



Wenn bei einem technischen Bericht oder einer Studienarbeit Chemie ins Spiel kommt, stoßen klassische Textverarbeitungsprogramme an ihre Grenzen. Dagegen können Sie mit LaTeX chemische Notationen mit einfachen Kommandos direkt im Dokument erzeugen.

Von Zacharias Steinmetz

Bei der Verbrennung von Erdgas entsteht  $\text{CO}_2$ . Solch ein Satz lässt sich ohne Weiteres in jedes gängige Textverarbeitungsprogramm tippen, enthält er doch mit „ $\text{CO}_2$ “ bloß eine einfache chemische Summenformel. Möchte man hingegen Kohlenstoffdioxid als Strukturformel darstellen, die komplette Verbrennung in einer chemischen Reaktionsgleichung abbilden oder gar mehrstufige Reaktionsmechanismen zu Papier bringen, ist Spezialsoftware gefragt.

Mit dem Makropaket LaTeX und dem zugrunde liegenden Satzsystem TeX lassen sich Texte mitsamt Formeln komplett aus einem Guss im LaTeX-Editor oder sogar in der gewohnten Office-Suite erstellen. Dagegen eignen sich eigenständige Formeleditoren für Android, die wir kürzlich getestet haben, vor allem für schnelle Skizzen, verweigern aber vielfach die Zusammenarbeit mit Microsoft Office, LibreOffice & Co. [1].

Kommerzielle Werkzeuge wie ACD/ChemSketch, ChemDraw oder ISIS Draw sind da leistungsfähiger, doch auch mit diesen gerät es leicht zum Geduldsspiel, die Ergebnisse mit geeigneten Darstellungs- und Exportparametern an die Formatvorlagen des Textdokuments anzupassen. Demgegenüber stellt die Einarbeitung in LaTeX kaum einen Mehraufwand dar, erschließt Ihnen aber weit mehr Möglichkeiten.

### Im Labor

Wie man mit LaTeX erste eigene Dokumente erzeugt, haben wir schon detailliert beschrieben [2]. Ungeduldige laden sich über die Website des LaTeX-Projekts (für alle erwähnten Webadressen: siehe [ct.de/ytk1](http://ct.de/ytk1)) eine TeX-Distribution ihrer Wahl für Windows, macOS oder Linux herunter. Darin wird stets auch LaTeX unterstützt.

# Chemiebaukasten

## Chemische Formeln und Reaktionsgleichungen in LaTeX

Bild: Rudolf A. Blaha

Zum Schreiben bewährt sich ein auf LaTeX spezialisierter Editor wie TeXstudio, indem er dem Benutzer viel Tipparbeit abnimmt und zudem auf Knopfdruck das fertig layoutete Arbeitsergebnis anzeigt. Einen Zwischenweg beschreitet das LibreOffice-Plug-in TexMaths. Dieses erzeugt, eine lokale LaTeX-Installation vorausgesetzt, aus Formelbefehlen PNG- oder SVG-Grafiken und bettet sie direkt in ein Writer-Dokument ein. Um das zu nutzen, müssen Sie außer den wenigen hier vorgestellten Kommandos nicht einmal den allgemeinen LaTeX-Wortschatz einstudieren.

## LaTeX pur

Die folgenden Zeilen, die man am bequemsten in einem LaTeX-Editor eingibt, kodieren ein erstes Vorschau-dokument:

```
\documentclass{scrartcl}
\usepackage[utf8]{inputenc}
\usepackage[T1]{fontenc}
\usepackage[ngerman]{babel}
\begin{document}
Bei der Verbrennung von Erdgas
entsteht CO2.
\end{document}
```

Im Editor erscheint dabei nur dieser Quellcode, den Sie per Kopfdruck zu einem DVI-Dokument kompilieren können. Darin findet sich das von TeX erzeugte Layout in einem geräteunabhängigen, maschinenlesbaren Format. Den Inhalt bekommen Sie automatisch als fertiges Layout auf dem Bildschirm angezeigt und typischerweise als PDF-Datei gespeichert.

