

Das chemmacros-Bundle

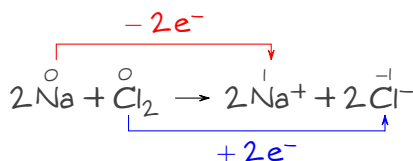
v3.4b 2013/01/04

Pakete `chemmacros`, `chemformula` und `ghsystem`

Clemens NIEDERBERGER

<https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/>
contact@mychemistry.eu

deutsche Dokumentation



Inhaltsverzeichnis	II. chemmacros	9
	8. Teilchen, Ionen und Symbole	9
I. Bevor es los geht	8.1. Vordefiniert	9
	8.2. Eigene Teilchen definieren . . .	11
1. Lizenz, Voraussetzungen und README	9. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke	12
	9.1. IUPAC-Namen	12
2. Motivation und Hintergrund	9.1.1. Vordefinierte Befehle . .	13
	9.1.2. Eigene Nomenklatur-Befehle	16
3. Installation und Laden des Bundles	9.2. Lateinische Ausdrücke	17
4. Paketoptionen	10. Einheiten für die Verwendung mit siunitx	17
5. Setup		
6. Spracheinstellungen	11. Säure/Base	18
6.1. Unterstützte Sprachen		
6.2. Besonderheiten	12. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen	19
6.2.1. Deutsch	12.1. Ionenladungen	19
6.2.2. Italienisch	12.2. Oxidationszahlen	20
	12.3. Partialladungen und Ähnliches .	21
7. Neues	13. Reaktionsmechanismen	22
7.1. Version 3.3		
7.2. Version 3.3a		
7.3. Version 3.3d		
7.4. Version 3.4		

14. Redoxreaktionen	23	25.4. Ladungen und andere Hochstel-	
		lungen	48
15. (Standard) Zustand, Thermodyna-	25	25.5. Bindungen	49
mik		25.5.1. Natürliche Bindungen	49
15.1. Thermodynamische Größen	25	25.5.2. Flexible Bindungen	49
15.1.1. Neue Größen definieren	26	25.6. Anpassung	51
15.1.2. Größen umdefinieren	27	26. Spezielle Input-Typen	53
15.2. Zustandsgrößen	27	26.1. Single-Token Input	53
16. Spektroskopie und Messdaten	27	26.2. Optionen Input	54
16.1. Der \NMR-Befehl	27	27. Geschützter Input	54
16.2. Abkürzungen	28	27.1. Text	54
16.3. Eine Umgebung, um Messergeb-	29	27.2. Mathematik	55
nisse darzustellen		28. Pfeile	55
16.4. Anpassung	29	28.1. Pfeiltypen	55
16.5. Anwendungsbeispiel	30	28.2. Beschriftung	56
16.5.1. Beinahe Standard	31	28.3. Anpassung	57
16.5.2. Formatierte Liste	32	28.4. Pfeiltypen bearbeiten	58
16.5.3. Verrückt	32	29. Text unter Formeln	59
17. Befehle für mhchem	33	29.1. Syntax	59
18. Reaktionsumgebungen	34	29.2. Anpassung	60
18.1. Durch CHEMMACROS definiert	34	30. Format und Schrift	60
18.2. Eigene Reaktionen	36	31. Verwendung in Mathematik-	62
18.3. Liste der Reaktionen	37	Umgebungen	
19. Phasen	38	32. Weitere Beispiele	63
19.1. Grundlagen	38	IV. ghsystem	65
19.2. Eigene Phasen definieren	39	33. Setup	65
20. Newman-Projektionen	40	34. Die Gefahren- (H) und Sicherheits-	65
21. s, p und Hybrid-Orbitale	41	sätze (P) aufrufen	
III. chemformula	43	34.1. Einfacher Aufruf	65
22. Setup	43	34.2. Sätze mit Platzhaltern	66
23. Das Grundprinzip	44	34.3. Sätze mit Lücken	67
24. Stöchiometrische Faktoren	45	34.4. Kombinierte Sätze	68
25. Summenformeln	47	35. Piktogramme	68
25.1. Addukte	47	35.1. Die Bilder	68
25.2. Tiefstellungen	47	35.2. Der Bildtyp hängt von der Engi-	
25.3. Befehle	48	ne ab	70

36. Verfügbare Sprachen	71	Vorschläge und Bugreports	75
37. Liste aller Sätze	71	Quellen	76
		Index	77
V. Anhang	72		
Übersicht über die Optionen und Anpassungsmöglichkeiten	72		

Teil I.

Bevor es los geht

1. Lizenz, Voraussetzungen und README

Das **CHEMMACROS**-Bundle steht unter der L^AT_EX Project Public License (LPPL) Version 1.3 oder später (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>) und hat den Status „maintained“.

Das **CHEMMACROS**-Bundle benötigt aktuelle Versionen der **l3kernel**¹- und **l3packages**²-Bundles. Außerdem werden die Pakete **siunitx**,³ **mathtools**,⁴ **bm**,⁵ **nicefrac**⁶ und **environ**⁷ sowie **tikz**⁸ und die **TikZ libraries calc** und **arrows** benötigt.

Die Paketoption **bpchem** (Abschnitt 4) benötigt **bpchem**,⁹ die Paketoption **xspace** benötigt **xspace**¹⁰ und die Paketoption **method = mhchem** benötigt **mhchem**.¹¹

Mit v3.0 wurde das **CHEMMACROS**-Paket mit den neuen Paketen **CHEMFORMULA** und **GHSYSTEM** gebündelt. **CHEMFORMULA** ist eine Alternative zu **mhchem**. Das führte zu einigen internen Änderungen bei **CHEMMACROS**. Gleichzeitig wurde die Dokumentation komplett überarbeitet.

Vielleicht erinnern Sie Sich, dass **CHEMMACROS**’ Optionen alle verschiedenen Modulen angehören, siehe Abschnitt 5 für weitere Informationen. Sie werden in den linken Rand geschrieben, wenn die Option das erste Mal erwähnt wird. Abschnitt V listet alle Optionen von **CHEMMACROS** und ihre Module auf. In diesem Dokument werden Optionen **grün** und Module **rot** dargestellt.

Das Paket **GHSYSTEM** benötigt die Pakete **CHEMMACROS**, **tabu**,¹² **longtable**,¹³ **ifpdf**¹⁴ und **graphicx**.¹⁵

Es gibt einige veraltete Befehle und Optionen, die in dieser Dokumentation nicht mehr beschrieben werden. Um Kompatibilität mit älteren Dokumenten zu gewährleisten, sind sie immer noch definiert. Diese Befehle geben eine Warnung aus. In Zukunft könnten sie nicht mehr definiert sein.

