

# L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 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

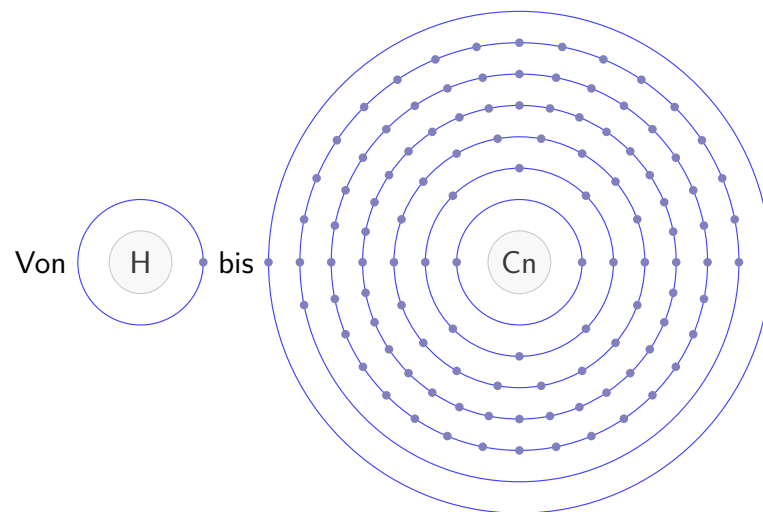
`\bohr[# der Schalen]{# der Elektronen}{chemisches Symbol}`

### Optionen

Optionen legen Aussehen und Größe fest.

## Beispiele

Von `\bohr{1}{H}` bis `\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

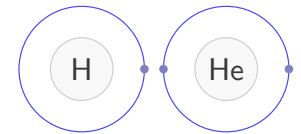
Fügt fehlende Elektronenanzahl ein.

