

Sub- en Superscripts in Chemische Formules

J. Hagen

PRAGMA, Onderwijskundig Bureau voor Advies- en Ontwikkelwerk,
Postbus 125, 8000 AC Zwolle

Abstract

In dit (korte) artikel wordt een mechanisme beschreven om subscript op een lijn te krijgen. Dit is nodig omdat de positie van een subscript mede bepaald wordt door de hoogte en diepte van een eventueel aanwezig superscript.

Bij het zetten van chemische formules kan men in superscripts de tekens + en – tegen komen. Omdat de plus vrij fors is uitgevallen, wordt in dat geval het subscript omlaag gedrukt. Knuth besteedt in ‘The T_EXBook’ op bladzijde 179 aandacht aan dit probleem. Zijn oplossing bestaat uit het aanpassen van enkele `\fontdimen`'s. Deze oplossing vinden we ook terug bij Eijkhout in ‘T_EX by Topic’. Elders in hun boeken vermelden zij dat dergelijke aanpassingen een globaal karakter hebben. Bij het schrijven van macro's voor het zetten van chemische formules (PPCH_{T_EX}) dient met dus dit gegeven rekening te worden gehouden.

Bij het aanpassen van `\fontdimen`'s dient men rekening te houden met de korpsgrootte, om precies te zijn met `\textfont`, `\scriptfont` en `\scriptscriptfont`. Bij een 10 punts korps hoeven we immers minder ver omlaag dan bij een 12 punt korps en bij een `\scriptfont` minder dan bij een `\textfont`.

Een relatief eenvoudige oplossing is die, waarbij we gebruik maken van `\fontdimen5`, de *x*-hoogte.

In de macro hieronder worden een drietal `\fontdimen`'s opgehoogd die betrekking hebben op super- en subscripts. De eerste macro laat zich samenvatten als:

```
\fontdimen14\textfont2          =
      .95\fontdimen5\textfont2
\fontdimen16\scriptfont2        =
      .95\fontdimen5\scriptfont2
\fontdimen17\scriptscriptfont2 =
      .95\fontdimen5\scriptscriptfont2
```

De factor 0.95 is experimenteel vastgesteld. Als we wat meer zekerheid willen, kunnen we als factor 1.0 gebruiken. Omdat we na afloop de `\fontdimen`'s 14, 16 en 17 weer moeten resetten, slaan we de oude waarden op.

```
\def\setevalue#1%                % zie cont-00a
  {\expandafter\edef\csname #1\endcsname}

\def\setsubscripts%
  {\def\dosetsubscript##1##2%
```

```
{\dimen0=.95\fontdimen5##2%
  \setevalue{@@\string##1\string##2}{%
    \the##1##2\relax}%
  ##1##2=\dimen0\relax}%
\def\dodosetsubscript##1%
  {\dosetsubscript{##1}{\textfont2}%
  \dosetsubscript{##1}{\scriptfont2}%
  \dosetsubscript{##1}{\scriptscriptfont2}}%
\dodosetsubscript{\fontdimen14}%
\dodosetsubscript{\fontdimen16}%
\dodosetsubscript{\fontdimen17}}
```

Bij het resetten kunnen we volstaan met het toekennen van de opgeslagen waarden:

```
\def\getvalue#1%                  % zie cont-00a
  {\csname #1\endcsname}

\def\resetsubscripts%
  {\def\doresetsubscript##1##2%
    {\dimen0=\getvalue{@@\string##1\string##2}\relax%
    ##1##2=\dimen0}%
  \def\dodoresetsubscript##1%
    {\doresetsubscript{##1}{\textfont2}%
    \doresetsubscript{##1}{\scriptfont2}%
    \doresetsubscript{##1}{\scriptscriptfont2}}%
  \dodoresetsubscript{\fontdimen14}%
  \dodoresetsubscript{\fontdimen16}%
  \dodoresetsubscript{\fontdimen17}}
```

Met behulp van deze commando's kunnen we in plaats van $A_2^{+1}B_3C_4D_5$ het (chemisch) beter ogende $A_2^{+1}B_3C_4D_5$ krijgen:

```
\setsubscripts$\mathrm{A}^{+1}_2B_3C_4D_5$
  \resetsubscripts
```

Zowel `\setsubscripts` als `\resetsubscript` staan dus *buiten* de \$ \$. Het mechanisme werkt natuurlijk ook als `\rm` achterwege wordt gelaten.

Het ophogen van de genoemde `\fontdimen`'s kan als gevolg hebben dat de volgende regel wat omlaag schuift als in een subscript karakters voorkomen met een *depth* > 0. Bij chemische formules is dit echter zelden het geval omdat cijfers boven de baseline blijven.