

# Le paquetage chemidentifier

Aliocha SKRZYPCZAK

Version 2.0.1

2026-09-20

## Résumé

`chemidentifier` numérote les composés d'un article de chimie de synthèse dans *l'ordre logique de la synthèse* — l'ordre où vous les déclarez — et non dans l'ordre où ils apparaissent dans le texte. Chaque numéro imprimé peut être rendu cliquable et renvoyer au schéma qui montre le composé (`links=true`, désactivé par défaut, §8.3). Le paquetage est écrit en L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X3 (expl3) ; comme `\ref/\label`, tout se stabilise en deux compilations.

## Table des matières

|          |                                                                  |           |
|----------|------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Installation et chargement</b>                                | <b>2</b>  |
| 1.1      | Quelle version est chargée . . . . .                             | 2         |
| <b>2</b> | <b>Les trois commandes</b>                                       | <b>2</b>  |
| 2.1      | <code>\chemid*</code> — déclarer . . . . .                       | 3         |
| 2.2      | <code>\chemid</code> — utiliser . . . . .                        | 4         |
| 2.3      | <code>\chemidhere</code> — ancrer . . . . .                      | 4         |
| <b>3</b> | <b>Ce qui se passe dans la table des matières et les signets</b> | <b>5</b>  |
| <b>4</b> | <b>Numérotation</b>                                              | <b>5</b>  |
| 4.1      | Clés . . . . .                                                   | 5         |
| 4.2      | Au-delà de 26 enfants . . . . .                                  | 5         |
| 4.3      | Remise à zéro . . . . .                                          | 6         |
| <b>5</b> | <b>Familles à gabarit</b>                                        | <b>6</b>  |
| 5.1      | Les options d'une famille . . . . .                              | 6         |
| 5.2      | Les enfants numérotés par la famille . . . . .                   | 7         |
| 5.3      | Une famille, une sorte d'enfants . . . . .                       | 7         |
| <b>6</b> | <b>Options</b>                                                   | <b>7</b>  |
| <b>7</b> | <b>Document multilingue</b>                                      | <b>8</b>  |
| <b>8</b> | <b>Deux points à connaître</b>                                   | <b>9</b>  |
| 8.1      | Le nom brut déduit automatiquement . . . . .                     | 9         |
| 8.2      | Un numéro n'est un lien que s'il mène quelque part . . . . .     | 9         |
| 8.3      | Activer les liens . . . . .                                      | 10        |
| <b>9</b> | <b>Déclarer après avoir utilisé</b>                              | <b>10</b> |

## 1 Installation et chargement

Copiez `chemidentifier.sty` à côté de votre document, ou lancez `make install` pour l'installer dans `~/texmf`.

```
\usepackage{hyperref}           % avant chemidentifier, de preference
\usepackage[links=true]{chemidentifier}
```

`hyperref` n'est pas chargé par le paquetage : il est *déecté*, pour vous laisser maîtriser ses options et l'ordre de chargement. Les numéros cliquables et les ancres sont une option à activer en plus de cela : `links` vaut `false` par défaut, ajoutez donc `links=true` — comme ci-dessus, ou plus tard via `\chemidsetup` — pour les obtenir (§8.3). Dans tous les cas, si `hyperref` manque, tout est numéroté normalement, rien n'est cliquable, et un avertissement le rappelle une fois.

### 1.1 Quelle version est chargée

`chemidentifier.sty` est un chargeur : il lit l'option `version`, et rien d'autre, puis passe la main à l'implémentation demandée. La version 2 est celle par défaut, décrite ici ; la version 1 est conservée telle quelle, définitivement, pour les documents écrits avec elle.

```
\usepackage{chemidentifier}      % version 2
\usepackage[version=1]{chemidentifier} % version 1, figee
```

Trois choses changent en version 2 pour un document écrit en version 1, les trois délibérément :

- `\herechemid` s'appelle désormais `\chemidhere`. L'ancien nom fonctionne toujours et continuera de fonctionner ; il signale une fois par document qu'il a été renommé.
- Un composé sans ancre est imprimé *sans* lien plutôt que de renvoyer dans le vide (§8.2). Les liens se stabilisent donc à la deuxième compilation, comme `\ref`.
- `\chemidhere{parent}` ancre maintenant toute la famille, enfants compris (§2.3).