Um LaTeX den Umgang mit chemischen Elementen beizubringen, verwenden wir in diesem Beitrag zusätzlich die Pakete chemmacros und chemfig jeweils in ihrer aktuellen Version, die allerdings noch nicht ihren Weg in alle TeX-Distributionen gefunden haben und womöglich manuell hinzugefügt werden müssen. In diesem Fall müssen Sie die Zip-Archive herunterladen, in gleichnamigen Verzeichnisse entpacken und diese dann in das Erweiterungsverzeichnis Ihrer TeX-Distribution kopieren. Für TeX Live und Windows ist das normalerweise texlive/texmf-local. Das für Windows empfohlene MikTeX installiert fehlende Pakete automatisch nach, wenn sie in der Präambel eines Dokuments erwähnt werden.

Während chemmacros hilft, chemische Summenformeln und Reaktionsgleichungen aufzustellen, lassen sich mit chemfig zweidimensionale Strukturformeln und Darstellungen von Reaktionsmechanismen wiedergeben.

Über den jeweiligen Befehl `\usepackage{<Paketname>}` werden die jeweiligen Pakete geladen und stellen die enthaltenen Befehle für die TeX-Verarbeitung bereit. Zusätzlich schaltet `\chemsetup{modules = all}` alle Zusatzmodule des chemmacros-Pakets frei. Diese Statements gehören zusammen mit anderen Angaben, deren Defaultwerte Sie nur in Sonderfällen anpassen müssen, in die Präambel des LaTeX-Dokuments.

## Die Grundbausteine

Mithilfe des Kommandos `\ch` lassen sich im Hauptteil des Dokuments nach `\begin{document}` chemische Formeln definieren. `\ch{CO2}` erzeugt „CO<sub>2</sub>“. Der tiefgestellte Index wird automatisch als solcher interpretiert, sodass es anders als im nativen Mathemodus keiner expliziten Formatierung bedarf.

Möchte man die Formel um Oxidationszahlen ergänzen, gelingt dies mit `\ox{4,C}\ox{-2,O2}`, hier wohlgeordnet ohne `\ch`-Makro. Erst wenn der Ausdruck in Anführungszeichen gesetzt wird, lässt sich dieser in die `\ch`-Notation einbinden: `\ch{"\ox{4,C}\ox{-2,O2}"}`. Auf diese Weise sind Mischkonstruktionen umsetzbar, in denen nur einzelne Abschnitte der Summenformel mit Oxidationszahlen versehen werden sollen. In beiden Fällen lautet das Ergebnis hier C<sup>IV</sup>O<sub>2</sub><sup>-II</sup> gemäß den Nomenklaturvorgaben der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC).

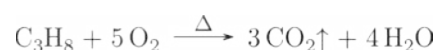
Dem `\ox`-Befehl nachgestellte eckige Klammern nehmen davon abweichende Optionen auf. So erzwingt `[roman=false, pos=top, explicit-sign=true]` die ebenso gebräuchliche Darstellung  $\overset{+4}{\text{C}}\overset{-2}{\text{O}_2}$ , bei der die Oxidationszahlen in arabischen Ziffern direkt über den Elementsymbolen stehen. Im Unterschied dazu werden echte Ladungen, wie sie etwa in den Anionen der Kohlensäure vorkommen, analog zum Mathemodus mit einem Zirkumflex erzeugt, also `\ch{HCO3^-}`. Ein optional übergebenes `[circled=all]` umkringt die Ladungszeichen zur besseren Übersicht:  $\text{HCO}_3^-$ . Zahlreiche weitere Funktionen wie die Notation von Radikalen oder Isotopen verrät die Paketdokumentation des TeX-Repositories CTAN.

