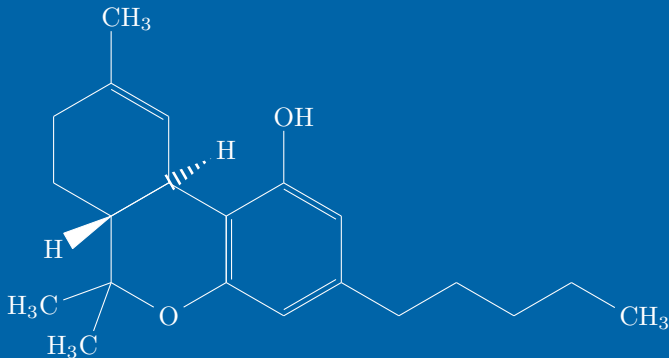


L^AT_EX und die Chemie

Ein Überblick über Pakete für Chemiker



(6a(R),10a(R))-6,6,9-Trimethyl-3-pentyl-6a,7,8,10a-tetrahydro-6H-benzo[c]chromen-1-ol

1. Summenformeln und einfache Strukturformeln
 - mhchem
 - chemformula (aus chemmacros)
2. Strukturformeln
 - chemfig
3. Angabe von Stoffeigenschaften
 - Einheiten (siunitx)
 - NMR-, IR-, ... Daten
 - GHS (Gefahrensymbole, H- und P-Sätze)
4. Spektren und Diagramme darstellen mit gnuplottex
5. sonstiges Nützliches

MHChem

ALLGEMEINES

- seit 2005 entwickelt
- aktuelle Version: 3.11 vom 3. Juni 2011
- beinhaltet:
 - `mhchem` für Formeln und Gleichungen
 - `rsphrases` für R- und S-Sätze (sollten nicht mehr verwendet werden)
- einbinden als:
 - `\usepackage[version=3]{mhchem}`
 - `\usepackage{rsphrases}`

MHCHEM

BEISPIELE I

einfache Formeln:

$\text{\ce{Sb2O3}}$

Sb_2O_3

$\text{\ce{H+}}$

H^+

$\text{\ce{CrO4^{2-}}}$

CrO_4^{2-}

$\text{\ce{[AgCl2]^-}}$

$[\text{AgCl}_2]^-$

Stöchiometrische Faktoren:

$\text{\ce{2H2O}}$

$2 \text{H}_2\text{O}$

$\text{\ce{1/2CO2}}$

$\frac{1}{2} \text{CO}_2$

Isotope:

$\text{\ce{^{227}_{90}Th+}}$

$^{227}_{90}\text{Th}^+$

MHCHEM

BEISPIELE II

Komplexere Formeln:

`\ce{[Cu(NH3)4]SO4.2H2O}`

`\ce{μhyphen$Cl}`

$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$

$\mu\text{-Cl}$

Bindungen:

`\ce{C6H5-CHO}`

`\ce{X=Y\#Z}`

`\ce{A\sbond B\dbond C\tbond D}`

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

`\ce{A\bond{\sim}B\bond{\sim-}C}`

`\ce{A\bond{\sim= }B\bond{\sim-}C\bond{-\sim-}D}`

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

`\ce{A\bond{->}B\bond{<-}C}`

$\text{C}_6\text{H}_5\text{-CHO}$

$\text{X}=\text{Y}\equiv\text{Z}$

$\text{A}-\text{B}=\text{C}\equiv\text{D}$

$\text{A}-\text{B}=\text{C}\equiv\text{D}$

$\text{A}\cdots\text{B}=\text{C}$

$\text{A}\equiv\text{B}\equiv\text{C}\equiv\text{D}$

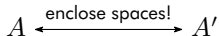
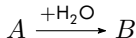
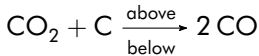
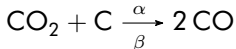
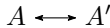
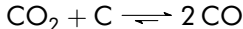
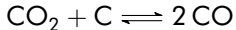
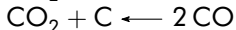
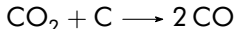
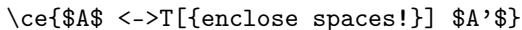
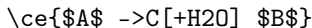
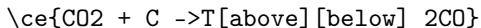
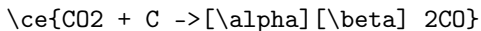
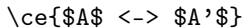
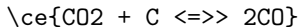
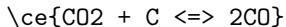
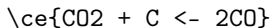
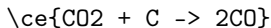
$\text{A}\cdots\text{B}\cdots\text{C}$

$\text{A}\rightarrow\text{B}\leftarrow\text{C}$

MHCHEM

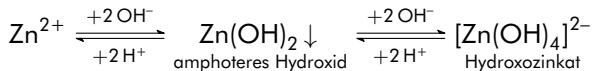
BEISPIELE III

Reaktionsgleichungen:



MHCHEM

BEISPIELE IV

$$\begin{aligned} & \text{\texttt{\textbackslash ce{Zn^2+}}} \\ & \text{\texttt{<=>[\textbackslash ce{+ 20H-}][\textbackslash ce{+ 2H+}]}} \\ & \text{\texttt{\$ \underset{\texttt{\textbackslash text{amphoter es Hydroxid}}}{\textbackslash ce{Zn(OH)2 v}} \$}} \\ & \text{\texttt{<=>C[+20H-][+ 2H+]}} \\ & \text{\texttt{\$ \underset{\texttt{\textbackslash text{Hydroxozikat}}}{\textbackslash cf{[Zn(OH)4]^2-}} \$}} \end{aligned}$$


MHCHEM

WEITERES

- Schriftarten anpassen
- Pfeilzeichnungen anpassen
- Umgebungen für mehrere Reaktionen
- R- und S-Sätze (nicht mehr verwenden!)

CHEMFORMULA

ALLGEMEINES

- Teil des chemmacros-Bundle
- aktuelle Version: 3.6b vom 19. April 2013
- einbinden als:
 - `\usepackage{chemmacros}` oder
 - `\usepackage{chemformula}`
- vermeidet weitestgehend den Mathematikmodus
- Syntax ähnlich dem von mhchem

Allgemeiner Befehl:

`\ch{<Typ1> <Typ2> <Typ3>}`

CHEMFORMULA

BEISPIELE I

Stöchiometriefaktoren:

`\ch{2}` 2

`\ch{.5}` 0.5

`\ch{5,7}` 5.7

`\ch{3/2}` $\frac{3}{2}$

`\ch{1_1/2}` $1\frac{1}{2}$

`\ch{(1/2)}` (1/2) Wie von IUPAC empfohlen

`\ch{2 H2O}` 2 H₂O

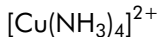
`\ch{1/2 H2O}` $\frac{1}{2}$ H₂O

CHEMFORMULA

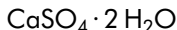
BEISPIELE II

Summenformeln:

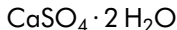
`\ch{[Cu(NH3)4]~2+}`



`\ch{CaSO4. 2 H2O}`



`\ch{CaSO4* 2 H2O}`



`\ch{A_nB_m}`



`\ch{A_{\$n\$}B_{\$m\$}}`



`\ch{\textbf{A}2B_{\color{red}3}}`



Zahlen oder Leerzeichen können nicht im Befehl verwendet werden, weil sie vor dem Befehl selbst interpretiert werden!

