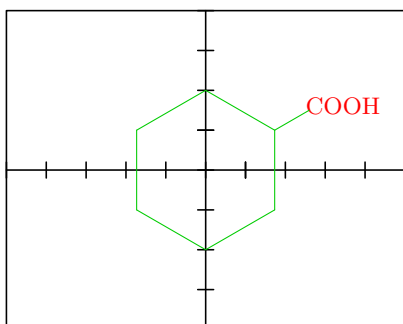
\startchemical
  \chemical[SIX,B,C]
\stopchemical
```

```
\protect
```

Meer informatie over de interface en de werking ervan is te vinden in de documentatie van de CON_TE_XT modules uit de `mult` groep.

5 | Kleur

Het is (binnen `CONTEXT`) mogelijk delen van een structuur te kleuren. In **voorbeeld 5.1** wordt zowel de substituent als de binding naar de substituent rood gekleurd.



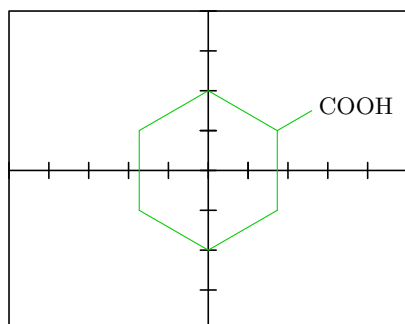
Voorbeeld 5.1

```
\startchemie[assenstelsel=aan,kader=aan,breedte=5000]
\chemie[SIX,B]
\kleur[rood]{\chemie[SIX,R1,RZ1][COOH]}
\stopchemie
```

Het kleur-mechanisme dient natuurlijk wel eerst te zijn geactiveerd met het commando `\stelkleurenin[status=start]`.

6 | Interactie

PPCH_TE_X ondersteunt, althans bij gebruik met CON_TE_XT, het opmaken van interactieve teksten. Onder een interactieve tekst verstaan we een tekst die kan worden geraadpleegd op de computer, waarbij delen van die tekst actief kunnen zijn. Dat wil zeggen dat het aanklikken van bijvoorbeeld een woord resulteert in het gaan naar de toelichting die bij dit woord hoort. In de tekst op COOH klikken kan bijvoorbeeld als gevolg hebben dat de cursor op de betreffende substituent in een structuur gaat staan. Andersom kan klikken op de substituent tot gevolg hebben dat naar de uitleg over deze substituent wordt gesprongen.



Voorbeeld 6.1

```
\startchemie[assenstelsel=aan,kader=aan,breedte=5000]
\chemie[SIX,B]
\chemie[sub:cooh][SIX,R1,RZ1][COOH]
\stopchemie
```

We zien dat er een derde argument wordt meegegeven: de verwijzing `[sub:cooh]`. Dit betekent dat we vanuit de tekst kunnen verwijzen naar de substituent COOH:

```
... tekst ... \naar{\chemie{COOH}}[sub:cooh] ... tekst ...
```

Hierbij is `\naar` een CON_TE_XT-commando. Klikken op de als zodanig gemarkeerde tekst resulteert dus in het plaatsen van de cursor bij de substituent in de afbeelding.

Andersom kan ook. We kunnen vanuit een structuur verwijzen naar een tekst. De verwijzing moet natuurlijk wel bestaan.

Klikken op COOH in de figuur resulteert in het springen naar een bijbehorende tekst, bijvoorbeeld gemarkeerd met:

```
