

L^AT_EX Kurs Chemie

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

Übersicht

Einheiten

siunitx

Chemie

chemfig
mhchem
substances

Journal

chemsym

SI-Einheiten

siunitx
2017

Inhalt

Zahlen und Einheiten in Form von Makros.

Befehle/Optionen

Wenige Befehle aber sehr viele Optionen.

lokal / global

Die Optionen können lokal und global verwendet werden.

Deutsch

Sprache

```
\documentclass[ngerman]{article}
\usepackage{babel}
...
\usepackage{siunitx}
```

Kommazahlen

```
...
\usepackage{siunitx}
\sisetup{locale = DE, ...}
...
```

Befehle

```
\num[Optionen]{Zahl}
\numlist[Optionen]{Zahl;Zahl;Zahl}
\numrange[Optionen]{Zahl Anfang}{Zahl Ende}

\si[Optionen]{Einheit}
\SI[Optionen]{Zahl}[per-Einheit]{Einheit}
\SIlist[Optionen]{Zahlen}{Einheit}
\SIrange[Optionen]{Zahl Anfang}{Zahl Ende}{Einheit}

\ang[Optionen]{Winkel}
\ang[Optionen]{Grad;Minuten;Sekunden}

\tablenum[Optionen]{Zahl}
```

Befehle I

Zahlen

```
\num{123,45}
\numlist{12; 34; 5,6; 7.8}
\numrange{1}{10}
```

Einheiten

```
\si{\newton}
\SI{1}{\newton}
\SIlist{1;3;5;7}{\newton}
\SIrange{1}{7}{\newton}
```

Winkel

```
\ang{47.99} oder \ang{47;59;43}
```

Befehle Ausgabe I

Zahlen

```
123,45
12, 34, 5,6 and 7,8
1 to 10
```

Einheiten

```
N
1 N
1 N, 3 N, 5 N and 7 N
1 N to 7 N
```

Winkel

```
47,99° oder 47°59'43''
```

Befehle II

Optionen

```
\sisetup{locale = DE, Option 2, ...}
```

Tabellen

```
S-Spalten Zahlen          \begin{tabular}{Ss}
s-Spalten Einheiten      {Zahlen} & Einheiten\\
\tablenum{Zahl}          1.234 & \km \\
                           23e5 & \meter\squared \\
                           e1 & \m \\
                           -1234 & \V \\
                           \end{tabular}
```

Befehle Ausgabe II

Optionen

```
\num{123,45} \num{123.45}  
123,45 123,45
```

Tabellen

Zahlen	Einheiten
1,234	km
$23 \cdot 10^5$	m ²
10 ¹	m
-1234	V

Einheiten

Einheiten

SI Einheiten, abgeleitete Einheiten und teilweise Nicht SI Einheiten bereits vorhanden. Ebenso wie die SI-Präfixe.

	SI Basisgrößen		
Bezeichnung	Einheit	Makro	Ausgabe
Länge	Meter	\metre	m
Masse	Kilogramm	\kilogram	kg
Zeit	Sekunde	\second	s
Stromstärke	Ampere	\ampere	A
Temperatur	Kelvin	\kelvin	K
Stoffmenge	Mol	\mole	mol
Lichtstärke	Candela	\candela	cd

Neue Einheiten

Befehl

```
\DeclareSIUnit\makro{Einheit}  
\DeclareSIUnit\franklin{Fr}
```

Präambel

Definition in der Präambel.

Konfig Datei

In einer separaten Konfigdatei.

input Variante

Alternativ in einer separaten tex Datei.

Präambel

In der Präambel

```
...  
\usepackage{siunitx}  
\sisetup{locale = DE,...}  
\DeclareSIUnit\parsec{pc}  
...  
\DeclareSIUnit\lightyear{ly}  
...  
\begin{document}
```

Nach ...

```
\usepackage{siunitx} und vor \begin{document}
```

Konfigdatei

Name

Datei mit dem Namen `siunitx.cfg`

Aufbau & Inhalt

```
\ProvidesFile{siunitx.cfg}
\DeclareSIUnit\parsec{pc}
...
\DeclareSIUnit\lightyear{ly}
```

Einbinden

Das Einbinden erfolgt automatisch. Wichtig – im gleichen Ordner wie die `tex` Datei.

Input Variante

Name

Egal – abgesehen von bereits benutzten.