CHEMFORMULA

BEISPIELE III

Plus- und Minuszeichen am Ende werden immer als Ladung interpretiert. Stehen sie innerhalb einer Formel, werden sie als Bindung interpretiert.

Ladung und Hochstellungen:

<code>\ch{A+B}</code>	$A \equiv B$
<code>\ch{AB+}</code>	AB^+
<code>\ch{A^x-}</code>	A^{x+}
<code>\ch{RNO2^{-}.}</code>	$RNO_2^{-\bullet}$
<code>\ch{^31H}</code>	3_1H
<code>\ch{^{58}_{26}Fe}</code>	$^{58}_{26}Fe$
<code>\ch{NO^*}</code>	NO^*
<code>\ch{H^{\fplus}}</code>	H^{\oplus}

CHEMFORMULA

BEISPIELE IV

Bindungen:

<code>\ch{H3C-CH3}</code>	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$
<code>\ch{H2C=CH2}</code>	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$
<code>\ch{HC+CH}</code>	$\text{HC}\equiv\text{CH}$
<code>\ch{H3C\bond{single/sb}CH3}</code>	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$
<code>\ch{H2C\bond{double/db}CH2}</code>	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$
<code>\ch{HC\bond{triple/tp}CH}</code>	$\text{HC}\equiv\text{CH}$
<code>\ch{C\bond{dotted/semisingle}C}</code>	$\text{C}\cdots\text{C}$
<code>\ch{C\bond{deloc/semidouble}C}</code>	$\text{C}\cdots\text{C}$
<code>\ch{C\bond{tdeloc/semitriple}C}</code>	$\text{C}\equiv\text{C}$
<code>\ch{C\bond{co>/coordright}C}</code>	$\text{C}\rightarrow\text{C}$
<code>\ch{C\bond{<co/coordleft}C}</code>	$\text{C}\leftarrow\text{C}$

CHEMFORMULA

BEISPIELE V

Wenn chemformula einen Teil nicht interpretieren soll, kann die geschützte Eingabe genutzt werden. Immer wenn der Befehl nicht direkt in `\ch{}` funktioniert, kann die geschützte Eingabe helfen.

Leerzeichen sind darin nicht erlaubt!

```
\ch{ 'Text' }
```

```
\ch{ "Text" }
```

geschützte Eingaben:

```
\ch{ '\ox{2,Ca}' 0}
```

```
\ch{"\chemfig{H3C-CH3-OH}"}
```

$$\begin{array}{c} \text{||} \\ \text{CaO} \end{array}$$

$$\text{H}_3\text{C} \text{ — } \text{CH}_3 \text{ — } \text{OH}$$

CHEMFORMULA

BEISPIELE VI

Mathematik:

$$\begin{array}{ll} \backslash\mathrm{ch}\{\$\sum_{i=0}^n\} \$ \mathrm{C}_x\mathrm{H}_{\{2x-2\}} & \sum_{i=0}^n \mathrm{C}_x\mathrm{H}_{2x-2} \\ \backslash\mathrm{ch}\{\prime\$\sum_{i=0}^n\} \$' \mathrm{C}_x\mathrm{H}_{\{2x-2\}} & \sum_{i=0}^n \mathrm{C}_x\mathrm{H}_{2x-2} \end{array}$$

Text unter Formeln:

$$\begin{array}{ll} \backslash\mathrm{ch}\{!(\mathrm{Oxidant})(\mathrm{H}_2\mathrm{O})\} & \begin{array}{c} \mathrm{H}_2\mathrm{O} \\ \mathrm{Oxidant} \end{array} \\ \backslash\mathrm{ch}\{!(\mathrm{H}_2\mathrm{O})(\mathrm{H}_2\mathrm{O})\} & \begin{array}{c} \mathrm{H}_2\mathrm{O} \\ \mathrm{H}_2\mathrm{O} \end{array} \\ \backslash\mathrm{ch}\{!(\$1\leq x < 5\$)(\mathrm{C}_x\mathrm{H}_{\{2x-1\}})\} & \begin{array}{c} \mathrm{C}_x\mathrm{H}_{2x-1} \\ 1 \leq x < 5 \end{array} \end{array}$$

CHEMFORMULA

BEISPIELE VII

Pfeile:

<code>\ch{ -> }</code>	\longrightarrow	<code>\ch{<-}</code>	\longleftarrow
<code>\ch{-/>}</code>	\nrightarrow	<code>\ch{</-}</code>	\nleftarrow
<code>\ch{<->}</code>	\longleftrightarrow	<code>\ch{<>}</code>	\rightleftharpoons
<code>\ch{==}</code>	$=$	<code>\ch{<=>}</code>	\rightleftharpoons
<code>\ch{<=>>}</code>	\rightleftharpoons	<code>\ch{<<=>}</code>	\rightleftharpoons
<code>\ch{<o>}</code>	\longleftrightarrow		

Pfeilbeschriftungen:

<code>\ch{->[a]}</code>	\xrightarrow{a}	
<code>\ch{->[a][b]}</code>	$\xrightarrow[b]{a}$	
<code>\ch{->[H2O]}</code>	$\xrightarrow{H_2O}$	$\xrightarrow{H_2O}$
<code>\ch{->[\Delta, \sim [H+ \]]}</code>	$\xrightarrow{\Delta, [H^+]}$	

CHEMFORMULA

REAKTIONSUMGEBUNGEN

```
\begin{reaction} <Chemformular-Code> \end{reaction}  
\begin{reactions} <Chemformular-Codes> \end{reactions}
```

Für beide Umgebungen gibt es jeweils noch eine *-Variante, ohne Zähler. Bei der reactions-Umgebung kann mit & eine Ausrichtung der Gleichungen untereinander erfolgen

Zählerformatierung:

```
\renewtagform{reaction}[R ]{[]{} }
```

Liste der Reaktionen:

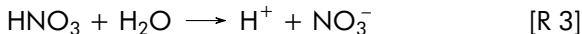
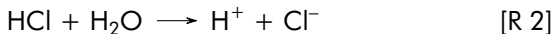
```
\listofreactions
```