2. Motivation und Hintergrund

CHEMMACROS entstand vor einigen Jahren als wachsende Liste von Makros, die ich häufig verwendete. Ich kann mich nicht mehr genau erinnern, wann und warum ich entschied, sie als Paket zu

¹ CTAN: **l3kernel** ² CTAN: **l3packages** ³ CTAN: **siunitx** ⁴ CTAN: **mathtools** ⁵ CTAN: **bm** ⁶ CTAN: **nicefrac**
⁷ CTAN: **environ** ⁸ CTAN: **pgf** ⁹ CTAN: **bpchem** ¹⁰ CTAN: **xspace** ¹¹ CTAN: **mhchem** ¹² CTAN: **tabu** ¹³ CTAN: **longtable** ¹⁴ CTAN: **ifpdf** ¹⁵ CTAN: **graphicx**

2. Motivation und Hintergrund

veröffentlichen. Nun – hier ist es und ich hoffe, Sie werden das eine oder andere ebenfalls nützlich finden.

Die Makros und ihre Funktionsweise haben sich im Laufe der Zeit leicht verändert. Es sind außerdem eine ganze Reihe hinzugekommen. Insgesamt hat sich mit der Zeit vieles vereinheitlicht und es sind viele Anpassungsmöglichkeiten hinzugekommen.

Wohl fast jeder Chemiker, der \LaTeX für seine Dokumente verwendet, dürfte das großartige Paket `mhchem` von Martin Hensel kennen. Es gab immer ein paar Schwierigkeiten, `mhchem` und `CHEM-MACROS` zur Zusammenarbeit zu bewegen. Ein paar Kleinigkeiten in `mhchem` haben mich zudem immer gestört, aber sie schienen nicht genug für ein neues Paket. Noch nicht einmal genug, um ein “feature request” an den Autoren von `mhchem` zu senden. Die Herausforderung und der Spaß, ein neues Paket zu erschaffen, sowie der Wunsch nach größtmöglicher Flexibilität führten so doch noch zu `CHEMFORMULA`.

`CHEMFORMULA` funktioniert sehr ähnlich wie `mhchem`, ist aber strenger was das Eingeben von Verbindungen, stöchiometrischen Faktoren und Pfeilen angeht. Gleichzeitig bietet `CHEMFORMULA` ein paar Möglichkeiten, den Output anzupassen, die `mhchem` nicht bietet. Da `CHEMFORMULA` als Alternative zu `mhchem` gedacht ist, bietet `CHEMMACROS` eine Option, mit der Sie zwischen `mhchem` und `CHEMFORMULA` wählen können.

Als Chemiker wissen Sie vermutlich, dass die UNITED NATIONS das Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS) als weltweiten Ersatz für die zahlreichen ähnlichen aber doch verschiedenen Systeme der einzelnen Länder entwickelt haben. Obwohl es noch nicht in allen Ländern umgesetzt wurde [Eur12], ist das nur eine Frage der Zeit. Das Paket `GHSYSTEM` gibt Ihnen nun die Möglichkeit, alle “hazard and precautionary statements” auf einfache Weise einzugeben und aufzurufen. Die Sätze wurden der EU-Verordnung 1272/2008 entnommen [Theo8].

Ich hoffe, folgende vier Punkte in diesem Bundle umgesetzt zu haben:

- intuitive Verwendung, vor allem im Hinblick auf die Syntax der Befehle
- die Befehle sollen nicht nur das Schreiben erleichtern sondern auch den Quelltext besser lesbar machen, indem er semantisch logischer wird (`\ortho`-dichlorobenzene kann man leichter lesen und verstehen als `\textsl{o}`-dichlorobenzene)
- so große Flexibilität und so viele Anpassungsmöglichkeiten wie möglich, damit jeder Anwender die Befehle nach eigenen Bedürfnissen anpassen kann.
- mit International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) konforme Voreinstellungen

Vor allem der letzte Punkt benötigte zwar einige Schubser von Anwendern,¹⁶ um die richtigen Einstellungen an vielen Stellen zu bekommen. Wenn Ihnen etwas auffällt, das nicht der IUPAC-Empfehlung entspricht,¹⁷ würde ich mich über eine E-Mail sehr freuen!

Bei einem Paket dieser Größe mit alten und neuen Teilen (die man noch als in der Beta-Phase befindlich betrachten muss) ist es unvermeidbar, dass es Fehler und Bugs gibt. Ich bin sehr daran interessiert, dieses Paket zu korrigieren und verbessern, daher eine Bitte: wenn Ihnen etwas auffällt, das Sie stört, egal wie geringfügig es erscheint, senden Sie mir bitte eine E-Mail und ich werde sehen, was ich tun kann. Besonders interessiert bin ich an Feedback zu `CHEMFORMULA` (siehe Teil III) und `GHSYSTEM` (siehe Teil IV), freue mich aber natürlich auch über Feedback zu jedem anderen Teil des Bundles.

¹⁶ Vielen Dank an Dr. Paul King! ¹⁷ Das gilt nicht für den `\ox`-Befehl. Die IUPAC-Fassung dazu ist `\ox*`.

3. Installation und Laden des Bundles

Das Bundle enthält drei Style-Dateien,¹⁸ einem Ordner namens `language/`, der die Sprach-Definitionen-Dateien für GHS enthält (Endung `def`) und einem Ordner `pictures/`, der `eps`-, `jpg`-, `pdf` und `png`-Dateien enthält (die GHS Piktogramme). Wenn Sie das Bundle von Hand installieren, *bitte achten Sie darauf, die Ordner `language/` und `pictures/` in den gleichen Ordner wie die Style-Dateien zu kopieren.*

Das Laden von **CHEMMACROS** via

```
1 \usepackage{chemmacros} % 'chemmacros', 'chemformula' and 'ghsystem' are
   loaded
```

wird ebenso **CHEMFORMULA** und **GHSYSTEM** laden. Sie können jedoch **CHEMMACROS** davon abhalten, **GHSYSTEM** zu laden:

```
1 \usepackage[ghsystem=false]{chemmacros} % 'chemmacros' and 'chemformula' are
   loaded
```

Das Laden von **CHEMFORMULA** kann nicht verhindert werden, da **CHEMMACROS** und **CHEMFORMULA** miteinander interagieren.

Das explizite Laden von **CHEMFORMULA** bzw. **GHSYSTEM** ist möglich und wird **CHEMMACROS** in jedem Fall laden, falls das noch nicht geschehen ist. Dadurch laden sie sich implizit gegenseitig.

```
1 \usepackage{chemformula}
2 or
3 \usepackage{ghsystem}
```

Es wird jedoch empfohlen, lediglich `\usepackage{chemmacros}` zu verwenden und die gewünschten Optionen mit `\chemsetup` vorzunehmen (siehe auch Abschnitt 5).

4. Paketoptionen

CHEMMACROS hat einige Optionen. Sie alle folgen einen Schlüssel/Wert-Prinzip:

```
1 \usepackage[option1 = <value1>, option2 = <value2>]{chemmacros}
```

Die meisten können auch ohne Wert verwendet werden (`\usepackage[option]{chemmacros}`). Sie verwenden dann den unterstrichenen Wert.

