

L^AT_EX Kurs Chemie

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

Übersicht

Chemie Pakete

Bohrmodell

Elements

mhchem

chemfig

Bohrmodell

Paket bohr

Mit `\usepackage{bohr}` wird das Paket eingebunden.

Inhalt

Automatische Zeichnung von Bohrmodellen.

neuer Befehl

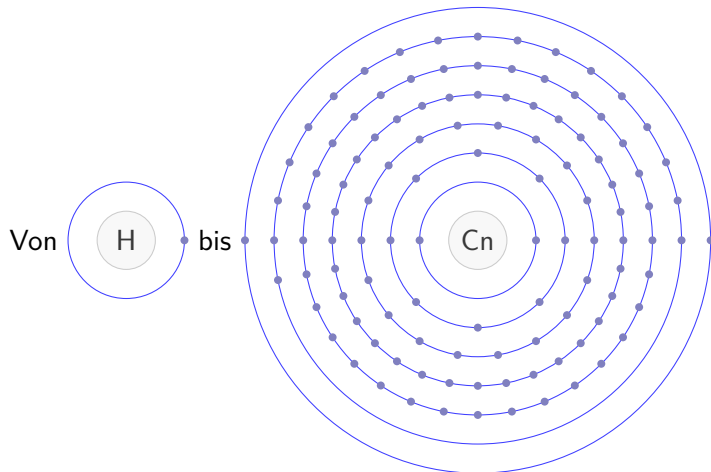
`\bohr[# der Schalen]{# der Elektronen}{chemisches Symbol}`

Optionen

Optionen legen Aussehen und Größe fest.

Beispiele

Von $\text{\bohr{1}\{H}}$ bis $\text{\bohr{112}\{Cn}}$



Optionen – verkürzt

Befehl

`\setbohr{ ...}`

Allgemeine Optionen

Umgang mit fehlenden Werten.

Atomkern Optionen

Aussehen und Gestaltung des Kerns.

Elektronen Optionen

Aussehen und Gestaltung der Elektronen.

Schalen Optionen

Aussehen und Gestaltung der Schalen.

Allgemeine Optionen

`insert-symbol=true`

Fügt fehlendes chemisches Symbol ein.

`insert-number=true`

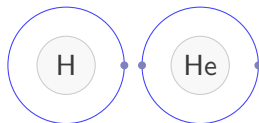
Fügt fehlende Elektronenanzahl ein.

`insert-missing=true`

Der jeweils fehlenden Wert wird eingefügt.

Beispiel

```
\setbohr{insert-missing = true}  
\bohr{1}{}  
\bohr{}{He}
```



Atomkern Optionen (grob)

atom-style

Aussehen und Größe des chemischen Symbols.

name-options-set

Beeinflusst den node Befehl aus tikz.

nucleus-options-set

Beeinflusst den draw Befehl aus tikz.

nucleus-radius

Legt die Größe des Kerns fest

```
\setbohr{  
atom-style={\LARGE\rmfamily},  
name-options-set={text=red},  
nucleus-options-set={green!80,fill=brown!100,opacity=0.5},  
nucleus-radius=1.5em}  
\bohr{2}{He}
```

Atomkern Optionen (grob)

atom-style

Aussehen und Größe des chemischen Symbols.

name-options-set

Beeinflusst den node Befehl aus tikz.

nucleus-options-set

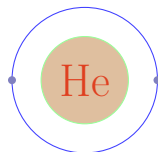
Beeinflusst den draw Befehl aus tikz.

nucleus-radius

Legt die Größe des Kerns fest

```
\setbohr{  
atom-style={\LARGE\rmfamily},  
name-options-set={text=red},  
nucleus-options-set={green!80,fill=brown!100,opacity=0.5},  
nucleus-radius=1.5em}  
\bohr{2}{He}
```

Ausgabe



Elektronen Optionen (grob)

electron-options-set

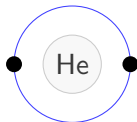
Verändert das Aussehen der Elektronen.

electron-radius

Legt den Radius der Elektronen fest.

