chemsym – ein LATEX Macro für chemische Symbole *

Mats Dahlgren † (übersetzt von Sandro Heuke (FSU-Jena) im August 2011) 1998/06/24

Zusammenfassung

Das vorliegende Dokument beschreibt das Paket chemsym, welches die Eingabe von korrekten chemischen Symbolen vereinfacht, ohne sich um die Verwendung des Mathe- oder Textmodus sorgen zu müssen. Darüberhinaus, erlaubt chemsym die Verwendung der Befehle zum Hoch- und Tiefstellen $(^and_{-})und^{i} \cdot '(\cdot)$ im Textmodus.

Das Urheberrecht © 1998 für Datei und Paket liegen bei Mats Dahlgren. Alle Rechte vorbehalten.

1 Einführung

chemsym ist ein I^AT_EX Paket, welches die Eingabe von chemischen Symbolen vereinfacht. Es definiert Befehle für jedes der ersten 109 Elemente des Periodensystems, Deuterium, für die Methyl, Ethyl und Butyl Gruppen¹ (um die Propyl Gruppezu erhalten, ist \Pr, Praseodym zu verwenden), dazu für die Gruppen -OH, -COOH, sowie -CH .² Der Einsatz dieser Befehle führt zu aufrecht stehenden chemischen Symbolen, unabhängig davon, ob sie im Mathe- oder Textmodus verwendet werden. Folgen den Symbolen keine Ober- und Unterskripte, oder Klammern (,), [, bzw.], so wird ein kleines Leerzeichen eingefügt. (etwas kleiner als jenes, welche der Befehl '\, ' erzeugt).

In den späten 1997igern, hat die IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) neue Empfehlungen für die Namen und Symbole der Elemente 104-107 heraus gegeben ("Names and symbols of transfermium elements (IUPAC recommendations 1997)", Pure and Applied Chemistry 1997, 69(12), 2471-2473). Die vorgeschlagenen Namen lauten dementsprechend Rutherfordium, Rf, Dubnium, Db, Seaborgium, Sg, Bohrium, Bh, Hassnium, Hs, und Meitnerium, Mt. Im Vergleich zu den vorangegangenen Empfehlungen von 1994, wurden damit alle außer Bh und Mt geändert.

Dieses Handbuch ist ebenso im Internet in .pdf-Format verfügbar. Man findet es auf meiner LATEX Webseite: http://www.homenet.se/matsd/latex/

2 Benutzerhandbuch

2.1 Anforderungen

Die Datei chemsym.sty muss unter dem Benutzerverzeichnis TEXINPUTS vorliegen. Eine \LaTeX 2 ε Version von 1996/12/01 oder neuer ist erfordert.

^{*}Dieses Dokument beschreibt chemsym Version 2.0. Es wurde zuletzt am 1998/06/24 aktualisiert.

[†]Email: matsd@sssk.se Web: http://www.homenet.se/matsd/

¹Angeregt durch Ulf Henriksson (ulf@physchem.kth.se).

²Unter anderem vorgeschlagen von Axel Kielhorn (i0080108@ws.rz.tu-bs.de.)

2.2 Verwendung

Das Paket chemsym wird hinzugefügt, indem man

\usepackage[option] {chemsym}

in die Präambel des Dokuments aufnimmt. Die einzige Option, welche chemsym affektiert, ist collision, für mehr Informationen siehe weiter unten.

2.3 Befehle

chemical symbols

Das Paket chemsym definiert 116 Benutzerbefehle – eines für jedes der ersten 109 Elemente, Deuterium, die Methyl, Ethyl und Butyl Gruppen (für die Propyl Gruppe, verwende man \Pr , Praseodymium), sowie für die -OH, -COOH, und -CH Gruppen. Die Befehlsnamen werden alle aus den chemischen Symbolen gebildet, welchen ein '\' voran geht. Dementsprechend ist für Stickstoff N, ein \N einzugeben und für Quecksilber \Hg , somit \Hg einzutippen, usw. Die Befehle erweisen sich als relativ stabil und einfach zu erweitern. Um ' \Hg ' zu erhalten, muss einfach nur ' \CH_2 ' in die Datei eingeben werden. ' \CH_3 ' wird folglich durch Eingabe von ' \CH_3 ' erhalten.