## In Reaktion

Möchte man nun veranschaulichen, dass bei der vollständigen Verbrennungsreaktion des Erdgas-Bestandteils Propan drei Teile Kohlenstoffdioxid und vier Teile Wasser entstehen, lautet die Eingabe:

```
\ch{C3H8 + 5 O2 ->[ $\Delta$ ]
3 CO2 ^ + 4 H2O}
```

Der LaTeX-Compiler erzeugt daraus folgende Reaktionsgleichung:



Gleich bleibt die Verwendung des Makros `\ch`. Neu ist neben den vorangestellten Stoffmengenverhältnissen der Reaktionspfeil und das alleinstehende Zirkumflex, das einen vertikalen Pfeil generiert. Dieser gibt explizit an, dass CO<sub>2</sub> während der Reaktion entweicht.

Je nach Bedarf ist eine Vielzahl weiterer Pfeilarten wählbar, zum Beispiel zur Darstellung eines chemischen Gleichgewichts. Dem Reaktionspfeil nachgestellte eckige Klammern nehmen zudem über oder unter dem Pfeil stehende Beschriftungen auf. In diesem Beispiel handelt es sich um ein Delta, das die Freisetzung von Energie anzeigt.

„chemmacro“-Befehl	Typ
<code>-&gt;</code>	A → B
<code>&lt;-</code>	A ← B
<code>-/&gt;</code>	A ⇄ B
<code>&lt;-&gt;</code>	A ↔ B
<code>&lt;&gt;</code>	A ⇌ B
<code>&lt;=&gt;</code>	A ⇐ B
<code>&lt;=&gt;&gt;</code>	A ⇐ B
<code>&lt;=&gt;&gt;</code>	A ⇐ B

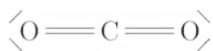
## Gib mir Struktur

Selbst einfache Strukturformeln lassen sich noch mittels `\ch`-Kommando umsetzen. Einfach-, Doppel- und Dreifachbindungen werden dabei jeweils mit einem Minus-, Gleichheits- und Pluszeichen kodiert. Aus `\ch{O=C=O}` wird also O=C=O. Für komplexere Strukturen samt Darstellung freier Elektronenpaare oder ganzer Reaktionsmechanismen bedarf es aber des Pakets und gleichnamigen Befehls `chemfig`.

Mit `\chemfig{O=C=O}` bleibt die Schreibweise zum Erzeugen der Molekülformel zunächst identisch zu `\ch`. Der Befehl

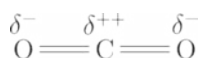
`\charge` fügt der Strukturformel unter Angabe der Winkel die freien Elektronenpaare als Striche hinzu:

```
\chemfig{\charge{135=\|, -135=\|}{O}}
=C
=\charge{45=\|, -45=\|}{O}}
```



Ersetzt man `|` durch einen Doppelpunkt, werden die freien Elektronen als einzelne Punkte dargestellt. Mit derselben Syntax lassen sich auch partielle Ladungen darstellen. Die Angabe `4pt` definiert den jeweiligen Abstand zum betreffenden Atom. `90` steht für eine Winkelangabe von  $90^\circ$ :

```
\chemfig{\charge{90:4pt=\delta-$}{O}}
=\charge{90:4pt=\delta^{++}$}{C}
=\charge{90:4pt=\delta-$}{O}}
```

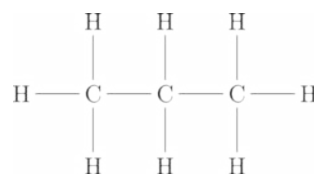


Damit liegt bisher lediglich ein lineares Molekül im Chemiebaukasten. Für Moleküle mit komplexeren Verzweigungen, wie sie im Propan aus der dargestellten Verbrennungsreaktion vorkommen, verlangt die `chemfig`-Notation nach der Definition von Substituenten. Das sind Moleküluntergruppen und diese stehen eingeschlossen in runden Klammern nach dem Atom, an das sie binden sollen. Damit sich die Substituenten beim Zeichnen nicht überlagern,

muss deren Position explizit angegeben werden. Dies gelingt am einfachsten über die Angabe einer ganzen Zahl zwischen 0 und 7 in eckigen Klammern, die einem Vielfachen von  $45^\circ$  relativ zur Horizontalen entspricht. Das Kommando