Beispiel

```
\setbohr{  
electron-options-set={black!100},  
electron-radius=3pt  
}  
\bohr{2}{He}
```



Schalen Optionen (grob)

shell-options-set

Aussehen der Schalen, der draw Befehl wird verändert.

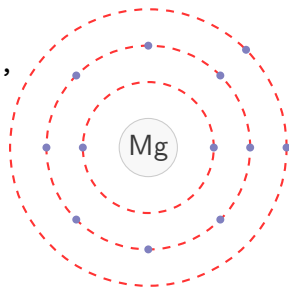
shell-dist

Abstand zwischen den Schalen und dem Kern.

distribution-method

Unterschiedliche Verteilungsvarianten der Elektroden.

```
\setbohr{  
shell-options-set = {dashed,red!80,  
thick},  
shell-dist = 1.25em,  
distribution-method = periodic  
}  
\bohr{12}{Mg}
```



Elemente

elements Paket

Mit `\usepackage{elements}` wird das Paket eingebunden.

Ursprung

Spin-off Paket vom bohr Paket.

Inhalt

Sammlung von Daten der chemischen Elemente (bis 112).

Verwendung

In anderen Paket und bei teilweisen oder vollständig automatisierten Anwendungen.

Mehrsprachig

Unterstützt deutsch, englisch, französisch und spanisch.

Inhalt

Ordnungszahl

`\atomicnumber{Symbol oder Name}`

Name

`\elementname{Ordnungszahl}`

Symbol

`\elementsymbol{Ordnungszahl}`

Hauptisotop

`\mainelementisotope{Ordnungszahl}`

Elektronenkonfiguration

`\elconf{Ordnungszahl}`

Erweiterungen

In Paketen / Dokumentenkopf

Name

```
\DeclareAtomName{Ordnungszahl}{Name}
```

Symbol

```
\DeclareAtomSymbol{Ordnungszahl}{Symbol}
```

Isotope

```
\DeclareAtomIsotopes{Ordnungszahl}{Isotopenliste}
```

Elektronenkonfiguration

```
\DeclareElectronDistribution{OZ}{Elektronenverteilung}
```

Erweiterungen

Im Dokumentenkörper

Name

```
\setatomname{Ordnungszahl}{Name}
```

Symbol

```
\setatomsymbol{Ordnungszahl}{Symbol}
```

Isotope

```
\setatomisotopes{Ordnungszahl}{Isotopenliste}
```

Elektronenkonfiguration

```
\setelectrondistribution{OZ}{Elektronenverteilung}
```

Beispiel o. Gewähr

```
\documentclass{...}  
...  
\usepackage{elements}  
\DeclareAtomName{118}{Oganesson}  
\DeclareAtomSymbol{118}{Og}  
\DeclareAtomIsotopes{118}{!294}  
\DeclareElectronDistribution{118}{2,2+6,2+6+10,2+6+10+14,  
2+6+10+14,2+6+10,2+6}  
...  
\begin{document}  
Oganesson  
\elementname{118}, \elementsymbol{118},  
\mainelementisotope{118} und \elconf{118}  
Oganesson, Og, 294 und  
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 6s^2 6p^6 6d^{10} 7s^2 7p^6$ 
```

Verwendung

Periodensystem der Elemente nach Mendelejew via TikZ

1 IA

2 IIA

3 IIIA

4 IVB

5 VB

6 VIB

7 VIIB

8 VIIIB

9 VIIIB

10 VIIIB

11 IIB

12 IIB

■ Alkalimetalle ■ Halogene
■ Erdalkalimetalle ■ Edelgase
■ Übergangsmetalle ■ Lanthanoide/Actinoide
■ Halbmetalle ■ übrige Metalle
■ Nichtmetalle ■ unbestimmt

