

# L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 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}
\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 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 <sup>2</sup>
$10^1$	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}
```

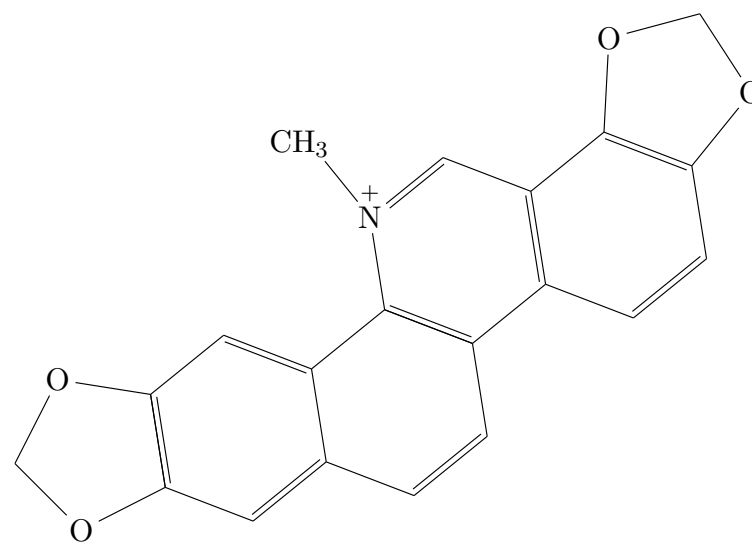
### TikZ

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&gt;B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A&lt;B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A&gt;:B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A&lt;:B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A&gt; B}</code>	A  B
<code>\chemfig{A&lt; 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

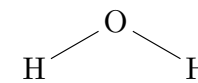
0	1	2	3	4	5	6	7	8	...
0°	45°	90°	135°	180°	225°	270°	315°	360°	...

### Anpassung

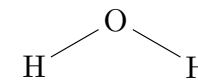
```
\setchemfig{angle increment = Value}
```

## Absolute und relative Winkel

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

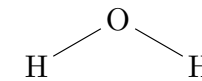


```
\chemfig{H-[::30]O-[::-60]H}
```



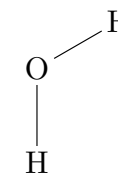
### Drehung

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



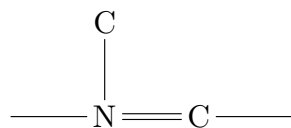
absolut vs. relativ

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

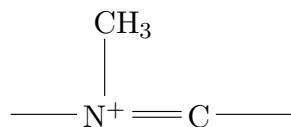


## Abzweigungen

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



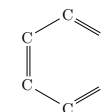
```
\chemfig{-N^{+}(-[2]CH_3)=C-}
```



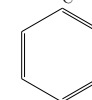
## Ringe

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

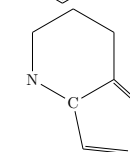
```
\chemfig{C*6(-C=C-C=C-)}
```



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



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



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



## Schemata und Beschriftungen

### Schemata

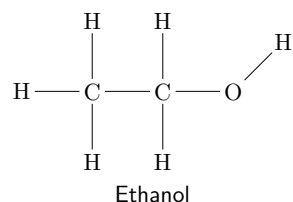
Innerhalb der zwei Befehle `\schemestart` und `\schemestop`

### 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
```



## Valenzstrichformeln & Elektronenformel

### Aufbau

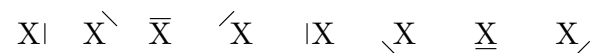
```
\chemfig{\charge{Zahl=\}|}{X}...
```

### Beispiel

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

### Überblick

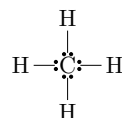
0 45 90 135 180 225 270 315



### 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, tfoot

### Befehle

Elemente, Aggregatzustand, Isotope ...

## Elemente & Co.

### Elemente & Co.

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

Ag und H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

### 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

$\text{\ce{H2S2O7 + H2O -> 2H2SO4}}$

$\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2 \text{H}_2\text{SO}_4$

$\text{\ce{2H2SO4 <=> H3O^{+} + HS2O7^{-}}}$

$2 \text{H}_2\text{SO}_4 \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HS}_2\text{O}_7^-$

$\text{\ce{H+ + OH- <=> H2O}}$

$\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$

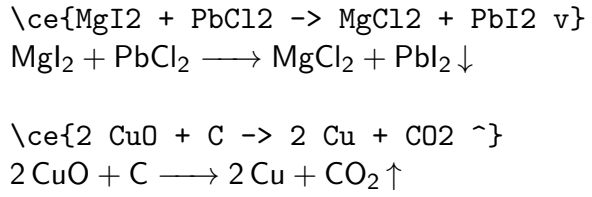


# Reaktionspfeile

<code>\ce{A -&gt; B}</code>	$A \longrightarrow B$
<code>\ce{A &lt;- B}</code>	$A \longleftarrow B$
<code>\ce{A &lt;-&gt; B}</code>	$A \longleftrightarrow B$
<code>\ce{A &lt;--&gt; B}</code>	$A \rightleftharpoons B$
<code>\ce{A &lt;=&gt; B}</code>	$A \rightleftharpoons B$
<code>\ce{A &lt;=&gt;&gt; B}</code>	$A \xrightarrow{\quad} B$
<code>\ce{A &lt;&lt;=&gt; B}</code>	$A \xleftarrow{\quad} B$
<code>\ce{A -&gt;[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 H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>  
 $\$ \ce{Ag} \$$  und  $\$ \ce{H2SO4} \$$  Ag und H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

## Schrift ändern

`\mhchemoptions{textfontcommand=\sffamily}`  
`\mhchemoptions{mathfontcommand=\mathsf}`

## Elemente & Co.

`\ce{Ag}` und `\ce{H2SO4}` Ag und H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>  
 $\$ \ce{Ag} \$$  und  $\$ \ce{H2SO4} \$$  Ag und H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

# 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  
}
```

Navigation icons

## 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}
```

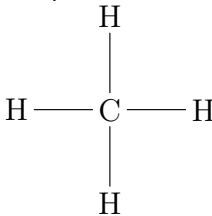


Navigation icons

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

**Tabelle:** Alle Eigenschaften von Potassiumchloride aus der Datenbank.

Navigation icons

## Tabellenbeispiel

name	Methane
formula	CH <sub>4</sub> 
...	
	 
H statements	H220
P statements	P210, P377, P381, P410 + P403

Navigation icons

## 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  
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](https://bitbucket.org/cgnieder/substances/pull-requests/2/changed-deprecated-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

## 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 <sup>3</sup>
<code>\SI{1}{\Hz}</code>	1 Hz
<code>\SI{1}{\molar}</code>	1 mol dm <sup>-3</sup>
<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}`

## Literaturverzeichnis

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

## 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.<sup>[1]</sup> Und was ich noch sagen wollte<sup>[1–3]</sup>

## 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}
```