Tout le reste est identique, et le manuel de la version 1 est installé à côté de celui-ci sous le nom `chemidentifier-doc-v1.fr.pdf`. La suite de tests compile chaque document de test de la version 1 avec l'implémentation figée et le compare à ses références d'origine, octet pour octet.

## 2 Les trois commandes

| Commande                      | Rôle        | Affichage            |
|-------------------------------|-------------|----------------------|
| <code>\chemid*{clé}</code>    | déclaration | aucun                |
| <code>\chemid{clé}</code>     | utilisation | le numéro, cliquable |
| <code>\chemidhere{clé}</code> | ancre       | aucun                |

## 2.1 \chemid\* — déclarer

```
\chemid*{clé}
\chemid*{clé}{nom riche}
\chemid*{clé}{nom riche}[nom brut]
\chemid*{clé}[nom riche][nom brut]      % variante equivalente
```

La déclaration n'imprime rien. **L'ordre des déclarations fixe la numérotation** : placez-les dans le préambule, dans l'ordre de votre schéma de synthèse.

```
\chemid*{benz}      % 1
\chemid*{benz.cl}   % 1a
\chemid*{benz.br}   % 1b
\chemid*{amine}     % 2
```

Le compteur principal avance à chaque nouveau *parent*. Chaque parent possède son propre compteur de lettres, si bien que vous pouvez déclarer les enfants plus tard sans casser la numérotation : **1** et **1a,b**, puis **2**.

Un *nom riche* remplace complètement le numéro automatique :

```
\chemid*{cible}{cible\textsubscript{finale}}[cible finale]
```

donne **cible<sub>finale</sub>**. Le second argument, entre crochets, est la version en texte brut utilisée dans les signets PDF et les métadonnées, où aucune mise en forme n'est admise. Si vous l'omettez, il est déduit automatiquement du nom riche (voir §8.1).

### Déclarer plusieurs clés d'un coup

Une liste de clés séparées par des virgules déclare chacune d'elles, auto-numérotée à son tour — la même convention que \chemid :

```
\chemid*{mol1,mol2,mol3}      % trois parents : 1, 2, 3
\chemid*{mol1.a,mol1.b}       % deux enfants de mol1 : 1a, 1b
```

Un nom personnalisé ne peut pas accompagner une déclaration multiple — \chemid\*{a,b}{nom} serait ambigu, à quelle clé appartiendrait-il ? C'est une erreur ; déclarez alors cette clé seule. Une virgule à *l'intérieur* d'une seule clé (résultat d'une clé mal formée, p. ex. générée par macro) est elle aussi rejetée.

### Un enfant sans son parent

Déclarer des enfants en bloc sans jamais déclarer leur parent à part fonctionne aussi : le parent est créé implicitement (§4.1), avec son propre numéro, et \chemid de son nom seul l'affiche normalement, sans erreur :

```
\chemid*{molz.a,molz.b}      % molz n'a jamais ete declare seul
...
\chemid{molz}                 % -> son numero
```

## 2.2 \chemid — utiliser

\chemid accepte une liste de clés séparées par des virgules et fonctionne partout : corps du texte, \caption, titres de section.

| Appel                           | Résultat                | Règle                              |
|---------------------------------|-------------------------|------------------------------------|
| \chemid{benz}                   | 1                       | clé simple                         |
| \chemid{benz.cl}                | 1a                      | clé enfant                         |
| \chemid{benz.cl,benz.br,benz.i} | 1a-c                    | 3 contiguës : intervalle           |
| \chemid{benz.cl,benz.br}        | 1a,b                    | 2 contiguës                        |
| \chemid{benz.cl,benz.i}         | 1a,1c                   | non contiguës                      |
| \chemid{benz,amine.a}           | 1 et 2a                 | familles différentes               |
| \chemid{cible}                  | cible <sub>finale</sub> | nom personnalisé                   |
| \chemid{seriea,serieb,seriec}   | 4-6                     | 3 parents consécutifs : intervalle |

L'ordre que vous donnez est respecté tel quel : rien n'est trié. Une clé non déclarée produit une erreur de compilation et s'imprime ??, comme un \ref non résolu.