18 VIIIA

17 VIIA

16 VIA

15 VA

14 IVA

13 IIIA

1	1.0079																	2	4.0026															
1	H Wasserstoff																	He Helium																
2	3 6.941 Li Lithium	4 9.0122 Be Beryllium																	10 20.180 Ne Neon															
3	11 22.990 Na Natrium	12 24.305 Mg Magnesium																	18 35.453 Ar Argon															
4	19 39.098 K Kalium	20 40.078 Ca Calcium	21 44.956 Sc Scandium	22 47.887 Ti Titan	23 50.942 V Vanadium	24 51.996 Cr Chrom	25 54.938 Mn Mangan	26 55.845 Fe Eisen	27 58.933 Co Cobalt	28 58.693 Ni Nickel	29 63.546 Cu Kupfer	30 65.39 Zn Zink	31 69.723 Ga Gallium	32 72.64 Ge Germanium	33 74.922 As Arsen	34 78.96 Se Selen	35 79.904 Br Brom	36 85.38 Kr Krypton																
5	37 85.468 Rb Rubidium	38 87.62 Sr Strontium	39 88.906 Y Yttrium	40 91.224 Zr Zirkon	41 92.906 Nb Niobium	42 95.94 Mo Molybdän	43 96 Tc Technetium	44 101.07 Ru Ruthenium	45 102.91 Rh Rhodium	46 106.42 Pd Palladium	47 107.87 Ag Silber	48 112.41 Cd Cadmium	49 114.82 In Indium	50 118.71 Sn Zinn	51 121.76 Sb Antimon	52 127.6 Te Tellur	53 126.9 I Iod	54 131.29 Xe Xenon																
6	85 132.91 Cs Cäsium	86 137.33 Ba Barium	87-112 La-Lu Lanthanoide	72 178.49 Hf Hafnium	73 180.95 Ta Tantal	74 183.84 W Wolfram	75 186.21 Re Rhenium	76 186.21 Os Osmium	77 192.22 Ir Iridium	78 200.59 Pt Platin	79 196.97 Au Gold	80 200.59 Hg Quecksilber	81 204.38 Tl Thallium	82 207.2 Pb Blei	83 208.98 Bi Bismut	84 209 Po Polonium	85 210 At Astat	86 210 Rn Radon																
7	87 223 Fr Francium	88 226 Ra Radium	89-112 Ac-Lr Actinoide	104 261 Rf Rutherfordium	105 262 Db Dubnium	106 266 Sg Seaborgium	107 264 Bh Bohrium	108 277 Hs Hassium	109 286 Mt Meitnerium	110 281 Ds Darmstadtium	111 280 Rg Roentgenium	112 285 Cn Copernicium	113 284 Nh Nihonium	114 289 Fl Flerovium	115 288 Mc Moscovium	116 293 Lv Livermorium	117 292 Ts Tennessine	118 294 Og Oganesson																
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; text-align: center; font-size: 0.7em;"> <tr> <td>57 138.91 La Lanthan</td> <td>58 140.12 Ce Cer</td> <td>59 140.91 Pr Praseodym</td> <td>60 144.24 Nd Neodym</td> <td>61 145 Pm Promethium</td> <td>62 150.36 Sm Samarium</td> <td>63 151.96 Eu Europium</td> <td>64 157.25 Gd Gadolinium</td> <td>65 158.93 Tb Terbium</td> <td>66 162.50 Dy Dysprosium</td> <td>67 164.93 Ho Holmium</td> <td>68 167.26 Er Erbium</td> <td>69 168.93 Tm Thulium</td> <td>70 173.04 Yb Ytterbium</td> <td>71 174.97 Lu Lutetium</td> </tr> </table>																				57 138.91 La Lanthan	58 140.12 Ce Cer	59 140.91 Pr Praseodym	60 144.24 Nd Neodym	61 145 Pm Promethium	62 150.36 Sm Samarium	63 151.96 Eu Europium	64 157.25 Gd Gadolinium	65 158.93 Tb Terbium	66 162.50 Dy Dysprosium	67 164.93 Ho Holmium	68 167.26 Er Erbium	69 168.93 Tm Thulium	70 173.04 Yb Ytterbium	71 174.97 Lu Lutetium
57 138.91 La Lanthan	58 140.12 Ce Cer	59 140.91 Pr Praseodym	60 144.24 Nd Neodym	61 145 Pm Promethium	62 150.36 Sm Samarium	63 151.96 Eu Europium	64 157.25 Gd Gadolinium	65 158.93 Tb Terbium	66 162.50 Dy Dysprosium	67 164.93 Ho Holmium	68 167.26 Er Erbium	69 168.93 Tm Thulium	70 173.04 Yb Ytterbium	71 174.97 Lu Lutetium																				
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; text-align: center; font-size: 0.7em;"> <tr> <td>89 227 Ac Actinium</td> <td>90 232.04 Th Thorium</td> <td>91 231.04 Pa Protactinium</td> <td>92 238.03 U Uran</td> <td>93 237 Np Neptunium</td> <td>94 244 Pu Plutonium</td> <td>95 243 Am Americium</td> <td>96 247 Cm Curium</td> <td>97 247 Bk Berkelium</td> <td>98 251 Cf Californium</td> <td>99 252 Es Einsteinium</td> <td>100 257 Fm Fermium</td> <td>101 258 Md Mendelevium</td> <td>102 259 No Nobelium</td> <td>103 262 Lr Lawrencium</td> </tr> </table>																				89 227 Ac Actinium	90 232.04 Th Thorium	91 231.04 Pa Protactinium	92 238.03 U Uran	93 237 Np Neptunium	94 244 Pu Plutonium	95 243 Am Americium	96 247 Cm Curium	97 247 Bk Berkelium	98 251 Cf Californium	99 252 Es Einsteinium	100 257 Fm Fermium	101 258 Md Mendelevium	102 259 No Nobelium	103 262 Lr Lawrencium
89 227 Ac Actinium	90 232.04 Th Thorium	91 231.04 Pa Protactinium	92 238.03 U Uran	93 237 Np Neptunium	94 244 Pu Plutonium	95 243 Am Americium	96 247 Cm Curium	97 247 Bk Berkelium	98 251 Cf Californium	99 252 Es Einsteinium	100 257 Fm Fermium	101 258 Md Mendelevium	102 259 No Nobelium	103 262 Lr Lawrencium																				