Sowohl **CHEMFORMULA** als auch **GHSYSTEM** haben keine eigenen Paketoptionen. Wenn Sie sie explizit laden, verpuffen alle als Paketoptionen gegebenen Optionen. Sie können dann nur mit dem Setup-Befehl gesetzt werden.

option ► `bpchem = true|false` → Diese Option lädt `bpchem` und passt das Layout von `\NMR` den `bpchem`-

¹⁸ Die mit der Endung `sty`.

4. Paketoptionen

Befehlen `\HNMR` und `\CNMR` an. Default = false

- option** ▶ `circled` = `formal|all|none` → `CHEMMACROS` unterscheidet zwischen zwei Typen von Ladungen¹⁹: reale (+/−) und formale (⊕/⊖) Ladungen. Die Option `formal` unterscheidet zwischen ihnen, `none` stellt alle ohne Umkreisung dar, `all` umkreist alle. Default = `formal`
- option** ▶ `circletype` = `chem|math` → Diese Option schaltet zwischen zwei Darstellungsmöglichkeiten für formale Ladungen hin und her: `\fplus` ⊕ und `\oplus` ⊕. Default = `chem`
- option** ▶ `cmversion` = `1|2|bundle` → Diese Option stellt die Definition einiger Befehle wieder her, so dass Dokumente, die mit v1.* gesetzt wurden, Korrekt kompilieren. Default = `bundle`. Eigentlich sind `2` und `bundle` Aliase. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.
- option** ▶ `ghsystem` = `true|false` → Das Paket `GHSYSTEM` abschalten. Die Einstellung `ghs` = false wird das Laden von `GHSYSTEM` unterbinden. Default = `true`
- option** ▶ `greek` = `math|textgreek|upgreek` → Diese Option bestimmt, wie die Buchstaben `\Chemalpha` und seine Verwandten dargestellt werden. Siehe Seite 11 für weitere Informationen. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden. Default = `upgreek`
- option** ▶ `iupac` = `auto|restricted|strict` → Einstellen, wie die Nomenklatur-Befehle definiert werden. Siehe Seite 13. Default = `auto`
- option** ▶ `language` = `american|british|english|french|german|italian|ngerman` → Sprachspezifische Einstellungen laden. `english`, `american` und `british` sind Aliase, ebenso `german` und `ngerman`. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden. Default = `english`
- option** ▶ `method` = `chemformula|mhchem` → Sie können wählen, ob `CHEMMACROS` `mhchem` oder `CHEMFORMULA` für die Reaktionsumgebungen (siehe Abschnitt 18) und die Teilchen (siehe Abschnitt 8) verwendet. Default = `chemformula`. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.
- option** ▶ `Nu` = `chemmacros|mathspec` → Das Paket `mathspec`²⁰ definiert ebenfalls ein Makro `\Nu`. Diese Option entscheidet, welche Definition gilt, siehe Seite 10. Default = `chemmacros`. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.
- option** ▶ `strict` = `true|false` → Die Einstellung `strict` = true wird alle Warnungen in Fehlermeldungen ändern. Default = false
- option** ▶ `synchronize` = `true|false` → Mit der Einstellung `true` wird `CHEMMACROS` die Schrifteinstellungen von `CHEMFORMULA` übernehmen, falls `CHEMFORMULA` als Methode gewählt wurde. Default = false. Um diese Option zu demonstrieren, wurde dieses Dokument mit `synchronize` = true und der `CHEMFORMULA` Einstellung `\chemsetup[chemformula]{font-spec={[[Color=darkgray]Latin Modern Sans}}` gesetzt.
- option** ▶ `xspace` = `true|false` → Mit dieser Option werden die meisten Makros mit einem `\xspace` definiert. Default = true

¹⁹ Vielen Dank an Christoph Schäfer, der mich darauf aufmerksam machte, dass v1.1 die Ladungen zu nachlässig behandelte! ²⁰ CTAN: `mathspec`

5. Setup

Zahlreiche der Befehle von **CHEMMACROS**, **CHEMFORMULA** und **GHSYSTEM** haben Schlüssel/Wert-Paare als Optionen, mit denen sie angepasst werden können. Meistens können sie als (optionales) Argument des entsprechenden Befehls verwendet werden. Meistens können Sie auch mit dem **\chemsetup** Befehl verwendet werden.

- ▶ **\chemsetup**[<module>]{<key> = <value>} oder
- ▶ **\chemsetup**{<module>/<key> = <value>}

Die Optionen gehören alle zu einem Modul, das anzeigt, auf welchen Befehl sie sich auswirken. Wenn eine Option vorgestellt wird, wird das dazugehörige Modul in den linken Rand geschrieben. Sie können die Optionen mit **\chemsetup** auf zwei Weisen verwenden, wie oben dargestellt.

Die Paketooptionen können ebenfalls als Optionen betrachtet werden, die zum Modul **option** gehören. Das bedeutet, sie können auch mit **\chemsetup** aufgerufen werden.

```

1  \chemsetup[option]{circled=none}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \
2  \chemsetup[option]{circled=formal}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \
3  \chemsetup[option]{circletype=math}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \
4  \chemsetup{option/circletype=chem,option/circled=all}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \
   el\ \prt \
5  \chemsetup{option/circletype=math}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt

- + - + e- p+
- + ⊖ ⊕ e- p+
- + ⊖ ⊕ e- p+
⊖ ⊕ ⊖ ⊕ e⊖ p⊕
⊖ ⊕ ⊖ ⊕ e⊖ p⊕

```

Optionen, die *keinem* Modul angehören, können *nicht* mit **\chemsetup** verwendet werden!

Alle Optionen von **CHEMFORMULA** gehören dem Modul **chemformula** an und alle Optionen von **GHSYSTEM** gehören dem Modul **ghs** an.

6. Spracheinstellungen

6.1. Unterstützte Sprachen

Durch die Wahl der Option

```

1  \chemsetup[option]{language=<language>}

```

kann eine der folgenden Sprachen gewählt werden: american, british, english, french, german, italian und ngerman. Die Sprachen american, british, english sind Aliase, ebenso die Sprachen german und ngerman.

Übersetzt werden

- Die Überschrift der Liste der Reaktionen.

7. Neues

- Die Einträge bei der Liste der Reaktionen.
- Die H- und P-Sätze.

Bitte beachten Sie, dass die GHS-Sätze nicht in allen Sprachen angeboten werden, siehe auch Abschnitt 36.

6.2. Besonderheiten

6.2.1. Deutsch

Bei der Sprachwahl `german/ngerman` werden zusätzlich die Phasen-Befehle `\sld`, `\lqd` und `\pKa` übersetzt.

