

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

Sascha Frank

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

# Übersicht

## Einheiten

siunitx

## Chemie

chemfig

mhchem

substances

## Journal

chemsym

# SI-Einheiten

siunitx

2017

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}`

`\numrage[Optionen]{Zahl Anfang}{Zahl Ende}`

`\si[Optionen]{Einheit}`

`\SI[Optionen]{Zahl}[per-Einheit]{Einheit}`

`\SIlst[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 and 7,8

1 to 10

## Einheiten

N

1 N

1 N, 3 N, 5 N and 7 N

1 N to 7 N

## Winkel

47,99° oder 47°59'43''

# Befehle II

## Optionen

```
\sisetup{locale = DE, Option 2, ...}
```

## Tabellen

S-Spalten Zahlen

s-Spalten Einheiten

```
\tablenum{Zahl}
```

```
\begin{tabular}{Ss}  
{Zahlen} & Einheiten\\  
1.234 & \km \\  
23e5 & \meter\squared \\  
e1 & \m \\  
-1234 & \V \\  
\end{tabular}
```



# Befehle Ausgabe II

## Optionen

`\num{123,45}` `\num{123.45}`

123,45 123,45

## Tabellen

Zahlen	Einheiten
1,234	km
$23 \cdot 10^5$	$\text{m}^2$
$10^1$	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.

## Konfig Datei

In einer separaten Konfigdatei.

## 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}
```

# Konfigdatei

## Name

Datei mit dem Namen `siunitx.cfg`

## Aufbau & Inhalt

```
\ProvidesFile{siunitx.cfg}
\DeclareSIUnit\parsec{pc}
...
\DeclareSIUnit\lightyear{ly}
```

## Einbinden

Das Einbinden erfolgt automatisch. Wichtig – im gleichen Ordner wie die `tex` Datei.

# 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}
```

## **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}`

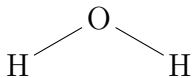
Schrittweite beträgt per default + 45°

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

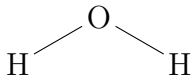
Mit `\setangleincrement{Gradzahl}` kann die Schrittweite verändert werden.

## absolute und relative Winkel

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

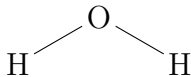


`\chemfig{H-[::30]O-[::-60]H}`



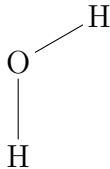
## Drehung

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



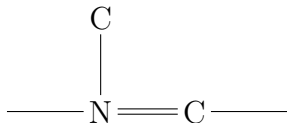
absolut vs. relativ

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

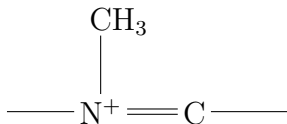


## "Abzweigungen"

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

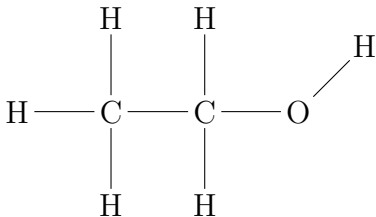


`\chemfig{-N^{+}(-[2]CH_3)=C-}`



## Beispiel Ethanol

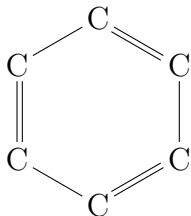
`\chemfig{H-C(-[2]H)(-[6]H)-C(-[2]H)(-[6]H)-O-[1]H}`



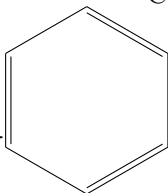
## Ringe

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

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



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

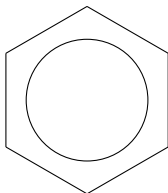


Unvollständig geht, aber mehr wird nicht angezeigt.