Z Masse

Symbol

Name

nur
Königlich

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

$\text{H}_2\text{SO}_4(\text{aq})$

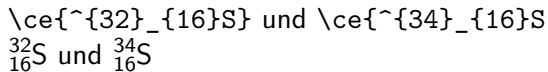
$\text{H}_2\text{SO}_4(\text{aq})$

Oxidationsstufe

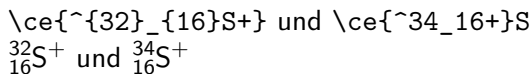
$\text{Fe}^{\text{II}}\text{Fe}^{\text{III}}_2\text{O}_4$

Isotope

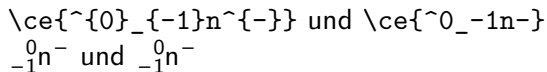
Isotope



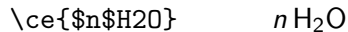
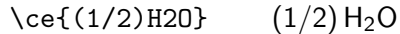
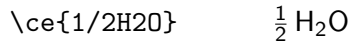
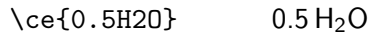
Mit Ladung



ohne



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}` $A \rightarrow B \leftarrow C$

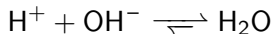
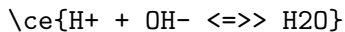
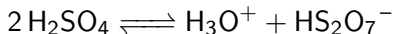
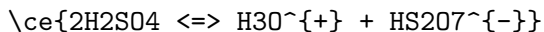
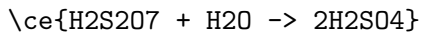
Aussehen

`\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

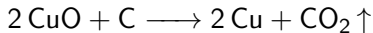
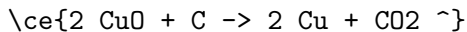
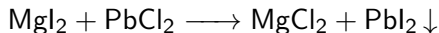
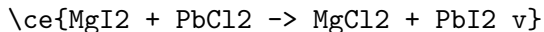
A \rightleftharpoons B

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

chemfig

Ein Paket zum Zeichnen von Strukturformeln.