6.2.2. Italienisch

Bei der Sprachwahl `italian` werden zusätzliche IUPAC-Befehle definiert:

► `\ter` → *ter*

► `\sin` → *sin*

7. Neues

7.1. Version 3.3

- Ab Version 3.3 gibt es die Umgebung `\begin{experimental}` `\end{experimental}`, siehe Abschnitt 16, die mit einigen neuen Befehlen und Optionen verwendet werden kann, um Messdaten konsistent darzustellen.
- Die Umgebung `\begin{reaction}` `\end{reaction}` und ihre Verwandten können nun mit `\label`, `\ref` und `\intertext` umgehen, siehe Abschnitt 18.
- Die Paketoptionen `german` und `ngerman` entfallen, dafür gibt es die neue Option `language`, siehe Seite 6 und Abschnitt 6 ab Seite 7.
- Die Paketoption `upgreek` wurde umbenannt in `greek`.
- Die `\Chem<greekletter>`-Befehle wurden um einige Buchstaben erweitert, siehe Abschnitt 8.

7.2. Version 3.3a

- Die IUPAC-Befehle `\hapto` und `\bridge` sind neu.
- Die H- und P-Sätze sind jetzt auch auf italienisch verfügbar.

7.3. Verison 3.3d

- pdf-Versionen der GHS-Piktogramme.
- Neue Voreinstellungen für Bindungslänge und Bindungs-Offset, siehe Seite 51.
- Neue Option `bond-style`, siehe Seite 51.
- neue Option `cip-kern`, siehe Seite 14

7.4. Version 3.4

- `CHEMMACROS` bekam ein italienisches Manual, vielen herzlichen Dank an Jonas Rivetti, der sich nicht nur freiwillig meldete, die H- & P-Sätze zu übersetzen, sondern auch diese Dokumentation!
- der Befehl `\bond`, der es ermöglicht, andere als Einfach-, Doppel- und Dreifachbindungen zu verwenden, siehe Abschnitt 25.5. Dieses Feature wollte ich schon lange einbauen!
- ein paar Änderungen am Aussehen des Radikalpunktes und neue Optionen, um es anzupassen, siehe Abschnitt 25.6.

Teil II.

chemmacros

8. Teilchen, Ionen und Symbole

8.1. Vordefiniert

`CHEMMACROS` definiert einige einfache Makros, um häufig verwendete Teilchen und Symbole darzustellen. Bitte beachten Sie, dass sie unterschiedlich dargestellt werden, je nach dem, welche Paketoptionen Sie verwenden. Diese Befehle können auch im Mathematikmodus eingesetzt werden.

- ▶ `\Hp1` → H^+ (Proton)
- ▶ `\Hyd` → OH^- (Hydroxid)
- ▶ `\Ht0` → H_3O^+ (Oxoniumion) (H three O)
- ▶ `\water` → H_2O
- ▶ `\el` → e^- (Elektron)
- ▶ `\prt` → p^+ (Proton)
- ▶ `\ntr` → n^0 (Neutron)

8. Teilchen, Ionen und Symbole

- ▶ `\Nu` → Nu^- (Nukleophil). Das Paket `mathspec` definiert ebenfalls ein Makro `\Nu`. Wenn Sie die Pake-toption `Nu = mathspec` wählen, definiert `CHEMMACROS` stattdessen `\Nuc`.
- ▶ `\El` → E^+ (Elektrophil)
- ▶ `\ba` → ba^- (Base)
- ▶ `\fplus` → \oplus
- ▶ `\fminus` → \ominus
- ▶ `\transitionstatesymbol` → \ddagger
- ▶ `\standardstate` → \ominus . Dieses Symbol wird nur dann von `CHEMMACROS` bereitgestellt, wenn das Paket `chemstyle`²¹ nicht geladen wurde. Die Idee ist von dort ausgeliehen.²²
- ▶ `\Chemalpha` → α
- ▶ `\Chembeta` → β
- ▶ `\Chemgamma` → γ
- ▶ `\Chemdelta` → δ
- ▶ `\Chemepsilon` → ϵ
- ▶ `\Chemeta` → η
- ▶ `\Chemkappa` → κ
- ▶ `\Chemmu` → μ
- ▶ `\Chemnu` → ν
- ▶ `\Chemrho` → ρ
- ▶ `\Chempi` → π
- ▶ `\Chemsigma` → σ
- ▶ `\Chemomega` → ω
- ▶ `\ChemDelta` → Δ

Der Befehl `\Rad` wird nicht mehr bereitgestellt!

Die beiden Teilchen `\Nu` und `\ba` können angepasst werden. Dafür verwenden Sie die Option

`particle` ▶ `elpair = false|dots|dash`

Sie hat nur dann Auswirkungen, wenn das Paket `chemfig`²³ geladen wurde, da sie dessen Befehl `\Lewis` verwendet.

²¹ CTAN: `chemstyle` ²² Vielen Dank an den Paketautoren [Joseph Wright](#). ²³ CTAN: `chemfig`

```

1 % needs package 'chemfig'
2 \ba[elpair] \Nu[elpair=dash]
3
4 \chemsetup[particle]{elpair}
5 \ba \Nu

```

$\text{ba}^{\text{---}} \text{Nu}^{\text{---}}$
 $\text{ba}^{\text{---}} \text{Nu}^{\text{---}}$

Die griechischen Buchstaben sind keine neu definierten Zeichen sondern werden abhängig von den Paketen, die sie geladen haben, definiert. Die Default-Version entspricht den entsprechenden kursiven „Mathematik“-Buchstaben. Wenn Sie das Paket `textgreek`²⁴ geladen haben, werden dessen Buchstaben verwendet. Wenn Sie das Paket `upgreek`²⁵ geladen haben, werden dessen Buchstaben verwendet. Diese Dokumentation verwendet `upgreek`. Haben Sie sowohl `textgreek` als auch `upgreek` geladen haben, wird `upgreek` verwendet.

Wenn Sie nicht wollen, dass `CHEMMACROS` automatisch wählt, sondern selbst entscheiden wollen, verwenden Sie die Paketoption `greek`. Tabelle 1 zeigt die verschiedenen Varianten einiger Buchstaben.

Tabelle 1: Die griechischen Buchstaben

	math	upgreek	textgreek
<code>\Chemalpha</code>	α	α	α
<code>\Chembeta</code>	β	β	β
<code>\ChemDelta</code>	Δ	Δ	Δ

Der Grund dafür, dass `CHEMMACROS` diese Makros überhaupt definiert, ist IUPAC-Konformität. IUPAC empfiehlt, aufrechte griechische Buchstaben in der Nomenklatur verwenden.

Greek letters are used in systematic organic, inorganic, macromolecular and biochemical nomenclature. These should be roman (upright), since they are not symbols for physical quantities.
IUPAC Green Book [Coh+08, p. 9]

`CHEMMACROS` verwendet diese Befehle nun, um Nomenklatur-Befehle zu definieren, siehe Seite 13.