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

erzeugt die Valenzstrichformel von Propan:



## Mit einem Minimum an TeX

Wenn Sie sich nicht in die komplexe Struktur von LaTeX-Dokumenten einarbeiten möchten, können Sie die hier vorgestellten Funktionen auch einsteigsfreundlich mit der Bürosuite LibreOffice nutzen. Dafür müssen Sie außer einer TeX-Distribution und den vorgestellten TeX-Packages außerdem das LibreOffice-Plug-in `TexMaths` installieren. Das gelingt im LibreOffice Writer unter „Extras/Extension Manager“ über den Download-Link für weitere Extensions.

Beim Einsatz unter Linux beklagt sich das Plug-in je nach verwendeter Linux- und TeX-Distribution über fehlende TeX-Kernelfunktionen oder ein zu altes Hilfsprogramm namens `dvipng` und verweigert erst einmal den Dienst. Dann wird es womöglich erforderlich, eine andere TeX-Distribution aufzuspielen.

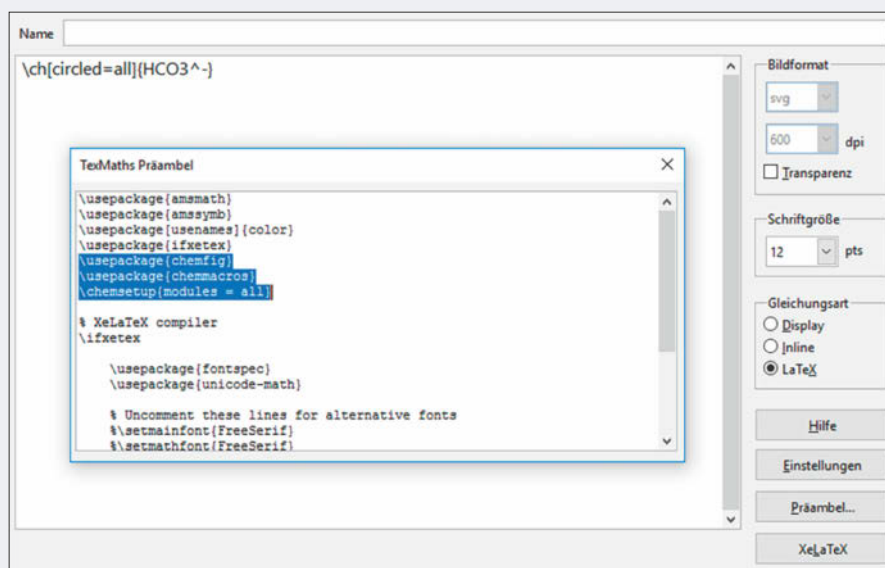
Nach dem anschließenden Neustart präsentiert Writer in der Befehlsleiste vier neue Symbole für Formeln, nummerierte Formellisten, Plug-in-Einstellungen und für LaTeX-Compiler-Einstellungen. Davon muss man sich nur mit dem ersten Symbol beschäftigen: Dieses öffnet einen Dialog, in dem Sie Ihre LaTeX-Befehle eingeben



Das Plug-in `TexMaths` gibt sich mit vier neuen Symbolen in der Writer-Befehlsleiste zu erkennen.

und mit dem Compiler LaTeX oder XeLaTeX kompilieren können. Beim ersten Gebrauch sollten Sie allerdings zuerst die Präambel-Schaltfläche anklicken. Daraufhin erscheint ein Grundgerüst des Codes. Dieses enthält auch die vorformulierte LaTeX-Präambel, die schon ohne Ihr Zutun ganz bequem die Voraussetzungen für die Formulierung mathematischer Ausdrücke schafft. Damit die Software auch die erwähnten Chemie-Pakete berücksichtigt, müssen Sie die zugehörigen `\usepackage`- und `\chemsetup`-Befehle in die Präambel einfügen und einmal speichern.