\paragraaf[txt:cooh]{Substituenten}
```

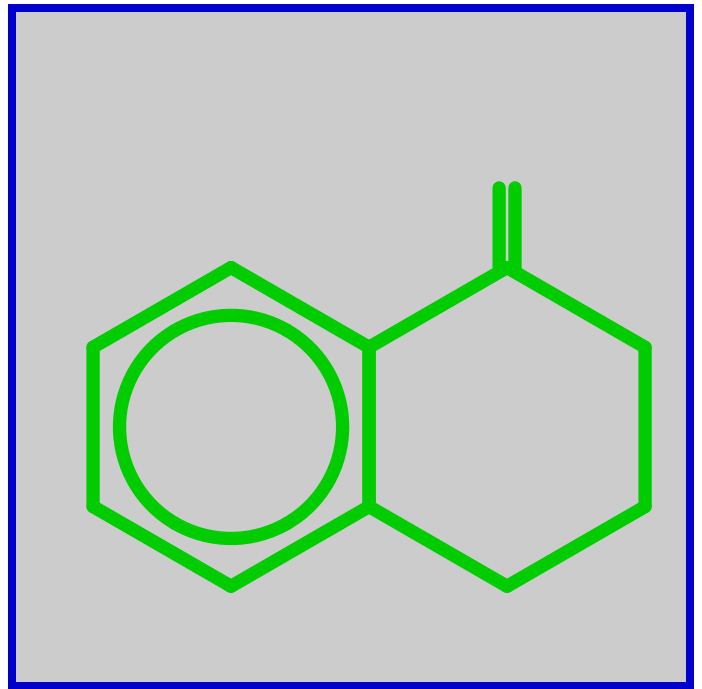
```
... tekst ... \chemie{COOH} ... tekst ...
```

Een combinatie is ook mogelijk. In dat geval is het verstandig eerst te markeren met `\chemie` en vanuit de formule te verwijzen met `\naarchemie`.

De koppeling met het interactiemechanisme loopt via de macro's:

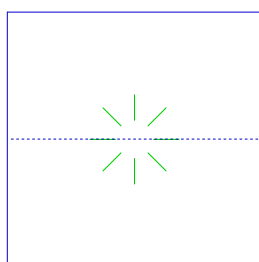
```
\localgotochemical {verwijzing} {tekst}  
\localthisischemical {verwijzing}
```

Voor meer uitleg verwijzen we naar de source. Deze koppeling kan ook voor andere doeleinden worden gebruikt. Enige ervaring met T_EX strekt daarbij wel tot aanbeveling.

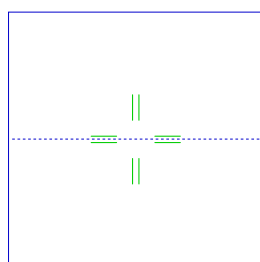


Deel 3
Overzichten

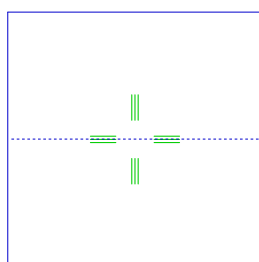
1 | One



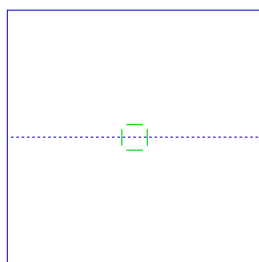
SB



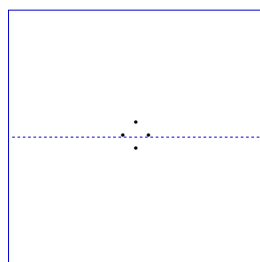
DB



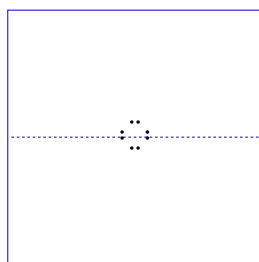
TB



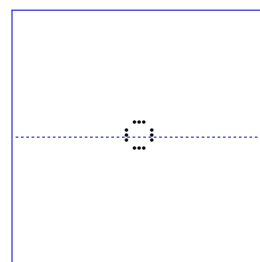
EP



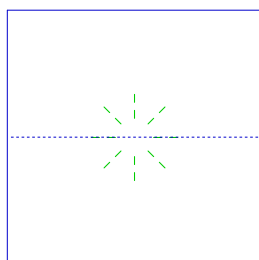
ES



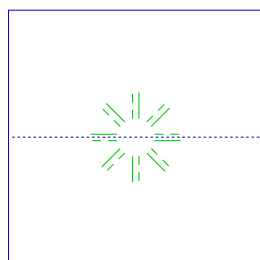
ED



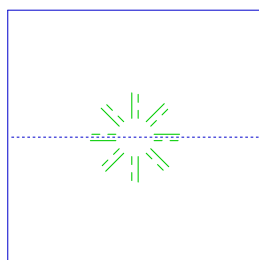
ET



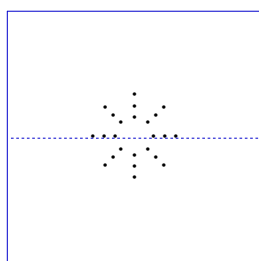
SD



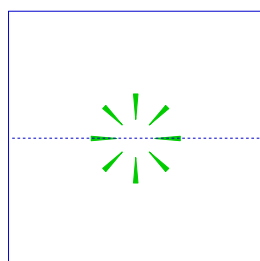
LDD



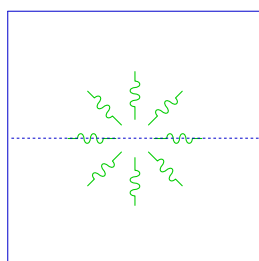
RDD



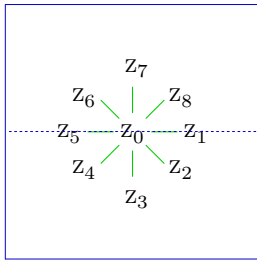
HB



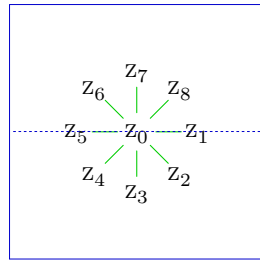
BB



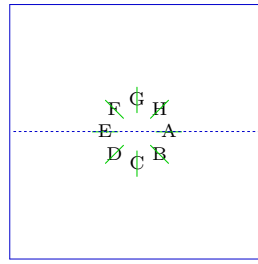
OE



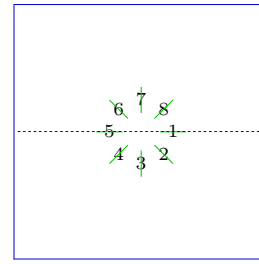
Z



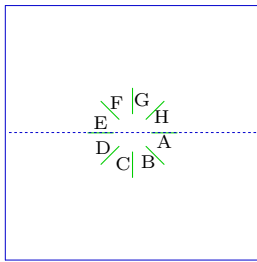
CZ



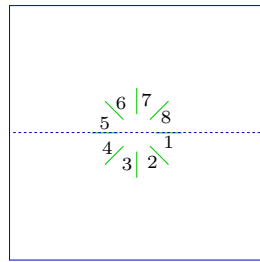
ZT



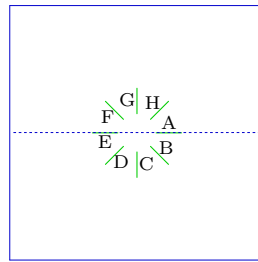
ZN



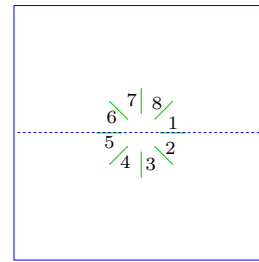
ZBT



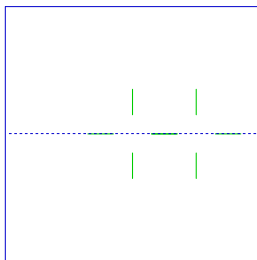
ZBN



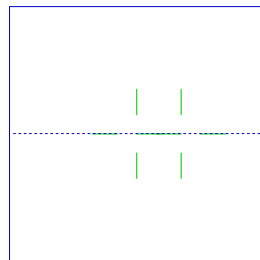
ZTT



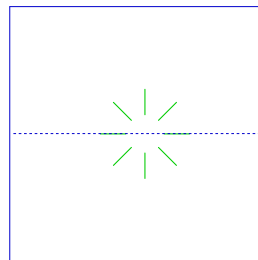
ZTN



MOV

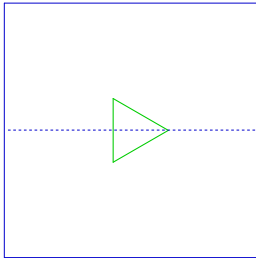


DIR

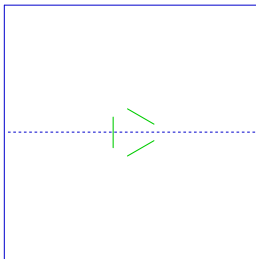


OFF

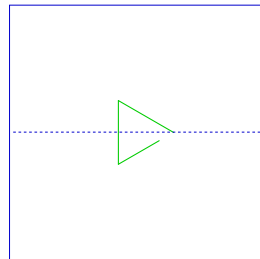
2 | Three



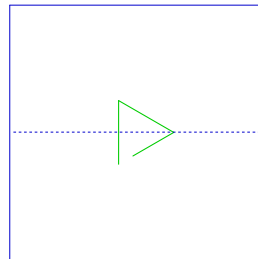
B



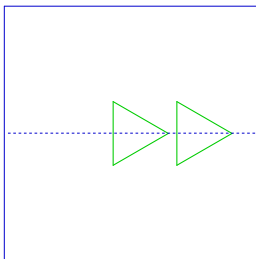
SB



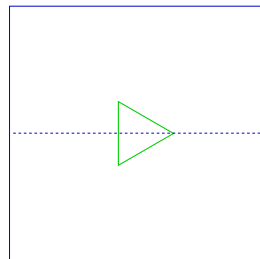
-SB



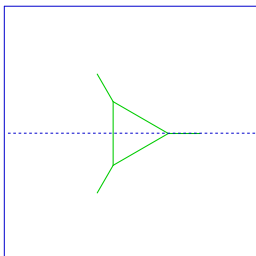
+SB



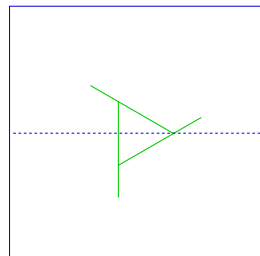
MOV



