

ỨNG DỤNG LATEX TRONG NGHIÊN CỨU VÀ GIẢNG DẠY HÓA HỌC

PHÙNG GIA LUÂN*

TÓM TẮT

Bài báo này đề cập đến vấn đề ứng dụng LATEX trong hóa học. Thông qua sử dụng một số gói lệnh quan trọng là mhchem, pst-labo, ChemFig phục vụ cho các công việc phổ biến trong giảng dạy, nghiên cứu hóa học như: viết công thức hóa học, phương trình phản ứng, vẽ dụng cụ thí nghiệm, biểu diễn các loại công thức cấu tạo hợp chất hữu cơ, vẽ sơ đồ phản ứng.

Từ khóa: LATEX, hóa học, mhchem, pst-labo, ChemFig.

ABSTRACT

Applying LATEX in Chemistry education and research

This article presents the issue of applying LATEX in chemistry. By using essential packages such as mhchem, pst-labo, ChemFig is widely used in Chemistry education and research including writing chemistry formulas, reaction equations, drawing lab-tools, performing reaction schemes or reaction mechanisms.

Keywords: Latex, chemistry, mhchem, pst-labo, ChemFig.

1. Giới thiệu

LATEX là một phần mềm sắp chữ mã nguồn mở được Leslie Lamport phát triển dựa trên nền TEX do giáo sư toán học Donal Knuth phát minh với phiên bản đầu tiên ra đời vào năm 1985. Hiện nay, LATEX đã phát triển trên phạm vi toàn thế giới và được dùng làm tiêu chuẩn chế bản cho các nhà in sách, tạp chí khoa học nổi tiếng, các ấn phẩm của hội nghị khoa học, cũng như được đưa vào chương trình giảng dạy, ứng dụng làm poster, viết bài báo khoa học, tạo file trình chiếu, làm luận văn cho sinh viên trong các trường đại học. Ban đầu, LATEX được ứng dụng chủ yếu trong lĩnh vực toán học song gần đây đã phát triển mạnh mẽ sang các ngành khoa học khác đặc biệt trong việc soạn thảo các tài liệu vật lí, hóa học...

Đối với những người dùng máy tính, khi chuyển sang môi trường soạn thảo mới, họ thường tìm hiểu xem môi trường đó có những tính năng gì đặc biệt. Đối với LATEX, người dùng thường so sánh với Microsoft Word của hãng Microsoft. Và LATEX được đánh giá cao ở các điểm sau đây.

Trước hết, tài liệu soạn bởi LATEX là tài liệu có tính cấu trúc. Ứng dụng này giúp người dùng chỉ tập trung vào soạn thảo nội dung văn bản thông qua việc quy định sẵn các định dạng chuẩn cho tài liệu, do đó người dùng không phải mất thời gian chỉnh sửa văn bản như chỉnh cỡ font cho tiêu đề, khoảng cách dòng... Hơn nữa, văn bản có

* ThS, Trường Đại học Nông – Lâm Bắc Giang; Email: luanpg@bafu.edu.vn

tính nhất quán cao. Tất cả các kiểu định dạng theo chương, theo đề mục, đề mục con sẽ thống nhất như nhau trong toàn bộ tài liệu. Điều này loại bỏ toàn bộ lỗi khi định dạng văn bản. Ngoài ra, dữ liệu đầu ra có tính chuyên nghiệp, bởi vì LATEX xuất ra các kết quả như nhau trên các máy tính và các hệ điều hành khác nhau. Theo mặc định, các kết quả xuất ra sẽ là các file có định dạng DVI, dạng PS hoặc dạng PDF. Một ưu điểm nữa phải kể đến là LATEX xóa nhòa ranh giới giữa phần chữ văn bản với phần chữ công thức. Trong LATEX chất lượng hình ảnh của hai phần này là như nhau, đều sắc nét, dễ nhìn, không tạo ra sự khác biệt và ấn tượng hơn nữa là kết quả của các phép toán có thể được LATEX tính ra một cách tự động. LATEX còn có lợi thế lớn trong việc tham chiếu chéo để phục vụ làm mục lục tự động, làm chỉ mục (index)... Đối với hình vẽ, bạn có thể tạo ra các hình vẽ chất lượng cao, các hình chuyển động thậm chí các hình vẽ có tính tương tác... chỉ bằng các kí tự, điều mà Word không thể làm được Cuối cùng, LATEX được phân phối và sử dụng miễn phí.