Plusieurs parents simples cités à la suite se contractent en intervalle exactement comme plusieurs enfants d'un même parent : \chemid{seriea,serieb} (seulement deux, sous le `range-threshold`) donne encore 4 et 5, mais un trou casse l'intervalle plutôt que d'être gommé, par exemple 4 et 6 pour \chemid{seriea,seriec} (serieb non cité entre les deux). Un nom personnalisé, une clé non déclarée ou une clé enfant ne rejoignent jamais une telle suite — ils la terminent simplement, comme le ferait une famille différente.

## 2.3 \chemidhere — ancrer

\chemidhere{clé} pose la cible du lien. Placez-la dans la figure qui montre le composé, typiquement près du \caption :

```
\begin{figure}
  \centering
  \includegraphics{schema}
  \chemidhere{benz}\chemidhere{benz.cl}\chemidhere{benz.br}
  \caption{Halogenation de \chemid{benz}}
\end{figure}
```

Elle n'imprime rien et ne modifie *jamais* la mise en page, en mode horizontal comme en mode vertical (c'est vérifié par la suite de tests). Un clic amène le lecteur sur la figure ; le format PDF ne permet pas de viser une sous-partie d'une image, une ancre y étant un point et non une zone.

### Plusieurs clés, et des familles entières, d'un coup

\chemidhere accepte une liste, avec la même convention de virgule que \chemid et \chemid\*. Et comme un schéma montre en général un parent avec tous ses enfants, nommer le *parent* ancre la famille :

```
\chemidhere{cmbr.4,cmbr.6,cmbr.8}  % trois cles, trois ancrs
\chemidhere{cmbr}                  % les memes trois, plus cmbr
\chemidhere{cmbr,cmal}             % deux familles en un appel
```

Un enfant qui porte une ancre à lui est laissé tranquille par l'ancre de famille — l'explicite l'emporte, sans rien signaler. Les enfants déclarés *après* le schéma sont ancrés eux aussi, étant relus du `.aux`. `anchor-children` à `false` limite `\chemidhere{parent}` au parent seul.

## Diagnostics

Poser deux fois l'ancre d'une même clé déclenche un avertissement : la cible PDF serait ambiguë. Utiliser une clé jamais déclarée est une erreur. Enfin, une clé utilisée mais jamais ancrée est signalée en fin de compilation, comme un `\ref` non résolu — et, la version 2 n'ayant nulle part où envoyer ce lien, elle est imprimée sans lien du tout (§8.2).

### `\herechemid`, l'ancien nom

La version 1 appelait cette commande `\herechemid`. Elle fonctionne toujours, et continuera de fonctionner, mais c'était la seule à sortir du rang parmi `\chemid`, `\chemidkey`, `\chemidnote`, `\chemidscheme` et `\chemidsetup` ; l'employer le signale une fois par document.

## 3 Ce qui se passe dans la table des matières et les signets

Un numéro de composé dans un titre de section doit se comporter différemment selon l'endroit où ce titre est réutilisé.

| Contexte                               | Comportement                         |
|----------------------------------------|--------------------------------------|
| Corps du texte, légende, titre affiché | numéro cliquable                     |
| Table des matières, liste des figures  | numéro affiché, <i>non</i> cliquable |
| Signets PDF, métadonnées               | texte brut, sans mise en forme       |

Le lien est retiré de la table des matières parce que l'entrée est *déjà* un lien vers la section : deux liens imbriqués ne sont pas représentables en PDF. Les trois rendus sont produits par le même code interne, entièrement expansible, ce qui garantit qu'ils ne peuvent pas diverger.