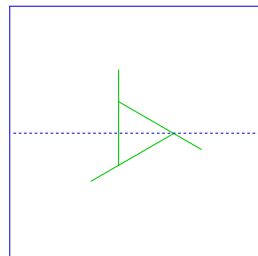
ROT



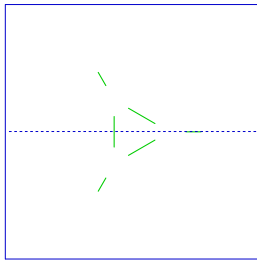
R



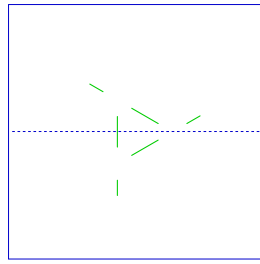
-R



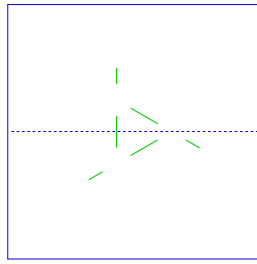
+R



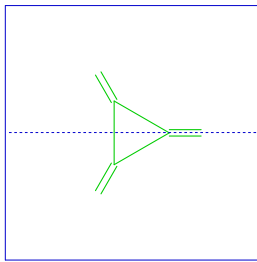
SR



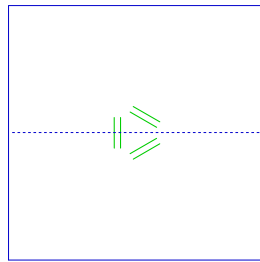
-SR



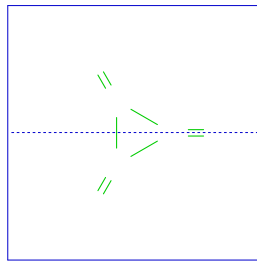
+SR



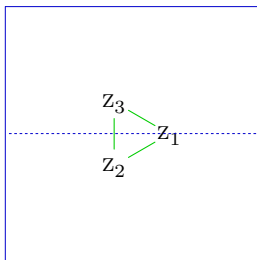
ER



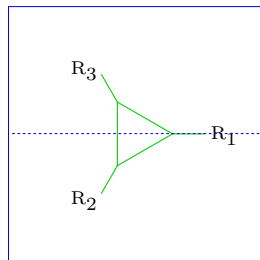
DB



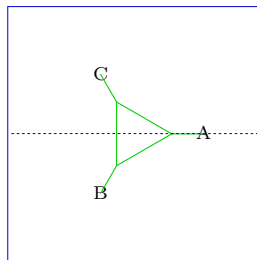
DR



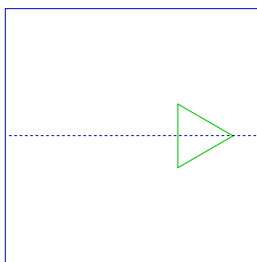
Z



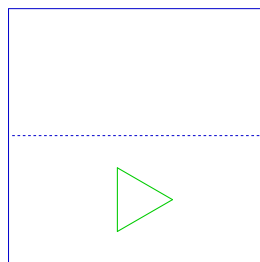
RZ



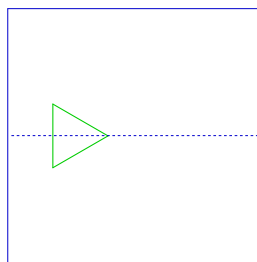
CRZ



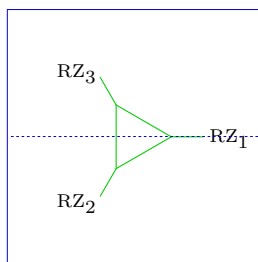
MOV1



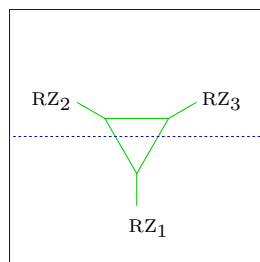
MOV2



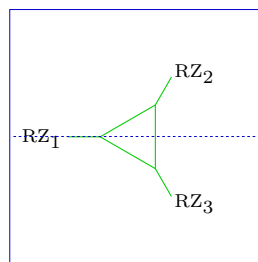
MOV3



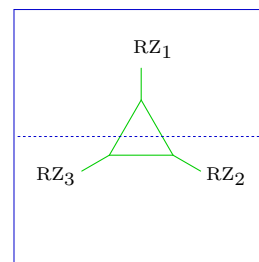
ROT1



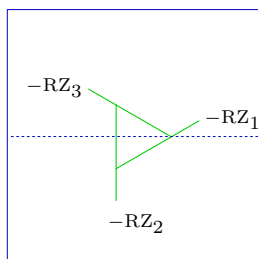
ROT2



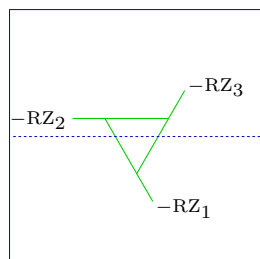
ROT3



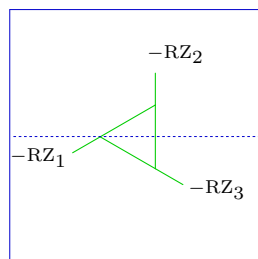
ROT4



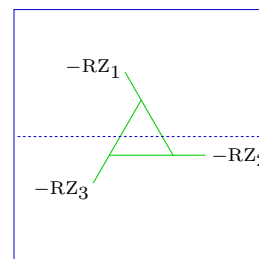
ROT1



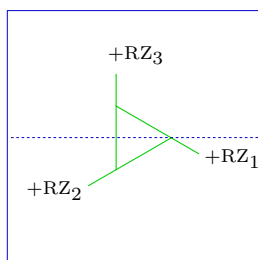
ROT2



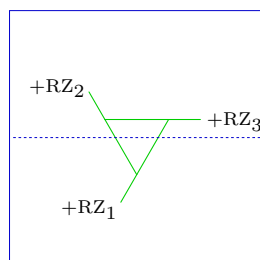
ROT3



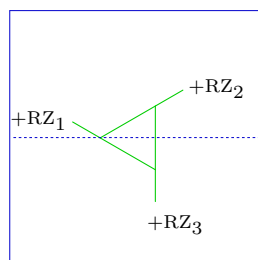
ROT4



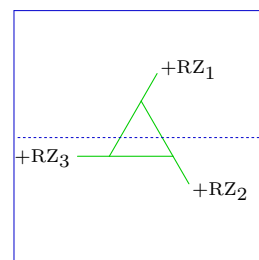
ROT1



ROT2

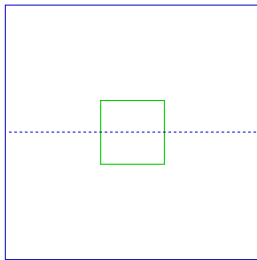


ROT3

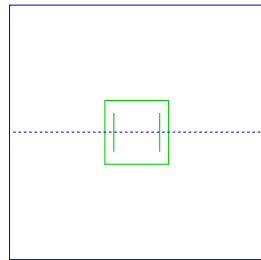


ROT4

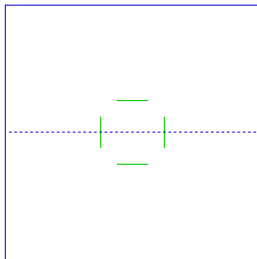
3 | Four



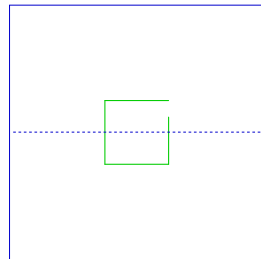
B



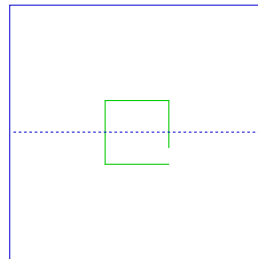
EB



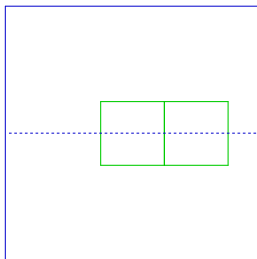
SB



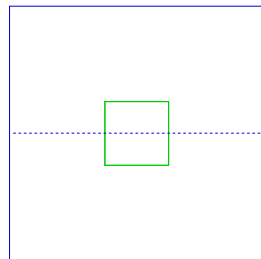
-SB



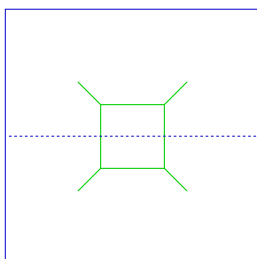
+SB



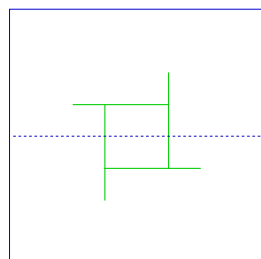
MOV



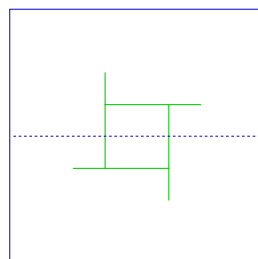
ROT



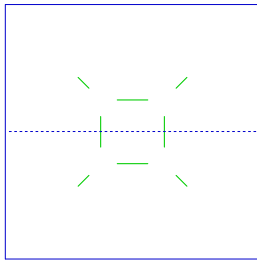
R



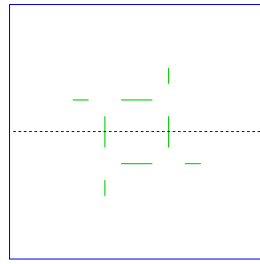
-R



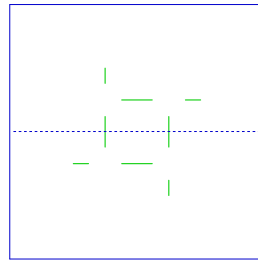
+R



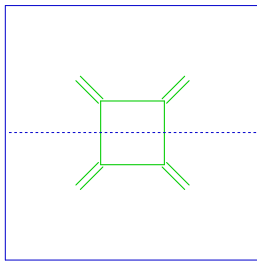
SR



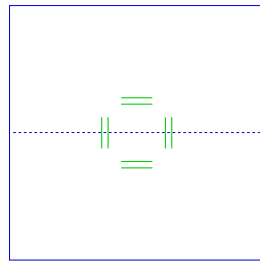
-SR



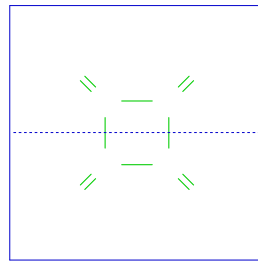
+SR



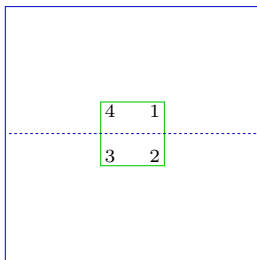
ER



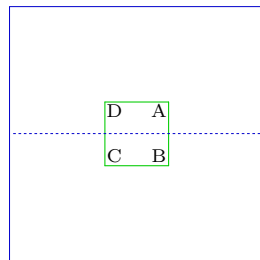
DB



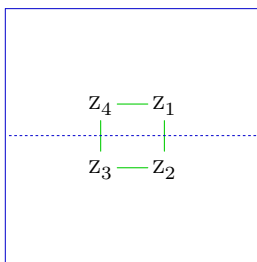
DR



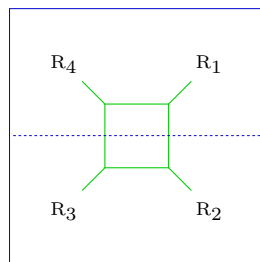
ZN



