

L^AT_EX Kurs
Chemie

<http://www.latex-kurs.de/kurse/kurse.html>

Übersicht

Chemie Pakete

mhchem

chemfig

Chemie Paket

Paket

mhchem

Einbinden

```
\usepackage{mhchem}
```

```
\usepackage[version=4]{mhchem}
```

```
\usepackage[version=4,arrows=pgf]{mhchem}
```

benutzt folgende Pakete

amsmath, calc, graphics, ifthen, keyval, pdf-texcmds, twoopt

Befehle

Elemente, Aggregatzustand, Isotope ...

Elemente & Co.

Elemente & Co.

Ag und H_2SO_4

Ag und H_2SO_4

Ladungen

Ag^+ und HSO_4^-

SO_4^{2-} und SO_4^{2-}

Aggregat Zustand

$\text{H}_2\text{SO}_4(\text{aq})$

$\text{H}_2\text{SO}_4(\text{aq})$

Oxidationsstufe

$\text{Fe}^{\text{II}}\text{Fe}^{\text{III}}_2\text{O}_4$

Isotope

Isotope

$\text{\ce{^{32}_{16}S}}$ und $\text{\ce{^{34}_{16}S}}$
 ${}^{32}_{16}\text{S}$ und ${}^{34}_{16}\text{S}$

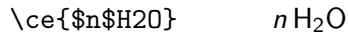
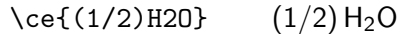
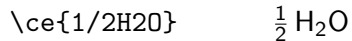
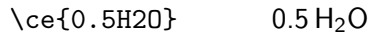
Mit Ladung

$\text{\ce{^{32}_{16}S+}}$ und $\text{\ce{^{34}_{16+}S}}$
 ${}^{32}_{16}\text{S}^+$ und ${}^{34}_{16}\text{S}^+$

ohne

$\text{\ce{^{0}_{-1}n^{-}}}$ und $\text{\ce{^{0}_{-1}n^{-}}}$
 ${}^0_{-1}\text{n}^-$ und ${}^0_{-1}\text{n}^-$

Stöchiometrie



Bindungen

Bindungen

`\ce{A - B = C#D}` $A - B = C \equiv D$

Mit Punkten

`\ce{A\bond{~}B\bond{~-}C}` und

`\ce{A\bond{~--}B\bond{~=}C\bond{-~-}D}`

$A \cdots B \equiv C$ und $A \equiv B \equiv C \equiv D$

`\ce{A\bond{\dots}B\bond{\dots}C}` $A \cdots B \cdots C$

Mit Pfeilen

`\ce{A\bond{->}B\bond{<-}C}` $A \rightarrow B \leftarrow C$

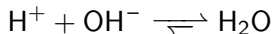
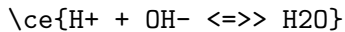
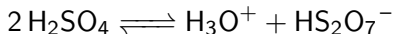
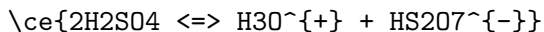
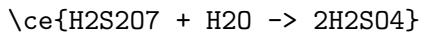
Aussehen

`\sffamily\bfseries\ce{A - B = C#D}`

$A - B = C \equiv D$

Reaktionen

Reaktionen



Reaktionspfeile

`\ce{A -> B}`

`\ce{A <- B}`

`\ce{A <-> B}`

`\ce{A <--> B}`

`\ce{A <=> B}`

`\ce{A <=>> B}`

`\ce{A <<=> B}`

`\ce{A ->[H2O][SO4] B}`

$A \longrightarrow B$

$A \longleftarrow B$

$A \longleftrightarrow B$

$A \rightleftharpoons B$

$A \rightleftharpoons B$

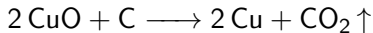
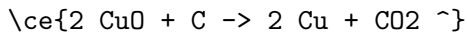
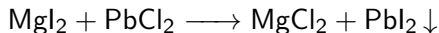
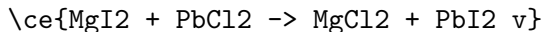
$A \rightleftharpoons B$

$A \rightleftharpoons B$

$A \xrightarrow[\text{SO}_4]{\text{H}_2\text{O}} B$

Fällung und Ausgasen

Fällung und Gasentstehung



Chemie in Text & Mathe

Elemente & Co.

