

L^AT_EX Kurs

Einheiten & Chemie

Sascha Frank

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

Übersicht

Einheiten

siunitx

Chemie

chemfig

mhchem

Substances

Journal

chemsym

Literaturverzeichnis

SI-Einheiten

Paket

`\usepackage{siunitx}`

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 und 7,8

1 bis 10

Einheiten

N

1 N

1 N, 3 N, 5 N und 7 N

1 N bis 7 N

Winkel

47,99° oder 47°59'43''

Befehle II

Optionen

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

Tabellen

S-Spalten Zahlen

```
\tablenum{Zahl}
```

```
\begin{tabular}{S1}  
{Zahlen} & Einheiten\\  
1.234 & \unit{\km} \\  
23e5 & \unit{\meter\squared} \\  
e1 & \unit{\m} \\  
-1234 & \unit{\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.

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}
```

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 Pakete

- ▶ Chemfig
- ▶ Mhchem
- ▶ Substances
- ▶ Chemsym

Chemfig

Paket

chemfig

Einbinden

```
\usepackage{chemfig}
```

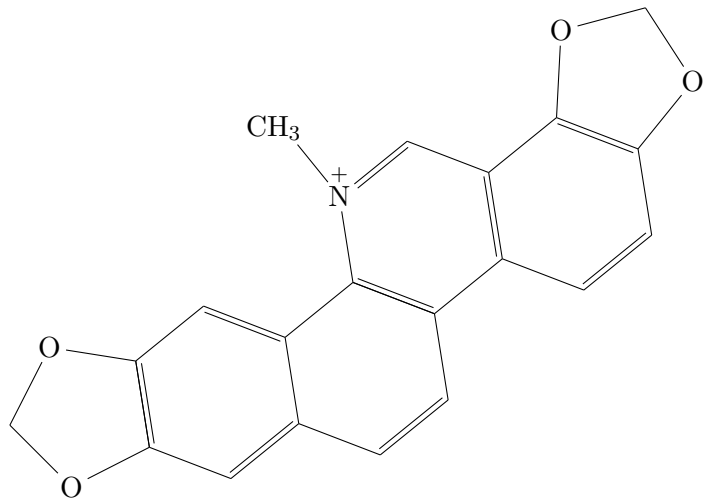
TikZ

Aktuelle TikZ Version

Befehl

```
\chemfig[Options]{Code}
```

Beispiel



Sanguinarine

Der chemfig Befehl

Befehl

`\chemfig[Liste von Key=Value Paaren]{Molekül-Code}`

Anpassungen

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







Was kann geändert werden?

`\chemfig[Linie und Knoten]{<Code>}`

Wie?

Breite, Farbe, Typ, Skalierung, Drehung, etc..

Bindungstypen

| | |
|--------------------------------|---|
| <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 |

Einstellungen für Abstände

Einstellungen

`\setchemfig{<Key=Value>}`

double bond sep

vertikaler Abstand bei 2- und 3-fach Bindung (Default 2pt)

atom sep

horizontaler Abstand zwischen zwei Elementen (Default 3em)

bond offset

horizontaler Abstand zwischen Element und Bindung (Default 2pt)

Horizontaler Abstand verkleinern

`\setchemfig{atom sep = 2em}`

Default Werte

werden mit `\resetchemfig` wiederhergestellt.

Anpassungen der Bindungen

Befehl

```
\setchemfig{bond style = <code>}
```

Code Beispiele

line width=5pt und red

```
\setchemfig{bond style = {line width = 5pt, color=red}}
```

A — B vs. A  B

Default Werte

werden mit `\resetchemfig` wiederhergestellt.

Winkelanpassungen

Default Wert

45° Schritte

Verwendung

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

Default Schritte

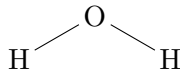
| | | | | | | | | | |
|----|-----|-----|------|------|------|------|------|------|-----|
| 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | ... |
| 0° | 45° | 90° | 135° | 180° | 225° | 270° | 315° | 360° | ... |

Anpassung

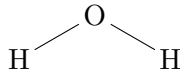
`\setchemfig{angle increment = Value}`

Absolute und relative Winkel

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

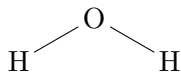


`\chemfig{H-[::30]O-[::-60]H}`



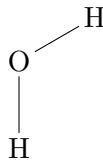
Drehung

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



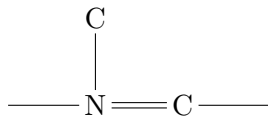
absolut vs. relativ

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

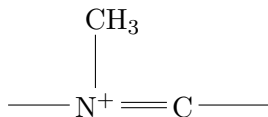


Abzweigungen

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



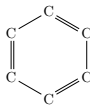
`\chemfig{-N^{\+}(-[2]CH_3)=C-}`



Ringe

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

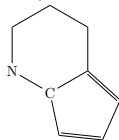
\chemfig{C*6(-C=C-C=C-C=)}



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



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



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



Schemata und Beschriftungen

Schemata

Innerhalb der zwei Befehle `\schemestart` und `\schemestop`

Beschriftung

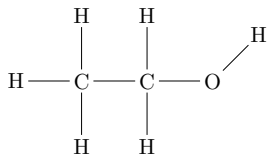
`\chemname[<Dim>]{\chemfig{<Code>}}{<Beschriftung>}`