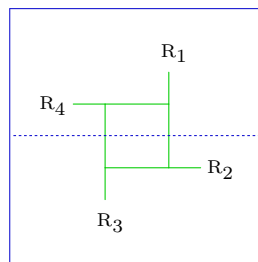
ZT



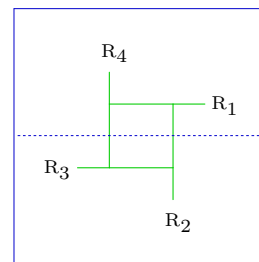
Z



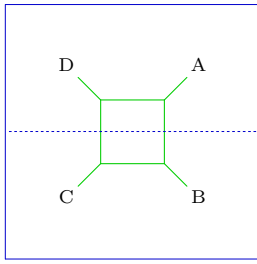
RZ



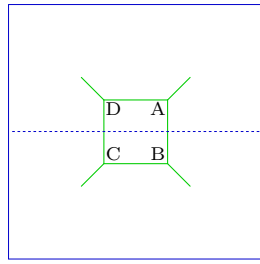
-RZ



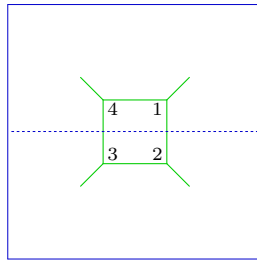
+RZ



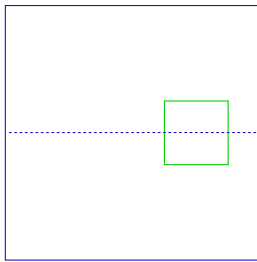
CRZ



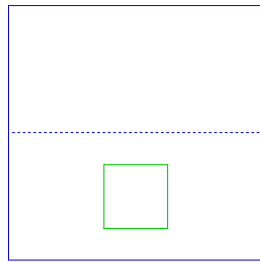
ZT



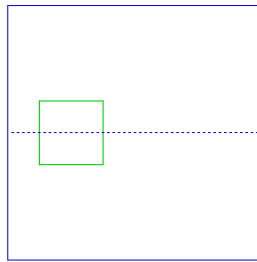
ZN



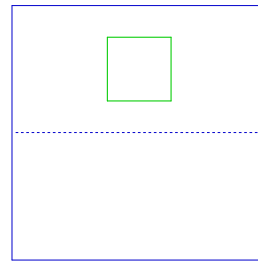
MOV1



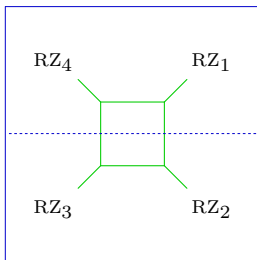
MOV2



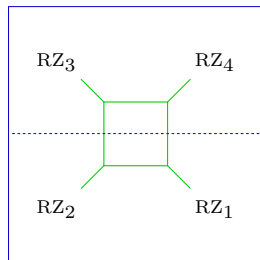
MOV3



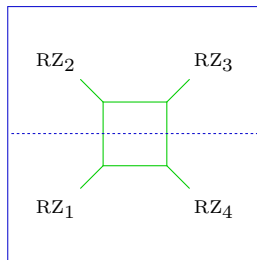
MOV4



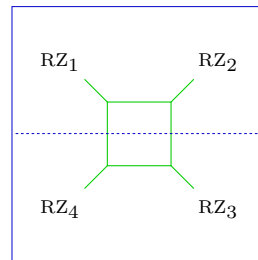
ROT1



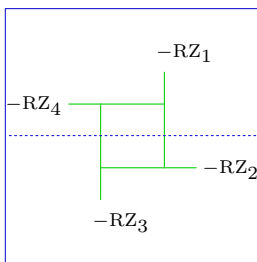
ROT2



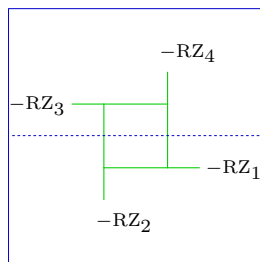
ROT3



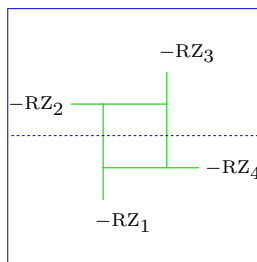
ROT4



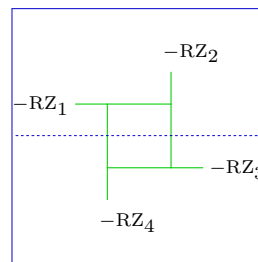
ROT1



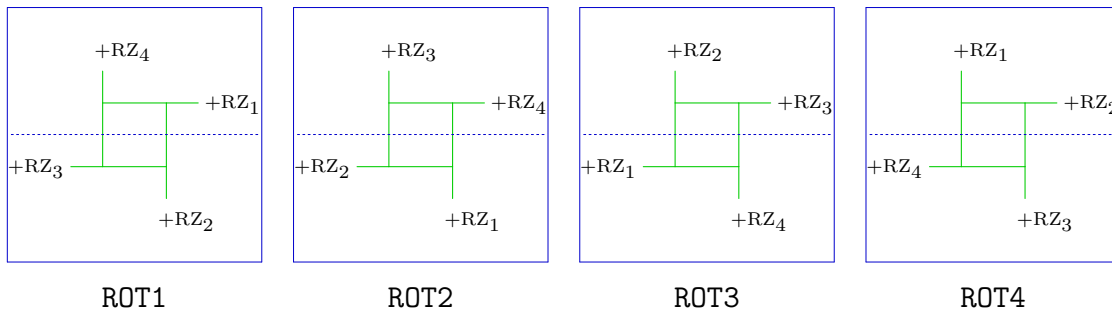
ROT2



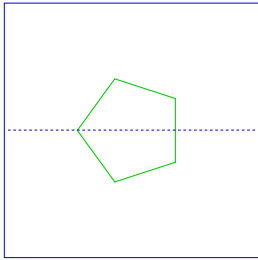
ROT3



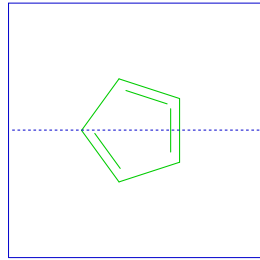
ROT4



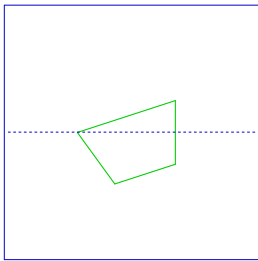
4 | Five



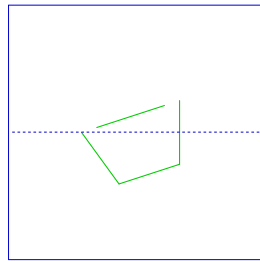
B



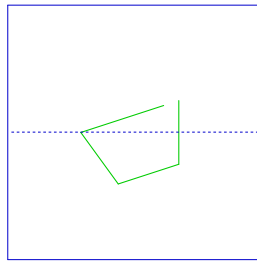
EB



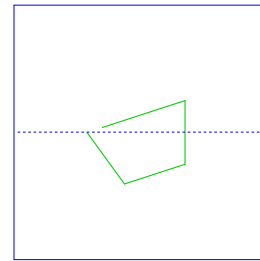
S



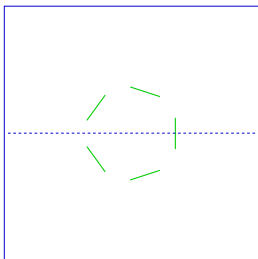
SS



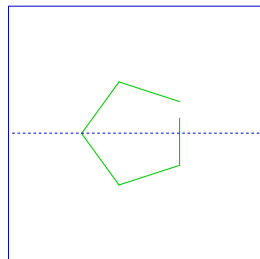
-SS



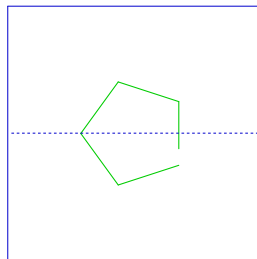
+SS



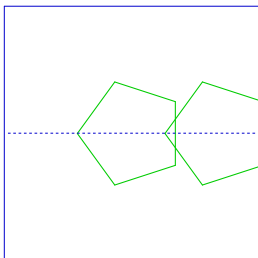
SB



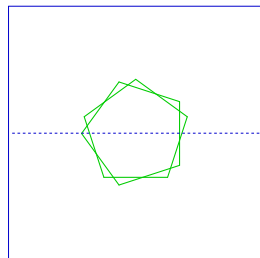
-SB



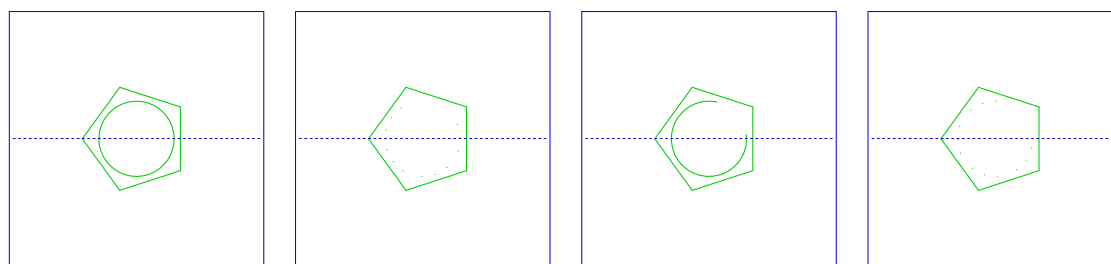
+SB



MOV



ROT

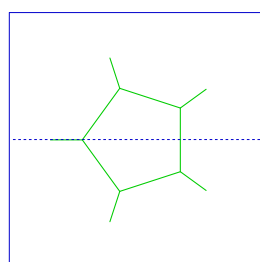


C

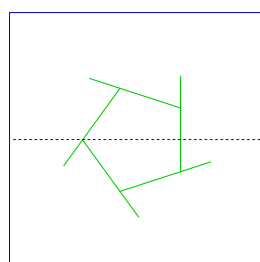
CD

CC

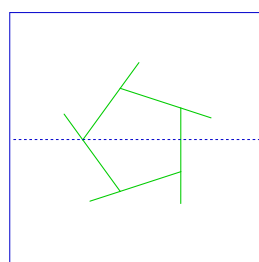
CCD



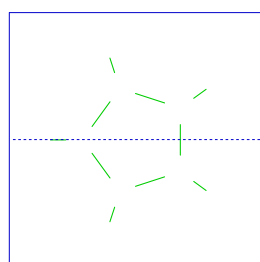
R



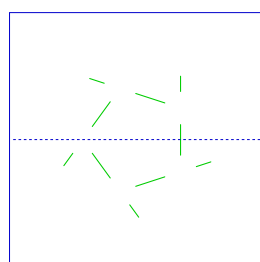
-R



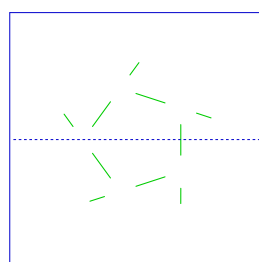
+R



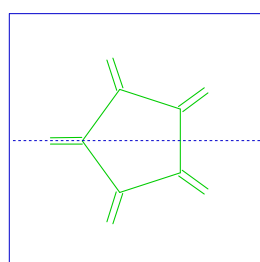
SR



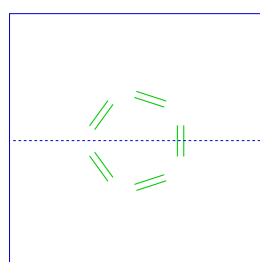
-SR



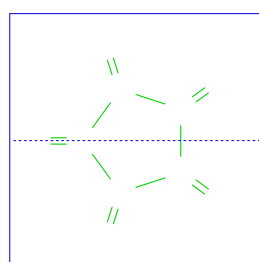
+SR



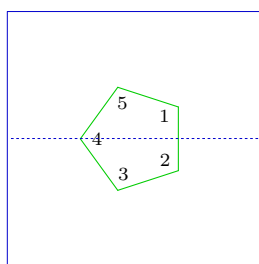
ER



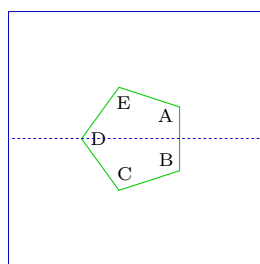
DB



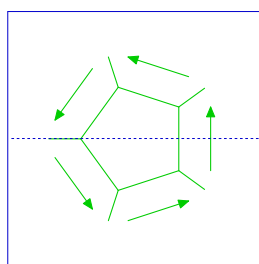
DR



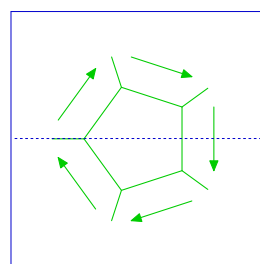
ZN



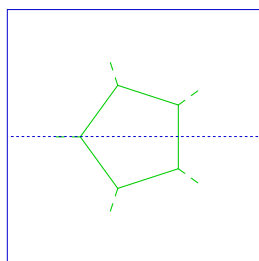
ZT



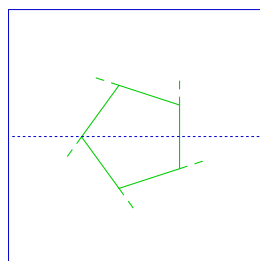
AU