Bên cạnh những ưu điểm kể trên, LATEX tồn tại một số nhược điểm. Thứ nhất, LATEX không thể xem được nội dung văn bản trước khi biên dịch. Điều này gây khó khăn cho những người quen sử dụng Word khi chuyển sang dùng LATEX. Thứ hai, LATEX đòi hỏi người dùng sự kiên nhẫn để học do phải học cách soạn thảo dựa trên các dòng lệnh. Thứ ba, việc thiết kế một kiểu trình bày mới khá vất vả và mất nhiều thời gian. Nói chung, LATEX thích hợp cho việc soạn những cuốn sách hoặc văn bản kĩ thuật, dài, còn nếu soạn thảo các văn bản không có cấu trúc hoặc cấu trúc lộn xộn thì nên dùng Word.

Việc cài đặt LATEX khá đơn giản. Thông thường với hệ điều hành Windows, người sử dụng chỉ cần cài đặt MiKTeX là phần mềm chứa các file hệ thống của LATEX và một công cụ soạn thảo như VietEX hoặc Texmaker. Đối với từng công việc cụ thể, người dùng sử dụng các gói lệnh riêng (packages) được cập nhật dễ dàng thông qua hệ thống MiKTeX. Sau khi soạn thảo xong file tex, người dùng sẽ biên dịch file này và được kết quả cuối cùng là file pdf.

Trong những năm gần đây, số lượng người dùng LATEX tại Việt Nam đã phát triển nhanh chóng. Một số trường đại học đã yêu cầu học viên phải nộp luận văn được soạn thảo bằng LATEX hoặc giảng dạy LATEX cho sinh viên như một môn học ngoại khóa.

Đối với sinh viên hóa học và những người làm công việc liên quan đến ngành hóa như giáo viên, các nhà nghiên cứu, việc sử dụng phần mềm Microsoft Word để có thể viết bài báo khoa học, làm luận văn, soạn thảo văn bản có công thức hóa học, vẽ các sơ đồ và cơ chế phản ứng, vẽ các dụng cụ thí nghiệm... đòi hỏi nhiều công sức và bắt buộc phải dùng thêm các phần mềm phụ trợ như ChemWin, ChemLab, ChemDraw. Các công việc này hoàn toàn có thể giải quyết đơn giản với LATEX chỉ với một số ít gói lệnh tiêu biểu.

2. Các gói lệnh thường dùng cho soạn thảo văn bản hóa học

Trong quá trình phát triển, LATEX đã được ứng dụng để biên soạn các tài liệu hóa học từ rất sớm. Hàng loạt các gói lệnh được viết nhằm đáp ứng nhu cầu này như *achemso*, *biblatex – chem*, *bpchem*, *chem – journal*, *chemarrow*, *chemcompounds*, *chemstruct*, *chemstyle*, *isotope*, *ochem*, *xymtex*... nhưng chỉ đến khi các gói lệnh *mhchem*, *pst-labo*, và đặc biệt là *ChemFig* ra đời mới giải quyết triệt để các vấn đề lớn khi biên soạn văn bản hóa học.

Ứng dụng của gói lệnh mhchem

Địa chỉ tải: <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/mhchem>

Tác giả của gói lệnh là Martin Hensel đã phát triển đến version 3. Đây là một gói lệnh dùng để biểu diễn các nguyên tố và công thức hóa học cũng như phương trình hóa học. Các chức năng chủ yếu của gói lệnh *mhchem* bao gồm:

- *Biểu diễn các công thức cơ bản*

Chỉ bằng lệnh $\ce{\text{biểu thức hóa học}}$ có thể biểu diễn biểu thức hóa học đa dạng với cách viết đơn giản đồng thời gói lệnh xử lý rất thông minh đối với các con số trong công thức như chỉ số trên, chỉ số dưới, các số đứng trước và sau công thức.

