

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

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.

```
\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

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

$\text{\ce{2H2O}}$ $2 \text{H}_2\text{O}$

$\text{\ce{2 H2O}}$ $2 \text{H}_2\text{O}$

$\text{\ce{0.5H2O}}$ $0.5 \text{H}_2\text{O}$

$\text{\ce{1/2H2O}}$ $\frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$

$\text{\ce{(1/2)H2O}}$ $(1/2) \text{H}_2\text{O}$

$\text{\ce{\$n\$H2O}}$ $n \text{H}_2\text{O}$

Bindungen

Bindungen

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

Mit Punkten

$\text{\ce{A\bond{~}B\bond{~}C}}$ und
 $\text{\ce{A\bond{~-}B\bond{~=}C\bond{~-}D}}$
 $A \cdot B = C$ und $A \equiv B \equiv C \equiv D$
 $\text{\ce{A\bond{\dots}B\bond{\dots}C}}$ $A \cdots B \cdots C$

Mit Pfeilen

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

Aussehen

$\text{\sffamily\bfseries\ce{A - B = C#D}}$
A - B = C ≡ D

Reaktionen

Reaktionen

$\text{\ce{H2S2O7 + H2O -> 2H2SO4}}$
 $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2 \text{H}_2\text{SO}_4$

$\text{\ce{2H2SO4 <=> H3O^{+} + HS2O7^{-}}}$
 $2 \text{H}_2\text{SO}_4 \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HS}_2\text{O}_7^-$

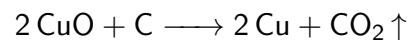
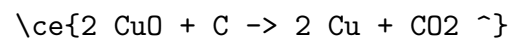
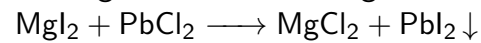
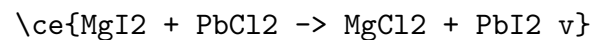
$\text{\ce{H+ + OH- <=>> H2O}}$
 $\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$

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>	$A \xrightarrow{\quad} B$
<code>\ce{A <<=> B}</code>	$A \xleftarrow{\quad} B$
<code>\ce{A ->[H2O][SO4] B}</code>	$A \xrightarrow[\text{SO}_4]{\text{H}_2\text{O}} B$

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  
}
```

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.

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}
```

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>
```

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

Lösung

bitbucket.org/cgnieder/substances/pull-requests/2/changed-depricated-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}`