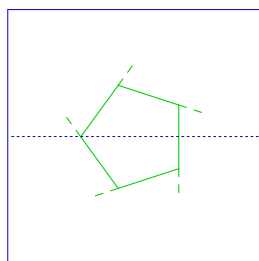
AD



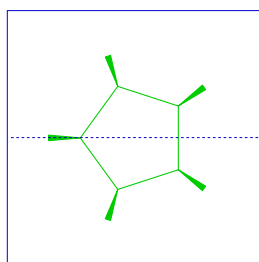
RD



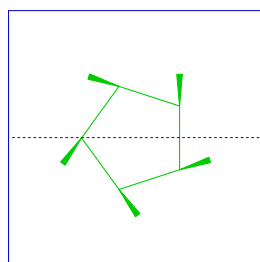
-RD



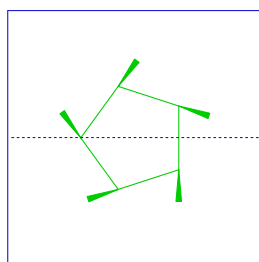
+RD



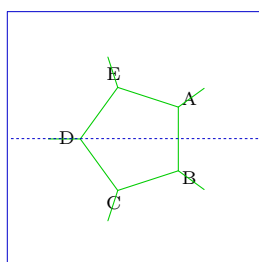
RB



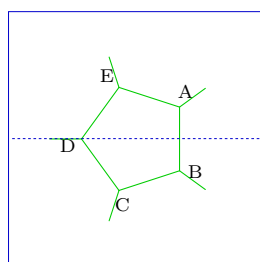
-RB



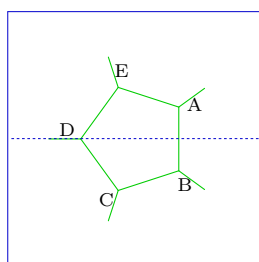
+RB



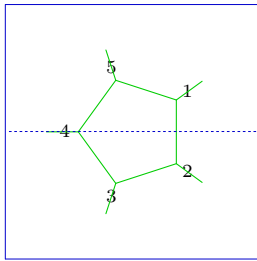
RT



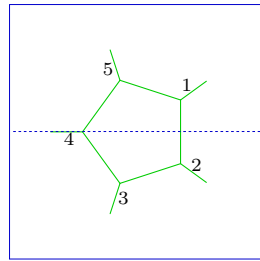
RTT



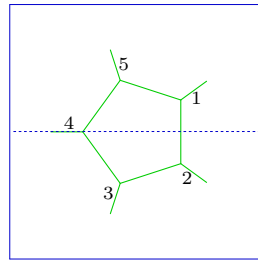
RBT



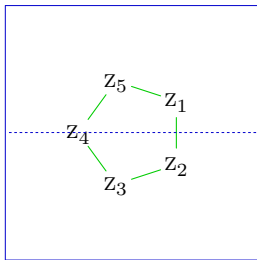
RN



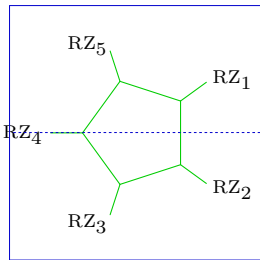
RTN



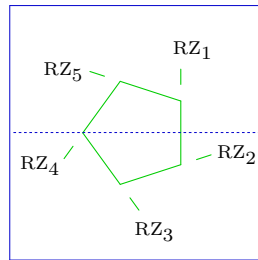
RBN



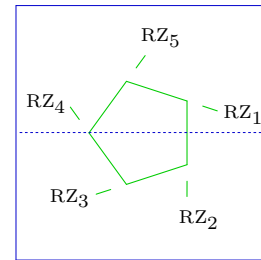
Z



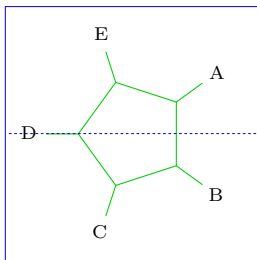
RZ



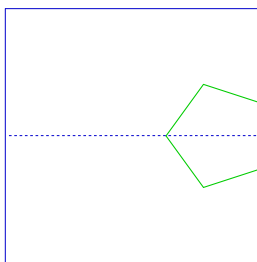
-RZ



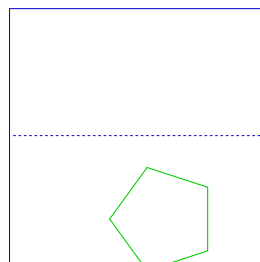
+RZ



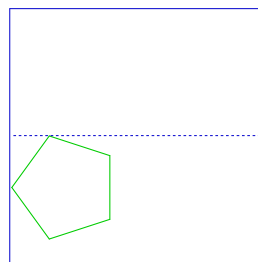
CRZ



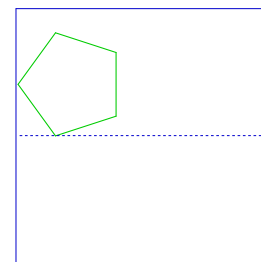
MOV1



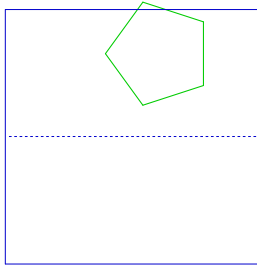
MOV2



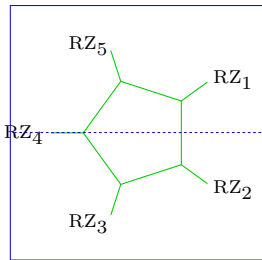
MOV3



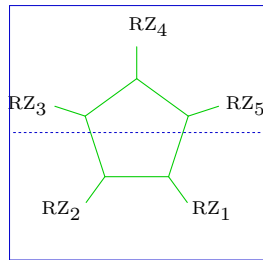
MOV4



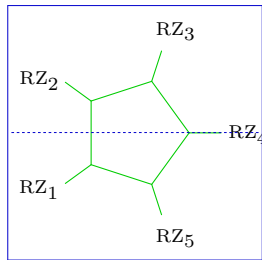
MOV5



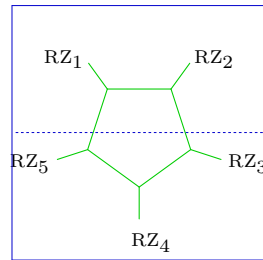
ROT1



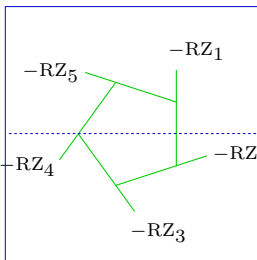
ROT2



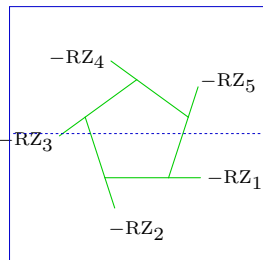
ROT3



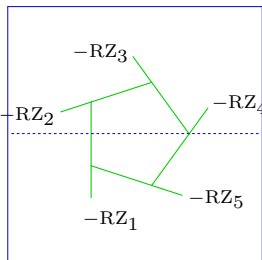
ROT4



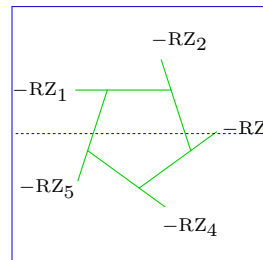
ROT1



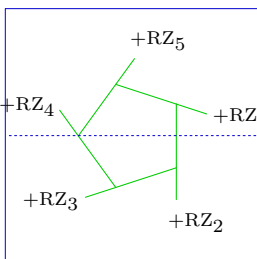
ROT2



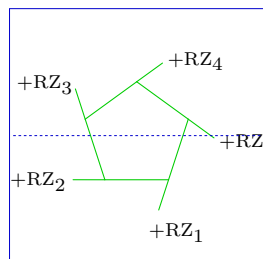
ROT3



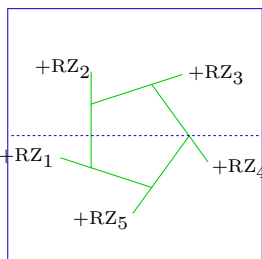
ROT4



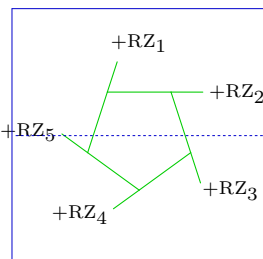
ROT1



ROT2

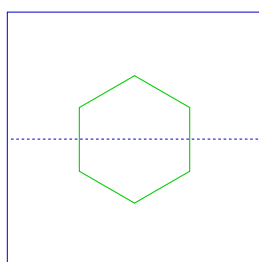


ROT3

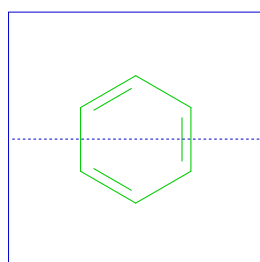


ROT4

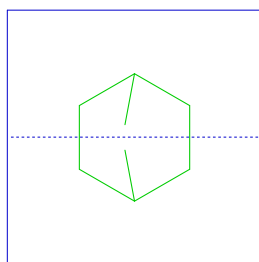
5 | Six



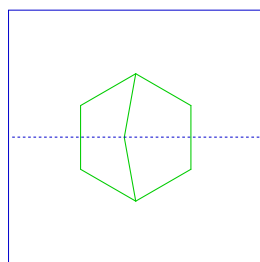
B



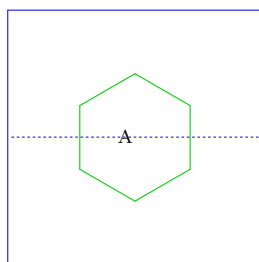
EB



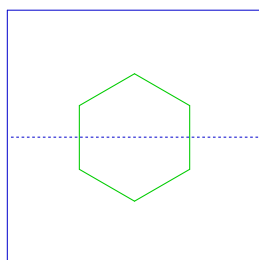
MID



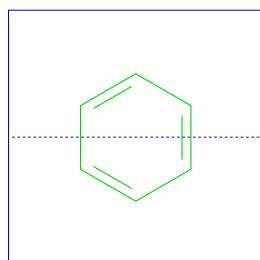
MIDS



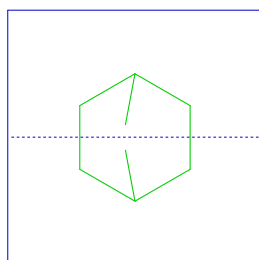
MIDZ



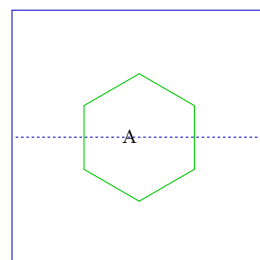
B



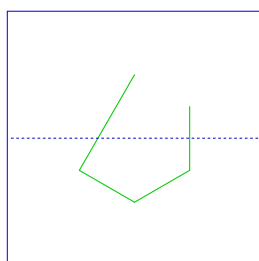
EB



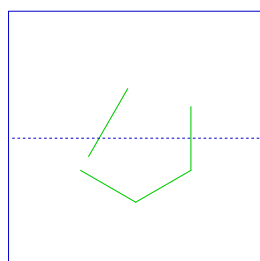
MID



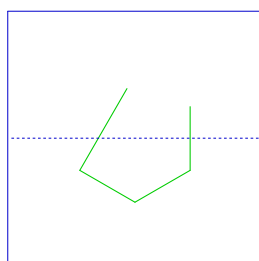
MIDZ



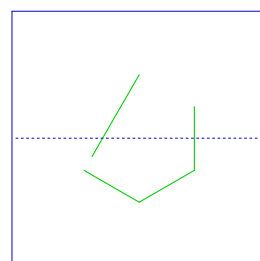