### 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.

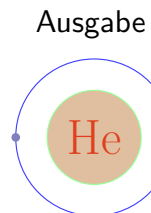
### nucleus-options-set

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}
```



## Elektronen Optionen (grob)

### electron-options-set

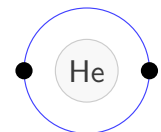
Verändert das Aussehen der Elektronen.

### 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.

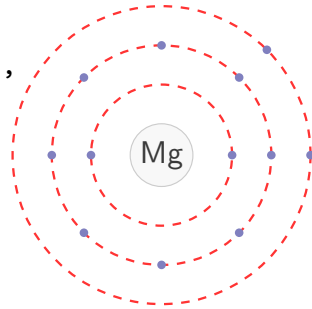
### shell-dist

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

Legend:

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

# 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, 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<sup>+</sup> und HSO<sub>4</sub><sup>-</sup>

`\ce{SO4^2-}` und `\ce{SO4^{2-}}` SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>

## Aggregat Zustand

`\ce{H2SO4_{(aq)}}` H<sub>2</sub>SO<sub>4(aq)</sub>

`\ce{H2SO4(aq)}` H<sub>2</sub>SO<sub>4(aq)</sub>

## Oxidationsstufe

`\ce{Fe^{II}Fe^{III}2O4}` Fe<sup>II</sup>Fe<sup>III</sup><sub>2</sub>O<sub>4</sub>

# Isotope

## Isotope

`\ce{^{32}_{16}S}` und `\ce{^{34}_{16}S}`

<sup>32</sup><sub>16</sub>S und <sup>34</sup><sub>16</sub>S

## Mit Ladung

`\ce{^{32}_{16}S+}` und `\ce{^{34}_{16}S+}`

<sup>32</sup><sub>16</sub>S<sup>+</sup> und <sup>34</sup><sub>16</sub>S<sup>+</sup>

## ohne

`\ce{^{0}_{-1}n^{-}}` und `\ce{^{0}_{-1}n^{-}}`

<sup>0</sup><sub>-1</sub>n<sup>-</sup> und <sup>0</sup><sub>-1</sub>n<sup>-</sup>

# Stöchiometrie

`\ce{2H2O}` 2 H<sub>2</sub>O

`\ce{2 H2O}` 2 H<sub>2</sub>O

`\ce{0.5H2O}` 0.5 H<sub>2</sub>O

`\ce{1/2H2O}`  $\frac{1}{2}$  H<sub>2</sub>O

`\ce{(1/2)H2O}` (1/2) H<sub>2</sub>O

`\ce{\$n\$H2O}` n H<sub>2</sub>O

# Bindungen

## Bindungen

`\ce{A - B = C#D}` A - B = C≡D

## Mit Punkten

`\ce{A\bond{~}B\bond{~}C}` und

`\ce{A\bond{~--}B\bond{~}C\bond{~--}D}`

A··B=C und A≡B≡C≡D

`\ce{A\bond{\dots}B\bond{\dots}C}` A···B···C

## Mit Pfeilen

`\ce{A\bond{->}B\bond{<-}C}` A→B←C

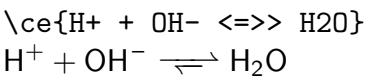
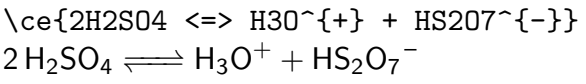
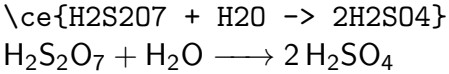
## Aussehen

`\sffamily\bfseries\ce{A - B = C#D}`

**A - B = C≡D**

# Reaktionen

## Reaktionen

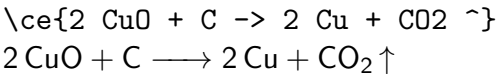
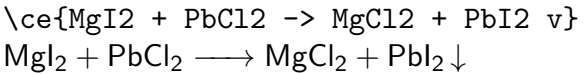