Aufbau & Inhalt

```
\DeclareSIUnit\parsec{pc}
...
\DeclareSIUnit\lightyear{ly}
```

Einbinden

Nach `\usepackage{siunitx}` und **vor** `\begin{document}`

```
...
\usepackage{siunitx}
...
\input{MeineEinheiten}
...
\begin{document}
```

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}`

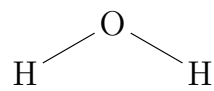
Schrittweite beträgt per default + 45°

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

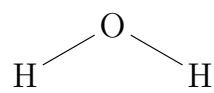
Mit `\setangleincrement{Gradzahl}` kann die Schrittweite verändert werden.

absolute und relative Winkel

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

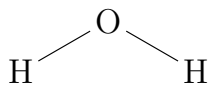


`\chemfig{H-[::30]O-[::-60]H}`



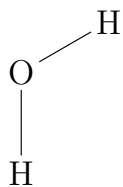
Drehung

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



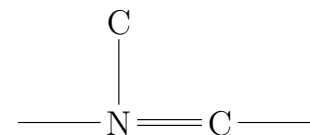
absolut vs. relativ

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

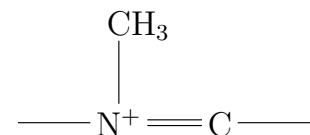


"Abzweigungen"

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

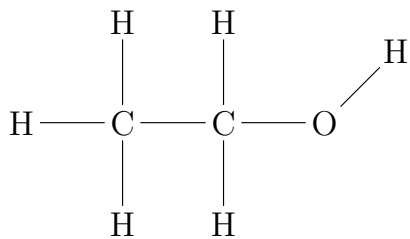


`\chemfig{-N^{+}(-[2]CH_3)=C-}`



Beispiel Ethanol

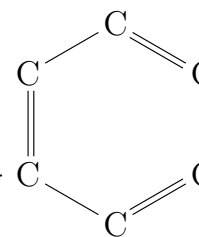
`\chemfig{H-C(-[2]H)(-[6]H)-C(-[2]H)(-[6]H)-O-[1]H}`



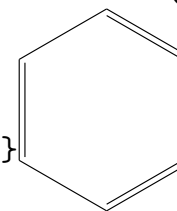
Ringe

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

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



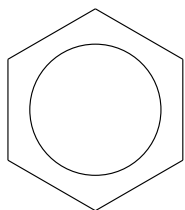
`\chemfig{*6(-----)}`



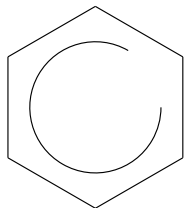
Unvollständig geht, aber mehr wird nicht angezeigt.

Benzol Ring & Co.

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

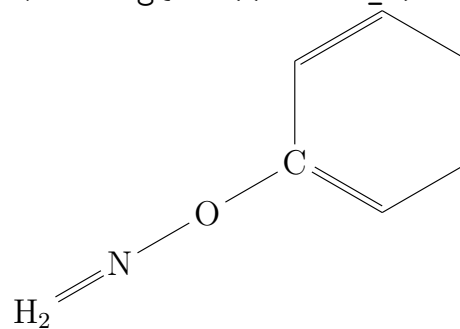


`\chemfig{**[60,360]6(-----)}`



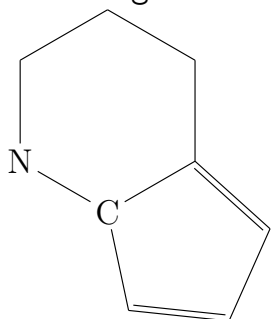
Ringe ...

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



Ringe ...