## 4 Numérotation

### 4.1 Clés

Une clé s'écrit `parent` ou `parent.enfant` — un seul niveau de hiérarchie ; `a.b.c` est une erreur. Les clés distinguent la casse et acceptent chiffres, tirets et soulignés (`2eme`, `ma_cle`, `compose-3`), mais pas de virgule : c'est le séparateur de liste de `\chemid` et `\chemid*`.

Déclarer `parent.enfant` sans avoir déclaré `parent` crée ce dernier automatiquement, avec son propre numéro, et le signale dans le `.log`. L'option `implicit-parent=false` en fait une erreur.

### 4.2 Au-delà de 26 enfants

Les lettres continuent au-delà de `z` : `aa`, `ab`, ... Il n'y a pas de limite à 26.

### 4.3 Remise à zéro

`\chemidreset` remet le compteur principal à zéro : la prochaine déclaration repartira de 1. C’est le seul reset offert — pas de remise à une valeur arbitraire, pas de reset partiel. Les composés déjà déclarés conservent le numéro qui leur a été attribué.

## 5 Familles à gabarit

Un parent numérote ses enfants avec des lettres : 1a, 1b, 1c. C’est juste pour une série d’analogues, et faux pour une série dont les membres se distinguent par quelque chose que le chimiste nomme déjà — une longueur de chaîne, un degré d’oxydation, un substituant. Une *famille* laisse le parent porter le radical, et chaque enfant ne porter que ce qui varie :

```
\chemidfamily{lcoum}{ name = Lcoum-C , placeholder = n }
\chemid*{lcoum.quatre}{4}
\chemid*{lcoum.huit}{8}
\chemid*{lcoum.douze}{12}
```

`\chemidfamily` déclare le parent, exactement comme le ferait `\chemid*` — il prend la même place dans la numérotation — et lui donne une forme dont ses enfants héritent. Dans une telle famille, l’argument qui *nommerait* une clé est lu comme sa *valeur* : le second argument de `\chemid*{lcoum.quatre}{4}` est le 4, pas un composé appelé « 4 ».

| Écrit                                                     | Imprimé                   |
|-----------------------------------------------------------|---------------------------|
| <code>\chemid{lcoum.quatre}</code>                        | Lcoum-C <sub>4</sub>      |
| <code>\chemid{lcoum.quatre,lcoum.huit}</code>             | Lcoum-C <sub>4,8</sub>    |
| <code>\chemid{lcoum.quatre,lcoum.huit,lcoum.douze}</code> | Lcoum-C <sub>4,8,12</sub> |
| <code>\chemid{lcoum}</code>                               | Lcoum-C <sub>n</sub>      |

Le radical est imprimé *une fois* pour tout un groupe et les valeurs sont rassemblées dans un seul indice, exactement comme 1a,b factorise le 1. Chaque valeur garde son propre lien, et le radical pointe vers la première.

### 5.1 Les options d’une famille

| Option          | Défaut    | Rôle                                                               |
|-----------------|-----------|--------------------------------------------------------------------|
| name            | (vide)    | le radical ; sans lui, le numéro du parent sert de radical         |
| raw             | déduit    | sa version texte brut, comme pour <code>\chemid*</code>            |
| sub-style       | sub-style | numérotation des enfants sans valeur                               |
| child-format    | subscript | subscript, superscript, plain, ou du code                          |
| placeholder     | (vide)    | ce que <code>\chemid{parent}</code> montre à la place d’une valeur |
| placeholder-raw | déduit    | sa version texte brut                                              |

`child-format` prend l’un des trois mots-clés ou, pour tout ce qu’ils ne savent pas exprimer, le code lui-même, avec `\chemidvalue` là où la valeur doit venir :

```
\chemidfamily{cu}{ name = Cu , child-format = \textsuperscript{\chemidvalue} }
```

## 5.2 Les enfants numérotés par la famille

Un enfant déclaré sans valeur à lui est numéroté par le `sub-style` de la famille — `lower-greek` compris, qui est justement ce dont ces séries sont étiquetées :

```
\chemidfamily{ser}{ name = Serie , sub-style = lower-greek ,  
                    child-format = plain }  
\chemid*{ser.a}\chemid*{ser.b}\chemid*{ser.c}
```

`\chemid{ser.a}` donne *Série $\alpha$* , et `\chemid{ser.a,ser.b,ser.c}` donne *Série $\alpha$ - $\gamma$*  : des enfants numérotés automatiquement sont consécutifs, ils se contractent donc en intervalle comme n'importe quelle autre suite. Dans les signets PDF, où il n'y a pas de mathématiques à espérer, la lettre grecque apparaît comme le caractère lui-même.