# Reaktionspfeile

$\text{A} \rightarrow \text{B}$	$A \longrightarrow B$
$\text{A} \leftarrow \text{B}$	$A \longleftarrow B$
$\text{A} \leftrightarrow \text{B}$	$A \longleftrightarrow B$
$\text{A} \rightleftharpoons \text{B}$	$A \rightleftharpoons B$
$\text{A} \rightleftharpoons \text{B}$	$A \rightleftharpoons B$
$\text{A} \rightleftharpoons \text{B}$	$A \rightleftharpoons B$
$\text{A} \rightleftharpoons \text{B}$	$A \rightleftharpoons B$
$\text{A} \xrightarrow[\text{SO}_4]{\text{H}_2\text{O}} \text{B}$	$A \xrightarrow[\text{SO}_4]{\text{H}_2\text{O}} B$

# Fällung und Ausgasen

## Fällung und Gasentstehung



# Chemie in Text & Mathe

## Elemente & Co.

$\text{Ag}$  und  $\text{H}_2\text{SO}_4$   
 $\text{\$Ag\$}$  und  $\text{\$H}_2\text{SO}_4\text{\$}$  Ag und  $\text{H}_2\text{SO}_4$

## Schrift ändern

$\text{\textfontfamily}$   
 $\text{\mathfontcommand}$

## Elemente & Co.

$\text{Ag}$  und  $\text{H}_2\text{SO}_4$   
 $\text{\$Ag\$}$  und  $\text{\$H}_2\text{SO}_4\text{\$}$  Ag und  $\text{H}_2\text{SO}_4$

## 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&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

## 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

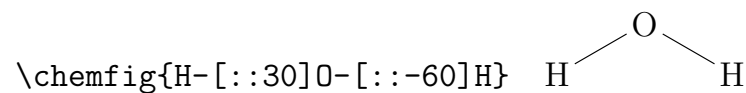
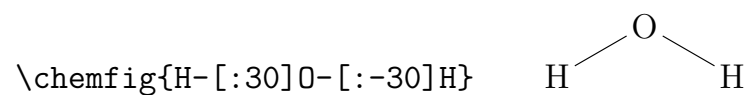
`\chemfig{A-[Zahl 0 bis n]B}`

Schrittweite beträgt per default + 45°

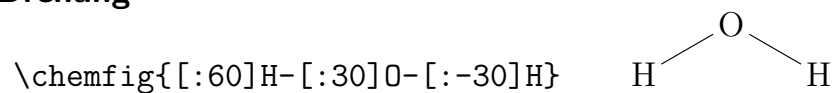
0	1	2	3	4	5	6	7	8	...
0°	45°	90°	135°	180°	225°	270°	315°	360°	...

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

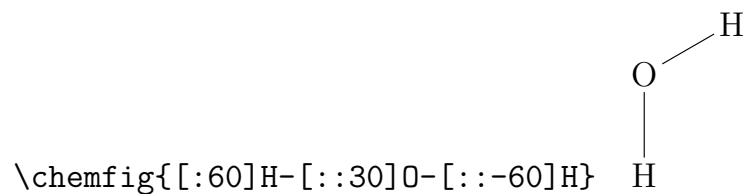
## absolute und relative Winkel



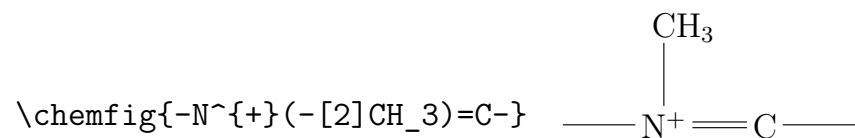
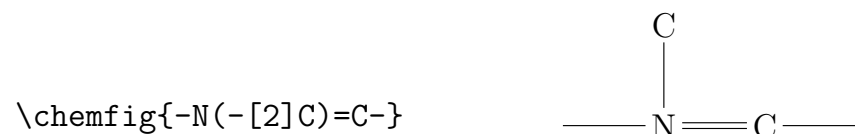
## Drehung



absolut vs. relativ



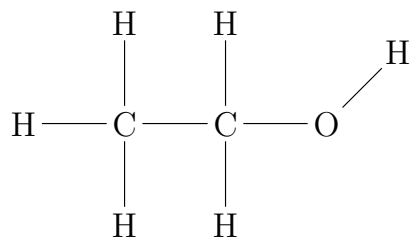
## "Abzweigungen"





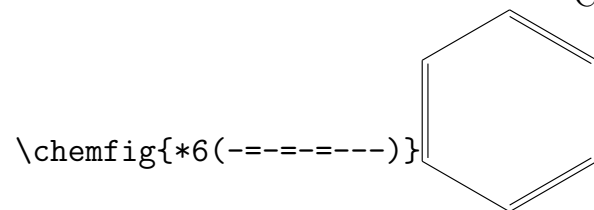
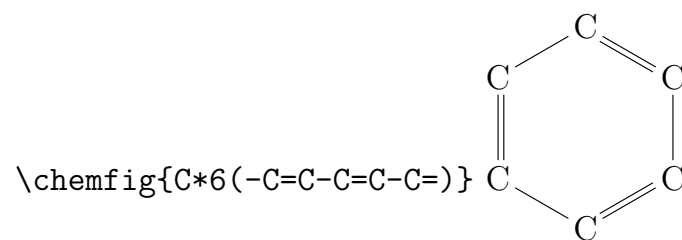
## Beispiel Ethanol

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



## Ringe

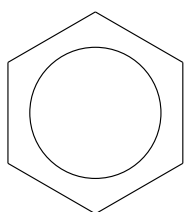
<Atom>\* <Anzahl> (<Code>)



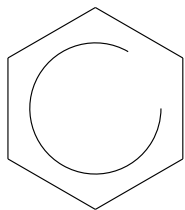
Unvollständig geht, aber mehr wird nicht angezeigt.

## Benzol Ring & Co.

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

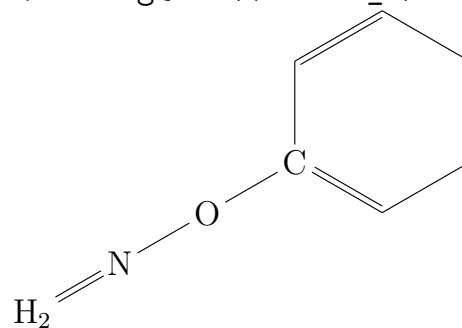