CHEMFORMULA

BEISPIELE VIII



`\renewtagform{reaction}[R]{[]{} }`



CHEMFIG

- aktuelle Version 1.0G vom 16. November 2012
- benötigt tikz
 - kann direkt PDF erzeugen
 - tikz berechnet Bounding Box

Syntax

```
\chemfig{<Atom1><Bindungstyp>[<Winkel>,<B-Längenkoeff.>,  
<n1>,<n2>,<tikz code>]<Atom2>}
```

EINFACHE STRUKTUREN

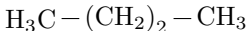
`\chemfig{C-C-C-C}`



`\chemfig{H_3C-CH_2-CH_2-CH_3}`

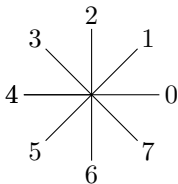


`\chemfig{H_3C-{\{(CH_2)\}_2}-CH_3}`

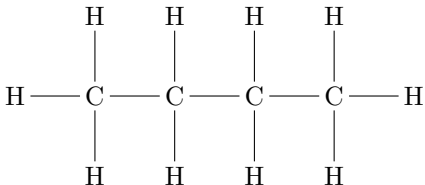


EINFACHE STRUKTUREN

Richtungsangaben



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



EINFACHE STRUKTUREN

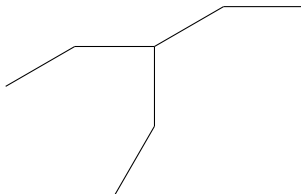
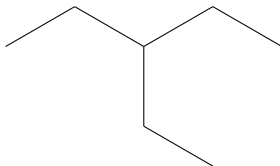
Winkelangaben

`[:Winkel]` absoluter Winkel

`[::Winkel]` relativer Winkel

```
\chemfig{-[:30]-[:-30]%  
(-[:-90]-[:-30])-[:30]-[:-30]}
```

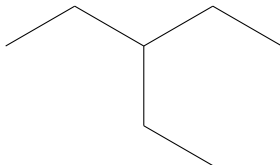
```
\chemfig{-[::30]-[::-30]%  
(-[::-90]-[::-30])-[:30]-[::-30]}
```



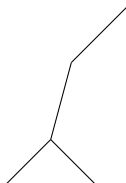
MOLEKÜLE DREHEN

- als erste Angabe im `\chemfig`-Befehl
- nur absolute Winkel
- keine Auswirkungen auf absolute Winkel innerhalb des Moleküls

```
\chemfig{[:45]-[:30]-[: -30]%  
(-[: -90]-[: -30])-[:30]-[: -30]}
```



```
\chemfig{[:45]-[:::30]-[:::-30]%  
(-[:::-90]-[:::-30])-[:::30]-[:::-30]}
```



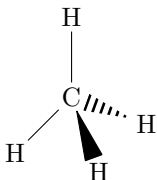
BINDUNGEN

Bdg.	Code	Ergebnis	Bindungstyp
1	<code>\chemfig{A-B}</code>	$A \text{ --- } B$	Einfachbindung
2	<code>\chemfig{A=B}</code>	$A \text{ = } B$	Doppelbindung
3	<code>\chemfig{A\sim B}</code>	$A \text{ \equiv } B$	Dreifachbindung
4	<code>\chemfig{A>B}</code>	$A \text{ \blacktriangleright } B$	gefüllte Cramb. rechts
5	<code>\chemfig{A<B}</code>	$A \text{ \blacktriangleleft } B$	gefüllte Cramb. links
6	<code>\chemfig{A>:B}</code>	$A \text{ ... } B$	gepunktete Cramb. rechts
7	<code>\chemfig{A<:B}</code>	$A \text{ ... } B$	gepunktete Cramb. links
8	<code>\chemfig{A> B}</code>	$A \text{ \triangle } B$	leere Cramb. rechts
9	<code>\chemfig{A< B}</code>	$A \text{ \triangleleft } B$	leere Cramb. links

Bindungslängen werden als zweiter Parameter hinter dem Bindungstyp als Faktor angegeben.

BINDUNGEN

```
\chemfig{C(-[5]H)(-[2]H)(<[: -70]H)(>[: -20]H)}
```



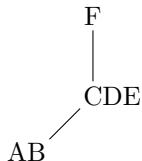
```
\chemfig{A<B-[1]C-[3,1.5]D-[ ,10]E}
```



START- UND ENDATOME

Bei mehreren Atomen als dritter Parameter einer Bindung das Start- und als vierter Parameter das Endatom angegeben werden.

```
\chemfig{AB-[1]CDE-[2]F}
```



```
\chemfig{AB-[1,,2,3]CDE-[2,,2]F}
```



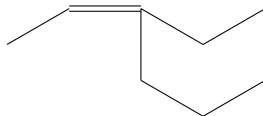
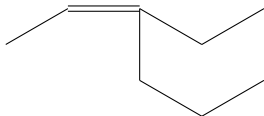
VERBINDEN ENTFERNTER ATOME

Atomen können Anker gegeben werden, womit Bindungen zwischen entfernten Atomen möglich sind.

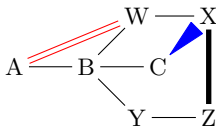
`<Atom>?[<Anker>,<Bindung>,<tikz>]`

```
\chemfig{-[:30]=(-[:90]-[:30]-[:30))-[:30]-[:30]}
```

```
\chemfig{-[:30]=(-[:90]-[:30]-[:30]?)-[:30]-[:30]?}
```



```
\chemfig{A?[a]-B(-[1]W?[a,2,red]-X?[b])(-[7]Y-%  
Z?[b,1,{line width=2pt}))-C?[b,{>},blue]}
```

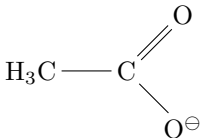


IONEN

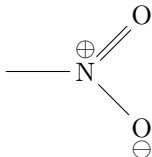
`\chemfig{O^{2-}}`



`\chemfig{H_3C-C(=[1]O)-[7]O^{\ominus}}`



`\chemfig{-\chemabove{N}{\oplus}(=[1]O)-[7]\chembelow{O}{\ominus}}`



LEWIS-FORMELN

`\lewis{<n1><n2>...<ni>, <Atom>}`

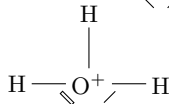
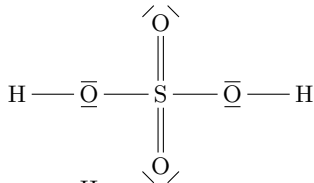
`<ni>` bestehen aus einer Zahl, die die Richtung um das Atom angibt (0 bis 7) und ggf. `.`, `:` oder `|`

```
\chemfig{H-\lewis{26,0}-S(=[2]%
\lewis{13,0})=[6]\lewis{57,0})%
-\lewis{26,0}-H}
```

```
\chemfig{H-\lewis{5|7,0^+}%
(-[2]H)-H}
```

```
\lewis{4.,NO_2}
```