Les valeurs données à la main, elles, ne se contractent jamais : 4, 8 et 12 n'ont aucune notion de « consécutif », et 4-12 affirmerait ce que personne n'a écrit. Elles sont toujours listées une à une.

## 5.3 Une famille, une sorte d'enfants

Dans une famille, soit tous les enfants portent une valeur à eux, soit aucun. Mélanger les deux est une erreur : ceux du milieu devraient être numérotés par une règle que les autres ne suivent visiblement pas, et aucune lecture de la liste ne serait honnête. L'enfant est tout de même déclaré — un diagnostic ne doit pas décaler la numérotation de tout ce qui suit.

## 6 Options

Elles se donnent au chargement, ou à tout moment avec `\chemidsetup{...}` ; dans ce dernier cas elles suivent la portée du groupe  $\text{\TeX}$  courant.

| Option                       | Défaut                 | Rôle                                                                                                  |
|------------------------------|------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <code>list-sep</code>        | <code>{, }</code>      | entre deux familles                                                                                   |
| <code>last-sep</code>        | <code>{ and }</code>   | avant la dernière famille                                                                             |
| <code>sub-sep</code>         | <code>{,}</code>       | entre lettres d'une même famille                                                                      |
| <code>range-sep</code>       | <code>{-}</code>       | dans un intervalle <code>1a-c</code>                                                                  |
| <code>range-threshold</code> | <code>3</code>         | taille à partir de laquelle on contracte en intervalle                                                |
| <code>format</code>          | (vide)                 | mise en forme appliquée à chaque identifiant, p. ex. <code>\textbf</code>                             |
| <code>main-style</code>      | <code>arabic</code>    | <code>arabic</code> , <code>alph</code> , <code>Alph</code> , <code>roman</code> , <code>Roman</code> |
| <code>sub-style</code>       | <code>alph</code>      | idem, plus <code>lower-greek</code> , pour la lettre                                                  |
| <code>prefix</code>          | <code>{chemid.}</code> | préfixe des ancres PDF                                                                                |
| <code>unknown-text</code>    | <code>{??}</code>      | affichage d'une clé non déclarée                                                                      |
| <code>purify</code>          | <code>true</code>      | déduire le nom brut du nom riche                                                                      |
| <code>implicit-parent</code> | <code>true</code>      | créer un parent manquant automatiquement                                                              |
| <code>strict-anchors</code>  | <code>true</code>      | pas d'ancre, pas de lien — §8.2                                                                       |
| <code>links</code>           | <code>false</code>     | <code>true</code> ajoute liens et ancres                                                              |
| <code>anchor-children</code> | <code>true</code>      | <code>\chemidhere{parent}</code> ancre la famille                                                     |
| <code>version</code>         | <code>2</code>         | implémentation à charger, §1.1                                                                        |
| <code>auto-lang</code>       | <code>true</code>      | voir §7                                                                                               |

La convention typographique des revues de chimie — numéros en gras — se demande ainsi :

```
\usepackage[format=\textbf]{chemidentifieur}
```

## 7 Document multilingue

Le séparateur devant le dernier élément est, par défaut, l'anglais `and` (`last-sep`). Pour choisir une langue fixe, sans `babel` :

```
\usepackage[last-sep={~et~}]{chemidentifieur} % au chargement
\chemidsetup{last-sep={~et~}} % ou a tout moment
```

Dans une thèse mêlant plusieurs langues avec `babel`, le séparateur suit automatiquement la langue courante — celle que `\selectlanguage` vient de fixer — sans rien demander de plus :

```
\usepackage[french,ngerman,spanish,italian,english]{babel}
...
\selectlanguage{french} \chemid{a,b} % ... et ...
\selectlanguage{ngerman} \chemid{a,b} % ... und ...
\selectlanguage{spanish} \chemid{a,b} % ... y ...
\selectlanguage{italian} \chemid{a,b} % ... e ...
\selectlanguage{english} \chemid{a,b} % ... and ...
```