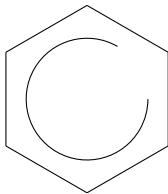


## Benzol Ring & Co.

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

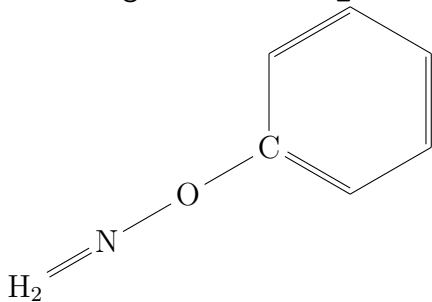


```
\chemfig{**[60,360]6(-----)}
```



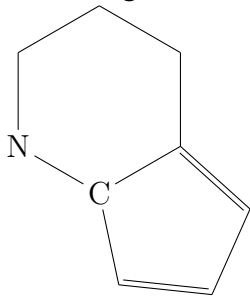
**Ringe ...**

```
\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>}
```

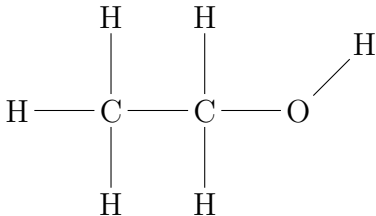
```
\schemestop
```

## Beschriftungsbeispiel

```
\schemestart
```

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

```
\schemestop
```



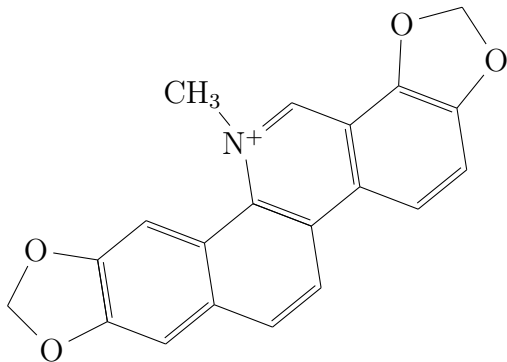
Ethanol

## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

Quellcode

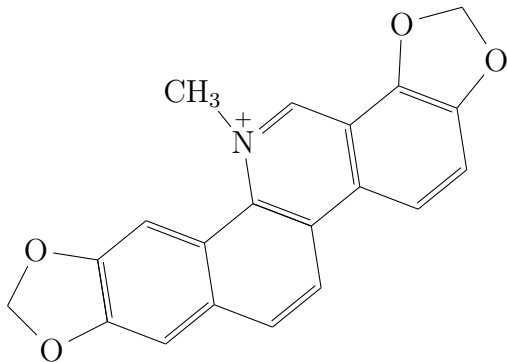
```
\schemestart
\chemname{
\chemfig{[:45]O*5(-*6(-=*6(-=*6(-=*6(-=*5(-O--O-)
--)=--N^+(-[:270]CH_3)--)=)--)=--)=--O--)}}
{Sanguinarine}
\schemestop
```

## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine

## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung



Sanguinarine



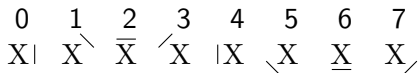
## Komplexeres Beispiel mit Beschriftung

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

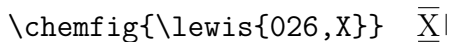
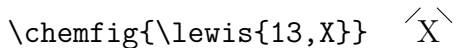
## Valenzstrichformeln

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

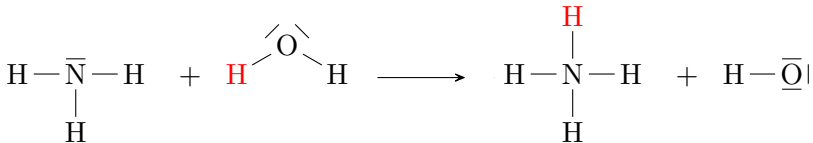
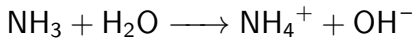
Beispiel: `\chemfig{\lewis{2,N}}`  $\bar{N}$



Kombinationen (Beispiele)



## Komplexeres Beispiel



Ammoniak

Wasser

...