Nach dieser Vorarbeit übersetzt ein Klick auf die LaTeX- oder XeLaTeX-Schaltfläche im Dialog die eingetippte Formel in eine TeX-gerenderte Grafik und fügt diese im LibreOffice-Dokument ein. Es entsteht ein ganz normales Dokument, das sich ohne Zusatzsoftware mit LibreOffice anzeigen und etwa auch als PDF exportieren lässt. Word kann solche Dokumenten nur in den Formaten DOC und DOCX lesen und rendert die vom Plug-in eingebundenen Formeln nur als unscharfe Bilder, taugt also nicht als Werkzeug für die Veröffentlichung.



Damit LibreOffice chemische Formeln rendert, muss man mit `\usepackage` die Module `chemmacros` und `chemfig` einbinden.

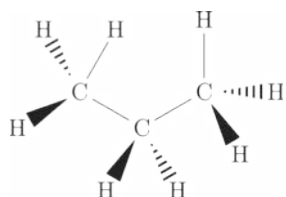


Direkt lassen sich absolute Winkelangaben durch einen vorangestellten Doppelpunkt übergeben. Der Befehl

```
\chemfig{H-C(-[:90]H)(-[:-90]H)
-C(-[:90]H)(-[:-90]H)
-C(-[:90]H)(-[:-90]H)-H}
```

gibt also dieselbe Valenzstrichformel aus.

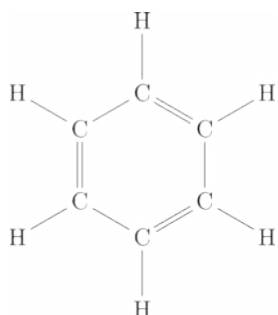
Eine leichte Anpassung der Winkelangaben und Bindungstypen bringt den Chemieinteressierten von der zuvor erstellten Valenzstrichformel zur Keilstrichformel. Diese verdeutlicht die räumliche Anordnung der Atome im Molekül:



Sie sehen: chemfig interpretiert Winkelangaben als Gradzahlen für die Drehung entgegen dem Uhrzeigersinn, beginnend bei 0 für die Ausrichtung von links nach rechts. Auch Ringstrukturen erschließen sich zwanglos aus passend verketteten Bindungs- und Winkelangaben, etwa mit

```
\chemfig{C(-[:90]H)
=[:330]C(-[:30]H)
-[:270]C(-[:330]H)
=[:210]C(-[:270]H)
-[:150]C(-[:210]H)
=[:90]C(-[:150]H)-[:30]C}
```

für die konventionelle Strukturformel des Benzolmoleküls:



Schnell zeigt sich, wie mit dem Umfang der zu zeichnenden Moleküle die Komplexität der chemfig-Syntax wächst. Den Einstieg erleichtert das Webtool mol2chemfig, mit dessen Hilfe man Molekülstrukturen händisch vorzeichnen oder aus einer Datenbank abrufen kann. Diese lassen

sich im Anschluss in die chemfig-eigene Struktur konvertieren und in LaTeX übernehmen.

Für weitere Details lohnt ein Blick ins chemfig-Kompendium. Neben zahlreichen Beispielen, wie sich besonders komplizierte Strukturen elegant umsetzen lassen, enthält es auch Anleitungen, die verschiedensten Formatierungseinstellungen feingranular anzupassen und eigene Vektorgrafiken mithilfe des Pakets TikZ einzubinden.