8.2. Eigene Teilchen definieren

Manchmal kann es sicherlich nützlich sein, andere Teilchen als Makro zur Verfügung zu haben, etwa `\positron` oder `\photon`. Mit diesem Befehl kann das einfach erreicht werden:

- `\DeclareChemParticle{<cmd>}{<definition>}`
- `\RenewChemParticle{<cmd>}{<definition>}`

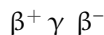
Abhängig von der `method`, die Sie als Option gewählt haben, wird die `<definition>` entweder mit `mhchem` oder mit `CHEMFORMULA` erfolgen. Das Teilchen verhält sich wie die vordefinierten mit einer Ausnahme: das Teilchen, das auf diese Weise definiert wurde, gehorcht der Option `circled` nur, wenn Sie `method = chemformula` gewählt haben. Wenn Sie mit `method = mhchem` formale Ladungen wollen, müssen Sie `CHEMMACROS`' Befehle (siehe Abschnitt 12) explizit einsetzen.

²⁴ CTAN: `textgreek` ²⁵ CTAN: `upgreek`

```

1 % uses the 'upgreek' package
2 \DeclareChemParticle{\positron}{$\upbeta$+}
3 \DeclareChemParticle{\photon}{$\upgamma$}
4 \RenewChemParticle{\el}{$\upbeta$-}
5 \positron\ \photon\ \el

```



`\DeclareChemParticle` definiert das Teilchen nur dann, wenn `<cmd>` noch nicht existiert. Andernfalls wird `CHEMMACROS` entweder eine Warnung oder einen Fehler ausgeben, abhängig von der Option `strict`. `\RenewChemParticle` definiert ein Teilchen *nur*, wenn `<cmd>` schon existiert und gibt andernfalls eine Warnung/einen Fehler.

9. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke

9.1. IUPAC-Namen

Ähnlich wie das Paket `bpchem` stellt `CHEMMACROS` einen Befehl²⁶ bereit, um IUPAC-Namen zu setzen. Wieso ist das nützlich? IUPAC-Namen können sehr lang werden. So lang, dass sie auch mal über mehr als zwei Zeilen gehen können, vor allem in zweiseitigen Dokumenten. Das bedeutet, sie müssen sich mehr als einmal umbrechen dürfen. Dabei hilft folgender Befehl:

- `\iupac{<IUPAC name>}` → Innerhalb dieses Befehls werden `\|` und `\-` verwendet, um Umbruchstellen oder einen umbrechenden Bindestrich anzugeben. `\^` kann als Abkürzung für `\textsuperscript`²⁷ eingesetzt werden.

```

1 \begin{minipage}{.4\linewidth}
2 \iupac{Tetra|cyclo[2.2.2.1\^1,4]]\un|decane-2\--dodecyl\--5\-(hepta|decyl|
   iso|dodecyl|thio|ester)}
3 \end{minipage}

Tetracyclo[2.2.2.14]-undecane-2-do-
decyl-5-(heptadecylisododecylthioes-
ter)

```

Der Befehl `\iupac` ist dennoch mehr ein semantischer Befehl. Meistens kann man (beinahe) dasselbe erreichen, indem man `\-` anstelle von `\|` verwendet, `-` anstelle von `\-` und `\textsuperscript` anstelle von `\^`.

Es gibt subtile Unterschiede: `\-` fügt einen kleinen Leerraum vor dem Bindestrich ein und entfernt etwas Raum danach. Der Befehl `\|` verhindert nicht nur Ligaturen, sondern fügt ebenfalls einen kleinen Leerraum ein.

```

1 \huge\iupac{2,4-Di|chlor|pentan} \
2 2,4-Dichlorpentan

```

2,4-Dichlorpentan
2,4-Dichlorpentan

Die eingefügten Leerräume können angepasst werden:

`iupac` ► `hyphen-pre-space` = `<dim>` → Default = `.01em`

²⁶ Die Idee und die Umsetzung stammt aus dem Paket `bpchem` von Bjørn Pedersen. ²⁷ Tatsächlich wird ein anderer Mechanismus verwendet, das Ergebnis ist jedoch weitestgehend dasselbe.

`iupac` ► `hyphen-post-space` = <dim> → Default = -.03em

`iupac` ► `break-space` = <dim> → Default = .01em

Der Befehl `\iupac` dient noch einem anderen Zweck. Unabhängig von der Paketoption `iupac` sind alle Befehle, die in diesem Abschnitt vorgestellt werden, *innerhalb* von `\iupac` immer definiert. Eine ganze Reihe der Nomenklatur-Befehle haben sehr allgemeine Namen: `\meta`, `\D`, `\E`, `\L`, `\R`, `\S`, `\trans` und so weiter. Das bedeutet, dass sie entweder schon definiert sind (`\L` L) oder leicht von anderen Paketen oder Klassen definiert werden (das Paket `cool`²⁸ definiert zum Beispiel sowohl `\D` als auch `\E`). Um Ihnen Kontrolle darüber zu geben, welche Befehle wie definiert sind, gibt es die Paketoption `iupac`. Sie hat drei Modi:

- `iupac` = auto: wenn der Befehl *nicht* von einem Paket oder einer Klasse, die sie verwenden, definiert wird, ist er generell verfügbar, sonst nur *innerhalb* von `\iupac`.
- `iupac` = restricted: alle Nomenklatur-Befehle sind *nur* innerhalb von `\iupac` definiert. Wenn sie von einem anderen Paket definiert sind, sind sie natürlich außerhalb verfügbar. Ansonsten sind sie außerhalb nicht definiert.
- `iupac` = strict: `CHEMMACROS` überschreibt jede bestehende Definition und macht die Befehle im ganzen Dokument verfügbar. Sie können natürlich (nur nach `\begin{document}`) undefiniert werden. Sie behalten dann die Nomenklatur-Bedeutung innerhalb von `\iupac`.

Tabelle 2 demonstriert die verschiedenen Modi.

Tabelle 2: Demonstration der verschiedenen `iupac`-Modi.

	auto	restricted	strict
<code>\L</code>	L	L	L
<code>\iupac{\L}</code>	L	L	L
<code>\D</code>	D	–	D
<code>\iupac{\D}</code>	D	D	D

9.1.1. Vordefinierte Befehle

Griechische Buchstaben Griechische Buchstaben in Verbindungsnamen werden aufrecht geschrieben. Dafür gibt es die Pakete `upgreek` und `textgreek`. Wenn Sie eines davon geladen haben, werden die folgenden Buchstaben aufrecht geschrieben:

► `\a` → α

► `\b` → β

► `\g` → γ

► `\d` → δ

► `\k` → κ

²⁸ CTAN: `cool`

► `\m` → μ

► `\n` → η

► `\w` → ω

```
1 \iupac{5\alpha\androstano-3\beta-ol} \\
2 \iupac{\alpha-(tri\chloromethyl)-\omega-chloropoly(1,4-phenylene\methylene)}
```

5 α -androstano-3 β -ol
 α -(trichloromethyl)- ω -chloropoly(1,4-phenylenemethylene)

Heteroatome und addierter Wasserstoff Bindungen an Heteroatome und addierter Wasserstoff werden durch kursive Buchstaben dargestellt [Coh+08]. **CHEMMACROS** definiert ein paar Abkürzungen dafür:

► `\H` → *H*

► `\O` → *O*

► `\N` → *N*

► `\Sf` → *S*

► `\P` → *P*

1	<code>\iupac{\N-methyl\benz\amide}</code>	<i>N</i> -methylbenzamide
2	<code>\iupac{3\H-pyrrole}</code>	3 <i>H</i> -pyrrole
3	<code>\iupac{\O-ethyl hexanethioate}</code>	<i>O</i> -ethyl hexanethioate

Cahn-Ingold-Prelog

► `\cip{<conf>}` → z. B.: `\cip{R,S}` (*R,S*)

► `\R` → (*R*)

► `\S` → (*S*)

Da der Befehl `\S` schon eine andere Bedeutung hat (§), ist er in der Voreinstellung nur innerhalb `\iupac` verfügbar.