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



Beschriftungen

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

Innerhalb von

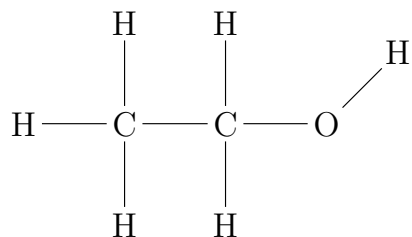
`\schemestart`

`\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
```



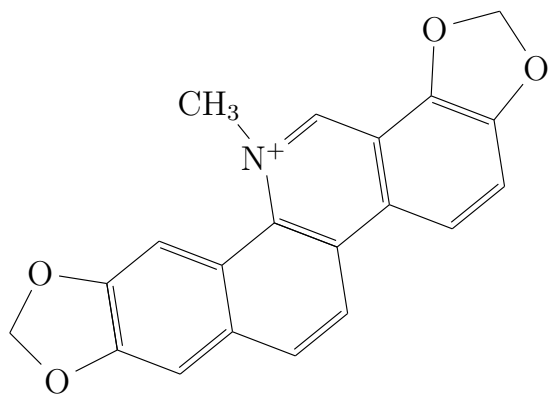
Ethanol

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

Quellcode

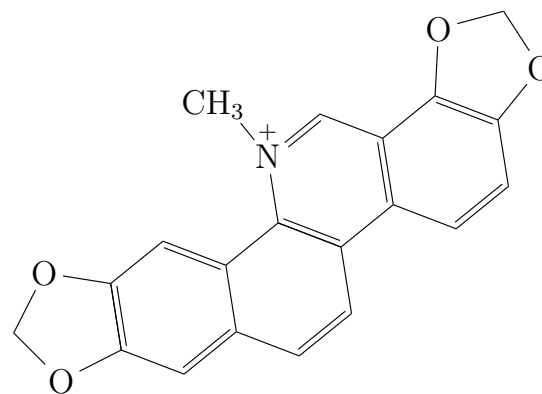
```
\schemestart  
\chemname{  
\chemfig{[:45]O*5(-*6(==*6(==*6(-*6(==*5(-O--O-)  
==)=--N^+(-[:270]CH_3)-=)--)-==)-O--)}}  
{Sanguinarine}  
\schemestop
```

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

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

Valenzstrichformeln

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

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

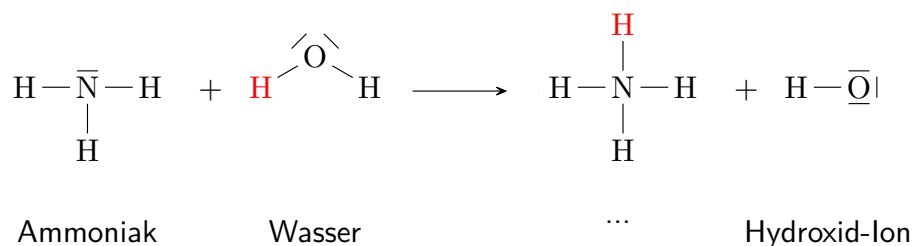
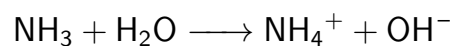
0 1 2 3 4 5 6 7
X| X\ \bar{X} $\sphericalangle X$ |X \X \underline{X} X \sphericalangle

Kombinationen (Beispiele)

`\chemfig{\lewis{13,X}}` $\sphericalangle X\$

`\chemfig{\lewis{026,X}}` $\underline{\underline{X}}$

Komplexeres Beispiel



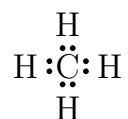
Quellcode

```
\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}-[:90]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

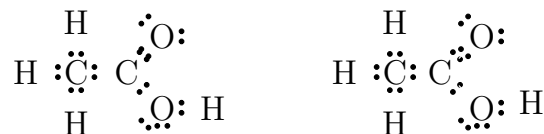
Aufbau: `\chemfig{... \lewis{[Zahlen]:,X}...}`

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



Etwas komplexer ...

`\lewis{}` vs. `\Lewis{}`



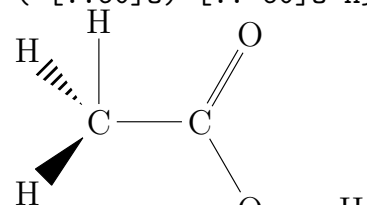
Quellcode

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

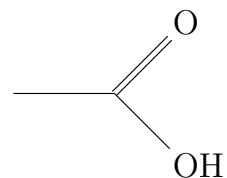
```
\chemfig[white][black]{H-\Lewis{0:2:4:6:,C}
(-[:90]H)(-[:270]H)-\Lewis{1:7:,C}(-[:45]
\Lewis{0:3:5:,O})(-[:45]\Lewis{0:5:6:,O}-H)}
```

Keilstrichformel & Skelettformel

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

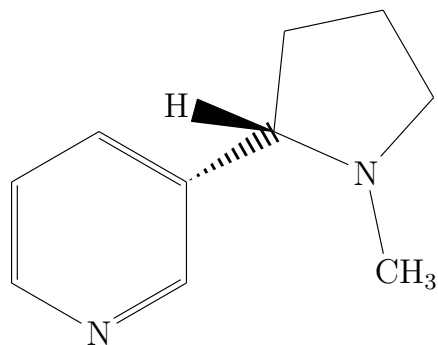


```
\chemfig{-([:45]O)(-[:45]OH)}
```



Komplexeres Beispiel:

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



Komplexeres Beispiel Teil 2

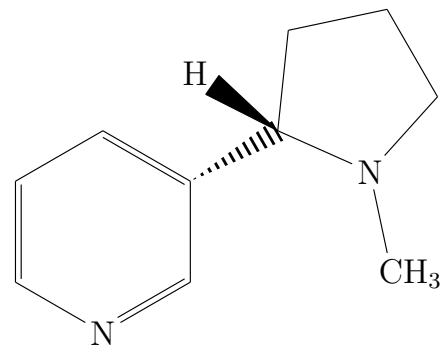


Abbildung 1: Nikotin

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
---	-------------------	----

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, tfoot

Befehle

Elemente, Aggregatzustand, Isotope ...

Elemente & Co.

Elemente & Co.

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

Ag und H₂SO₄

Ladungen

```
\ce{Ag+} und \ce{HSO4-} Ag+ und HSO4-
```

```
\ce{SO4^2-} und \ce{SO4^{2-}} SO42- SO42-
```

Aggregat Zustand

```
\ce{H2SO4_{(aq)}} H2SO4(aq)
```

```
\ce{H2SO4(aq)} H2SO4(aq)
```

Oxidationsstufe

```
\ce{Fe^{II}Fe^{III}2O4} FeIIFeIII2O4
```

Isotope

Isotope

```
\ce{^{32}_{16}S} und \ce{^{34}_{16}S}
```

³²S und ³⁴S

Mit Ladung

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

³²S⁺ und ³⁴S⁺

ohne

```
\ce{^{0}_{-1}n^{-}} und \ce{^{0}_{-1}n^{-}}
```

⁰₋₁n⁻ und ⁰₋₁n⁻

Stöchiometrie

```
\ce{2H2O} 2 H2O
```

```
\ce{2 H2O} 2 H2O
```

```
\ce{0.5H2O} 0.5 H2O
```

```
\ce{1/2H2O}  $\frac{1}{2}$  H2O
```

```
\ce{(1/2)H2O} (1/2) H2O
```

```
\ce{$n$H2O} n H2O
```

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}`
 $A \cdots B = C$ 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 ≡ D

Reaktionen

Reaktionen

`\ce{H2S2O7 + H2O -> 2H2SO4}`
 $H_2S_2O_7 + H_2O \longrightarrow 2 H_2SO_4$

`\ce{2H2SO4 <=> H3O^{+} + HS2O7^{-}}`
 $2 H_2SO_4 \rightleftharpoons H_3O^+ + HS_2O_7^-$

`\ce{H+ + OH- <=>> H2O}`
 $H^+ + OH^- \rightleftharpoons H_2O$

Reaktionspfeile

<code>\ce{A -> B}</code>	$A \longrightarrow B$
<code>\ce{A <- B}</code>	$A \longleftarrow B$
<code>\ce{A <-> B}</code>	$A \longleftrightarrow B$
<code>\ce{A <--> B}</code>	$A \rightleftharpoons B$
<code>\ce{A <=> B}</code>	$A \rightleftharpoons B$
<code>\ce{A <=>> B}</code>	$A \rightleftharpoons B$
<code>\ce{A <<=> B}</code>	$A \rightleftharpoons B$
<code>\ce{A ->[H2O][SO4] B}</code>	$A \xrightarrow[SO_4]{H_2O} B$

Fällung und Ausgasen

Fällung und Gasentstehung

`\ce{MgI2 + PbCl2 -> MgCl2 + PbI2 v}`
 $MgI_2 + PbCl_2 \longrightarrow MgCl_2 + PbI_2 \downarrow$

`\ce{2 CuO + C -> 2 Cu + CO2 ^}`
 $2 CuO + C \longrightarrow 2 Cu + CO_2 \uparrow$

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

substances

Paket

`\usepackage{substances}`

Inhalt

Ermöglicht das

- ▶ erstellen
- ▶ einbinden und
- ▶ auslesen

einer Datenbank von chemischen Substanzen

weitere Pakete

Bindet weitere Pakete ein u.a. chemfig und ghsystem

Datenbank

Einbinden

`\LoadSubstances{Name_der_Datenbank}`

Default Datenbank

`\LoadSubstances{substances-examples}`

Eintrag

```
\DeclareSubstance{KCl}{
  name      = Potassium|chloride ,
  sort      = Potassiumchloride ,
  formula    = KCl ,
  CAS       = 7447-40-7,
  mass      = 74.55 ,
  mp        = 773 ,
  bp        = 1413 ,
  phase     = solid ,
  density   = 1.98
}
```