\S \Re \Pr Sb

\H

\0

\P

T_EX	Mit chemsym	Verwendung/Beispiel
Befehl	schreibt man	
\H	\h	Akzent bei 'ő'
\0	\00	Ø
\P	\PP	\P
\S	\Ss	§
\Re	\re	ℜ (im Mathemodus)
\Pr	\pr	Pr (im Mathemodus)
\begin{Sb}	\begin{SB}	$(\min \mathcal{AMS}\text{-}\text{IAT}_{E}X)$
\end{Sb}	\end{SB}	$(\text{mit }\mathcal{AMS}\text{-}\text{LAT}_{EX})$

\kemtkn

\nsrrm

Mit \kemtkn steht ein Befehl zur Definition von anderen chemischen Symbolen und ähnlicher Funktionen zur Verfügung. \kemtkn besitzt ein obligatorisches Argument (die Zeichenfolge, welche als chemisches Symbol behandelt werden soll). Daneben sind noch zwei andere interne Befehle, \nsrrm und \nsrrms zugänglich. \nsrrm vermag das obligatorische Argument in mathrm zu setzen. \nsrrms leistet das Gleiche, fügt jedoch noch ein kleines Leerzeichen hinzu. Dieses Leerzeichen kann als zweites, optionales Argument von \nsrrms variiert werden und wird in em Einheiten angegeben (ohne 'em'). Der Standardwert lautet 0.1em. Zweckdienlicherweise sind nun auch die Befehle ^ und _ für den Einsatz von Ober- und Unterskripten außerhalb des Mathemodus einsetzbar, sofern die Option collision nicht angegeben wird. Damit ist es in chemsym möglich m^2 anstatt m\$^2\$ für m² im Textmodus schreiben. Analog, kann man \H_2\0 für H₂O im Mathe- als auch im Textmodus eintippen und erhält das Gleiche Ergebnis. Man merke jedoch, dass Text, welchen man als Arguments von ^ und _ stellt, automatisch im Mathemodus gesetzt wird. Wenn man 'Mq' erhalten möchte, so muss man M_{\mathrm{q}} \mathrm{q}} schreiben. Nicht jedoch M_q, welches als 'Mq' erscheint. (Diese Eigenschaft stört jedoch nicht sonderlich, da ^ und _ hauptsächlich für Zahlen im

\cdot

Argument gedacht sind.)

Überdies ist der Befehl \cdot (welcher ein '·' erzeugt) auch außerhalb des Mathemodus einsetzbar.

³Einen Dank an Thorsten Löhl (lohl@uni-muenster.de) für diesen Hinweis.

Dieser Bestandteil wurde hinzugefügt, um die Eingabe von Formeln des Typs "CH₃·CH₃" (\CH_3\cdot\CH_3) durch Verwendung des Textmodus zu vereinfachen. ⁴

2.4 Die collision-Option

collision

Probleme mit anderen Paketen auf Grund der Aktivierung von ^ (und _) können vermieden werden, indem beim Laden des Pakets chemsym die Option collision angeben wird. Erhält man die folgende Fehlermeldung (oder eine ähnlich) ist es wahrscheinlich, dass hieran eine solche "Kollision" mit chemsym beteiligt ist (in diesem Fall mit longtable):

Um das Problem zu lösen, muss die Option collision angegeben und die .aux Datei gelöscht werden, bevor man LATEX wiederholt durchlaufen lässt. Einige Pakete enthalten ^^J-Konstruktionen, welche für den Nutzer nicht in jedem Fall offensichtlich sein müssen. Ein Bespiel, welches mit chemsym kollidiert, zeigt sich im Warnhinweis des multicol Paketes, wenn man lediglich eine Spalte angibt. In diesem Fall lautet die Fehlermeldung:

Eventuell gelingt es das Problem zu umgehen, indem man eine Anzahl von Spalten ≥ 2 wählt. Falls nicht, muss die Option collision für das chemsym-Paket beigefügt werden.

