Estructuras químicas

Curso de LATEX

October 17, 2023

chemfig es un paquete utilizado para dibujar gráficos químicos en 2D, basado en el paquete tikz, diseñado específicamente para representar expresiones químicas.

1 Uso básico

El primer comando que debemos aprender a usar con este paquete es \chemfig:

C—H

El argumento que recibe este comando se subdivide en tres partes: el primer átomo, el tipo de enlace y el segundo átomo.

Hay nueve tipos de enlaces soportados:

A ── B

Podemos escribir varios enlaces de manera secuencial:

$$H$$
— C == S

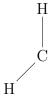
2 Ángulo de los enlaces

Un enlace puede recibir una o más opciones entre corchetes, siendo la primera de ellas el ángulo que tendrá el enlace con respecto al último átomo.

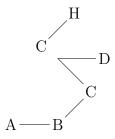
Hay 3 tipos de ángulos que podemos definir: absolutos, relativos y predefinidos. Los absolutos indican un ángulo preciso (generalmente de 0 a 360, aunque también pueden ser negativos) y son representados con la sintaxis [:<ángulo absoluto>]. Por ejemplo:



Los ángulos relativos requieren la sintaxis [::<ángulo relativo>] y producen un ángulo relativo al del enlace anterior. Por ejemplo:

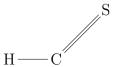


Finalmente, los ángulos predefinidos son números enteros que van del 0 al 7 indicando intervalos de 45°:



3 Coeficiente del enlace

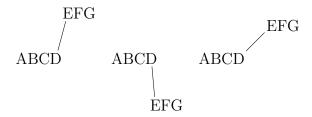
La segunda opción que puede recibir un enlace, es el coeficiente del enlace:



Con el cual describimos el tamaño del enlace.

4 Átomos de salida y arribo

La tercer y cuarta opción del ángulo se utiliza cuando agrupamos varios átomos en un solo elemento de la estructura química y deseamos controlar qué átomos serán los que se conectaran. Por ejemplo, si consideramos los siguientes conjuntos:



Veremos que La Texsiempre utiliza el último y primer átomo de cada conjunto para realizar el enlace. Utilizando las opciones del enlace que mencionamos, podemos cambiar este comportamiento:

5 Código tikz

Finalmente, hay una quinta opción que podemos escribir con la que especificamos las características del gráfico dibujado con código del paquete tikz:

S

H — C A — B A — B A — B