

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

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

## Übersicht

### Chemie Pakete

mhchem  
chemfig

## 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+ 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

$\text{\ce{H2S2O7 + H2O -> 2H2SO4}}$   
 $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2 \text{H}_2\text{SO}_4$

$\text{\ce{2H2SO4 <=> H3O^{+} + HS2O7^{-}}}$   
 $2 \text{H}_2\text{SO}_4 \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HS}_2\text{O}_7^-$

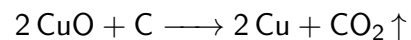
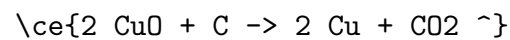
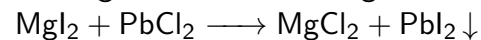
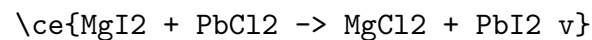
$\text{\ce{H+ + OH- <=>> H2O}}$   
 $\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$

## 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>

### chemfig

Ein Paket zum Zeichnen von Strukturformeln.

- Elektronenformel
- Valenzstrichformel
- Keilstrichformel
- Skelettformel






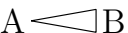
### Einbinden

`\usepackage{chemfig}`

### Achtung

Läuft hier nicht auf den Rechner ...

## Bindungen

`\chemfig{A-B}` A — B  
`\chemfig{A=B}` A = B  
`\chemfig{A~B}` A ≡ B  
`\chemfig{A>B}` A  B  
`\chemfig{A<B}` A  B  
`\chemfig{A>:B}` A  B  
`\chemfig{A<:B}` A  B  
`\chemfig{A>|B}` A  B  
`\chemfig{A<|B}` 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

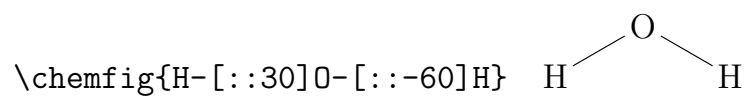
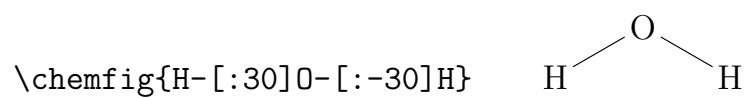
`\chemfig{A-[Zahl 0 bis n]B}`

Schrittweite beträgt per default + 45°

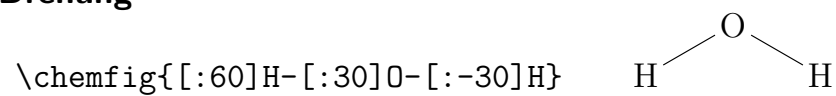
0	1	2	3	4	5	6	7	8	...
0°	45°	90°	135°	180°	225°	270°	315°	360°	...

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

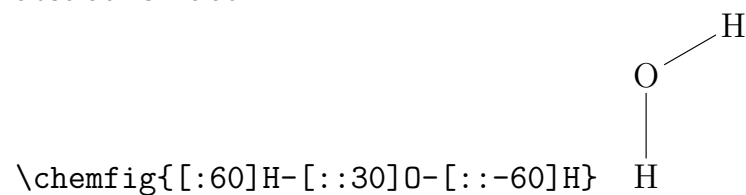
## absolute und relative Winkel



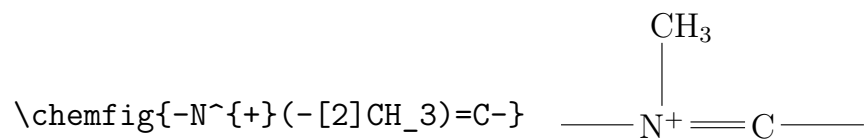
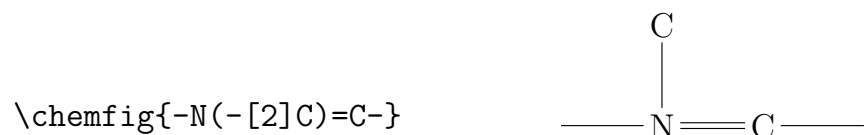
## Drehung