3 Beispiele

Dieser Abschnitt zeigt ein paar einfache Beispiele für die Verwendung von chemsym. Um die Formel für Wasser im Mathe- als auch im Textmodus nieder zu schreiben, muss $H_2\$ eintippt werden, was in H_2 O resultiert. Man merke, dass sich dieses Ergebnis von der Eingabe von $H_2\$ unterscheidet, welche in H_2 O mündet. Im ersten Beispiel gibt es kein extra Leerzeichen nach dem H. Dieser Zusatz eines Leerzeichens macht es jedoch einfacher, Formeln wie HCN ($H\$) zu lesen, verglichen mit einfach nur HCN einzugeben, was zu HCN führt.

Die Verwendung der Befehle von chemsym ist vor allem dann hilfreich, wenn in Gleichungen chemische Symbole als Indizes eingesetzt werden. Das folgende Beispiel soll dies verdeutlichen:

$$\mathcal{M}_{\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6} = 6\mathcal{M}_{\text{H}_2\text{O}} + \mathcal{M}_{\text{Fe}} \tag{1}$$

welches erhalten wurde durch Eingabe von

\begin{equation}

⁴Ebenso vorgeschlagen von Ulf Henriksson (ulf@physchem.kth.se).

```
\label{eq:mathcal_M}_{\end{equation}} = 6\\ \end{equation} + \\ \end{equation}
```

Ebenso ist es einfacher andere chemische Symbole zu definieren, zum Beispiel solche für bestimmte Isotope. Gesetzt den Fall, man verwendet lieber die Notation ²H statt D für Deuterium, dann kann dies neu definiert werden durch:

(was bereits kurz zuvor genutzt wurde: ... Notation \hH{} statt \D{} f\"ur...). Intern benutzt chemsym eine ähnliche Syntax, um die verschiedenen Befehle für die chemischen Symbole zu definieren.⁵

Nachdem chemsym.ins mit \LaTeX $2_{\mathcal{E}}$ durchgelaufen ist, kann man das Periodensystem der Elemente setzen lassen, indem man die Datei pertab.tex auf \LaTeX $2_{\mathcal{E}}$ ausführt. (Das PSE passt gut auf A4-Format und ebenso wenig Probleme sollte es mit dem U.S. Letter-Format geben.) Das Periodensystem benötigt das Paket rotating, welches wiederum das graphicx und ifthen Paket erfordert.

4 Bekannte Probleme

- Da chemsym ^ und _ aktiviert, wird es mit anderen Paketen kollidieren, welche Konstruktionen wie ^^J verwenden (z. B. das longtable-Paket). Dies kann vermieden werden, wenn man die Option collision beim Laden von chemsym angibt (oder global).
- Wenn das chemsym Paket zusammen mit den Paketen rotating oder amstex verwendet wird chemsym sollte in diesem Fall zuletzt geladen werden.
- Wenn das chemsym Paket zusammen mit dem Paket fancyheadings verwendet wird fancyheadings sollte nach chemsym geladen werden.⁶
- Da chemsym _ und ^ aktiviert, können diese Zeichen nicht zum Labeln noch für Namen von Dateien, welche man auf IATEX ausgeführt, eingesetzt werden, während das chemsym Paket geladen ist (außer man gibt die Option collision an).⁷
- Ebenso da $\hat{}$ aktiviert wurde, wird ein "double superscriptFehler ausgegeben, sobald im Mathemodus ein $\hat{}$ auf (') folgt. Der Fehler wird behoben durch das einbringen einer geschweiften Doppelklammer vor dem $\hat{}$ Zeichen. Man muss also $\hat{}$ Man wird anstatt von $\hat{}$ verwenden, um mit chemsym $\hat{}$ zu erhalten.

5 Sendung einer Fehlermeldung

chemsym enthält wahrscheinlich einige Fehler und Berichte darüber sind ausdrücklich erwünscht. Bevor ein Fehlerbericht jedoch gesendet wird, überprüfe man sein Problem bitte zuerst an Hand der folgenden drei Kriterien:

 Man überprüfe, ob das Problem durch die eigene Input-Datei, Pakete oder Klassen verursacht wird:

 $^{^5} Um$ einen robusten Befehl zu erhalten, benutze \newcommand{\hH}{\protect\kemtkn{{}}^2H}} oder \DeclareRobustCommand anstatt von \newcommand.

⁶Einen Dank an Lars Reinton (larsr@stud.unit.no) für diesen Hinweis.

⁷Einen Dank an Axel Kielhorn (i0080108@ws.rz.tu-bs.de) für den Verweis auf dieses Problem.

