

Next Steps in L^AT_EX: Intermediate Techniques

Chemfig - Chemische Strukturformeln & Co.

Sascha Frank

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

2025

Chemfig

Paket

chemfig

Einbinden

```
\usepackage{chemfig}
```

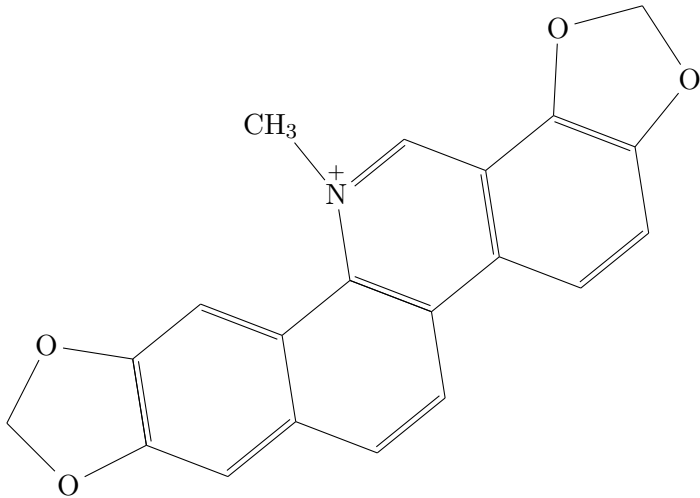
TikZ

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

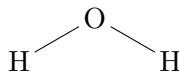
0	1	2	3	4	5	6	7	8	...
0°	45°	90°	135°	180°	225°	270°	315°	360°	...

Anpassung

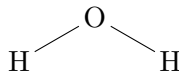
`\setchemfig{angle increment = Value}`

Absolute und relative Winkel

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

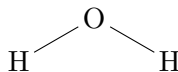


`\chemfig{H-[:30]O-[:-60]H}`



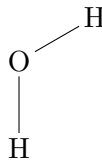
Drehung

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



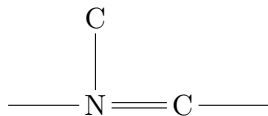
absolut vs. relativ

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

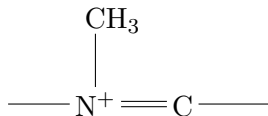


Abzweigungen

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



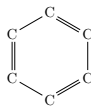
`\chemfig{-N^{+}(-[2]CH_3)=C-}`



Ringe

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

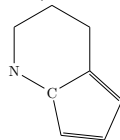
\chemfig{C*6(-C=C-C=C-C=)}



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



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



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



Schemata und Beschriftungen

Schemata

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

Beschriftung

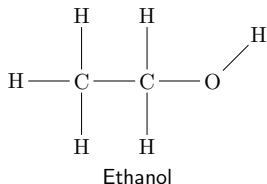
`\chemname[<Dim>]{\chemfig{<Code>}}{<Beschriftung>}`

Beispiel

```
\schemestart
```

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

```
\schemestop
```



Valenzstrichformeln & Elektronenformel

Aufbau

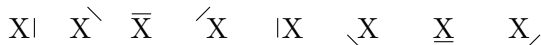
`\chemfig{\charge{Zahl=\|}{X}...}`

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}...}`