$\bullet\text{NO}_2$



```
\lewis{0:2:4:6:,Cl^-}
```

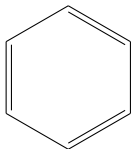


RINGE

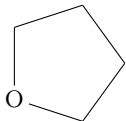
Allgemeine Syntax:

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

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



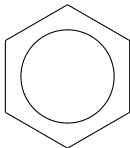
`\chemfig{O*5(-----)}`



Aromatische Syntax:

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

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



`\chemfig{\chembelow{N}{H}**5(-----)}`

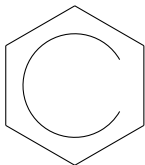


RINGE

Erweiterte aromatische Syntax:

```
<Atom>**[<Startwinkel>,<Endwinkel>,<tikz>] <n>(<Code>)
```

```
\chemfig{**[30,330]6(-----)}
```

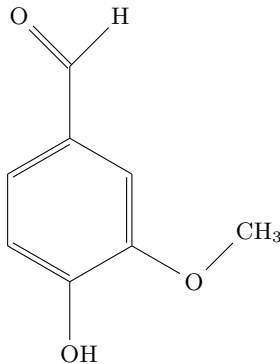
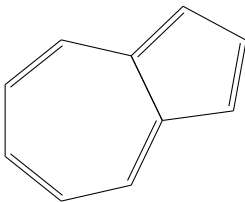


```
\chemfig{**[0,270,dash pattern=on 2pt off 2pt]4(----)}
```



KONDENSIERTE RINGE UND SUBSTITUIERTE RINGE

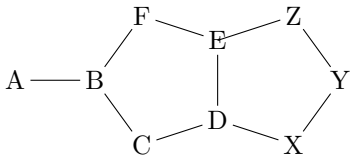
`\chemfig{*7(==*5(-==--)-==-)}`



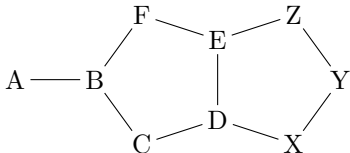
`\chemfig{*6(=(-OH)-(-O-[1]CH_3)-(-([3]O)-[1]H)=)}`

BEKANNTE SCHWIERIGKEITEN

```
\chemfig{A-B*5(-C-D*5(-X-Y-Z-)-E-F-)}
```

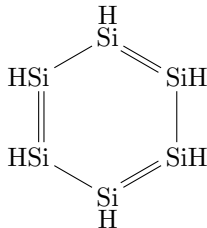
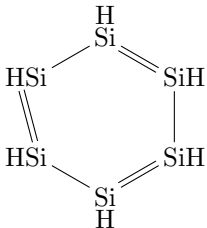


```
\chemfig{A-B*5(-C-D*5(-X-Y-Z?)-E?-F-)}
```



BEKANNTE SCHWIERIGKEITEN

```
\chemfig{HSi*6(-\chembelow{Si}{H}=SiH-SiH=%  
\chemabove{Si}{H}-HSi=)}
```

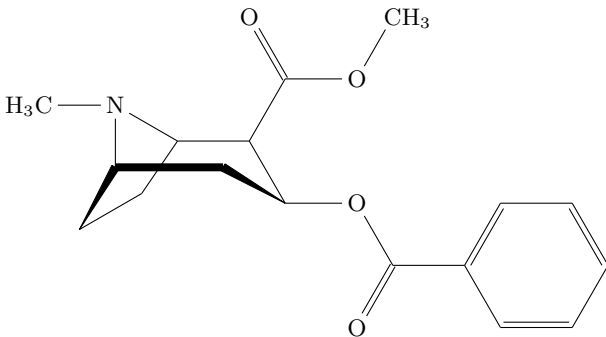


```
\chemfig{HSi*6(-\chembelow{Si}{H}=SiH-SiH=%  
\chemabove{Si}{H}-HSi=[, ,2])}
```

NAMEN

`\chemname{<Code>}{<Name>}`

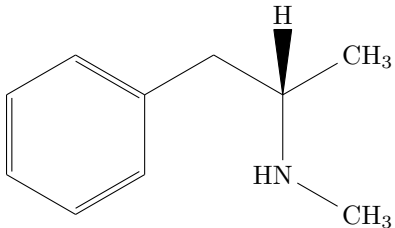
```
\chemname{\chemfig{H_3C-N?[a]-[: -30]?[b]-(-[: 60]%
(=[: 60]O)-[: -60]O-[: 60]CH_3)-[: -60](<[: -150]-%
[: 30,1.5,,,line width=3pt)?[a]>[: 60]-[: 150]?[b])%
-[: 60]O-[: -60](=[: -60]O)-[: 60]*6(---=)}}{Kokain}
```



Kokain

(S)-N-METHAMPHETAMIN

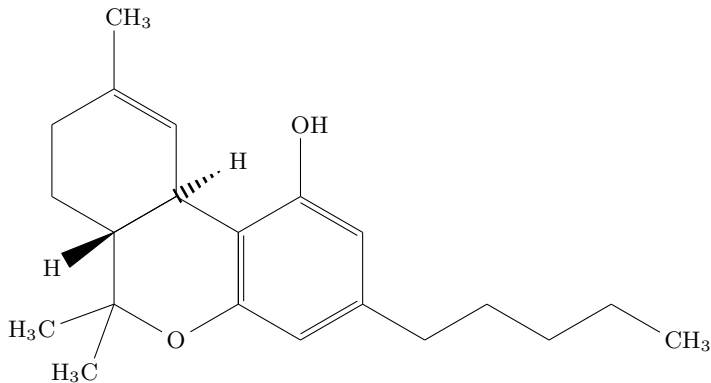
```
\chemfig{*6(==(--[: -30](<[2]H)(-[6,,,2]HN%
-[: -30]CH_3)-[:30]CH_3)=--=)}
```