S



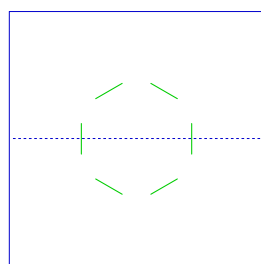
SS



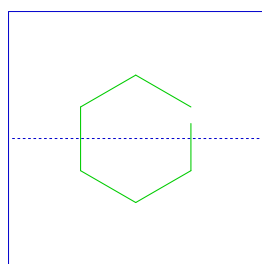
-SS



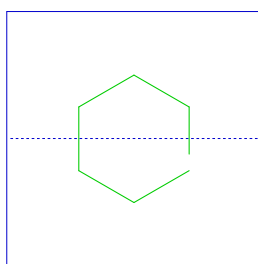
+SS



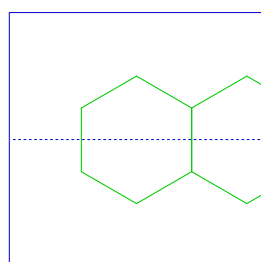
SB



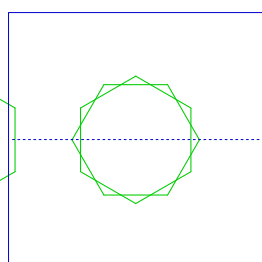
-SB



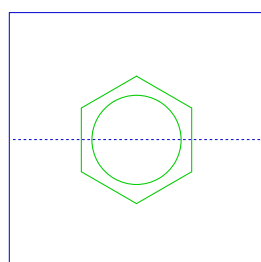
+SB



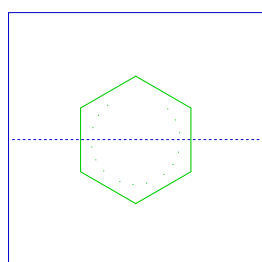
MOV



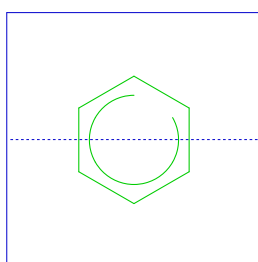
ROT



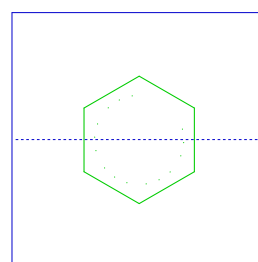
C



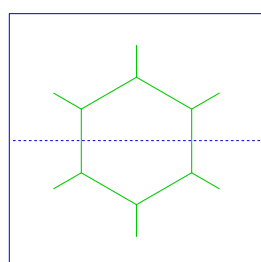
CD



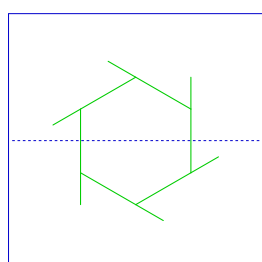
CC



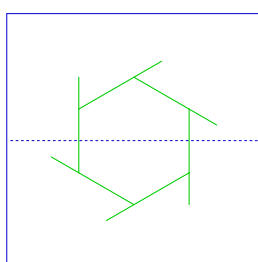
CCD



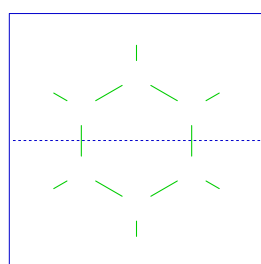
R



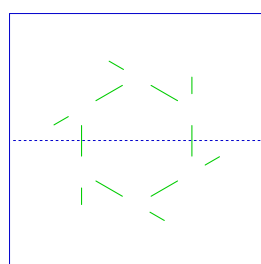
-R



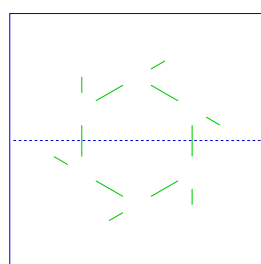
+R



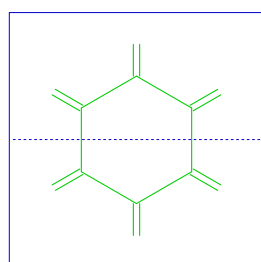
SR



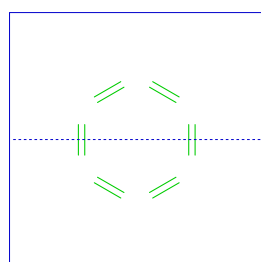
-SR



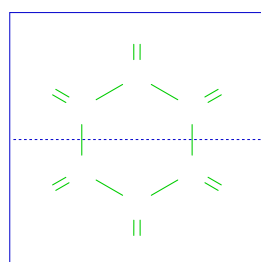
+SR



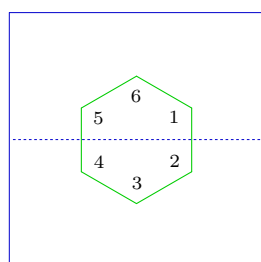
ER



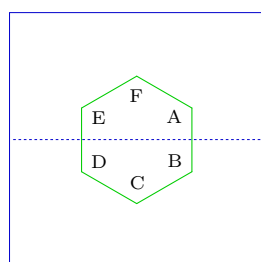
DB



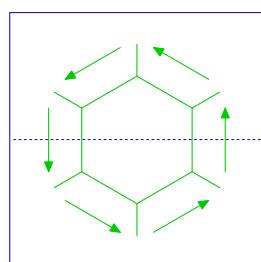
DR



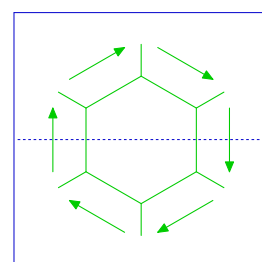
ZN



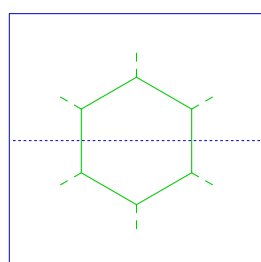
ZT



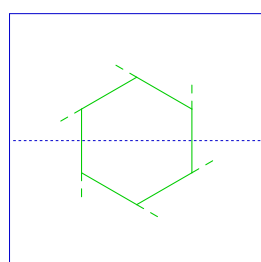
AU



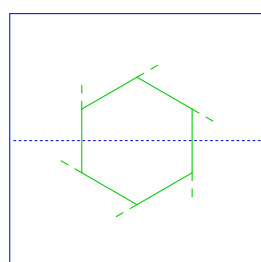
AD



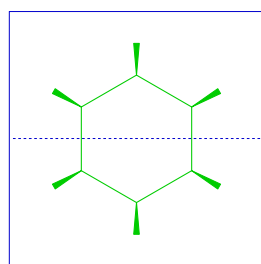
RD



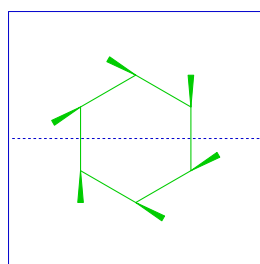
-RD



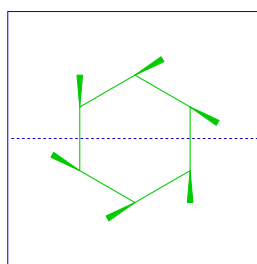
+RD



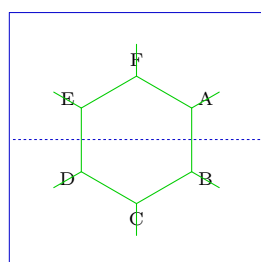
RB



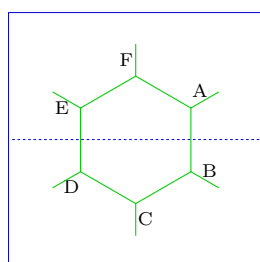
-RB



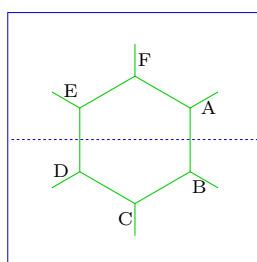
+RB



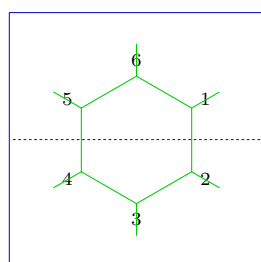
RT



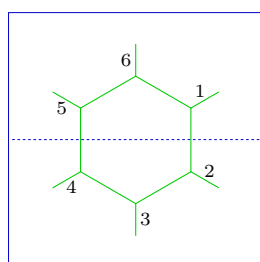
RTT



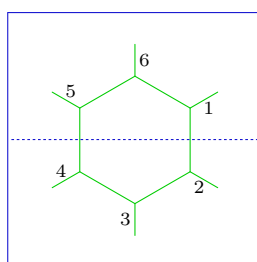
RBT



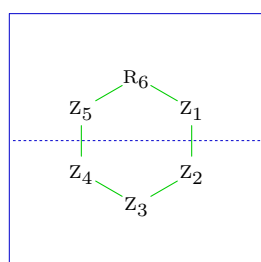
RN



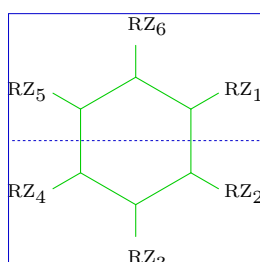
RTN



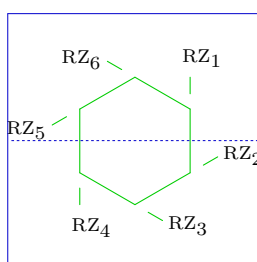
RBN



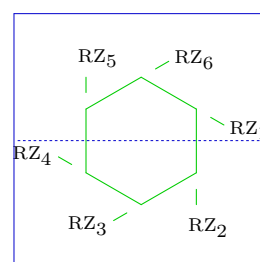
Z



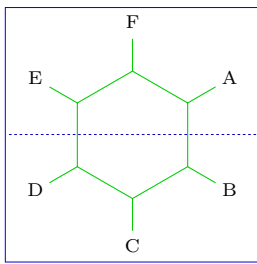
RZ



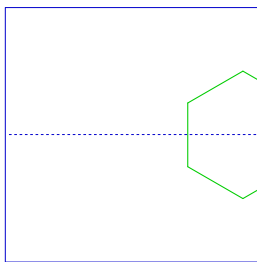
-RZ



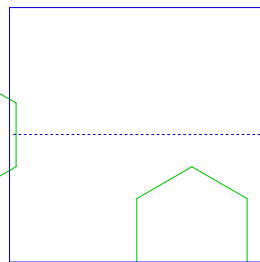
+RZ



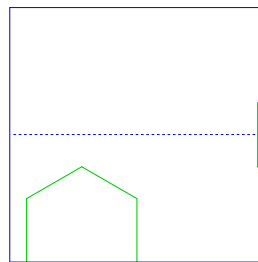
CRZ



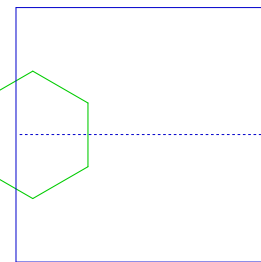
MOV1



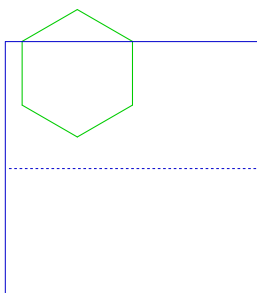
MOV2



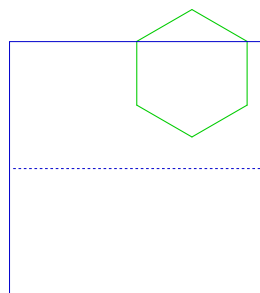
MOV3