Sowohl diese Befehle als auch die entgegen/zusammen-Deskriptoren erhalten etwas Kerning nach der schließenden Klammer. Der betrag kann durch folgende Option geändert werden:

`iupac` ► `cip-kern` = <dim> → Betrag des Kernings nach der schließenden Klammer. Default = .1ex

Fischer

► `\D` → D

► `\L` → L

Da der Befehl `\L` schon eine andere Bedeutung hat (Ł), ist er in der Voreinstellung nur innerhalb `\iupac` verfügbar.

cis/trans, zusammen/entgegen, syn/anti & tert

► `\cis` → *cis*

► `\trans` → *trans*

► `\Z` → (*Z*)

► `\E` → (*E*)

► `\syn` → *syn*

► `\anti` → *anti*

► `\tert` → *tert*

Das Paket cool beispielsweise definiert die Befehle `\E` und `\D` ebenfalls. Wenn Sie es laden, ist die `CHEMMACROS`-Version in der Voreinstellung nur innerhalb von `\iupac` verfügbar.

ortho/meta/para

► `\ortho` → *o*

► `\meta` → *m*

► `\para` → *p*

Absolute Konfiguration (verwendet TikZ)

► `\Rconf[<letter>]` → `\Rconf:`  `\Rconf[]:` 

► `\Sconf[<letter>]` → `\Sconf:`  `\Sconf[]:` 

Beispiele:

```
1 \iupac{\D-Wein\|s"aure} =
2 \iupac{\cip{2S,3S}\-Wein\|s"aure} \
3 \iupac{\D-($-)$-Threose} =
4 \iupac{\cip{2S,3R}\-($-)$-2,3,4-Tri\|hydroxy\|butanal} \
5 \iupac{\cis-2-Buten} =
6 \iupac{\Z-2-Buten}, \
7 \iupac{\cip{2E,4Z}\-Hexa\|dien} \
8 \iupac{\meta-Xylol} =
9 \iupac{1,3-Di\|methyl\|benzol}
```

D-Weinsäure = (2*S*,3*S*)-Weinsäure
 D-(–)-Threose = (2*S*,3*R*)-(–)-2,3,4-Trihydroxybutanal
cis-2-Buten = (*Z*)-2-Buten,
 (2*E*,4*Z*)-Hexadien
m-Xylol = 1,3-Dimethylbenzol

Koordinations-Chemie `CHEMMACROS` stellt zwei Befehle bereit, die in der Koordinationschemie nützlich sein können:

► `\bridge{<num>}` → μ_3 -

► `\hapto{<num>}` → η^5 -

```
1 Ferrocene = \iupac{bis(\hapto{5}cyclo\penta\dienyl)iron} \
2 \iupac{tetra-\bridge{3}iodido-tetrakis[tri\methyl\platinum(IV)]}

Ferrocene = bis( $\eta^5$ -cyclopentadienyl)iron
tetra- $\mu_3$ -iodido-tetrakis[trimethylplatinum(IV)]
```

Zwei Optionen stehen zur Anpassung zur Verfügung:

`iupac` ► `bridge-number` = sub|super → hängt die Nummer als Tiefstellung oder als Hochstellung an. IUPAC empfiehlt die Tiefstellung [`Con+05`]. Default = sub

`iupac` ► `coord-use-hyphen` = true|false → hängt einen Bindestrich an `\hapto` und `\bridge` an wenn true. Default = true

9.1.2. Eigene Nomenklatur-Befehle

Wenn Ihnen Befehle fehlen sollten, können Sie neue definieren.

► `\DeclareChemIUPAC{<cmd>}{<declaration>}`

► `\RenewChemIUPAC{<cmd>}{<declaration>}`

Ein Befehl, der in dieser Weise definiert wurde, gehorcht der Option `iupac`. Das bedeutet, dass bestehende Befehle nur überschrieben werden, wenn Sie die Paketoption `iupac = strict` verwenden. `\DeclareChemIUPAC` wird jedoch die Definition eines bestehenden Nomenklatur-Befehls *nicht* überschreiben, sondern eine Warnung/einen Fehler melden (abhängig von der Paketoption `strict`).

```
1 \DeclareChemIUPAC\endo{\textit{endo}}
2 \RenewChemIUPAC\anti{\textit{anti}}
3 \iupac{(2-\endo,7-\anti)-2-bromo-7-fluoro\bicyclo[2.2.1]heptane}

(2-endo,7-anti)-2-bromo-7-fluorobicyclo[2.2.1]heptane
```

`\RenewChemIUPAC` erlaubt Ihnen, die vordefinierten Befehle umzudefinieren.

1	<code>\iupac{\meta{-Xylol}} \</code>	<i>m</i> -Xylol
2	<code>\RenewChemIUPAC\meta{\textit{m}}</code>	<i>m</i> -Xylol
3	<code>\iupac{\meta{-Xylol}}</code>	

9.2. Lateinische Ausdrücke

Das Paket chemstyle stellt den Befehl `\latin` bereit, um gebräuchliche lateinische Ausdrücke konsistent darzustellen. `CHEMMACROS` definiert ein ähnliches `\latin`, aber nur, wenn chemstyle *nicht* geladen wurde, und stellt zusätzlich diese Befehle bereit:

- `\insitu` → *in situ*
- `\abinitio` → *ab initio*
- `\invacuo` → *in vacuo*

Falls das Paket chemstyle geladen wurde, wurden sie mit chemstyles Befehl `\latin` definiert. Das bedeutet, dass ihr Erscheinungsbild von der chemstyle Option `abbremp` abhängen:

1	<code>\insitu, \abinitio\</code>	<i>in situ, ab initio</i>
2	<code>\cstsetup{abbremp=false}</code>	
3	<code>\insitu, \abinitio</code>	<i>in situ, ab initio</i>

Die Makros wurden mit folgendem Befehl definiert:

- `\DeclareChemLatin{<cmd>}{<phrase>}`
- `\RenewChemLatin{<cmd>}{<phrase>}`

1	<code>\DeclareChemLatin\ltn{latin text}</code>	<i>latin text</i> latin text
2	<code>\ltn \cstsetup{abbremp=false} \ltn</code>	

Wenn Sie chemstyle *nicht* geladen haben, können Sie das Erscheinungsbild mit dieser Option anpassen:

`latin` ► `format` = <definition> → Default = `\itshape`

10. Einheiten für die Verwendung mit siunitx

In der Chemie sind einige nicht-SI-Einheiten sehr verbreitet. Das Paket siunitx stellt den Befehl `\DeclareSIUnit{<command>}{<unit>}` zur Verfügung, um beliebige Einheiten zu definieren. `CHEMMACROS` verwendet diesen Befehl, um die unten gelisteten Einheiten zu definieren. Wie alle siunitx-Einheiten sind sie nur innerhalb von `\SI{<num>}{<unit>}` und `\si{<unit>}` gültig.