Crystal Meth

TETRAHYDROCANNABINOL

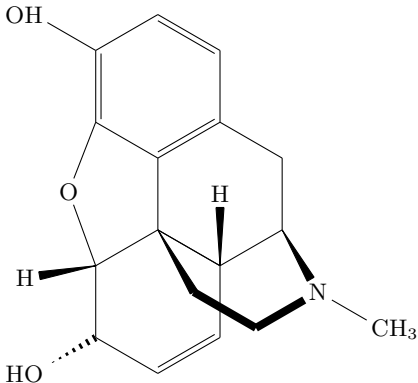
```
\chemfig{*6(-(<[: -120]H)(*6(-(-[: -20]H_3C)%
(-[: -70]H_3C)-O-(*6(=((-[:30]-[: -30]-[:30]-%
[: -30]CH_3)-=(-OH)-))--(<[: -120]H)-))--=(-CH_3)--)}
```



THC

(5R,6S,9R,13S,14R)-4,5-Epoxy-N-methylmorphinan-7-en-3,6-diol

```
\setcrambond{3pt}{-}{-}
\chemfig{*6(?[a]-(*6(-(<[:30]-[:30,,,%
{line width=3pt})-[:60,,,{line width=3pt})%
N?[b](-[::-60]CH_3))(*6(-(<[::-20]H)-[::-100,1.1]%
O?[a])-(>:HO)-==))-(<[2]H)-?[b,{>}]--))=--(-OH=)}
```



Morphin

SIUNITX

ALLGEMEINES

- aktuelle Version: 2.5q vom 11. März 2013
- Darstellung von Zahlen und Einheiten gemäß SI-Vorgabe
- einbinden als:
 - `\usepackage{siunitx}`

BEFEHLE

Nummern:

<code>\num{123,456}</code>	123,456
<code>\num{2+-i}</code>	$2 \pm i$
<code>\num{.5e3}</code>	$0,5 \cdot 10^3$
<code>\num{-20,9}</code>	-20,9
<code>\numlist{10;20;30;40;50}</code>	10, 20, 30, 40 und 50
<code>\numrange{20}{50}</code>	20 bis 50

Winkel:

<code>\ang{10}</code>	10°
<code>\ang{12,3}</code>	$12,3^\circ$
<code>\ang{1;2;3}</code>	$1^\circ 2' 3''$
<code>\ang{;;1}</code>	$1''$
<code>\ang{+10;;}</code>	10°
<code>\ang{-0;1;}</code>	$-0^\circ 1'$

BEFEHLE

Einheiten:

<code>\si{kg.m/s^2}</code>	kg m/s^2
<code>\si{g_{polymer}~mol_{Kat.}.s^{-1}}</code>	$\text{g}_{\text{polymer}} \text{mol}_{\text{Kat.}} \text{s}^{-1}$
<code>\si{\kilo\gram\metre\per\square\second}</code>	kg m s^{-2}

Zahlen mit Einheit

<code>\SI{1,23}{\candela}</code>	1,23 cd
<code>\SIlist{10;40;50}{\metre}</code>	10 m, 40 m und 50 m
<code>\SIrange{20}{50}{\kilo\metre}</code>	20 km bis 50 km

BEFEHLE

Zusatz:

<code>\si{\second\squared}</code>	s^2
<code>\si{\square\second}</code>	s^2
<code>\si{\second\cubed}</code>	s^3
<code>\si{\cubic\second}</code>	s^3
<code>\si{\second\tothe{5}}</code>	s^5
<code>\si{\raiseto{4,5}\second}</code>	$s^{4,5}$
<code>\si{\metre\per\second}</code>	$m s^{-1}$
<code>\si{\gram\of{Metall}}</code>	g_{Metall}

Kürzen und Hervorheben:

<code>\si{\cancel{kilogram}\metre\per\cancel{kilogram}}</code>	kg m kg^{-1} s^{-1}
<code>\si{\highlight{red}\kilo\gram\metre\per\second}</code>	kg $m s^{-1}$

SI-EINHEITEN

Einheit	Befehl	Symbol
Ampere	<code>\ampere</code>	A
Candela	<code>\candela</code>	cd
Kelvin	<code>\kelvin</code>	K
Kilogramm	<code>\kilogram</code>	kg
Meter	<code>\metre</code>	m
Sekunde	<code>\second</code>	s
Mol	<code>\mole</code>	mol
Prozent	<code>\percent</code>	%

WEITERE EINHEITEN

Unit	Macro	Symbol	Unit	Macro	Symbol
becquerel	<code>\becquerel</code>	Bq	newton	<code>\newton</code>	N
degree Celsius	<code>\degreeCelsius</code>	°C	ohm	<code>\ohm</code>	Ω
coulomb	<code>\coulomb</code>	C	pascal	<code>\pascal</code>	Pa
farad	<code>\farad</code>	F	radian	<code>\radian</code>	rad
gray	<code>\gray</code>	Gy	siemens	<code>\siemens</code>	S
hertz	<code>\hertz</code>	Hz	sievert	<code>\sievert</code>	Sv
henry	<code>\henry</code>	H	steradian	<code>\steradian</code>	sr
joule	<code>\joule</code>	J	tesla	<code>\tesla</code>	T
katal	<code>\katal</code>	kat	volt	<code>\volt</code>	V
lumen	<code>\lumen</code>	lm	watt	<code>\watt</code>	W
lux	<code>\lux</code>	lx	weber	<code>\weber</code>	Wb

WEITERE EINHEITEN

Unit	Macro	Symbol
day	<code>\day</code>	d
degree	<code>\degree</code>	°
hectare	<code>\hectare</code>	ha
hour	<code>\hour</code>	h
litre	<code>\litre</code>	l
	<code>\liter</code>	L
minute (plane angle)	<code>\arcminute</code>	'
minute (time)	<code>\minute</code>	min
second (plane angle)	<code>\arcsecond</code>	"
tonne	<code>\tonne</code>	t

WEITERE EINHEITEN

Unit	Macro	Symbol
astronomical unit	<code>\astronomicalunit</code>	ua
atomic mass unit	<code>\atomicmassunit</code>	u
bohr	<code>\bohr</code>	a_0
speed of light	<code>\clight</code>	c_0
dalton	<code>\dalton</code>	Da
electron mass	<code>\electronmass</code>	m_e
electronvolt	<code>\electronvolt</code>	eV
elementary charge	<code>\elementarycharge</code>	e
hartree	<code>\hartree</code>	E_h
reduced Planck constant	<code>\planckbar</code>	\hbar

WEITERE EINHEITEN

Unit	Macro	Symbol
ångström	<code>\angstrom</code>	Å
bar	<code>\bar</code>	bar
barn	<code>\barn</code>	b
bel	<code>\bel</code>	B
decibel	<code>\decibel</code>	dB
knot	<code>\knot</code>	kn
millimetre of mercury	<code>\mmHg</code>	mmHg
nautical mile	<code>\nauticalmile</code>	M
neper	<code>\neper</code>	Np