Le mécanisme lit `\language`, que babel met à jour à chaque `\selectlanguage`, de façon entièrement expansible : il fonctionne donc identiquement dans le texte, la table des matières et les signets PDF. Sans babel chargé, ou pour une langue non enregistrée, le paquetage retombe silencieusement sur l'option `last-sep`.

Cinq langues sont connues par défaut, avec leurs variantes babel usuelles :

| Langue   | Séparateur       | Noms babel reconnus                                                       |
|----------|------------------|---------------------------------------------------------------------------|
| anglais  | <code>and</code> | <code>english, american, british, australian, UKenglish, USenglish</code> |
| français | <code>et</code>  | <code>french, francais, acadian, canadien</code>                          |
| allemand | <code>und</code> | <code>german, ngerman, austrian, naustrian</code>                         |
| espagnol | <code>y</code>   | <code>spanish, mexican</code>                                             |
| italien  | <code>e</code>   | <code>italian</code>                                                      |

Pour ajouter ou redéfinir une langue :

```
\chemidaddlanguage{portuges}{ e }
```

Pour désactiver la bascule automatique — un séparateur fixe, quelle que soit la langue courante — mettez `auto-lang=false` ; `last-sep` redevient alors la seule source, comme avant l'introduction de cette fonctionnalité. Comme toute option, cela peut se faire localement dans un groupe :

```
\begingroup
  \chemidsetup{auto-lang=false,last-sep={ ou bien }}
  \chemid{a,b} % ... ou bien ...
\endgroup
\chemid{a,b} % la langue reprend la main
```

## 8 Deux points à connaître

### 8.1 Le nom brut déduit automatiquement

Quand vous donnez un nom riche sans son équivalent brut, celui-ci est déduit avec `\text_purify:n d'expl3` : `H\textsubscript{2}O` devient `H2O`. Le résultat est bon sur les cas courants (indices, exposants, gras, italique) mais **n'est pas garanti** sur des mathématiques imbriquées. Pour un nom riche non trivial, donnez la version brute vous-même :

```
\chemid*{k}{\alpha$-D-glucopyranose}[alpha-D-glucopyranose]
```

### 8.2 Un numéro n'est un lien que s'il mène quelque part

Un composé jamais ancré est imprimé comme un numéro ordinaire : aucun lien, plutôt qu'un lien atterrissant là où le lecteur PDF voudra bien le poser. C'est `strict-anchors`, activé par défaut en version 2.

Pour cela, le paquetage doit savoir, au moment où il imprime un numéro, si une ancre existe *quelque part* dans le document — ce qu'il ne peut pas savoir en avançant. Les ancres sont donc mémorisées dans le `.aux` et relues à la compilation suivante : la première ne met de lien que sur ce qu'elle a déjà vu ancré, la deuxième les met tous, et cela ne bouge plus. La même contrepartie que `\ref/\label`, et pour la même raison.

Le cas du parent mérite d'être connu. Un schéma n'ancre souvent que les enfants — `\chemidhere{parent.a}`, `\chemidhere{parent.b}` — alors que le texte cite aussi le parent seul. Plutôt que de supprimer ce lien, le paquetage l'envoie vers le *premier enfant ancré* : `\chemid{parent}` arrive sur la même figure, c'est-à-dire là où le lecteur voulait aller. Avec `\chemidhere{parent}` (§2.3), la question ne se pose même pas, le parent étant ancré lui aussi.

`strict-anchors` à `false` rétablit le comportement de la version 1 : le lien est toujours écrit, et seule l'absence d'ancre est signalée en fin de compilation.

### 8.3 Activer les liens

`links` vaut `false` par défaut : les composés sont de simples numéros, sans `\hyperlink` ni `\hypertarget`, même là où un `\chemidhere` en demande un. Le bilan de fin de document sur les composés sans ancre se tait également, n'ayant rien à protéger. La numérotation, les noms et tout le reste du rendu sont inchangés dans les deux cas.