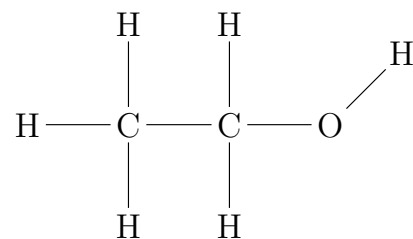
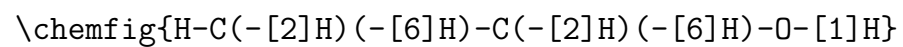
absolut vs. relativ



## "Abzweigungen"

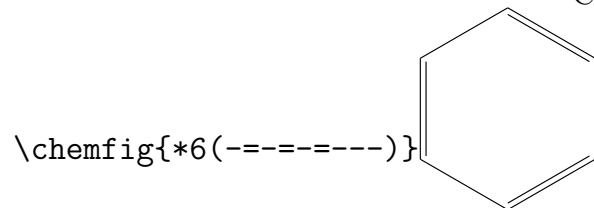
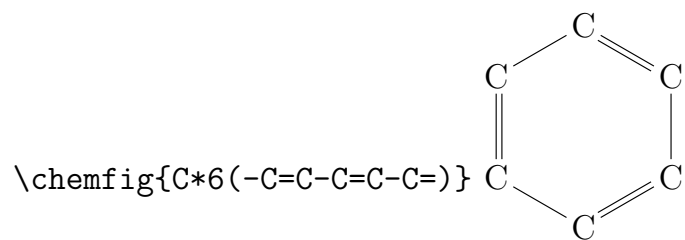


## Beispiel Ethanol



## Ringe

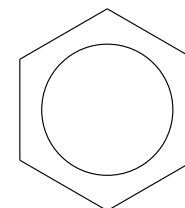
<Atom>\*<Anzahl>( <Code>)



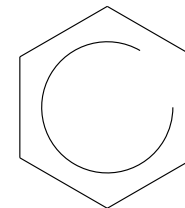
Unvollständig geht, aber mehr wird nicht angezeigt.

## Benzol Ring & Co.

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

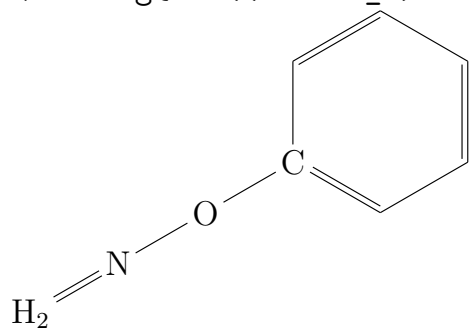


`\chemfig{**[60,360]6(-----)}`



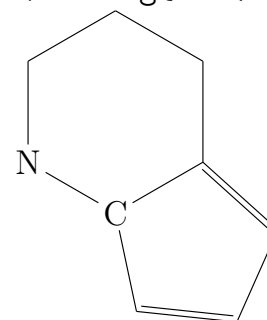
## Ringe ...

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



## Ringe ...

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



## Beschriftungen

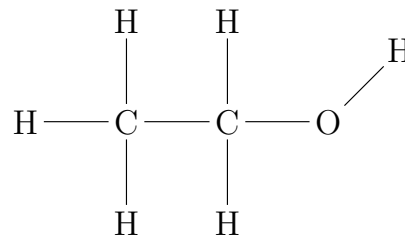
```
\chemname [<Dim>]{\chemfig{<Code>}}{<Beschriftung>}
```

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
```



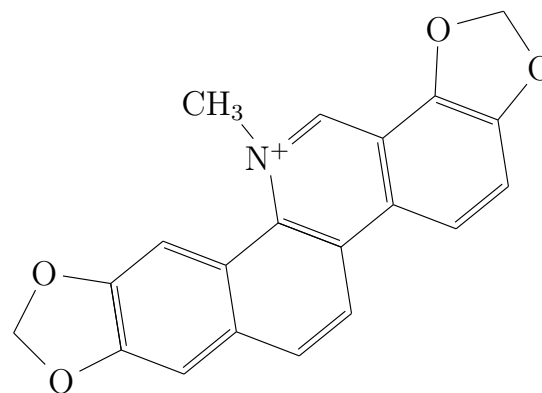
Ethanol

## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

Quellcode

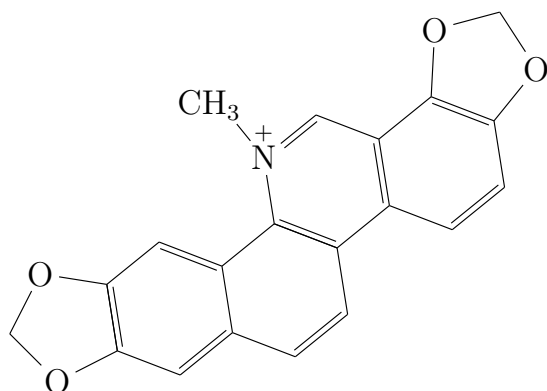
```
\schemestart  
\chemname{  
\chemfig{[:45]O*5(-*6(-=*6(-=*6(-=*6(-=*5(-O--O-)  
=--)=N^+(-[:270]CH_3)-=)--)-==)--O--)}}  
{Sanguinarine}  
\schemestop
```

## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

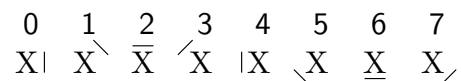
## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