```
\chemfig{**[60,360]6(-----)}
```



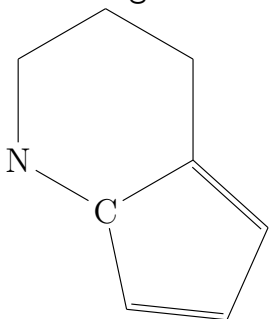
## Ringe ...

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



## Ringe ...

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



## Beschriftungen

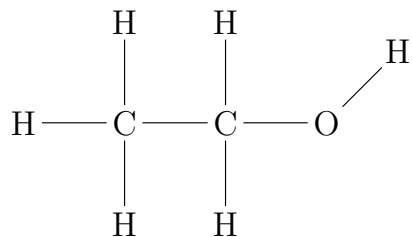
```
\chemname[<Dim>]{\chemfig{<Code>}}{<Beschriftung>}
```

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
```



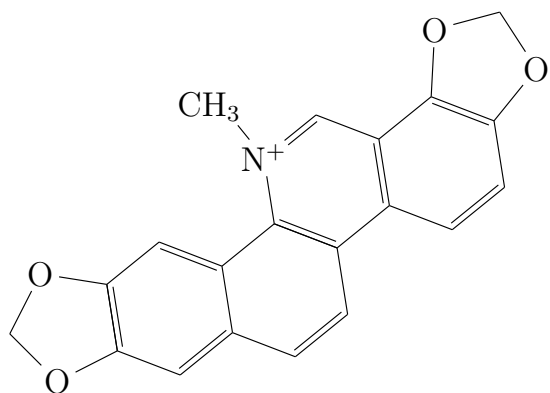
Ethanol

## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

Quellcode

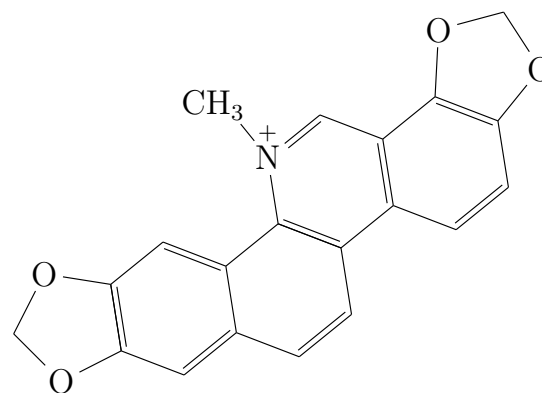
```
\schemestart  
\chemname{  
\chemfig{[:45]O*5(-*6(-=*6(-=*6(-*6(-=*5(-O--O-)  
==))=N^+(-[:270]CH_3)-=)--)-==)--O--)}}  
{Sanguinarine}  
\schemestop
```

### Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

### Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

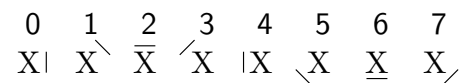
### Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

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

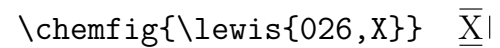
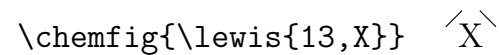
### Valenzstrichformeln

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

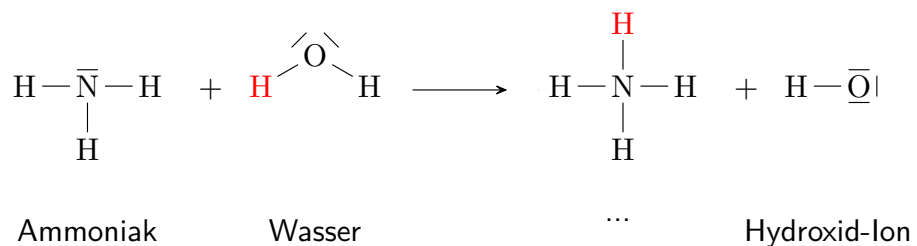
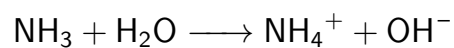
Beispiel: `\chemfig{\lewis{2,N}}`  $\bar{N}$



Kombinationen (Beispiele)



## Komplexeres Beispiel



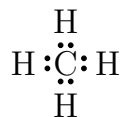
## Quellcode

```
\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

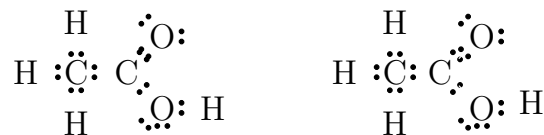
Aufbau: `\chemfig{... \lewis{[Zahlen]:,X}...}`

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



## Etwas komplexer ...

`\lewis{}`      vs.      `\Lewis{}`



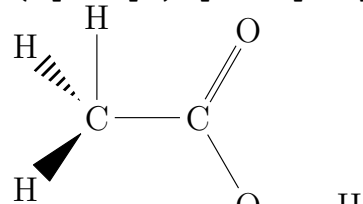
## Quellcode

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

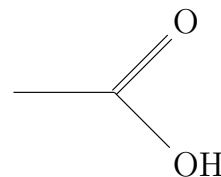
```
\chemfig[white][black]{H-\Lewis{0:2:4:6:,C}
(-[:90]H)(-[:270]H)-\Lewis{1:7:,C}(-[:45]
\Lewis{0:3:5:,O})(-[:-45]\Lewis{0:5:6:,O}-H)}
```

## Keilstrichformel & Skelettformel

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

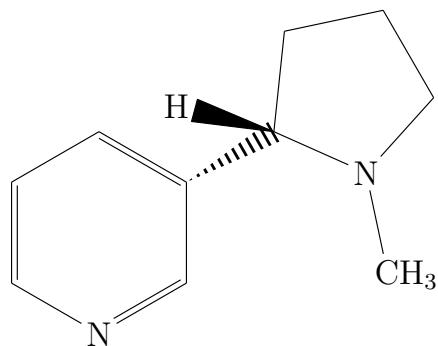


```
\chemfig{- (=[:45]O)(-[:-45]OH)}
```



## Komplexeres Beispiel:

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



## Komplexeres Beispiel Teil 2

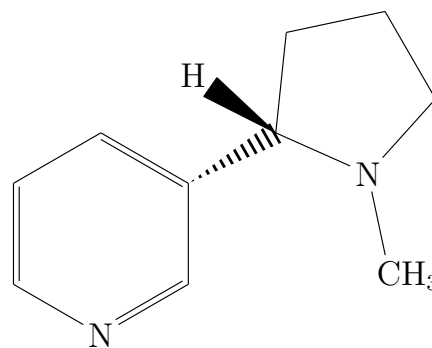


Abbildung 1: Nikotin

## 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
---	-------------------	----