Bảng 1. Mã lệnh minh họa một số chất

Cú pháp lệnh	Kết quả
$\ce{H+}$	H^+
$\ce{SO4^2-}$	SO_4^{2-}
$\ce{1/2H2O}$	$\frac{1}{2}H_2O$
$\ce{H2SO4}$	H_2SO_4
$\ce{^{16}_8O}$	$^{16}_8O$

- *Biểu diễn các liên kết hóa học*

Trong *mhchem*, sử dụng cú pháp lệnh $\bond{\}$ kết hợp với các kí hiệu -, =, # để chỉ liên kết đơn (sbond), đôi (dbond) và ba (tbond) tương ứng như sau:

Bảng 2. Mã lệnh minh họa các loại liên kết chủ yếu trong hợp chất hữu cơ

Cú pháp lệnh	Kết quả
$\ce{CH3-CHO}$	$CH_3 - CHO$
$\ce{CH2=CH-C\#CH}$	$CH_2 = CH - C \equiv CH$

Để biểu diễn liên kết yếu, liên kết cho nhận, dùng lệnh `\bond` có thêm các tùy chọn `{~}`, `{...}`, `{->}`, `{<-}`.

Bảng 3. Mã lệnh minh họa một số loại liên kết yếu

Cú pháp lệnh	Kết quả
<code>\ce{O = S \bond{->}O}</code>	$O = S \rightarrow O$
<code>\ce{Br^{+} \bond{~}CH2 \dbond CH2}</code>	$Br^{+} \dots CH_2 = CH_2$
<code>\ce{H2O \bond{...}NaCl \bond{...}H2O}</code>	$H_2O \dots NaCl \dots H_2O$

- **Biểu diễn phương trình phản ứng hóa học**

Viết phương trình hóa học là tính năng nổi bật của gói *mhchem* với nhiều tùy chọn về các loại mũi tên và điều kiện phản ứng. Ngoài ra, gói này còn hỗ trợ viết chữ dưới công thức hóa học của các chất trong phương trình phản ứng.

Bảng 4. Mã lệnh minh họa một số phương trình hóa học

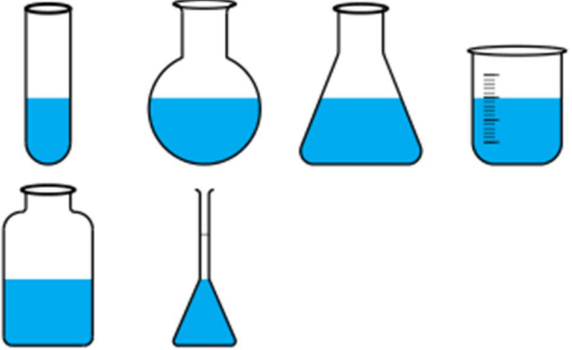
Cú pháp lệnh	Kết quả
<code>\ce{CO2 + C -> 2CO}</code>	$CO_2 + C \rightarrow 2CO$
<code>\ce{2NO2 <=> N2O4}</code>	$2NO_2 \rightleftharpoons N_2O_4$
<code>\ce{2SO2 + O2 -> [text{\ce{t^o}}] [V2O5] 2SO3}</code>	$2SO_2 + O_2 \xrightarrow[V_2O_5]{t^o} 2SO_3$
<code>\ce{Zn^{2+} <=> [ce{+ 2OH-}] [ce{+ 2H+}] \underset{\text{Amphoterer hydroxid}}{\ce{Zn(OH)2 v}} } <=> C[+2OH-][+2H+] \underset{\text{Hydroxozikat}}{\ce{[Zn(OH)4]^{2-}}} }</code>	$Zn^{2+} \xrightleftharpoons[+2H^+]{+2OH^-} Zn(OH)_2 \downarrow \xrightleftharpoons[+2H^+]{+2OH^-} [Zn(OH)_4]^{2-}$ Amphoterer hydroxid Hydroxozikat

Ứng dụng của gói lệnh pst – labo

Địa chỉ tải: <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/pst-labo>

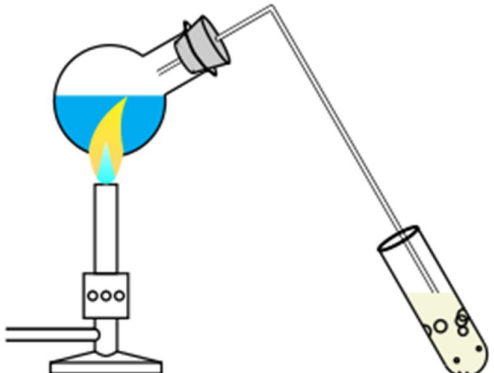
Trong tất cả các gói lệnh hỗ trợ cho soạn thảo hóa học chỉ có duy nhất gói *pst – labo* của nhóm tác giả D. Girou, C. Jorssen, M. Luque và H. Vob hỗ trợ vẽ các dụng cụ thí nghiệm. Gói này dựa trên các lệnh của gói lệnh *PSTricks* do đó phải biên dịch file văn bản theo thứ tự file.tex → file.dvi → file.ps → file.pdf. Gói *pst – labo* cho phép vẽ riêng lẻ nhiều dụng cụ thí nghiệm đến một bộ thí nghiệm hóa học hoàn chỉnh.