- Elektronenformel
- Valenzstrichformel
- Keilstrichformel
- Skelettformel







Einbinden

```
\usepackage{chemfig}
```

Achtung

Läuft hier nicht auf den Rechner ...

Bindungen

<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

Befehle rund um Bindungen

`\setdoublesep{Hoehe}` Vertikaler Abstand bei 2- und 3-fach Bindung (default 2pt)

`\setatomsep{Laenge}` Horizontaler Abstand zwischen zwei Elementen (default 3em)

`\setbondoffset{Laenge}` Horizontaler Abstand zwischen Element und Bindung (default 2pt)

`\setbondstyle{TikZ Code}` Stilländerungen

Beispiel `\setbondstyle{line width=1pt,red}` mit `\setbondstyle{}` wird wieder auf die default Einstellungen gewechselt.

Anpassungen

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

Option1 ist für die Linie gedacht (Breite, Farbe, Typ, etc.)

Option2 ist für die Knoten gedacht (Farbe, Skalierung, Drehung)

Über die Schriftgrößen Schalter ist auch eine Größenanpassung möglich, wovon aber abgeraten wird.

Vorgegebene Winkel

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

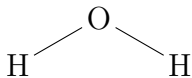
Schrittweite beträgt per default + 45°

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

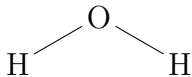
Mit `\setangleincrement{Gradzahl}` kann die Schrittweite verändert werden.

absolute und relative Winkel

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

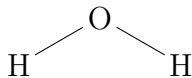


`\chemfig{H-[::30]O-[::-60]H}`



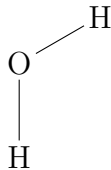
Drehung

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



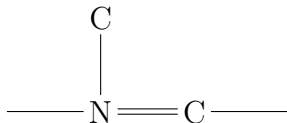
absolut vs. relativ

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

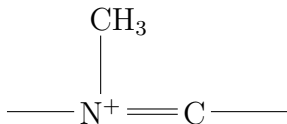


"Abzweigungen"

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

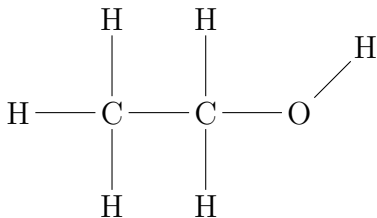


`\chemfig{-N^{\+}(-[2]CH_3)=C-}`



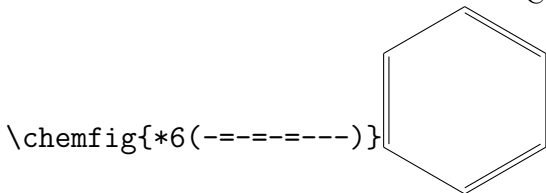
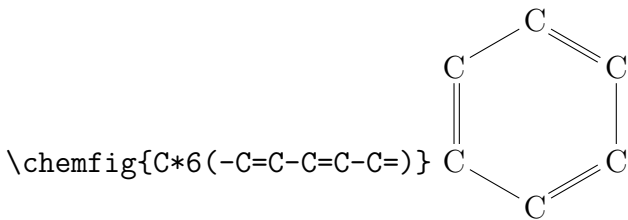
Beispiel Ethanol

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



Ringe

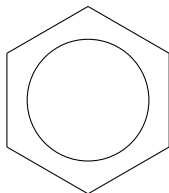
`<Atom>*<Anzahl>(<Code>)`



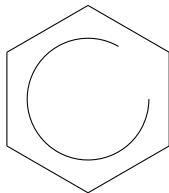
Unvollständig geht, aber mehr wird nicht angezeigt.

Benzol Ring & Co.