- `\atmosphere` → atm
- `\atm` → atm

- ▶ `\calory` → cal
- ▶ `\cal` → cal
- ▶ `\cmc` → cm³ Die Einheiten `\cmc`, `\molar` und `\Molar` werden durch das Paket `chemstyle` ebenfalls definiert. `CHEMMACROS` definiert sie nur, wenn `chemstyle` nicht geladen wurde.
- ▶ `\molar` → mol dm⁻³
- ▶ `\molAr` → mol L⁻¹
- ▶ `\Molar` → M
- ▶ `\MolMass` → g mol⁻¹
- ▶ `\normal` → N
- ▶ `\torr` → torr

Übrigens: `\mmHg` mmHg wird durch `siunitx` und `chemstyle` bereitgestellt.

11. Säure/Base

Einfache Darstellung von pH, pK_A ... (der Befehl `\pKa` hängt von der Paketooption `language` ab).

- ▶ `\pH` → pH
- ▶ `\pOH` → pOH
- ▶ `\Ka` → K_A
- ▶ `\Kb` → K_B
- ▶ `\Kw` → K_W
- ▶ `\pKa[<num>]` → `\pKa`: pK_A, `\pKa[1]`: pK_{A1}
- ▶ `\pKb[<num>]` → `\pKb`: pK_B, `\pKb[1]`: pK_{B1}
- ▶ `\p{<anything>}` → z. B.: `\p{\Kw}` pK_W

<code>\Ka</code> <code>\Kb</code> <code>\pKa</code> <code>\pKa[1]</code> <code>\pKb</code> <code>\pKb[1]</code>	K_A K_B pK_A pK_{A1} pK_B pK_{B1}
---	---

Das voreingestellte Erscheinungsbild der p-Befehle hat sich verändert, um der IUPAC-Empfehlung zu folgen.

The operator p [...] shall be printed in Roman type. *IUPAC Green Book [Coh+08, p. 103]*

Es gibt eine Option, die den Stil, in dem das p dargestellt wird, ändert:

`acid-base` ▶ `p-style` = `italics|slanted|upright` → Default = `upright`

```

1 \pH, \pKa
2
3 \chemsetup[acid-base]{p-style=slanted} \pH, \pKa
4
5 \chemsetup[acid-base]{p-style=italics} \pH, \pKa

pH, pKA
pH, pKA

pH, pKA


```

12. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen

CHEMMACROS unterscheidet zwischen realen (+/−) und formalen (⊕/⊖) Ladungssymbolen, siehe auch Abschnitt 4. Alle Befehle, die formale Ladungen ausgeben, starten mit einem f.

12.1. Ionenladungen

Einfache Verwendung von (realen) Ladungen:

- `\pch[<number>]` → positive Ladung (plus + charge)
- `\mch[<number>]` → negative Ladung (minus + charge)

<pre> 1 \pch, Na\pch, Ca\pch[2]\ 2 \mch, F\mch, S\mch[2] </pre>	$^+, \text{Na}^+, \text{Ca}^{2+}$ $^-, \text{F}^-, \text{S}^{2-}$
---	--

Das gleiche für formale Ladungen:

- `\fpch[<number>]` → positive Ladung
- `\fmch[<number>]` → negative Ladung

<pre> 1 \fpch\ \fmch\ \fpch[3] \fmch[3] </pre>	$\oplus \ominus 3\oplus 3\ominus$
--	-----------------------------------

Es gibt eine Option, die das Verhalten der Ladungen beeinflusst:

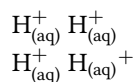
charges ► `append = true|false` → Wenn auf true gesetzt, wird die Ladung mit einer leeren Gruppe angehängt.
Default = false

Das hat folgende Auswirkungen:

```

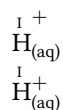
1 % uses package 'mhchem'
2 \chemsetup{charges/append=false, phases/pos=sub}
3 \ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}
4
5 \chemsetup{charges}{append=true}
6 \ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}

```



In den meisten Fällen wird das Verhalten unerwünscht sein, es kann jedoch Gelegenheiten geben, wo es nützlich sein kann:

```
1 \chemsetup{charges/append=false,phases/pos=sub}
2 \ce{\ox{1,H}\pch\aq}
3
4 \chemsetup[charges]{append=true}
5 \ce{\ox{1,H}\pch\aq}
```



12.2. Oxidationszahlen

Eingabe von Oxidationszahlen:

- `\ox[<options>]{<number>,<atom>}` → setzt <number> über <atom>; <number> muss eine (rationale) Zahl sein!

```
1 \ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ox{-1,F} \quad \overset{\text{I}}{\text{Na}}, \overset{\text{II}}{\text{Ca}}, \overset{-\text{II}}{\text{S}}, \overset{-\text{I}}{\text{F}}
```

Es gibt eine Reihe von Optionen, mit denen `\ox` angepasst werden kann.

- ox** ► `parse = true|false` → Wenn false, dann kann ein beliebiger Eintrag für <number> gemacht werden. Default = true
- ox** ► `roman = true|false` → schaltet von römischen auf arabische Ziffern um. Default = true
- ox** ► `pos = top|super|side` →; top setzt <number> über <atom>, super rechts oben als Hochstellung und side rechts daneben in Klammern. Default = top
- ox** ► `explicit-sign = true|false` → gibt + für positive Zahlen und ± für die 0 aus. Default = false
- ox** ► `decimal-marker = comma|point` → Wahl des Dezimalzeichens für Oxidationszahlen wie $\overset{1.2}{\text{X}}$. Default = point
- ox** ► `align = center|right` → Die Oxidationszahl über dem Atom zentrieren oder es mit diesem rechts ausrichten. Default = center

```
1 \ox[roman=false]{2,Ca} \ox{2,Ca} \quad \overset{2}{\text{Ca}} \overset{\text{II}}{\text{Ca}}
2 \ox[pos=super]{3,Fe}-Oxid \quad \text{Fe}^{\text{III}}\text{-Oxid}
3 \ox[pos=side]{3,Fe}-Oxid \quad \text{Fe(III)-Oxid}
4 \ox[parse=false]{?,Mn} \quad \overset{?}{\text{Mn}}
5 \ox[align=right]{2,Ca} \quad \overset{\text{II}}{\text{Ca}}
```