Bảng 5. Mã lệnh vẽ một số dụng cụ thủy tinh

<pre> \psset{unit=0.5cm} \pstTubeEssais \pstTubeEssais[glassType=ballon] \pstTubeEssais[glassType=erlen] \pstTubeEssais[glassType=becher] \pstTubeEssais[glassType=flacon] \pstTubeEssais[glassType=fiolleJauge] </pre>	
---	--

Kết hợp nhiều tùy chọn, gói *pst – labo* có thể vẽ bộ thí nghiệm hóa học rất đẹp. Người biên soạn có thể xoay, đánh số, kết nối các dụng cụ, đặt nhãn các hóa chất, thêm đèn khí Bunsen, kẹp gỗ, thêm ống thủy tinh, sinh hàn, buret, phễu lọc, máy đo pH, dây dẫn, biểu diễn trạng thái của các chất trong thí nghiệm hóa học... với một mã lệnh ngắn gọn.

Bảng 6. Mã lệnh vẽ một bộ thu khí hoàn chỉnh

<pre> \psset{unit=0.5cm,glassType=ballon, becBunsen} \psframebox{\pstChauffageTube [becBunsen,barbotage]} </pre>	
--	--

Ứng dụng của gói lệnh ChemFig

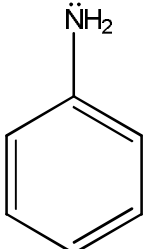
Địa chỉ tải: <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/chemfig>

Vấn đề sử dụng LATEX để vẽ công thức cấu tạo chất là một vấn đề phức tạp đặc biệt khi cần vẽ một công thức cấu tạo của một hợp chất hữu cơ. Đã có nhiều gói lệnh được viết để giải quyết vấn đề này như *xymtex*, *streeTEX*, *ochem*... Mỗi gói đều có ưu và nhược điểm riêng bởi sự đa dạng, phức tạp từ cài đặt cho tới viết mã lệnh, điều đó gây bối rối cho người sử dụng. Gói *ChemFig* được viết bởi Christian Tellechea đã giải quyết

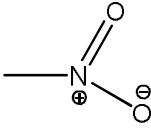
được vấn đề này với ưu thế rất lớn là cú pháp lệnh đơn giản, vì vậy gói lệnh này nhanh chóng phổ biến rộng rãi và tạo được hứng thú với người biên soạn văn bản hóa học.

Sử dụng ChemFig dễ dàng vẽ được các dạng công thức cấu tạo sau:

- **Công thức Lewis**

$\backslash\text{chemfig}\{ *6(-=-(-\text{lewis}\{2:,N\}H_2)-=)\}$	
--	---

- **Công thức cấu tạo ion**

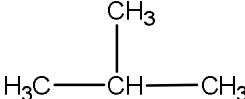
$\backslash\text{chemfig}\{-\text{chemabove}\{N\}\{\scriptstyle\oplus\}([1]O)[7]O^{\ominus}\}$	
--	--