Passer `links=true` — en option du paquetage ou via `\chemidsetup` — rétablit toute la couche d'hyperliens décrite ci-dessus : numéros cliquables, ancres, et l'avertissement de fin de document pour un composé utilisé sans ancre.

```
\usepackage[links=true]{chemidentfier}
\chemidsetup{links=true}      % ou a partir d'ici, ou dans un groupe
```

## 9 Déclarer après avoir utilisé

`\chemid` et `\chemidhere` peuvent apparaître *avant* le `\chemid*` qui déclare la clé — utile pour ne pas être contraint de tout déclarer en tête de document, en particulier lorsque la table des matières précède le texte :

```
Le compose \chemid{mol1} est cite ici, avant sa declaration.
...
\chemid*{mol1}
```

Chaque clé déclarée est enregistrée dans le `.aux` à la fin de la compilation (numéro, lettre, nom riche, nom brut), et relue au `\begin{document}` suivant — le même mécanisme que `\label/\ref`, avec la même contrepartie : la première compilation affiche ?? pour toute référence en avance sur sa déclaration, la deuxième la résout, et le résultat reste stable ensuite, puisque l'ordre des déclarations ne dépend jamais de l'endroit où elles sont utilisées. Une clé encore inconnue à la fin de la deuxième passe est réellement non déclarée : l'erreur reste alors affichée.

Si vous n'avez pas de contrainte particulière, déclarer en tête de préambule reste ce qu'il y a de plus simple : le numéro est connu dès la lecture de la clé, sans référence en avant à résoudre.

## 10 Substitution de texte dans les figures `.pdf_tex` (LuaLaTeX uniquement)

Un schéma exporté par Inkscape (une paire `.pdf_tex` + `.pdf`) peut avoir ses étiquettes de composés reliées à `\chemid`, comme `psfrag` rustinait autrefois du texte dans des figures `.eps` — sans les scories du `.eps/psfrag` : un `.pdf_tex` n'est que du texte L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X qui appelle

`\includegraphics`, donc une simple substitution ligne par ligne suffit. Cela demande de compiler avec `lualatex` (ou tout autre moteur fournissant `\directlua`) : la substitution est faite en Lua, qui lit le fichier comme du texte brut et rend la main à T<sub>E</sub>X une fois les marqueurs remplacés. Le fichier sur le disque n'est jamais modifié : réexporter depuis Inkscape ne perd donc rien.

Une alternative en T<sub>E</sub>X pur, à base de manipulation de catcodes (à la `psfrag`), a été envisagée puis écartée : un `.pdf_tex` est du vrai code T<sub>E</sub>X/PGF, plein de `\`, `{`, `}`, `%`, `#`, `_`, `~`... Le lire tel quel puis le ré-exécuter comme du code demanderait qu'un même caractère porte deux catcodes contradictoires — inerte pendant la lecture, actif pendant l'exécution — pour un contenu arbitraire : exactement ce qui rendait `psfrag` fragile. Lua contourne le problème en traitant le fichier comme une simple chaîne de bout en bout, et ne rend la main à T<sub>E</sub>X qu'à la toute fin, lu alors sous le régime de catcodes ordinaire de T<sub>E</sub>X.

Placez dans le dessin un marqueur texte brut pour chaque étiquette de composé (TMP1, TMP2...ce que vous voulez, à condition qu'il n'apparaisse pas aussi comme sous-chaîne ailleurs dans le texte de la figure), puis :

```
\usepackage{graphicx}           % nécessaire au .pdf_tex lui-meme
\usepackage{chemidentfier}
\chemidsetup{ pdftex-font = \sffamily\small } % optionnel, une fois

\chemid*{precuteur}
\chemid*{produit}

\begin{figure}
  \centering
  \chemidkey{TMP1}{precuteur}      % TMP1 -> \chemid{precuteur}
  \chemidkey[1.3]{TMP2}{produit}  % 1,3x plus gros que le reste
  \chemidnote{TMPCOND}{K$_2$CO$_3$, acetone, 70~\textcelsius}
  \chemidscheme[0.8]{figures/schema.pdf_tex} % echelle optionnelle
  \chemidhere{precuteur}\chemidhere{produit}
  \caption{Synthese de \chemid{produit} a partir de \chemid{precuteur}..}
\end{figure}
```