```
\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}`

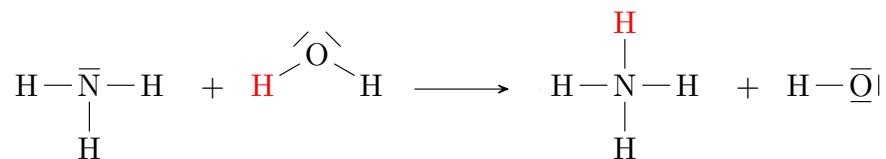
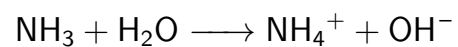


Kombinationen (Beispiele)

`\chemfig{\lewis{13,X}}`  $\sphericalangle X\backslash$

`\chemfig{\lewis{026,X}}`  $\bar{X}|$

## Komplexeres Beispiel



Ammoniak

Wasser

...

Hydroxid-Ion



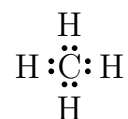
## Quellcode

```
\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

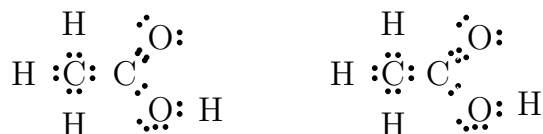
Aufbau: `\chemfig{... \lewis{[Zahlen]:,X}...}`

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



## Etwas komplexer ...

`\lewis{}` vs. `\Lewis{}`



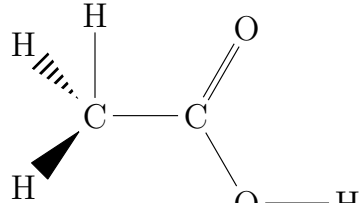
## Quellcode

```
\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)}
```

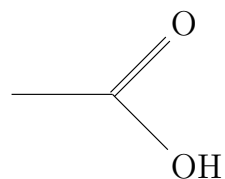
```
\chemfig[white][black]{H-\Lewis{0:2:4:6:,C}
(-[::90]H)(-[::270]H)-\Lewis{1:7:,C}(-[::45]
\Lewis{0:3:5:,0})(-[::-45]\Lewis{0:5:6:,0}-H)}
```

### Keilstrichformel & Skelettformel

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

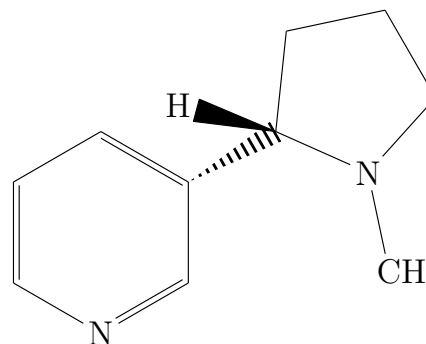


```
\chemfig{-([[:45]O])(-[:45]OH)}
```



### Komplexeres Beispiel:

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



### Komplexeres Beispiel Teil 2

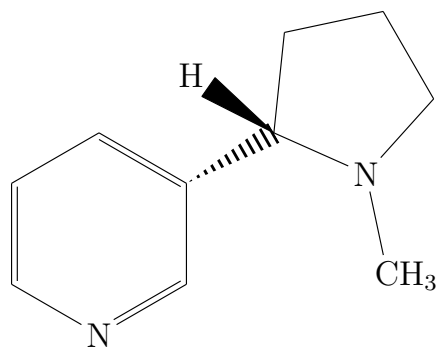


Abbildung 1: Nikotin

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