

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

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

## Übersicht

Einheiten  
siunitx

Chemie  
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}
\numrange[Optionen]{Zahl Anfang}{Zahl Ende}

\si[Optionen]{Einheit}
\SI[Optionen]{Zahl}[per-Einheit]{Einheit}
\SIlist[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 und 7,8  
1 bis 10

### Einheiten

N  
1 N  
1 N, 3 N, 5 N und 7 N  
1 N bis 7 N

### Winkel

47,99° oder 47°59'43''

## Befehle II

### Optionen

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

### Tabellen

S-Spalten Zahlen	<code>\begin{tabular}{Ss}</code>
s-Spalten Einheiten	<code>{Zahlen} &amp; Einheiten\\</code>
<code>\tablenum{Zahl}</code>	<code>1.234 &amp; \km \\</code>
	<code>23e5 &amp; \meter\squared \\</code>
	<code>e1 &amp; \m \\</code>
	<code>-1234 &amp; \V \\</code>
	<code>\end{tabular}</code>

## Befehle Ausgabe II

### Optionen

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

### Tabellen

Zahlen	Einheiten
1,234	km
$23 \cdot 10^5$	m <sup>2</sup>
10 <sup>1</sup>	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}
```

## 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.

```
\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

$\text{\ce{H2S2O7 + H2O -> 2H2SO4}}$

$\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2 \text{H}_2\text{SO}_4$

$\text{\ce{2H2SO4 <=> H3O^{+} + HS2O7^{-}}}$

$2 \text{H}_2\text{SO}_4 \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HS}_2\text{O}_7^-$

$\text{\ce{H+ + OH- <=>> H2O}}$

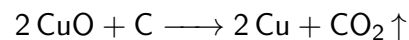
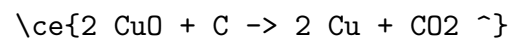
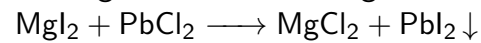
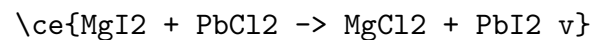
$\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$

## 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>

## 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  
}
```

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

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

## 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}
```

## 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_nam  
ETC.
```

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

```
1.400 ... \par  
1.400 ... \substances_index:nx { \c_job_name_tl  
-chem }
```

### Lösung

[bitbucket.org/cgnieder/substances/pull-requests/2/changed-depricated-c\\_job\\_name\\_tl-to/diff](https://bitbucket.org/cgnieder/substances/pull-requests/2/changed-depricated-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

## Journale

### 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.

## Slunitx Erweiterung

### 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}`