Hydroxid-Ion

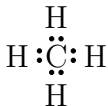
## Quellcode

```
\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}`

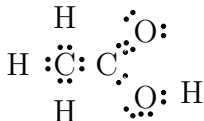
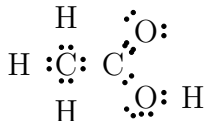


## Etwas komplexer ...

`\lewis{}`

vs.

`\Lewis{}`



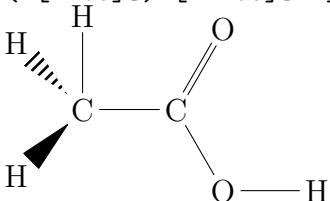
## Quellcode

```
\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)}
```

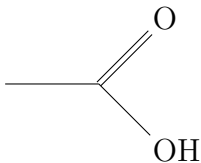
```
\chemfig[white] [black] {H-\Lewis{0:2:4:6:,C}  
(-[::90]H)(-[::270]H)-\Lewis{1:7:,C}(-[::45]  
\Lewis{0:3:5:,0})(-[:::-45]\Lewis{0:5:6:,0}-H)}
```

## Keilstrichformel & Skelettformel

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



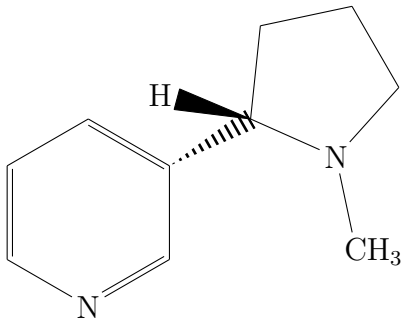
`\chemfig{- (=[:45]O) (-[: -45]OH)}`





## Komplexeres Beispiel:

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



## Komplexeres Beispiel Teil 2

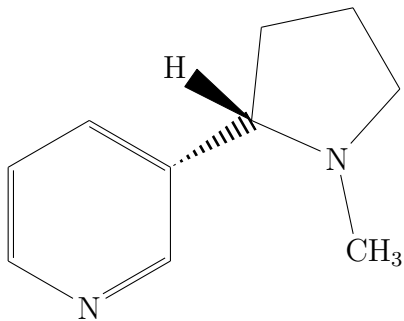


Abbildung 1: Nikotin

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

# 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.

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

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

## Ladungen

$\text{Ag}^+$  und  $\text{HSO}_4^-$

$\text{SO}_4^{2-}$  und  $\text{SO}_4^{2-}$

## 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

$\text{\ce{^{32}_{16}S}}$  und  $\text{\ce{^{34}_{16}S}}$   
 ${}^{32}_{16}\text{S}$  und  ${}^{34}_{16}\text{S}$

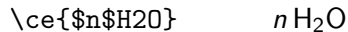
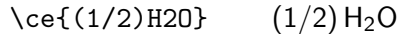
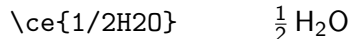
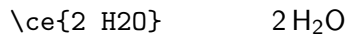
## Mit Ladung

$\text{\ce{^{32}_{16}S+}}$  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





# 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}`       $A \rightarrow B \leftarrow C$

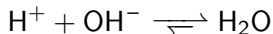
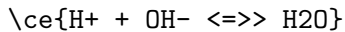
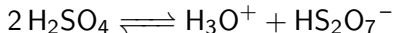
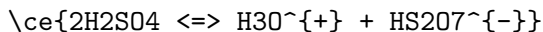
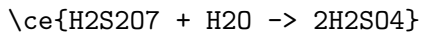
## Aussehen

`\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

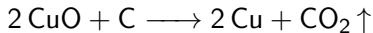
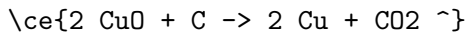
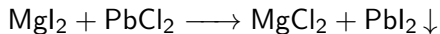
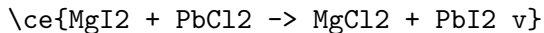
A  $\rightleftharpoons$  B

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 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  
}
```

## 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}
```



---

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

---

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

# Tabellenbeispiel

---

name	Methane
formula	CH <sub>4</sub>
	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
...	
	
H statements	H220
P statements	P210, P377, P381, P410 + P403

---

# Hinweise

## Datenbank

Am Besten die beiliegen Datenbank verwenden und erweitern...

## Fehler beim Einbinden

Runaway argument?

```
{\AssignTemplateKeys \bool_if:nTF {\l__substances_index_alternative_name  
ETC.
```

```
! Forbidden control sequence found while scanning use of \DeclareTemplate  
<inserted text>
```

```
1.400 ... \par  
          \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)

# 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

# Journal

## 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.

## 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}
```