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

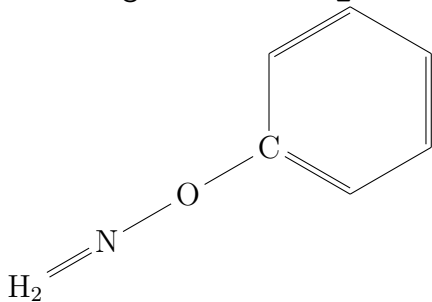


```
\chemfig{**[60,360]6(-----)}
```



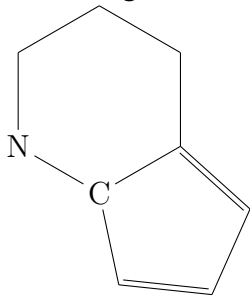
Ringe ...

```
\chemfig{C*6((-O-N=H_2)=-=-=-)}
```



Ringe ...

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



Beschriftungen

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

Innerhalb von

```
\schemestart
```

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

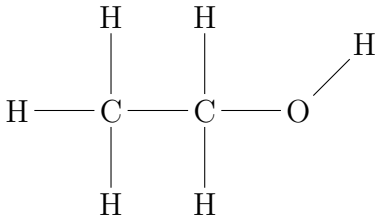
```
\schemestop
```

Beschriftungsbeispiel

```
\schemestart
```

```
\chemname[8ex]{\chemfig{H-C(-[2]H)(-[6]H)-C  
(-[2]H)(-[6]H)-O-[1]H}}{Ethanol}
```

```
\schemestop
```



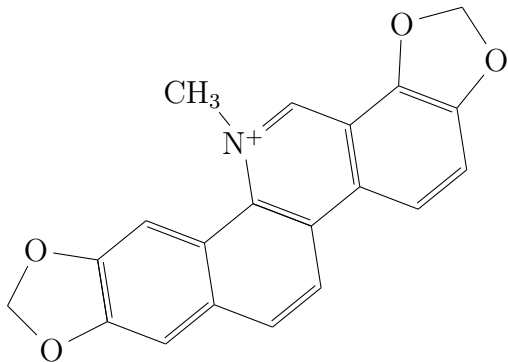
Ethanol

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

Quellcode

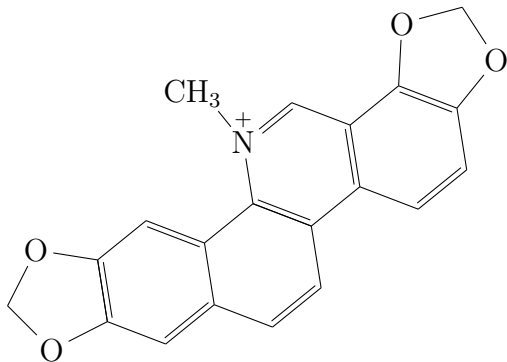
```
\schemestart
\chemname{
\chemfig{[:45]O*5(-*6(-=*6(-=*6(-*6(-=*5(-O--O-)
--)=--N^+(-[:270]CH_3)--)--)=--)=--O--)}}
{Sanguinarine}
\schemestop
```

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

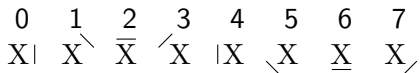
Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

```
\schemestart
\chemname{
\chemfig{[:45]O*5(-*6(-=*6(-=*6(-=*6(-=*5(-O--O-)
--)=--\chemabove{N}{\scriptstyle+}(-[:270]CH_3)-=)
--)-==)-O--)}}{Sanguinarine}
\schemestop
```

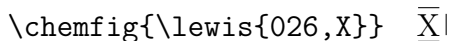
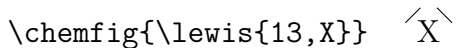
Valenzstrichformeln

Aufbau: `\chemfig{... \lewis{[Zahl(en)],X}...}`

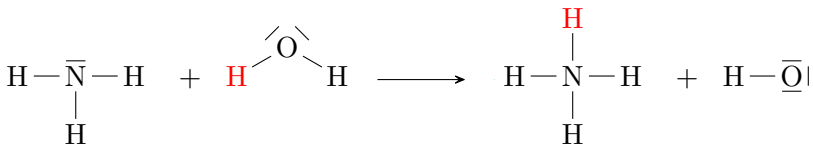
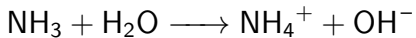
Beispiel: `\chemfig{\lewis{2,N}}` \bar{N}



Kombinationen (Beispiele)



Komplexeres Beispiel



Ammoniak

Wasser

...