SI-VORSILBEN

Prefix	Macro	Symbol	Power	Prefix	Macro	Symbol	Power
yocto	\yocto	y	-24	deca	\deca	da	1
zepto	\zepto	z	-21	hecto	\hecto	h	2
atto	\atto	a	-18	kilo	\kilo	k	3
femto	\femto	f	-15	mega	\mega	M	6
pico	\pico	p	-12	giga	\giga	G	9
nano	\nano	n	-9	tera	\tera	T	12
micro	\micro	μ	-6	peta	\peta	P	15
milli	\milli	m	-3	exa	\exa	E	18
centi	\centi	c	-2	zetta	\zetta	Z	21
deci	\deci	d	-1	yotta	\yotta	Y	24

ANGABE VON MESSDATEN

ALLGEMEINES

- aus dem Paket `chemmacros`
- unterstützt bei Formatierung
- stellt nützliche Makros und Umgebungen bereit

NMR

`\NMR`

^1H -NMR: δ

`\NMR*`

^1H -NMR

`\NMR*{13,C}`

^{13}C -NMR

`\NMR*(400)`

^1H -NMR (400 MHz)

`\NMR*[CDCl3]`

^1H -NMR (CDCl_3)

Eigene Abkürzungen:

`\DeclareChemNMR\CNMR{13,C}`

`\CNMR`

^{13}C -NMR: δ

`\CNMR*`

^{13}C -NMR

`\CNMR*(400)`

^{13}C -NMR (400 MHz)

`\CNMR*[CDCl3]`

^{13}C -NMR (CDCl_3)

MESSDATEN-UMGEBUNG

```
\begin{experimental}[Optionen]
  \data{Typ}[Spezifikation]
  \data*{Typ}[Spezifikation]
  \NMR{Masse, Element [Koppelder Kern]}(Frequenz,%
  Einheit)[Lösungsmittel]
  \J[Einheit]{Liste der Kopplungskonstanten}
  \#{Anzahl der Kerne}
  \pos{Nummer des Kerns}
  \val{Zahlenwert}
  \val{Zahlenwert -- Zahlenwert}
\end{experimental}
```

MESSDATEN-UMGEBUNG

BEISPIEL

```
\begin{experimental}
  \data*{Ausbeute} \SI{17}{\milli\gram} schwarzes Öl
  (\SI{0.04}{\milli\mole}, \SI{13}{\percent}).

  \NMR(600)[CDCl3] \val{2,4} (s, \#{3}, \pos{3}),
  \val{1,3} (t, \#{1}, \pos{1}), \val{0,8} (m, \#{3},%
  \pos{2}).

  \data{IR}[KBr] \val{3443} (w), \val{3010 -- 2800} (s),%
  \val{1700} (s).

  \data*{Quantenausbeute} $\Phi = \val{0,74+-0,1}$.
\end{experimental}
```

MESSDATEN-UMGEBUNG

BEISPIEL I

Ausbeute 17 mg schwarzes Öl (0,04 mmol, 13 %).

$^1\text{H-NMR}$ (600 MHz, CDCl_3): δ 2,4 (s, 3 H, H-3), 1,3 (t, 1 H, H-1), 0,8 (m, 3 H, H-2).

IR (KBr) 3443 (w), 3010 bis 2800 (s), 1700 (s).

Quantenausbeute $\Phi = 0,74(10)$.

MESSDATEN-UMGEBUNG

OPTIONEN

unit= Einheit für das NMR, Standard MHz

format= Zur Formatierung, bsp: `\bfseries`

pos-number= side oder sub

parse= true oder false, wird das Lösungsmittel von chemmacros geparkt oder nicht

delta= wird nach δ eingefügt

use-equal= true oder false, Gleichheitszeichen nach `\NMR` oder `\data` einsetzen

MESSDATEN-UMGEBUNG

BEISPIEL II

```
delta=(ppm), pos-number=sub, use-equal=true,  
format=\bfseries
```

Ausbeute: 17 mg schwarzes Öl (0,04 mmol, 13 %).

^1H -NMR (600 MHz, CDCl_3): δ (ppm) = 2,4 (s, 3 H, H_3), 1,3 (t, 1 H, H_1), 0,8 (m, 3 H, H_2).

IR (KBr) = 3443 (w), 3010 bis 2800 (s), 1700 (s).

Quantenausbeute: $\Phi = 0,74(10)$.

MESSDATEN-UMGEBUNG

BEISPIEL III

`delta=(ppm), use-equal=true, format=\color{red}\itshape`

Ausbeute: 17 mg schwarzes Öl (0,04 mmol, 13 %).

$^1\text{H-NMR}$ (600 MHz, CDCl_3): δ (ppm) = 2,4 (s, 3 H, H-3), 1,3 (t, 1 H, H-1), 0,8 (m, 3 H, H-2).

IR (KBr) = 3443 (w), 3010 bis 2800 (s), 1700 (s).

Quantenausbeute: $\Phi = 0,74(10)$.

GLOBALLY HARMONIZED SYSTEM

ALLGEMEINES

- Paket `ghsystem` aus dem Bundle `chemmacros`
- beinhaltet alle H-, EUH- und P-Sätze auf Englisch, Deutsch und Italienisch
- stellt Piktogramme zur Verfügung

Befehle:

```
\ghs[optionen]{Typ}{Nummer}  
\ghspic[optionen]{name}
```

GHS

BEISPIELE

`\ghs{h}{201}`

H201: Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.

`\ghs{euh}{201A}`

EUH201A: Achtung! Enthält Blei.

`\ghs{p}{235}`

P235: Kühl halten.

`\ghs{p}{301+330+331}`

P301 + P330 + P331: BEI VERSCHLUCKEN: Mund ausspülen. KEIN Erbrechen herbeiführen.

GHS

PLATZHALTER

Es gibt vier Arten von Platzhaltern, die in den Optionen angegeben und somit gefüllt werden können:

- Expositionsweg `exposure=`
- Effekt `effect=`
- Organe `organs=`
- sensibilisierende Stoffe `substance=`

GHS

PLATZHALTER

```
\ghs[fill-in]{euh}{208}
```

EUH208: Enthält *<Name des sensibilisierenden Stoffes>*. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.

```
\ghs[substance=Freiberger ABC]{euh}{208}
```

EUH208: Enthält Freiberger ABC. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.

GHS

LÜCKEN

Es gibt verschiedene Lücken, die in den Optionen angegeben und somit gefüllt werden können:

- unsichtbare Lücken, die einem Doppelpunkt folgen `text=`
- Lücken, die durch ... angezeigt werden `dots=`
- fehlende Temperaturen `C-temperature=` und `F-temperature=`
- fehlende Massen `kg-mass=` und `lbs-mass=`

GHS

LÜCKEN

`\ghs{p}{301}`

P301: BEI VERSCHLUCKEN:

`\ghs[text=Arzt hinzuziehen.]{p}{301}`

P301: BEI VERSCHLUCKEN: Arzt hinzuziehen

`\ghs{p}{401}`

P401: ... aufbewahren.