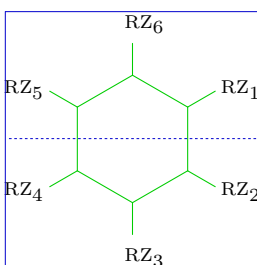
MOV4



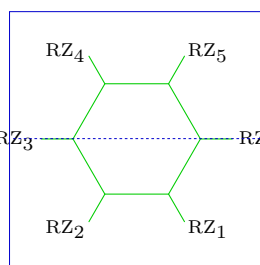
MOV5



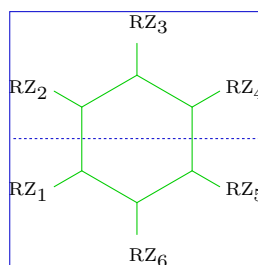
MOV6



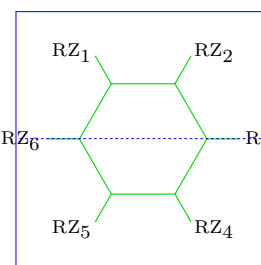
ROT1



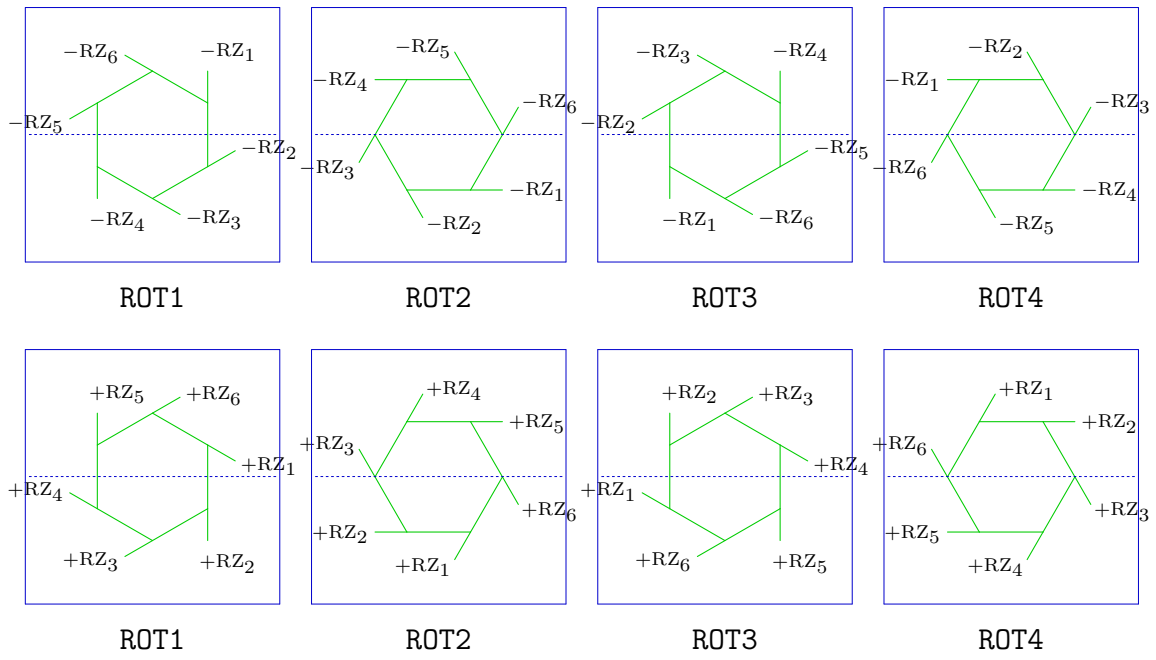
ROT2



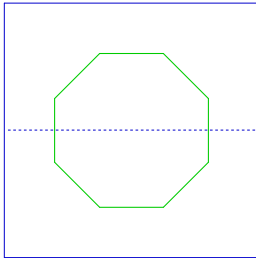
ROT3



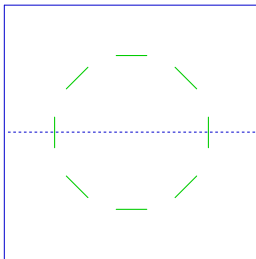
ROT4



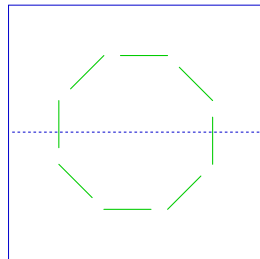
6 | Eight



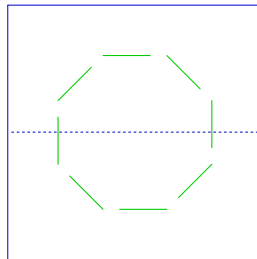
B



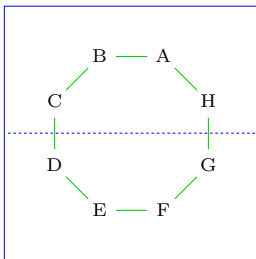
SB



-SB

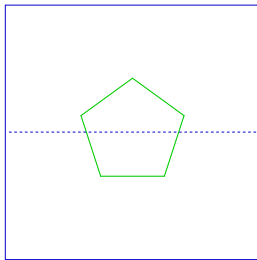


+SB

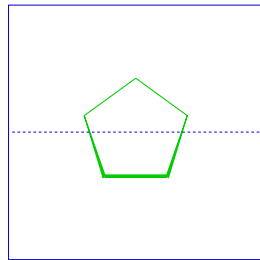


Z

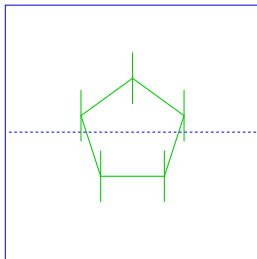
7 | Five Front



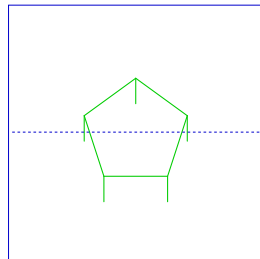
B



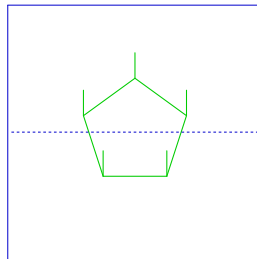
BB



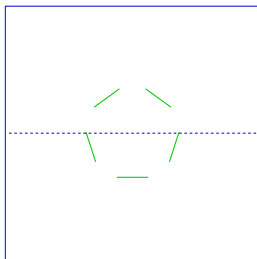
R



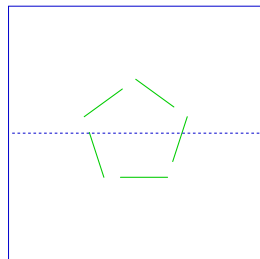
-R



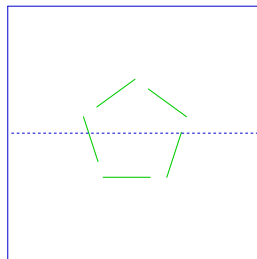
+R



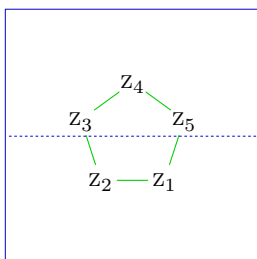
SB



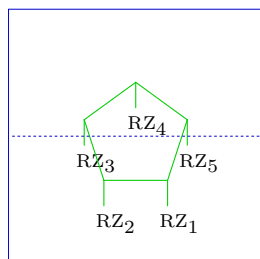
-SB



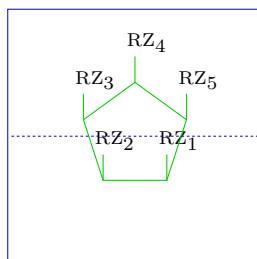
+SB



Z

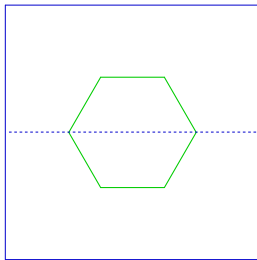


-RZ

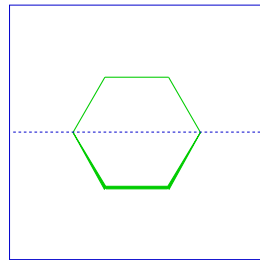


+RZ

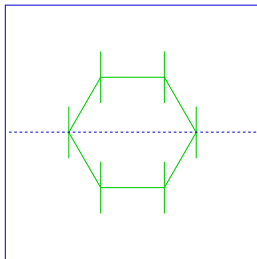
8 | Six Front



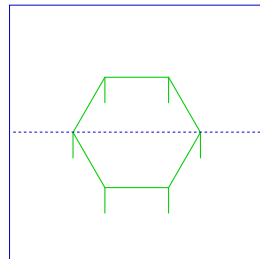
B



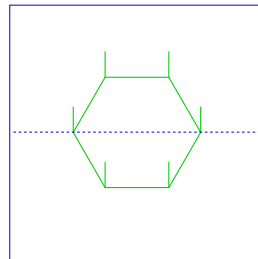
BB



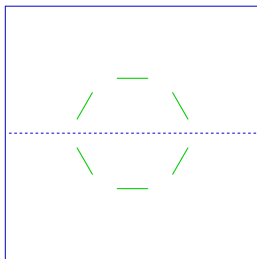
R



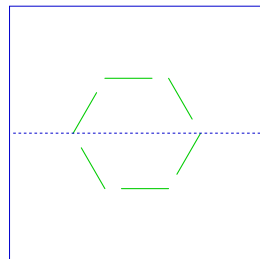
-R



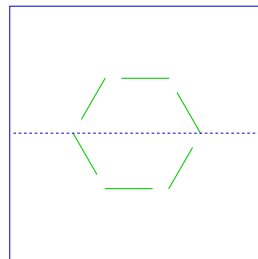
+R



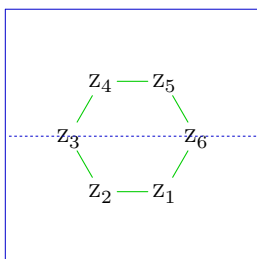
SB



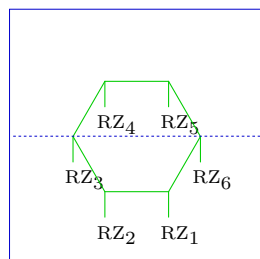
-SB



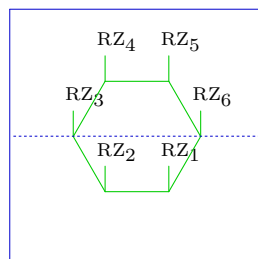
+SB



Z

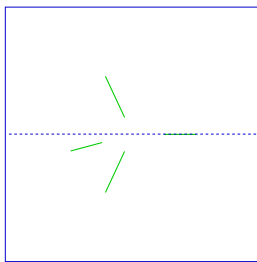


-RZ

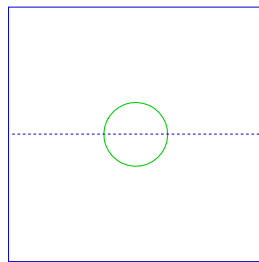


+RZ

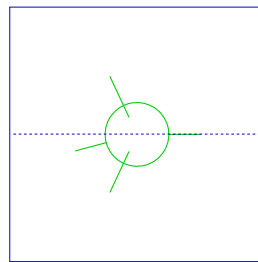
9 | Carbon



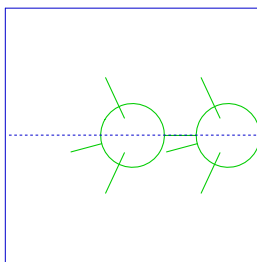
B



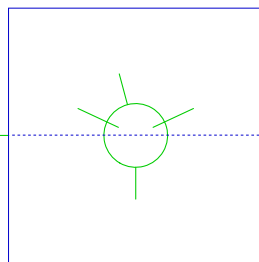
C



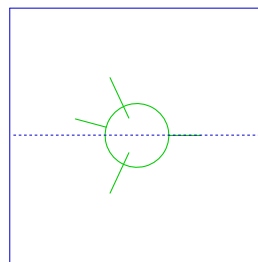
CB



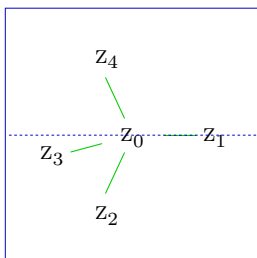
MOV



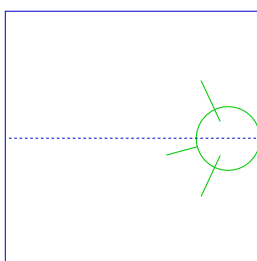
ROT



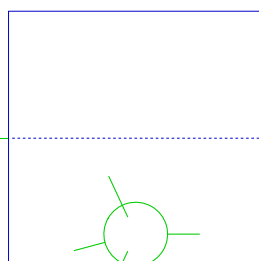
MIR



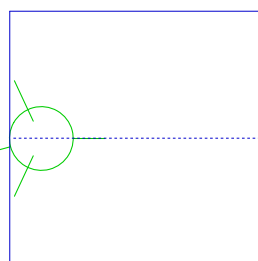
Z



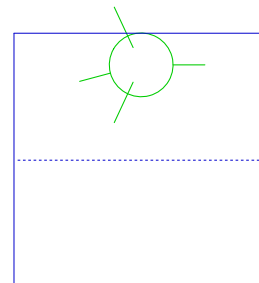
MOV1



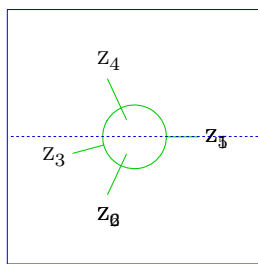
MOV2



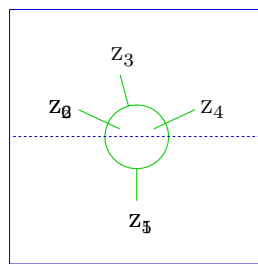