- **Công thức cấu tạo phân tử dạng rút gọn**

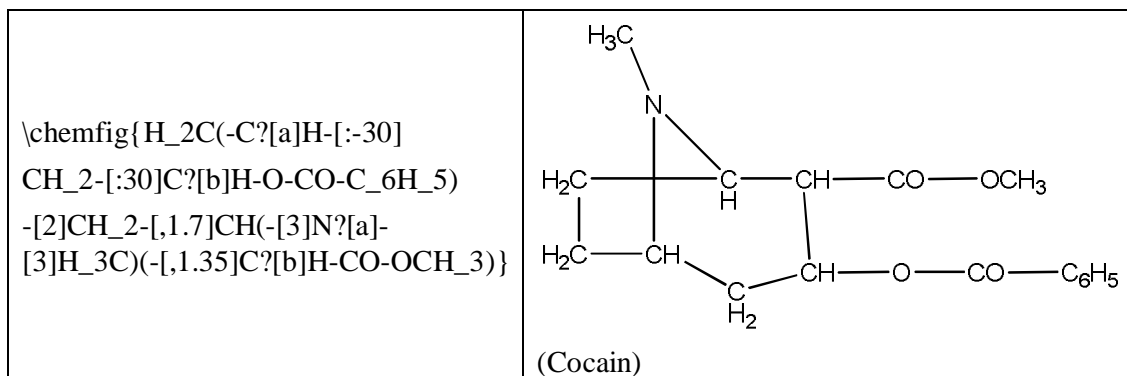
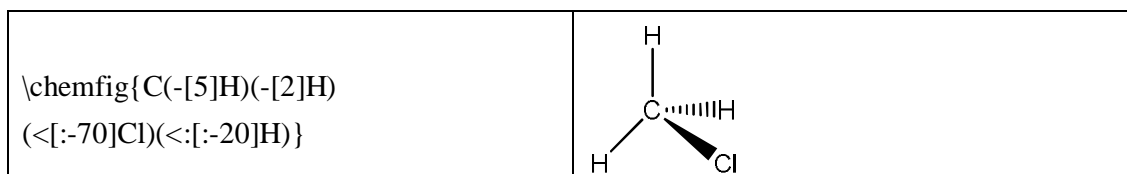
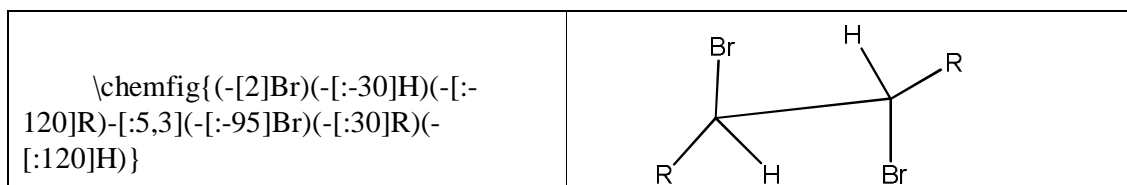
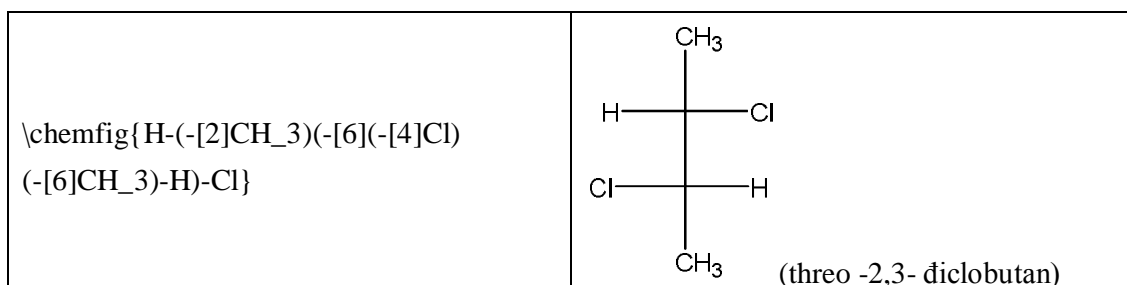
$\backslash\text{chemfig}\{H_3C-\{(CH_2)\}_3-CH=CH_2\}$	$H_3C - (CH_2)_3 - CH = CH_2$
---	-------------------------------

- **Công thức cấu tạo của phân tử có nhánh**

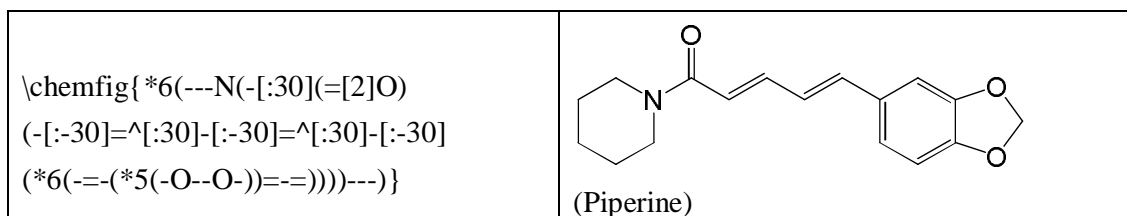
Để vẽ một nhánh, dùng thêm mã lệnh viết cho nhánh gắn trực tiếp vào nguyên tử đó.