Beispiel

```
\schemestart
```

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

```
\schemestop
```



Ethanol

Valenzstrichformeln & Elektronenformel

Aufbau

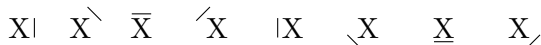
`\chemfig{\charge{Zahl=\|}{X}...}`

Beispiel

`\chemfig{\charge{45=\|, 315=\|}{X}} X\`

Überblick

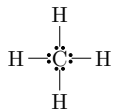
0 45 90 135 180 225 270 315



Elektronenformel

`\chemfig{\charge{Zahl=\.}{X}...}`

`\chemfig{\charge{Zahl=\:}{X}...}`



Mhchem

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

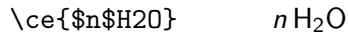
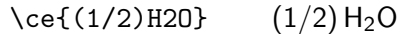
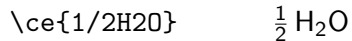
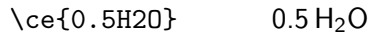
Mit Ladung

$\text{\ce{^{32}_{16}S+}}$ 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}` $A \rightarrow B \leftarrow C$

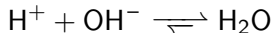
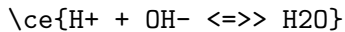
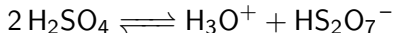
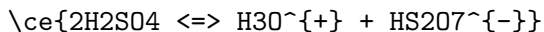
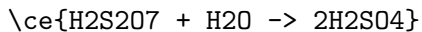
Aussehen

`\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

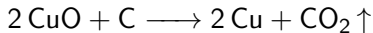
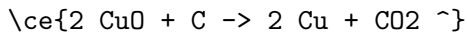
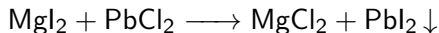
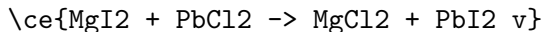
A \rightleftharpoons B

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

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_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-depricated-c_job_name_tl-to/diff](https://bitbucket.org/cgnieder/substances/pull-requests/2/changed-depricated-c_job_name_tl-to/diff)

Hinweise forts.

Fehler beim Einbinden

```
1.669 \chemmacros_load_module:n
                                         {nomenclature}
```

Lösung

```
\documentclass{article}
%...
\ExplSyntaxOn
\cs_new:Npn \chemmacros_load_module:n #1 {}
\ExplSyntaxOff
%...
\usepackage{substances}
%...
\begin{document}
%...
```

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}
```

Literaturverzeichnis

Ungefähr ein Viertel des menschlichen Genoms codiert für Enzyme.^[1] Und was ich noch sagen wollte^[1,2,3]

Ausgabe

- [1] J. M. Berg, J. L. Tymoczko, G. J. Gatto, L. Stryer, *Stryer Biochemie*, Springer Spektrum, 8th ed.
- [2] S. Oh, S. Shin, R. Janknecht *1871*, 406–418.
- [3] A. G. Cridge, C. Crowe-McAuliffe, S. F. Mathew, W. P. Tate *46*, 1927–1944.

Quellcode

Im Header

```
\documentclass{article}
%...
\usepackage[super,comma,numbers,square,sort]{natbib}
\usepackage{mciteplus}
%...
\begin{document}
```

Im Body

```
\begin{document}
%...
Enzyme.\cite{berg} Und was ich noch sagen wollte \cite{berg,
oh_small_2019,cridge_eukaryotic_2018}
%...
\bibliographystyle{angew}
\bibliography{Literatur2}
\end{document}
```

Literaturverzeichnis Version 2

Ungefähr ein Viertel des menschlichen Genoms codiert für Enzyme.^[1] Und was ich noch sagen wollte^[1-3]

Ausgabe

- [1] J. M. Berg, J. L. Tymoczko, G. J. Gatto, L. Stryer, *Stryer Biochemie*, Springer Spektrum, 8th ed.
- [2] S. Oh, S. Shin, R. Janknecht *1871*, 406–418.
- [3] A. G. Cridge, C. Crowe-McAuliffe, S. F. Mathew, W. P. Tate *46*, 1927–1944.

Quellcode

Im Header

```
\documentclass{article}
%...
\usepackage[super,comma,numbers,square,sort&compress]{natbib}
\usepackage{mciteplus}
%...
\begin{document}
```

Im Body

```
\begin{document}
%...
Enzyme.\cite{berg} Und was ich noch sagen wollte \cite{berg,
oh_small_2019,cridge_eukaryotic_2018}
%...
\bibliographystyle{angew}
\bibliography{Literatur2}
\end{document}
```