### Viele weitere Möglichkeiten

LaTeX kann noch mehr Chemie. Wem nach diesem Artikel noch nicht der Kopf raucht, der kann etwa mithilfe des LaTeX-Pakets bohr Bohr'sche Atommodelle visualisieren. Beim Zeichnen von Energiediagrammen hilft endiagram, und ghsystem nimmt dem Benutzer die Recherche und Übernahme von Risiko- und Sicherheitssätzen sowie Gefahrensymbolen gemäß dem global harmonisierten System zur Einstufung und Kennzeichnung von Chemikalien (GHS) ab. Um anzugeben, dass Propan leicht brennbar ist, fügt man mit \ghspic{flame} das entsprechende Piktogramm ein. Der Befehl \ghs{h}{220} spuckt gemäß GHS die Warnung „H220: Extrem entzündbares Gas“ auf Deutsch, Englisch, Französisch, Italienisch oder Spanisch aus, je nachdem, welche Sprache in der Präambel festgelegt ist, etwa mit \usepackage[ngerman]{babel} für Deutsch mit Silbentrennung.

Zusätzlich zu den allgemeinen Funktionen für professionellen Textsatz bietet



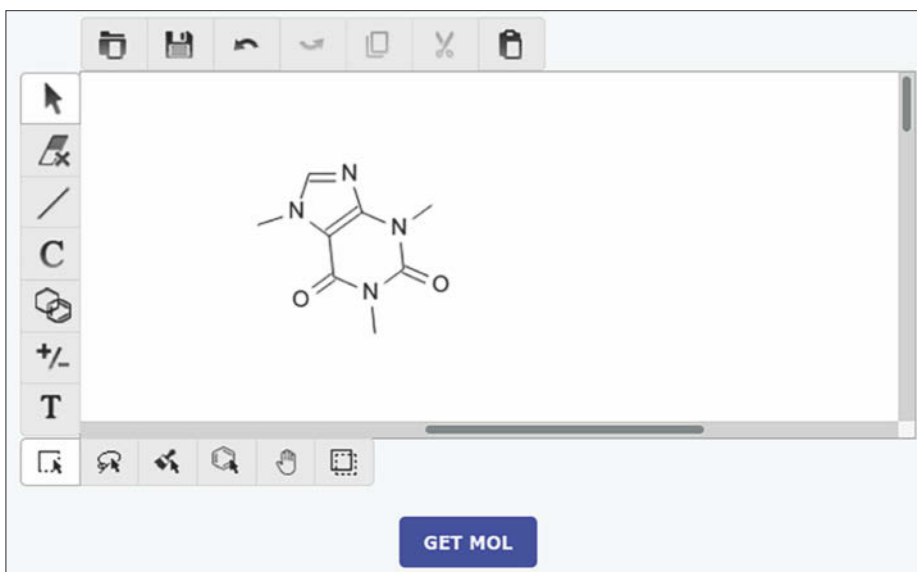
**Wenns brenzlich wird: ghsystem stellt Gefahrstoffsymbole bereit.**

LaTeX speziell für Chemiker viele Werkzeuge, die ohne TeX allenfalls in komplizierter Spezialsoftware zu finden wären. Auch wenn spezielle Editoren den ungewohnten Umgang mit TeX und LaTeX schon vereinfachen, können Sie sich die Einarbeitung mit dem beschriebenen LibreOffice-Plug-in TexMaths noch weiter erleichtern. (hps@ct.de) 

### Literatur

- [1] Peter Schüler, Molekül-Baumeister, Android-Editoren für chemische Strukturformeln, c't 24/2018, S. 156
- [2] Zacharias Steinmetz, In Form gegossen, Anspruchsvolle Texte mit LaTeX schreiben und gestalten, c't 9/2019, S. 152

**Software-Quellen und Dokumentationen:**  
[ct.de/ytk1](http://ct.de/ytk1)



**Mit mol2chemfig kann man Strukturformeln im MDL-Format anfertigen oder aus einer Datenbank holen.**