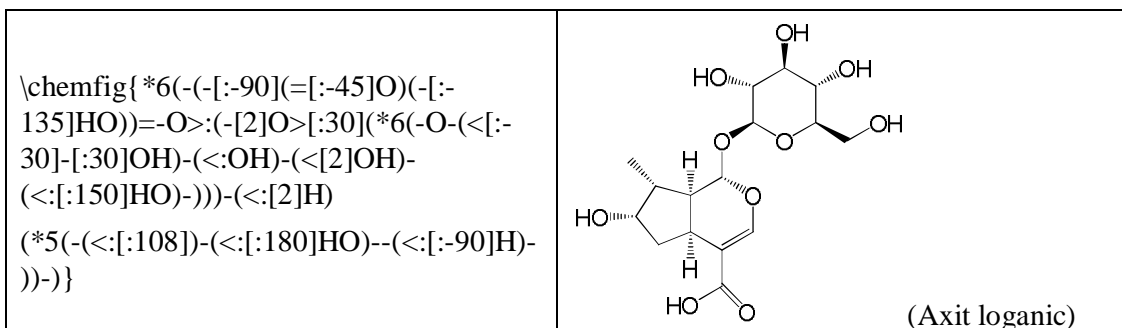
$\backslash\text{chemfig}\{H_3C-CH(-[2]CH_3)-CH_3\}$	
--	--

Đối với các phân tử phức tạp, đôi khi cần vẽ liên kết giữa hai nguyên tử không ở cạnh nhau, để làm được việc này, kí tự ? được sử dụng nhằm chỉ ra sự liên kết giữa hai nguyên tử đã được đánh dấu bằng kí tự ? đó.

- *Công thức Cram*- *Công thức phối cảnh*- *Công thức chiếu Fiso*

Dùng *ChemFig* vẽ các phân tử phức tạp rất hiệu quả.





Gói lệnh *ChemFig* còn có thể biểu diễn công thức cấu tạo của polime, vẽ được phương trình, chuỗi phản ứng, đặc biệt nhất là vẽ được cơ chế phản ứng, sơ đồ tổng hợp các hợp chất hữu cơ.

Ngoài ba gói lệnh đã đề cập trên đây, LATEX còn được dùng để tạo các file trình diễn (presentation), vẽ sơ đồ tư duy, vẽ đồ thị, và làm đề thi trắc nghiệm rất nhanh chóng, hiệu quả, đáp ứng các yêu cầu của quá trình đổi mới hiện nay trong công tác giáo dục.

3. Kết luận

Những công việc liên quan đến học tập, nghiên cứu và giảng dạy hóa học thường xuyên phải soạn thảo một số lượng lớn văn bản. Tính đặc thù về nội dung của những văn bản kỹ thuật này đã gây ra rất nhiều khó khăn và tốn thời gian khi phải soạn thảo bởi Microsoft Word. Sự phát triển của LATEX với các gói lệnh phù hợp, thông minh hơn, sẽ là một hướng giải quyết mới có hiệu quả và đem lại văn bản chất lượng cao. Trong thời gian tới, LATEX được mong đợi sẽ là một công cụ phổ biến trong việc biên soạn các tài liệu hóa học nói riêng cũng như các văn bản khoa học kỹ thuật nói chung.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Hữu Điền (2009), *mhchem.sty – Phương trình hóa học*, <<http://www.scribd.com/doc/19285361/mhchemhelp>>, xem 07/09/2015.
2. Phùng Gia Luân (2011), *Cơ bản về ChemFig và các ví dụ*, <<https://chemistrylatex.wordpress.com/2011/11/27/su-dung-chemfig/>>, xem 07/09/2015.
3. Denis Girou, Christophe Jorssen, Manuel Luque, and Herbert Voß (2005), *PST-Labo - chemical objects version 2.02*, Available at: <<http://mirrors.ibiblio.org/CTAN/graphics/pstricks/contrib/pst-labo/pst-labo-docEN.pdf>> [Accessed 07 September 2015]
4. Christian Tellechea (2012), *ChemFig v1.1a A TEX package for drawing molecules*, Available at: <http://ctan.megagod.net/tex-archive/macros/generic/chemfig/chemfig_doc_en.pdf> [Accessed 07 September 2015]

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 06-8-2015; ngày phản biện đánh giá: 06-9-2015;
ngày chấp nhận đăng: 24-9-2015)