`\ce{Ag}` und `\ce{H2SO4}` Ag und H₂SO₄

`$$\ce{Ag}$$` und `$$\ce{H2SO4}$$` Ag und H₂SO₄

Schrift ändern

`\mhchemoptions{textfontcommand=\sffamily}`

`\mhchemoptions{mathfontcommand=\mathsf}`

Elemente & Co.

`\ce{Ag}` und `\ce{H2SO4}` Ag und H₂SO₄

`$$\ce{Ag}$$` und `$$\ce{H2SO4}$$` Ag und H₂SO₄

chemfig

Ein Paket zum Zeichnen von Strukturformeln.

- Elektronenformel
- Valenzstrichformel
- Keilstrichformel
- Skelettformel







Einbinden

```
\usepackage{chemfig}
```

Achtung

Läuft hier nicht auf den Rechner ...

Bindungen

<code>\chemfig{A-B}</code>	A — B
<code>\chemfig{A=B}</code>	A = B
<code>\chemfig{A~B}</code>	A ≡ B
<code>\chemfig{A>B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A<B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A>:B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A<:B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A> B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A< B}</code>	A  B

Befehle rund um Bindungen

`\setdoublesep{Hoehe}` Vertikaler Abstand bei 2- und 3-fach Bindung (default 2pt)

`\setatomsep{Laenge}` Horizontaler Abstand zwischen zwei Elementen (default 3em)

`\setbondoffset{Laenge}` Horizontaler Abstand zwischen Element und Bindung (default 2pt)

`\setbondstyle{TikZ Code}` Stilländerungen

Beispiel `\setbondstyle{line width=1pt,red}` mit `\setbondstyle{}` wird wieder auf die default Einstellungen gewechselt.

Anpassungen

`\chemfig[<Option1>][<Option2>]{<Code>}`

Option1 ist für die Linie gedacht (Breite, Farbe, Typ, etc.)

Option2 ist für die Knoten gedacht (Farbe, Skalierung, Drehung)

Über die Schriftgrößen Schalter ist auch eine Größenanpassung möglich, wovon aber abgeraten wird.

Vorgegebene Winkel

`\chemfig{A-[Zahl 0 bis n]B}`

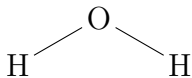
Schrittweite beträgt per default + 45°

0	1	2	3	4	5	6	7	8	...
0°	45°	90°	135°	180°	225°	270°	315°	360°	...

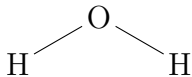
Mit `\setangleincrement{Gradzahl}` kann die Schrittweite verändert werden.

absolute und relative Winkel

`\chemfig{H-[:30]O-[:-30]H}`

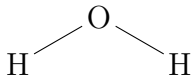


`\chemfig{H-[::30]O-[::-60]H}`



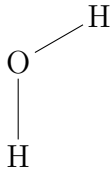
Drehung

`\chemfig{[:60]H-[:30]O-[:-30]H}`



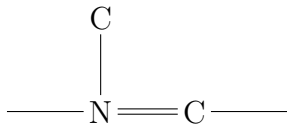
absolut vs. relativ

`\chemfig{[:60]H-[::30]O-[::-60]H}`

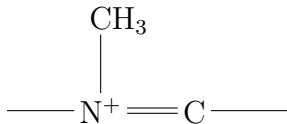


"Abzweigungen"

`\chemfig{-N(-[2]C)=C-}`

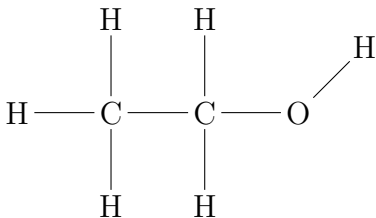


`\chemfig{-N^{+}(-[2]CH_3)=C-}`



Beispiel Ethanol

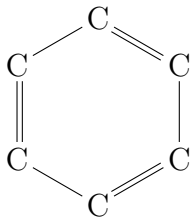
`\chemfig{H-C(-[2]H)(-[6]H)-C(-[2]H)(-[6]H)-O-[1]H}`



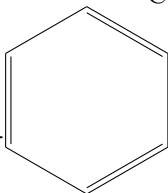
Ringe

`<Atom>*<Anzahl>(<Code>)`

`\chemfig{C*6(-C=C-C=C-C=)}`



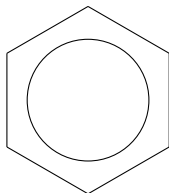
`\chemfig{*6(-==--==--)}`



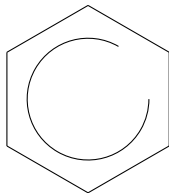
Unvollständig geht, aber mehr wird nicht angezeigt.