⁸Einen Dank an Jeroen Paasschens (paassche@natlab.research.philips.com) dafür, dass er meine Aufmerksamkeit hierauf gelenkt hat.

- 2. Man überprüfe, ob das Problem nicht bereits in dem obigen Kapitel "Bekannte Probleme" behandelt wird;
- 3. Man versuche das Problem zu lokalisieren, indem man ein Minimalbeispiel in Form einer LaTEX-Eingabe-Datei erzeugt, welche das Problem reproduziert. Man füge den Befehl \setcounter{errorcontextlines}{999} in diese Eingabe;
- 4. Führt die Datei auf L⁴TEX aus;
- 5. und sendet eine Beschreibung des Problems, die Eingabe Datei und die log Datei via E-Mail an:

matsd@sssk.se.

Viel Vergnügen mit LATEX!

 $mats\ d.$

6 Der Code

Für den interessierten Leser ist nachfolgend eine kurze Beschreibung des Codes angehängt. Zuerst lernt man dem Paket sich selbst zu identifizieren:

- 1 \NeedsTeXFormat{LaTeX2e}[1996/12/01]
- 2 \ProvidesPackage{chemsym}[1998/05/31 v.2.0 Chemical symbols]

Im echten Code müssen die alten Funktionen \H, \O, \P, \S, \Re, und \Pr umbenannt werden:

```
3 \left| h=H \right|
4 \left(00=0\right)
5 \left| PP = P \right|
6 \let\Ss=\S
7 \let\re=\Re
8 \let\pr=\Pr
```

Hier überprüfen man, ob das AMS-IATEX Paket geladen ist und sofern dem so ist, wird die Sb Umgebung umbenannt nach SB.

```
9 \@ifundefined{Sb}{\def\Sb{\protect\kemtkn{Sb}}}%
   {\let\SB=\Sb \let\endSB=\endSb}
```

An dieser Stelle bringt man ^, _, und \cdot ohne \$...\$ auch im Text Modus zum funktionieren – sofern nicht ausgeschaltet. Um dies zu erreichen, benötigt man ein Boolean und einige weiterverarbeitende Optionen...

```
11 \newif \ifc@llsn \c@llsnfalse
13 \DeclareOption*{\OptionNotUsed}
14 \ProcessOptions*
15 \ifc@llsn\AtEndDocument{%
   \PackageWarningNoLine{chemsym}{Due to possible collisions with other
   \MessageBreak packages, super- and subscrips are not avaliable
   \MessageBreak outside math mode despite your loading of 'chemsym'}}
18
19 \else
   \def\sprscrpt#1{\ensuremath{^{#1}}}
20
   \def\sbscrpt#1{\ensuremath{_{#1}}}
21
   \catcode'\^ \active
22
   \catcode'\_ \active
23
24
   \let^=\sprscrpt
   \let_=\sbscrpt
25
26\fi
27 \@ifundefined{cd@t}{%
28 \let\cd@t=\cdot
29 \def\cdot{\ensuremath{\cd@t}}}{}
```

(Das \@ifundefined wurde früher von mir aus Kompatibilitätsgründen benötigt.) Anschließend werden einige allgemeine Macros definiert:

```
30 \newcommand{\nsrrm}[1]{\ensuremath{\mathrm{#1}}}
31 \newcommand{\nsrrms}[2][0.1]{\ensuremath{\mathrm{#2}\kern #1em}}
32 \newcommand{\kemtkn}[1]{\difnextchar_{\nsrrm{#1}}}{\difnextchar^{\nsrrm{#1}}}%
   {\@ifnextchar){\nsrrm{#1}}{\@ifnextchar({\nsrrm{#1}}}%
```

Wie man sieht, kann man den Abstand in chemischen Formeln variieren, indem man \nsrrms ändert. Dies kann mit Hilfe von \renewcommand in der Päamble des Dokuments oder in einer anderen Paket-Datei geschehen. Nun definiert man die 110 Befehle für die chemischen Symbole:

35 \renewcommand{\H}{\protect\kemtkn{H}} % modified

```
36 \newcommand{\D}{\protect\kemtkn{D}}
37 \mbox{ }\mbox{\em He}{\protect\kemtkn{He}}
38 \newcommand{\Li}{\protect\kemtkn{Li}}
39 \newcommand{\Be}{\protect\kemtkn{Be}}
40 \newcommand{\B}{\protect\kemtkn{B}}
41 \newcommand{\C}{\protect\kemtkn{C}}
42 \mbox{ newcommand{N}{\protect\kemtkn{N}}}
43 \renewcommand{\0}{\protect\kemtkn{0}} % modified
44 \newcommand{\F}{\protect\kemtkn{F}}
45 \newcommand{\Ne}{\protect\kemtkn{Ne}}
46 \mbox{ } {\mathbf{Na}}{\mathbf{Na}}
47 \newcommand{\Mg}{\protect\kemtkn{Mg}}
48 \mbox{ } \{\Lambda \} {\mbox{ } Al} 
49 \newcommand{\Si}{\protect\kemtkn{Si}}
50 \renewcommand{\P}{\protect\kemtkn{P}} % modified
51 \renewcommand{\S}{\protect\kemtkn{S}} % modified
52 \newcommand{\Cl}{\protect\kemtkn{Cl}}
53 \newcommand{\Ar}{\protect\kemtkn{Ar}}
54 \newcommand{\K}{\protect\kemtkn{K}}
55 \newcommand{\Ca}{\protect\kemtkn{Ca}}
56 \newcommand{\Sc}{\protect\kemtkn{Sc}}
57 \end{Ti}{\protect\kemtkn{Ti}}
58 \newcommand{\V}{\protect\kemtkn{V}}
59 \end{\cr}{\cr}{\c ct\kemtkn{\c Cr}}
60 \newcommand{\Mn}{\protect\kemtkn{Mn}}
61 \newcommand{\Fe}{\protect\kemtkn{Fe}}
62 \newcommand{\Co}{\protect\kemtkn{Co}}
63 \newcommand{\Ni}{\protect\kemtkn{Ni}}
64 \newcommand{\Cu}{\protect\kemtkn{Cu}}
65 \newcommand{\Zn}{\protect\kemtkn{Zn}}
66 \newcommand{\Ga}{\protect\kemtkn{Ga}}
67 \newcommand{\Ge}{\protect\kemtkn{Ge}}
68 \newcommand{\As}{\protect\kemtkn{As}}
69 \newcommand{\Se}{\protect\kemtkn{Se}}
70 \newcommand{\Br}{\protect\kemtkn{Br}}
71 \newcommand{\Kr}{\protect\kemtkn{Kr}}
72 \newcommand{\Rb}{\protect\kemtkn{Rb}}
73 \newcommand{\Sr}{\protect\kemtkn{Sr}}
74 \newcommand{\Y}{\protect\kemtkn{Y}}
75 \newcommand{\Zr}{\protect\kemtkn{Zr}}
76 \newcommand{\Nb}{\protect\kemtkn{Nb}}
77 \newcommand{\Mo}{\protect\kemtkn{Mo}}
78 \newcommand{\Tc}{\protect\kemtkn{Tc}}
80 \newcommand{\Rh}{\protect\kemtkn{Rh}}
81 \newcommand{\Pd}{\protect\kemtkn{Pd}}
82 \newcommand{\Ag}{\protect\kemtkn{Ag}}
83 \newcommand{\Cd}{\protect\kemtkn{Cd}}
84 \newcommand{\In}{\protect\kemtkn{In}}
85 \newcommand{\Sn}{\protect\kemtkn{Sn}}
86 \label{Sb}{\protect\kemtkn{Sb}}
                                           % modified with AMS-LaTeX
87 \newcommand{\Te}{\protect\kemtkn{Te}}
88 \newcommand{\I}{\protect\kemtkn{I}}
89 \newcommand{\Xe}{\protect\kemtkn{Xe}}
```

```
90 \newcommand{\Cs}{\protect\kemtkn{Cs}}
  91 \newcommand{\Ba}{\protect\kemtkn{Ba}}
  92 \mbox{ } 12 \
  93 \newcommand{\Ce}{\protect\kemtkn{Ce}}
  94 \renewcommand{\Pr}{\protect\kemtkn{Pr}} % modified
