

L^AT_EX Kurs Teil 11

Chemie

Sascha Frank

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

Übersicht

Einheiten

siunitx

Chemie

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}`

`\numrage[Optionen]{Zahl Anfang}{Zahl Ende}`

`\si[Optionen]{Einheit}`

`\SI[Optionen]{Zahl}[per-Einheit]{Einheit}`

`\SIlolist[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

s-Spalten Einheiten

```
\tablenum{Zahl}
```

```
\begin{tabular}{Ss}  
{Zahlen} & Einheiten\\  
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}
```

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 ${}^{34}_{16}\text{S}$

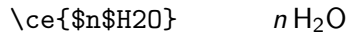
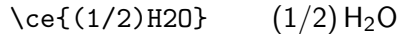
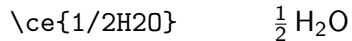
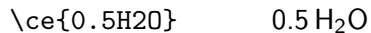
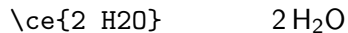
Mit Ladung

$\text{\ce{^{32}_{16}S+}}$ 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{...}B\bond{....}C}` $A \cdots B \cdots C$

Mit Pfeilen

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

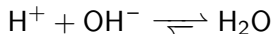
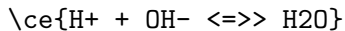
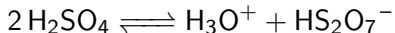
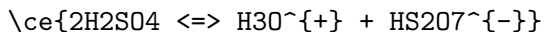
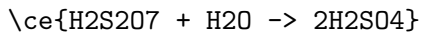
Aussehen

`\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

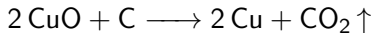
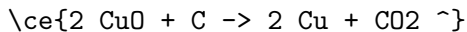
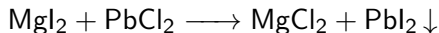
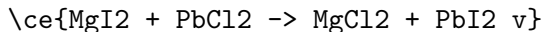
A \rightleftharpoons B

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

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

Table: 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_name  
ETC.
```

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

```
1.400 ... \par  
          \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

Journal

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.

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{abbrempf=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}
```