`\ghs[dots=Unter Schutzgas]{p}{401}`

P401: Unter Schutzgas aufbewahren.

GHS

LÜCKEN

`\ghs{p}{413}`

P413: Schüttgut in Mengen von mehr als kg bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.

`\ghs[kg-mass=5.0, lbs-mass=11,%
C-temperature=50, F-temperature=122]{p}{413}`

P413: Schüttgut in Mengen von mehr als 5,0 kg bei Temperaturen von nicht mehr als 50 °C aufbewahren.

GHS

GEFAHRENSYMBOLE

```
\ghspic{skull}
```



```
\ghspic[scale=2]{skull}
```



```
\ghspic[includegraphics={angle=90}]{skull}
```



GHS

GEFAHRENSYMBOLE



skull



explos



flame



flame-O



bottle



acid



exclam



health



aqpol

GNU PLOTTEX

ALLGEMEINES

- aktuelle Version: 0.5 vom 3. Juni 2013
- benutzt gnuplot um Diagramme zu zeichnen
- gnuplot: openSource komandozeilengesteuerter Funktionsplotter zur Darstellung wissenschaftlicher Daten
- benötigt `-shell-escape=enable` beim kompilieren
- einbinden als:
 - `\usepackage{gnuplottex}`
- Alternative wäre pgfplots

BEFEHLE

Direkt alle Befehle im \LaTeX -Dokument:

```
\begin{gnuplot}[shell/noshell,miktex, terminal=pdf/epslatex]  
  <Gnuplot-Code>  
\end{gnuplot}
```

Skripte einbinden:

```
\gnuplotloadfile[terminal=pdf]{example.gnuplot}
```

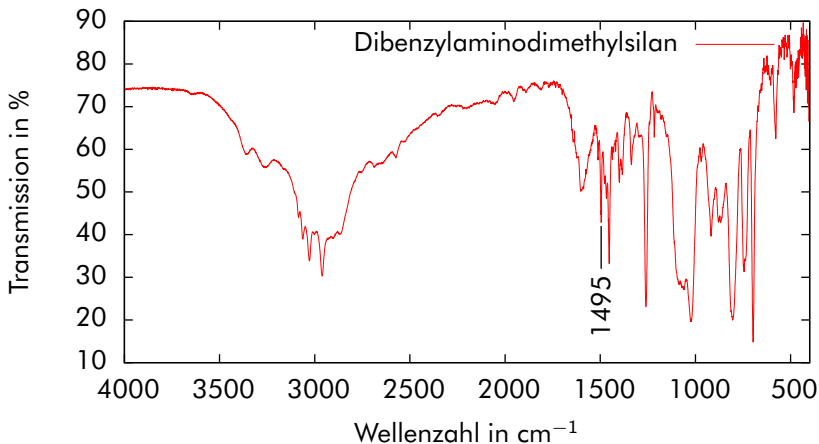
GNU PLOT – DIE WICHTIGSTEN BEFEHLE

<code>plot</code>	Ausgabe des Diagramms
<code>fit</code>	fitten von Messdaten über Funktionen
<code>set xrange</code>	dargestellten Definitionsbereich definieren
<code>set yrange</code>	dargestellten Wertebereich festlegen
<code>set xlabel</code>	Beschriftung der X-Achse
<code>set ylabel</code>	Beschriftung der Y-Achse
<code>set grid</code>	Raster anzeigen
<code>set key</code>	Legende erstellen
<code>set label</code>	Text im Diagramm erzeugen
<code>set arrow</code>	Pfeile und Linien zeichnen

BEISPIEL

```
\begin{gnuplot}[terminal=epslatex,%  
terminaloptions=solid color]  
  set size 0.9,0.7  
  set xrange [4000:400]  
  set ylabel "Transmission in \%"  
  set xlabel "Wellenzahl in \si{\per\centi\metre}"  
  set arrow from 1495,42 to 1495,32 nohead  
  set label "\rotatebox{90}{1495}" at 1550,22  
  plot "MH-01b.csv" with lines title %  
    "Dibenzylaminodimethylsilan"  
\end{gnuplot}
```

BEISPIEL



AUS CHEMMACROS

Vordefinierte Befehle:

<code>\Hp1</code>	H^+	<code>\Hyd</code>	OH^-
<code>\HtO</code>	H_3O^+	<code>\water</code>	H_2O
<code>\el</code>	e^-	<code>\prt</code>	p^+
<code>\ntr</code>	n^0	<code>\Nu</code>	Nu^-
<code>\El</code>	E^+	<code>\ba</code>	ba^-
<code>\fplus</code>	\oplus	<code>\fminus</code>	\ominus
<code>\transitionstatesymbol</code>	\ddagger	<code>\standardstate</code>	\oplus
<code>\Chemalpha</code>	α	<code>\Chembeta</code>	β
<code>\Chemgamma</code>	γ	<code>\Chemdelta</code>	δ
<code>\Chemepsilon</code>	ϵ	<code>\Chemeta</code>	η
<code>\Chemkappa</code>	κ	<code>\Chemmu</code>	μ
<code>\Chemnu</code>	ν	<code>\Chemrho</code>	ρ
<code>\Chempi</code>	π	<code>\Chemsigma</code>	σ
<code>\Chemomega</code>	ω	<code>\ChemDelta</code>	Δ

AUS CHEMMACROS

IUPAC-Namen können sehr lang werden. Daher stellt Chemmacros den Befehl `\iupac{}` zur Verfügung. Dabei zählt `\|` als potenzielle Trennstelle, `\-` als Bindestrich und `\^` kann zum hochstellen genutzt werden. Weitere Befehle nur innerhalb von `\iupac{}` sind:

griechische Buchstaben: (benötigt Paket `upgreek`)

<code>\a</code>	α	<code>\b</code>	β
<code>\g</code>	γ	<code>\d</code>	δ
<code>\k</code>	κ	<code>\m</code>	μ
<code>\n</code>	η	<code>\w</code>	ω

Heteroatome:


<code>\H</code>	H	<code>\O</code>	O
<code>\N</code>	N	<code>\Sf</code>	S
<code>\P</code>	P		

AUS CHEMMACROS

Cahn-Ingold-Prelog:

<code>\R</code>	(R)	<code>\S</code>	(S)
<code>\cip{R,S}</code>	(R,S)		

Absolute Konfiguration:

<code>\Rconf</code>		<code>\Sconf</code>	
<code>\Rconf []</code>		<code>\Sconf []</code>	