Benzol Ring & Co.

```
\chemfig{**6(-----)}
```

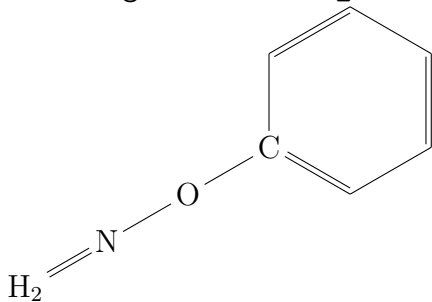


```
\chemfig{**[60,360]6(-----)}
```



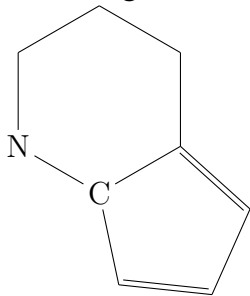
Ringe ...

```
\chemfig{C*6((-O-N=H_2)=-=-=-)}
```



Ringe ...

```
\chemfig{N*6(-C*5(-==)------)}
```



Beschriftungen

```
\chemname [<Dim>]{\chemfig{<Code>}}{<Beschriftung>}
```

Innerhalb von

```
\schemestart
```

```
\chemname [<Dim>]{\chemfig{<Code>}}{<Beschriftung>}
```

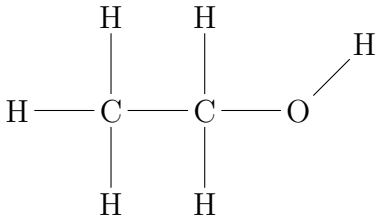
```
\schemestop
```

Beschriftungsbeispiel

```
\schemestart
```

```
\chemname[8ex]{\chemfig{H-C(-[2]H)(-[6]H)-C  
(-[2]H)(-[6]H)-O-[1]H}}{Ethanol}
```

```
\schemestop
```



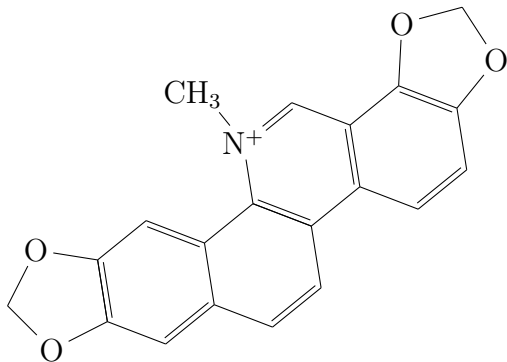
Ethanol

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

Quellcode

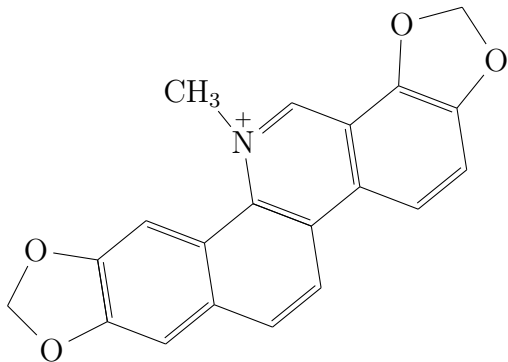
```
\schemestart
\chemname{
\chemfig{[:45]O*5(-*6(-=*6(-=*6(-*6(-=*5(-O--O-)
=--)=--N^+(-[:270]CH_3)--)=--)=--O--)}}
{Sanguinarine}
\schemestop
```

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

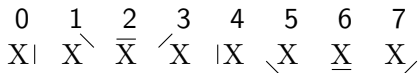
Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

```
\schemestart
\chemname{
\chemfig{[:45]O*5(-*6(-=*6(-=*6(-=*6(-=*5(-O--O-)
--)=--\chemabove{N}{\scriptstyle+}(-[:270]CH_3)-=)
--)-==)---0--)}}{Sanguinarine}
\schemestop
```

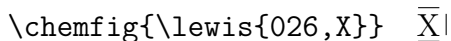
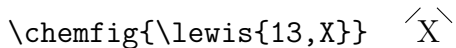
Valenzstrichformeln

Aufbau: `\chemfig{... \lewis{[Zahl(en)],X}...}`

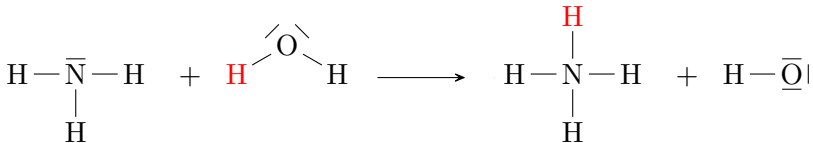
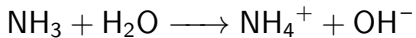
Beispiel: `\chemfig{\lewis{2,N}}` \bar{N}



Kombinationen (Beispiele)



Komplexeres Beispiel



Ammoniak

Wasser

...