Hydroxid-Ion

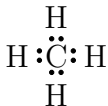
Quellcode

```
\ce{NH3 + H2O -> NH4^{+} + OH^{-}} \par
\schemestart
\chemname{\chemfig{H-\lewis{2,N}(-[::-90]H)-H}}{Ammoniak}
\+
\chemname{\chemfig{{\color{red}H}-[::30]\lewis{13,0}-
[::-60]H}}{Wasser}
\arrow(.mid east--.mid west)
\chemname{
\chemfig{H-N(-[::90]{\color{red}{H}})(-[::-90]H)-H}}{...}
\+
\chemname{\chemfig{H-\lewis{026,0}}}{Hydroxid-Ion}
\schemestop
\chemnameinit{}
```

Elektronenformel

Aufbau: `\chemfig{... \lewis{[Zahlen]:,X}...}`

`\chemfig[white][black]{H-\lewis{0:2:4:6:,C}`
`(-[:90]H)(-[:270]H)-H}`

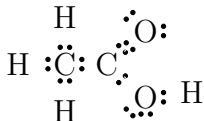
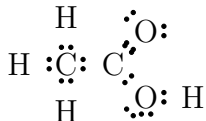


Etwas komplexer ...

`\lewis{}`

vs.

`\Lewis{}`



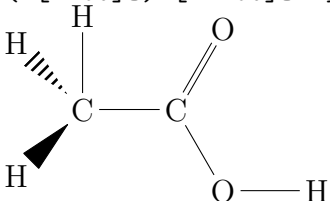
Quellcode

```
\chemfig[white] [black] {H-\lewis{0:2:4:6:,C}  
(-[::90]H)(-[::270]H)-\lewis{1:7:,C}(-[::45]  
\lewis{0:3:5:,0})(-[:::-45]\lewis{0:5:6:,0}-H)}
```

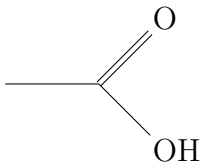
```
\chemfig[white] [black] {H-\Lewis{0:2:4:6:,C}  
(-[::90]H)(-[::270]H)-\Lewis{1:7:,C}(-[::45]  
\Lewis{0:3:5:,0})(-[:::-45]\Lewis{0:5:6:,0}-H)}
```

Keilstrichformel & Skelettformel

`\chemfig{C(<[:225]H)(<[:135]H)(-[:90]H)-C`
`(=[:60]O)-[: -60]O-H}`

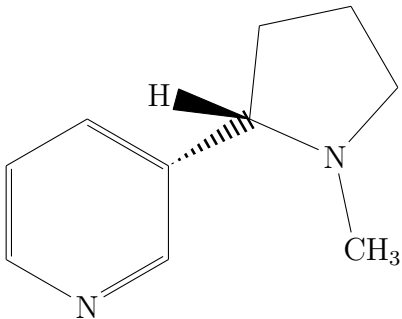


`\chemfig{- (=[:45]O) (-[: -45]OH)}`



Komplexeres Beispiel:

```
\chemfig{[::60]N*6(=-(<:(<[::135]H)  
*5(-N(-CH_3)----))=--=)}
```



Komplexeres Beispiel Teil 2

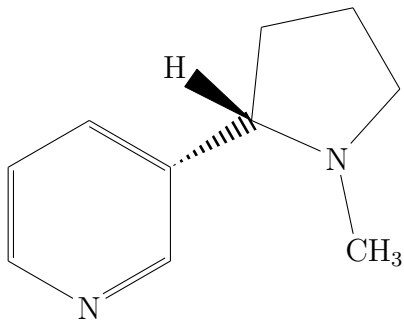


Abbildung 1: Nikotin

Komplexeres Beispiel Teil 2

```
\begin{figure}[!htpb]
\chemfig{[::60]N*6(=-(<:(<[::115]H)
*5(-N(-CH_3)----))=--)}
\caption{Nikotin}
\end{figure}
```

Abbildungsverzeichnis

1	Nikotin	28
---	-------------------	----