  95 \newcommand{\Nd}{\protect\kemtkn{Nd}}
  96 \newcommand{\Pm}{\protect\kemtkn{Pm}}
  97 \newcommand{\Sm}{\protect\kemtkn{Sm}}
  98 \newcommand{\Eu}{\protect\kemtkn{Eu}}
  99 \newcommand{\Gd}{\protect\kemtkn{Gd}}
100 \newcommand{\Tb}{\protect\kemtkn{Tb}}
101 \newcommand{\Dy}{\protect\kemtkn{Dy}}
102 \newcommand{\Ho}{\protect\kemtkn{Ho}}
103 \newcommand{\Er}{\protect\kemtkn{Er}}
104 \newcommand{\Tm}{\protect\kemtkn{Tm}}
105 \newcommand{\Yb}{\protect\kemtkn{Yb}}
106 \newcommand{\Lu}{\protect\kemtkn{Lu}}
107 \newcommand{\Hf}{\protect\kemtkn{Hf}}
108 \newcommand{\Ta}{\protect\kemtkn{Ta}}
109 \newcommand{\W}{\protect\kemtkn{W}}}
110 \renewcommand{\Re}{\protect\kemtkn{Re}} % modified
111 \newcommand{\0s}{\protect\kemtkn{0s}}
112 \mbox{\line}{\protect\kemtkn{Ir}}
113 \newcommand{\Pt}{\protect\kemtkn{Pt}}
114 \newcommand{\Au}{\protect\kemtkn{Au}}
115 \newcommand{\Hg}{\protect\kemtkn{Hg}}
116 \newcommand{\Tl}{\protect\kemtkn{Tl}}
117 \newcommand{\Pb}{\protect\kemtkn{Pb}}
118 \newcommand{\Bi}{\protect\kemtkn{Bi}}
119 \newcommand{\Po}{\protect\kemtkn{Po}}
120 \newcommand{\At}{\protect\kemtkn{At}}
121 \newcommand{\Rn}{\protect\kemtkn{Rn}}
122 \mbox{ } \mbox{
123 \newcommand{\Ra}{\protect\kemtkn{Ra}}
124 \newcommand{\Ac}{\protect\kemtkn{Ac}}
125 \newcommand{\Th}{\protect\kemtkn{Th}}
126 \newcommand{\Pa}{\protect\kemtkn{Pa}}
127 \newcommand{\U}{\protect\kemtkn{U}}}
128 \newcommand{\Np}{\protect\kemtkn{Np}}
129 \newcommand{\Pu}{\protect\kemtkn{Pu}}
130 \newcommand{\Am}{\protect\kemtkn{Am}}
131 \newcommand{\Cm}{\protect\kemtkn{Cm}}
132 \verb|\newcommand{\Bk}{\protect\kemtkn{Bk}}|
133 \mbox{\command}(\Cf}{\protect\kemtkn}
134 \newcommand{\Es}{\protect\kemtkn{Es}}
135 \newcommand{\Fm}{\protect\kemtkn{Fm}}
136 \newcommand{\Md}{\protect\kemtkn{Md}}
137 \newcommand{\No}{\protect\kemtkn{No}}
138 \newcommand{\Lr}{\protect\kemtkn{Lr}}
139 \newcommand{\Rf}{\protect\kemtkn{Rf}}
140 \newcommand{\Db}{\protect\kemtkn{Db}}
141 \newcommand{\Sg}{\protect\kemtkn{Sg}}
142 \newcommand{\Bh}{\protect\kemtkn{Bh}}
143 \newcommand{\Hs}{\protect\kemtkn{Hs}}
```

 $144 \end{Mt}{\protect\kemtkn{Mt}}$

Zuletzt definiert man die drei Alkyl und andere nützliche Gruppen als chemische Symbole:

- $145 \verb|\newcommand{\Me}{\protect\kemtkn{Me}}|$
- $146 \verb|\encommand{\Et}{\protect\kemtkn{Et}}|$
- 147 \newcommand{\Bu}{\protect\kemtkn{Bu}}
- 148 \newcommand{\OH}{\protect\kemtkn{OH}}
- $149 \verb| newcommand{\COOH}{\protect\kemtkn{COOH}}|$
- $150 \verb|\newcommand{\CH}_{\protect\kemtkn{CH}}|$

Dies ist schon das Ende von chemsym. Ich hoffe Sie genießen es!