Hydroxid-Ion

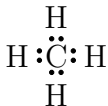
Quellcode

```
\ce{NH3 + H2O -> NH4^{+} + OH^{-}} \par
\schemestart
\chemname{\chemfig{H-\lewis{2,N}(-[::-90]H)-H}}{Ammoniak}
\+
\chemname{\chemfig{{\color{red}H}-[::30]\lewis{13,0}-
[::-60]H}}{Wasser}
\arrow(.mid east--.mid west)
\chemname{
\chemfig{H-N(-[::90]{\color{red}{H}})(-[::-90]H)-H}}{...}
\+
\chemname{\chemfig{H-\lewis{026,0}}}{Hydroxid-Ion}
\schemestop
\chemnameinit{}
```

Elektronenformel

Aufbau: `\chemfig{... \lewis{[Zahlen]:,X}...}`

`\chemfig[white][black]{H-\lewis{0:2:4:6:,C}`
`(-[:90]H)(-[:270]H)-H}`

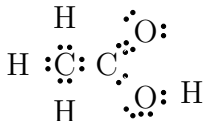
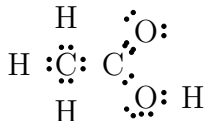


Etwas komplexer ...

`\lewis{}`

vs.

`\Lewis{}`



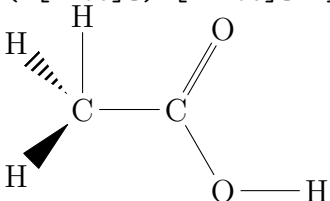
Quellcode

```
\chemfig[white] [black] {H-\lewis{0:2:4:6:,C}  
(-[::90]H)(-[::270]H)-\lewis{1:7:,C}(-[::45]  
\lewis{0:3:5:,0})(-[:::-45]\lewis{0:5:6:,0}-H)}
```

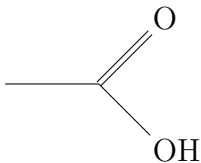
```
\chemfig[white] [black] {H-\Lewis{0:2:4:6:,C}  
(-[::90]H)(-[::270]H)-\Lewis{1:7:,C}(-[::45]  
\Lewis{0:3:5:,0})(-[:::-45]\Lewis{0:5:6:,0}-H)}
```

Keilstrichformel & Skelettformel

`\chemfig{C(<[:225]H)(<[:135]H)(-[:90]H)-C`
`(=[:60]O)-[: -60]O-H}`

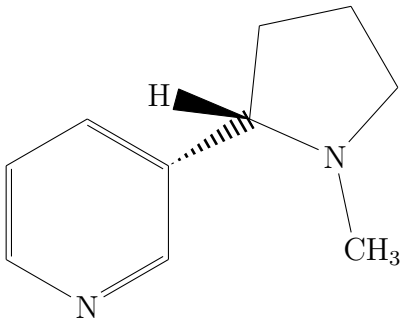


`\chemfig{- (=[:45]O) (-[: -45]OH)}`



Komplexeres Beispiel:

```
\chemfig{[::60]N*6(=-(<:(<[::135]H)  
*5(-N(-CH_3)----))=--=)}
```



Komplexeres Beispiel Teil 2

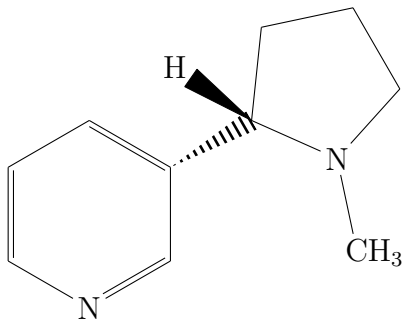


Abbildung 1: Nikotin

Komplexeres Beispiel Teil 2

```
\begin{figure}[!htpb]
\chemfig{[::60]N*6(=-(<:(<[::115]H)
*5(-N(-CH_3)----))=--)}
\caption{Nikotin}
\end{figure}
```


Abbildungsverzeichnis

1	Nikotin	28
---	-------------------	----