| Commande                                        | Rôle                                                                        |
|-------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|
| <code>\chemidkey[facteur]{motif}{clé}</code>    | marqueur → numéro courant du composé, ex. <code>\chemid{clé}</code>         |
| <code>\chemidnote[facteur]{motif}{texte}</code> | marqueur → tout autre texte, libre                                          |
| <code>\chemidscheme[échelle]{chemin}</code>     | lit le fichier, substitue, compose ; étend aussi <code>\graphicspath</code> |

`\chemidscheme` consomme la liste `\chemidkey`/`\chemidnote` en attente au fur et à mesure qu'il lit le fichier : la figure suivante repart donc automatiquement d'une liste vide — pas d'étape « vider » séparée à retenir. Une liste vide est parfaitement valide : un schéma sans aucune étiquette substituable (une structure isolée, un résumé graphique, des étiquettes déjà composées dans le dessin) est simplement lu et composé tel quel, et reste avantageusement passé par `\chemidscheme` pour la gestion du `\graphicspath` et de la police.

La ligne qui inclut le PDF compagnon n'est jamais substituée, seul l'est le texte des étiquettes. Le motif naturel est le nom du composé, et Inkscape nomme lui aussi le PDF exporté d'après le composé : `\chemidkey{KaBMD244}{...}` sur un `KaBMD244.pdf_tex` réécrirait sinon le nom de fichier lui-même et casserait la figure. Lorsqu'un motif apparaît dans le chemin de l'image, le paquet le signale nommément plutôt que de laisser l'erreur

survenir de façon obscure. L'avertissement est sans conséquence si la figure est correcte, mais un motif ne pouvant entrer en collision (TMP1, cpdA...) reste l'habitude la plus sûre.

La taille d'une étiquette substituée est le produit de trois facteurs indépendants, pour qu'une figure réduite reste lisible sans retoucher chaque étiquette à la main :

1. `pdftex-font` (`\chemidsetup`) – la police de base, réglée une fois pour toutes, indépendamment du texte du corps (sinon Inkscape réinjecte la famille du document, à la taille du dessin, souvent trop grande), ex. `\chemidsetup{pdftex-font = \sffamily\fontsize{9}{1}`
2. l'[échelle] de `\chemidscheme` – le même nombre transmis au `\svgscale` de la figure, pour que les étiquettes suivent la taille du dessin.
3. le [facteur] optionnel de `\chemidkey/\chemidnote` – une étiquette isolée par rapport aux autres de la même figure ; vaut 1 par défaut.

Sous un moteur non-Lua, `\chemidscheme` déclenche une erreur claire plutôt que de ne rien faire silencieusement ou de mal rendre le schéma. `\chemidkey` prend le numéro *courant* du composé : elle ne déclare ni ne renumérote rien, les clés doivent donc toujours avoir leur `\chemid*` déclaré par ailleurs.

## 11 Limites assumées

- Un seul niveau de hiérarchie (`parent.enfant`), familles comprises.
- Les listes ne sont pas triées ni dédoublonnées : ce que vous écrivez est ce qui est imprimé — `\chemid{a,b,a}` affiche 1, 2 and 1, sans erreur.
- `cleveref` n'est pas géré (hors périmètre).
- Une clé supprimée du document continue de se résoudre à sa dernière valeur connue tant que le `.aux` n'a pas été effacé — la même limite que `\ref/\label`.
- Les arguments optionnels de `\chemid*` ne sont reconnus que *collés* à la clé, sans le moindre espace ni saut de ligne : `\chemid*{k}{riche}[brut]`. La moindre espace avant { ou [ les exclut de la lecture ; le contenu qui suit est alors traité comme du texte ordinaire, jamais absorbé.