MOV3



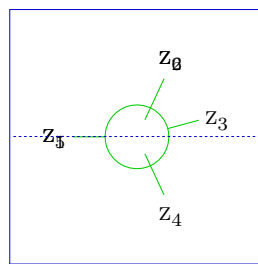
MOV4



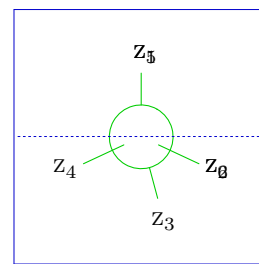
ROT1



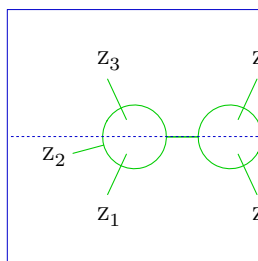
ROT2



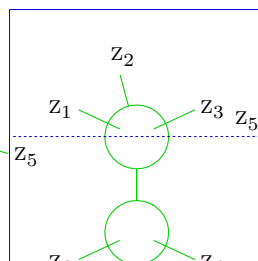
ROT3



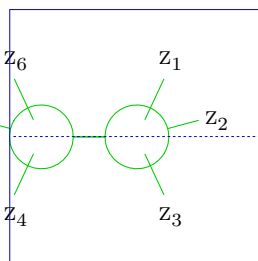
ROT4



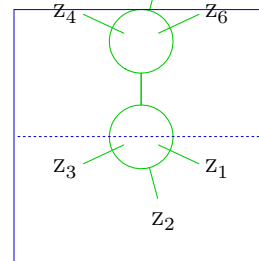
CB1



CB2

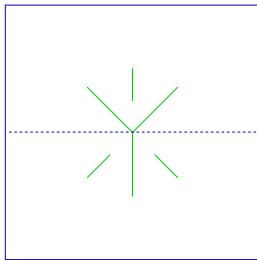


CB3

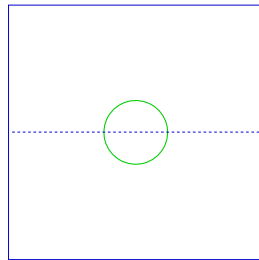


CB4

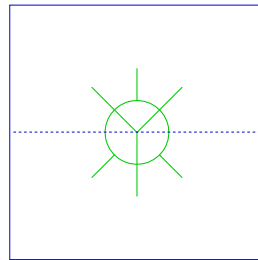
10 | Newman Stagger



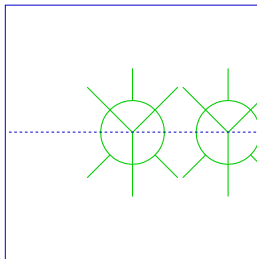
B



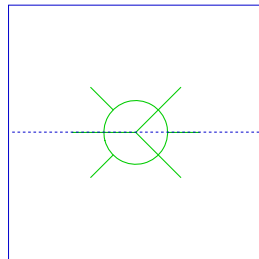
C



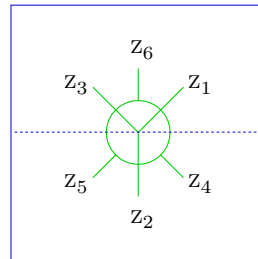
CB



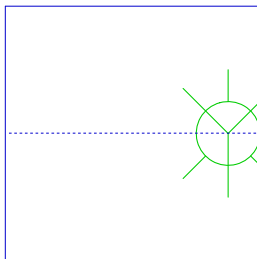
MOV



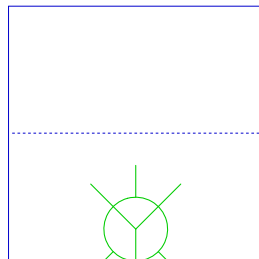
ROT



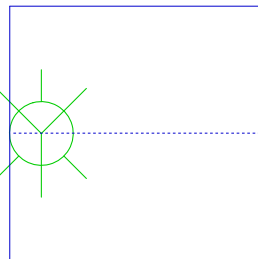
Z



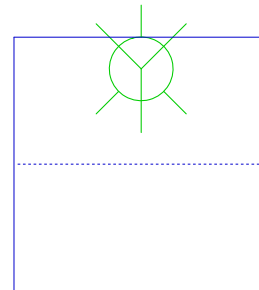
MOV1



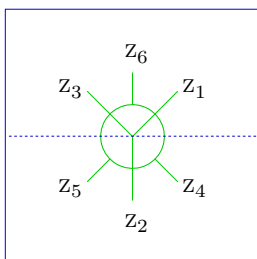
MOV2



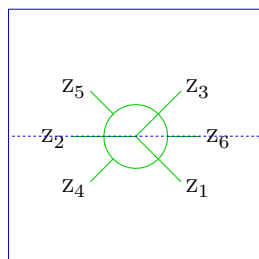
MOV3



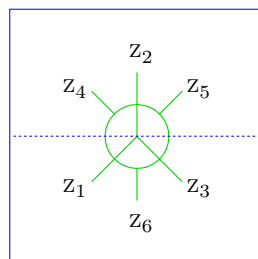
MOV4



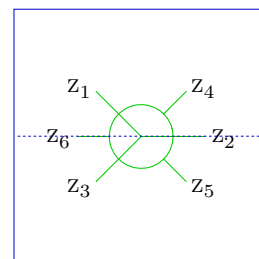
ROT1



ROT2

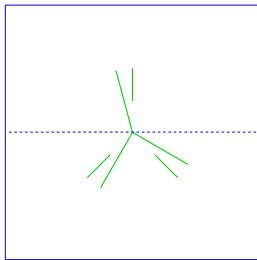


ROT3

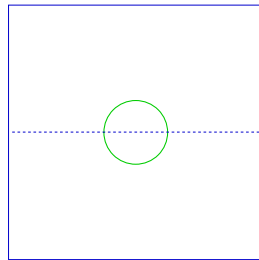


ROT4

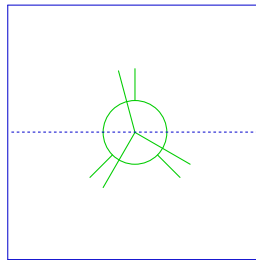
11 | Newman Eclipse



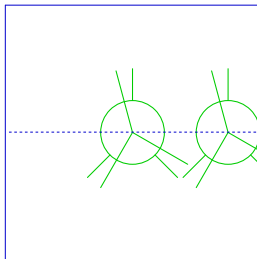
B



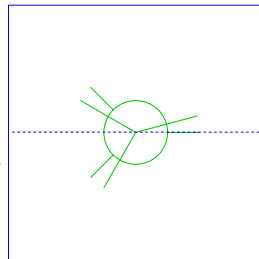
C



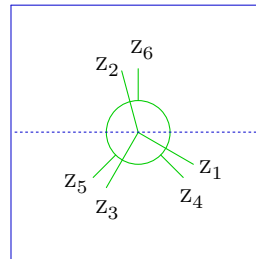
CB



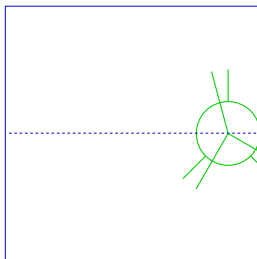
MOV



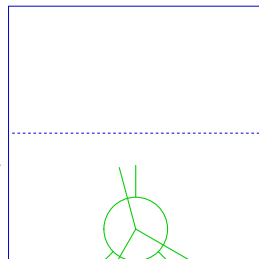
ROT



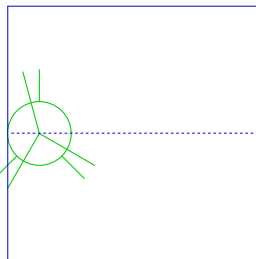
Z



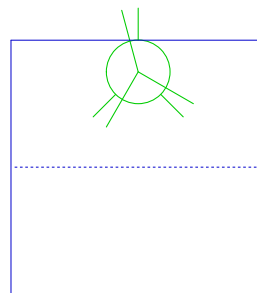
MOV1



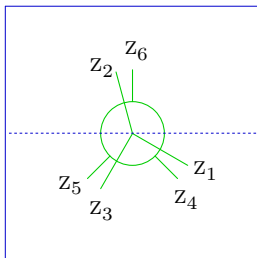
MOV2



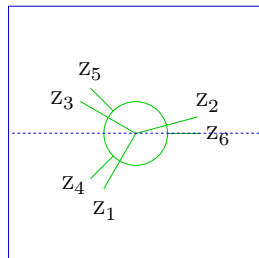
MOV3



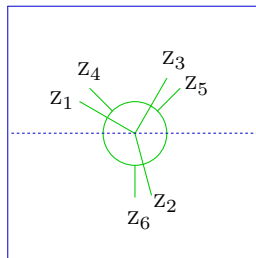
MOV4



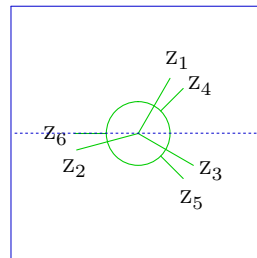
ROT1



ROT2

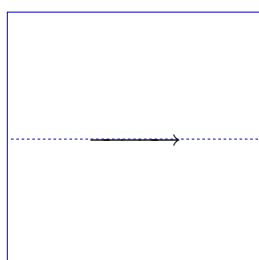


ROT3

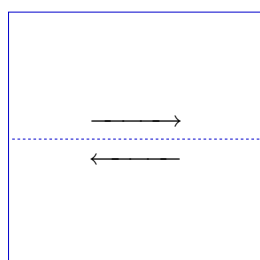


ROT4

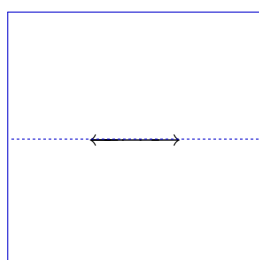
12 | Symbol



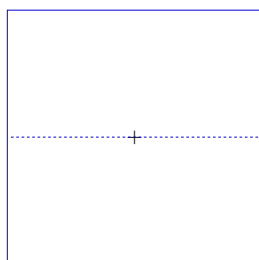
GIVES



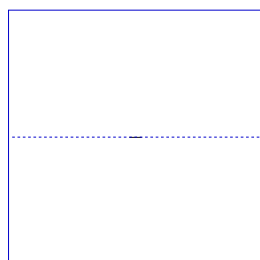
EQUILIBRIUM



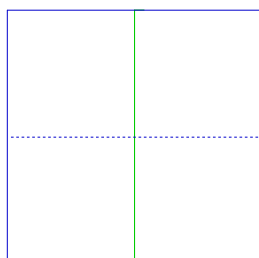
MESOMERIC



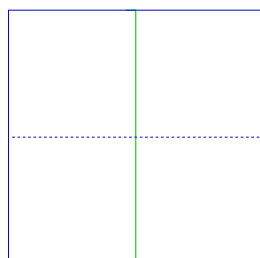
PLUS



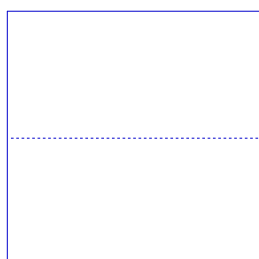
MINUS



OPENCOMPLEX



CLOSECOMPLEX



SPACE