Fischer:

<code>\L</code>	L	<code>\D</code>	D
-----------------	-----	-----------------	-----

cis/trans...:

<code>\cis</code>	cis	<code>\trans</code>	$trans$
<code>\Z</code>	(Z)	<code>\E</code>	(E)
<code>\syn</code>	syn	<code>\anti</code>	$anti$
<code>\tert</code>	$tert$		

AUS CHEMMACROS

ortho, meta, para:

<code>\ortho</code>	<i>o</i>	<code>\meta</code>	<i>m</i>
<code>\para</code>	<i>p</i>		

Koordinations-Chemie:

<code>\bridge{3}</code>	μ_3 -	<code>\hapto{5}</code>	η^5 -
-------------------------	-----------	------------------------	------------

Weiterhin gibt es auch außerhalb des `\iupac{}`-Befehls:

Lateinische Ausdrücke:

<code>\insitu</code>	<i>in situ</i>	<code>\abinitio</code>	<i>ab initio</i>
<code>\invacuo</code>	<i>in vacuo</i>		

AUS CHEMMACROS

Neue Einheiten für Slunitx:

<code>\si{\atmosphere}</code>	atm	<code>\si{\atm}</code>	atm
<code>\si{\calory}</code>	cal	<code>\si{\cal}</code>	cal
<code>\si{\cmc}</code>	cm ³	<code>\si{\molar}</code>	mol dm ⁻³
<code>\si{\moLar}</code>	mol L ⁻¹	<code>\si{\Molar}</code>	M
<code>\si{\MolMass}</code>	g mol ⁻¹	<code>\si{\normal}</code>	N
<code>\si{\torr}</code>	torr		

Säuren und Basen:

<code>\pH</code>	pH	<code>\pOH</code>	pOH
<code>\Ka</code>	K_S	<code>\Kb</code>	K_B
<code>\Kw</code>	K_W	<code>\p{\Kw}</code>	pK_W
<code>\pKa[1]</code>	pK_{S1}	<code>\pKb[1]</code>	pK_{B1}

AUS CHEMMACROS

Ionenladungen:

<code>Na\pch</code>	Na^+	<code>Ca\pch[2]</code>	Ca^{2+}
<code>F\mch</code>	F^-	<code>S\mch[2]</code>	S^{2-}

Formalladungen:

<code>\fpch</code>	\oplus	<code>\fpch[4]</code>	$4\oplus$
<code>\fmch</code>	\ominus	<code>\fmch[3]</code>	$3\ominus$

Oxidationszahlen:

<code>\ox{+1, Na}</code>	$\overset{+1}{\text{Na}}$	<code>\ox{2, Ca}</code>	$\overset{+2}{\text{Ca}}$
<code>\ox{-2, S}</code>	$\overset{-2}{\text{S}}$	<code>\ox{-1, F}</code>	$\overset{-1}{\text{F}}$
<code>\ox{-1, \ch{O2~2-}}</code>	$\overset{-1}{\text{O}_2^{2-}}$	<code>\ch{"\ox{-1, O}" {}2~2-}</code>	$\overset{-1}{\text{O}_2^{2-}}$

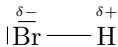
AUS CHEMMACROS

Partialladungen und Ähnliches:

<code>\delp</code>	$\delta+$	<code>\delm</code>	$\delta-$
<code>\fdelp</code>	$\delta\oplus$	<code>\fdelm</code>	$\delta\ominus$
<code>\scrp</code>	$+$	<code>\scrm</code>	$-$
<code>\fscrp</code>	\oplus	<code>\fscrm</code>	\ominus
<code>\fsscrp</code>	\oplus	<code>\fsscrm</code>	\ominus

Gutes Zusammenspiel mit chemfig:

```
\chemfig{\chemabove[3pt]{\lewis{246,Br}}{\fdelm}-%
\chemabove[3pt]{H}{\fdelp}}
```



AUS CHEMMACROS

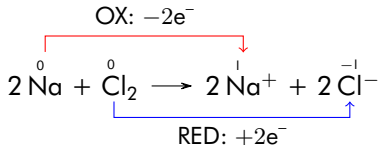
Reaktionsmechanismen:

<code>\mech</code>	S_N
<code>\mech[1]</code>	S_N1
<code>\mech[2]</code>	S_N2
<code>\mech[se]</code>	S_E
<code>\mech[1e]</code>	S_E1
<code>\mech[2e]</code>	S_E2
<code>\mech[ar]</code>	Ar- S_E
<code>\mech[e]</code>	E
<code>\mech[e1]</code>	E1
<code>\mech[e2]</code>	E2
<code>\mech[cb]</code>	E1 _{cb}

AUS CHEMMACROS

REDOXREAKTIONEN

```
\ch{ 2 "\OX{o1,\ox{0,Na}}" + "\OX{r1,\ox{0,Cl}}"%
{}2 -> 2 "\OX{o2,\ox{+1,Na}}"%
\pch{} + 2 "\OX{r2,\ox{-1,Cl}}"\mch }
\redox(o1,o2)[draw=red,->]{\small OX: $- 2\el$}
\redox(r1,r2)[draw=blue,->][-1]{\small RED: $+ 2\el$}
```



AUS CHEMMACROS

THERMODYNAMIK

Thermodynamische Größen:

`\Enthalpy{123}`

$$\Delta H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$$

`\Enthalpy(R){123}`

$$\Delta_{\text{R}} H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$$

`\Enthalpy[unit=\kilo\joule]{123}`

$$\Delta H^\ominus = 123 \text{ kJ}$$

`\Entropy{123}`

$$S^\ominus = 123 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

`\Entropy[delta=\Delta, exponent=]{123}`

$$\Delta S = 123 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

`\Gibbs{123}`

$$\Delta G^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$$

`\Gibbs[delta=false]{123}`

$$G^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Zustandsgrößen:

`\State{A}`

$$\Delta A^\ominus$$

`\State{G}{f}`

$$\Delta_{\text{f}} G^\ominus$$

`\State[subscript-left=false]{E}{\ch{Na}}`

$$\Delta E_{\text{Na}}^\ominus$$

`\State[exponent=\SI{1000}]{\celsius}{H}`

$$\Delta H^{1000^\circ \text{C}}$$

BIB \LaTeX -STIL

BIBLATEX-CHEM

- aktuelle Version: 1.1k vom 11. Februar 2013
- beinhaltet den Zitierstil verschiedener Zeitschriften, z.B.
 - Angewandte Chemie
 - Biochemistry
 - Chemical Communications
 - Chemistry – A European Journal
 - Dalton Transactions
 - JACS
 - Organic & Biomolecular Chemistry