Komplettausgabe Quellcode

```
\begin{table}[htp] \centering \ghssetup{hide}
\sisetup{scientific-notation=fixed,fixed-exponent=0,
per-mode=symbol}
\begin{tabular}{l>{\raggedright\arraybackslash}p{.6\linewidth}}
\toprule
name & \chem{KCl} \\
formula & \chem{KCl}[formula] \\
\midrule
\textbf{CAS} & \chem{KCl}[CAS] \\
\midrule
boiling point & \chem{KCl}[bp] \\
melting point & \chem{KCl}[mp] \\
density & \chem{KCl}[density] \\
molar mass & \chem{KCl}[mass] \\
\bottomrule
\end{tabular}
\caption{Alle Eigenschaften von \chem{KCl} aus der Datenbank.}
\end{table}
```

name	Potassiumchloride
formula	KCl
CAS	7447-40-7
boiling point	1413 °C
melting point	773 °C
density	1.98 g/cm ³
molar mass	74.55 g/mol

Tabelle: Alle Eigenschaften von Potassiumchloride aus der Datenbank.

Tabellenbeispiel

name	Methane
formula	CH ₄
	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
...	
	
H statements	H220
P statements	P210, P377, P381, P410 + P403

Hinweise

Datenbank

Am Besten die beiliegen Datenbank verwenden und erweitern...

Fehler beim Einbinden

Runaway argument?

```
{\AssignTemplateKeys \bool_if:nTF {\l__substances_index_alternative_nam
ETC.
```

```
! Forbidden control sequence found while scanning use of \DeclareTempla
<inserted text>
```

```
\par
```

```
1.400 ... \substances_index:nx { \c_job_name_tl
-chem }
```

Lösung

bitbucket.org/cgnieder/substances/pull-requests/2/changed-deprecated-c_job_name_tl-to/diff

chemsym

Einbinden

```
\usepackage[Optionen]{chemstyle}
```

Optionen setzen

Entweder beim Einbinden oder per `\cstsetup{...}` Befehl.

andere Pakete

graphicx, varioref, cleveref, notes2bib ...

cleveref verwenden

```
\usepackage[varioref=false]{chemstyle}
```

Optionen anderer Pakete

graphicx und varioref vor chemstyle laden

Journale

Journal Style setzen

```
\usepackage[journal=Style]{chemstyle}
```

Style	Journal
angew	Angew. Chem., Chem. Eur. J.
jomc	J. Organomet. Chem., Coord. Chem. Rev.
ic	Inorg. Chem.
jacs	J. Am. Chem. Soc.
jcp	J. Phys. Chem. A, J. Phys. Chem. B
orglett	Org. Lett.
rsc	Chem. Commun., Org. Biomol. Chem. Dalton Trans.
tetlett	Tetrahedron, Tetrahedron Lett.

Slunitx Erweiterung

Extra Einheiten

<code>\SI{1}{\cmc}</code>	1 cm ³
<code>\SI{1}{\Hz}</code>	1 Hz
<code>\SI{1}{\molar}</code>	1 mol dm ⁻³
<code>\SI{1}{\Molar}</code>	1 M
<code>\SI{1}{\mmHg}</code>	1 mmHg

Phrasen

Eingabe	Ausgabe
<code>\eg</code>	<i>e.g.</i>
<code>\etal</code>	<i>et al.</i>
<code>\etc</code>	<i>etc.</i>
<code>\ie</code>	<i>i.e.</i>
<code>\invacuo</code>	<i>in vacuo</i>
<code>\latin{kursiver Text}</code>	<i>kursiver Text</i>

weitere Möglichkeiten

nicht kursiv mit `\cstsetup{abbremph=false}` und
ein zusätzliches Komma mit `\cstsetup{abbrcomma=true}`

Hinweis

Im Fall, dass der Text nach der Abkürzung (*etc.* bzw. *et al.*)
weitergeht muss ein Leerzeichen entweder mit »\ «oder mit
»_«angefügt werden.

Scheme

weiteres Gleitobjekt

```
\begin{scheme}[Ausrichtung]
\includegraphics{chem_bild}
\caption{Unterschrift}
\end{scheme}
```

weitere Befehle

```
\renewcommand*{\schemename}{Neuer Name}
\listofschemes Verzeichnis erstellen
\listschemename Wie das Verzeichnis heißt
```

Achtung die Beschriftung der floats ist immer oben!

Wenn Änderung gewünscht, dann
`\floatsetup[table]{style=plain}`