Die `pos` = super-Variante kann auch mit dem Shortcut `\ox*` erzeugt werden:

```
1 \ox{3,Fe} \ox*{3,Fe}  $\overset{\text{III}}{\text{Fe}} \text{Fe}^{\text{III}}$ 
```

Die Verwenden von `explicit-sign` wird immer das Vorzeichen der Oxidationszahl zeigen:

```
1 \chemsetup[ox]{explicit-sign = true}
2 \ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ch{"\ox{0,F}" {}2}

 $\overset{+I}{\text{Na}}, \overset{+II}{\text{Ca}}, \overset{-II\pm 0}{\text{S}}, \text{F}_2$ 
```

```
1 Vergleichen Sie \ox{-1,\ch{O2^2-}} mit \ch{"\ox{-1,O}" {}2^2-}
```

Vergleichen Sie O_2^{2-} mit O_2^{2-}

Manchmal muss man formale Oxidationszahlen wie 0.5 oder $\frac{1}{3}$ verwenden:

```
1 \ox{.5,\ch{Br2}} \ch{"\ox{1/3,I}" {}3+}  $\overset{0.5}{\text{Br}}_2 \overset{1/3}{\text{I}}_3^+$ 
```

Der Bruch verwendet den `\sfrac`-Befehl des `xfrac`²⁹-Pakets. Zu diesem Zweck wurde die Instanz `chemmacros-ox-fraction` definiert.

```
1 \DeclareInstance{xfrac}{chemmacros-ox-fraction}{text}
2 {
3   scale-factor      = 1.2 ,
4   denominator-bot-sep = -.5ex ,
5   numerator-top-sep  = -.3ex ,
6   slash-left-kern    = -.2em ,
7   slash-right-kern   = -.2em ,
8   slash-symbol-font  = lmr
9 }
```

Natürlich können Sie sie nach Ihren Vorstellungen umdefinieren.

12.3. Partialladungen und Ähnliches

Vielleicht selten genutzt, manchmal aber praktisch:

- `\delp` → $\delta+$ (delta + plus)
- `\delm` → $\delta-$ (delta + minus)
- `\fdelp` → $\delta\oplus$
- `\fdelm` → $\delta\ominus$

²⁹ CTAN: `xfrac`

Ein Beispiel mit dem Befehl `\ox` oder mit dem Paket `chemfig`:

```

1 \chemsetup{
2   option/circled = all,
3   ox/parse      = false
4 }
5 \ce{\ox{\del p,H}-\ox{\del m,Cl}} \hspace*{1cm}
6 \chemfig{\chemabove[3pt]{\lewis{246,Br}}{\del m}-\chemabove[3pt]{H}{\del p}}


$$\overset{\delta\oplus}{\text{H}}-\overset{\delta\ominus}{\text{Cl}} \quad \overset{\delta\ominus}{\text{Br}}-\overset{\delta\oplus}{\text{H}}$$


```

Auch diese Makros lassen sich gut mit `chemfig` einsetzen.

- `\scrip` → + (scriptstyle + plus)
- `\scrm` → − (scriptstyle + minus)
- `\fscrp` → ⊕
- `\fscrm` → ⊖
- `\fsscrp` → ⊕ (verwendet `\scriptscriptstyle`)
- `\fsscrm` → ⊖

```

1 \setatomsep{1.8em}\chemfig{CH_3-\chemabove{C}{\scrip}(-[6]C|H_3)-\vphantom{H_3}CH
   _3}
2
3 \chemfig{\fmch{}}|O-\chemabove{N}{\fscrp}(-[1]O|\fmch)-[7]O|\fmch}


$$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\overset{+}{\text{C}}-\text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3 \\ | \\ \ominus\text{O}-\overset{\oplus}{\text{N}}-\text{O}\ominus \end{array}$$


```

13. Reaktionsmechanismen

Mit dem Befehl

- `\mech[<type>]`

kann man die verbreitetsten Reaktionsmechanismen spezifizieren. `<type>` kann einen der folgenden Werte annehmen:

- `\mech` → (leer, kein opt. Argument) nukleophile Substitution S_N
- `\mech[1]` → unimolekulare nukleophile Substitution S_{N1}
- `\mech[2]` → bimolekulare nukleophile Substitution S_{N2}

- ▶ `\mech[se]` → elektrophile Substitution S_E
- ▶ `\mech[1e]` → unimolekulare elektrophile Substitution S_{E1}
- ▶ `\mech[2e]` → bimolekulare elektrophile Substitution S_{E2}
- ▶ `\mech[ar]` → elektrophile aromatische Substitution $Ar-S_E$
- ▶ `\mech[e]` → Eliminierung E
- ▶ `\mech[e1]` → unimolekulare Eliminierung E_1
- ▶ `\mech[e2]` → bimolekulare Eliminierung E_2
- ▶ `\mech[cb]` → unimolekulare Eliminierung “conjugated base”, d. h. via Carbanion E_{1cb}

14. Redoxreaktionen

CHEMMACROS stellt zwei Befehle zur Verfügung, mit denen die Übertragung von Elektronen in Redoxreaktionen angezeigt werden kann.³⁰ Beide Befehle verwenden **TikZ**.

- ▶ `\OX{<name>,<atom>}`
- ▶ `\redox(<name1>,<name2>)[<tikz>][<num>]{<text>}` → Lediglich das erste Argument (`<name1>,<name2>`) wird benötigt, die anderen sind optional.

`\OX` setzt `<atom>` in einen Knoten (eine “Node”) mit dem Namen `<name>`. Wenn Sie zwei `\OX` verwendet haben, dann können sie mit `\redox` verbunden werden. Die Namen der zu verbindenden Knoten werden in runde Klammern geschrieben. Da `\redox` ein Tikzpicture mit den Optionen `remember picture, overlay` erstellt, muss das Dokument *wenigstens zwei mal* kompiliert werden.

```
1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b){oxidation}
   oxidation
   ┌───┐
   Na → Na+
```

Diese Linie kann mit **TikZ**-Keys in `[<tikz>]` angepasst werden:

```
1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}
   ox
   ┌───┐
   Na → Na+
```

Mit dem Argument `[<num>]` kann die Länge der vertikalen Linien angepasst werden. Die Voreinstellung beträgt `.6em`. Diese Länge wird mit `<num>` multipliziert. Ein negativer Wert wird die Linie *unter* den Text setzen.

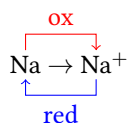
³⁰ Dank an [Peter Cao](#), der dieses Feature vorgeschlagen hat.

14. Redoxreaktionen

```

1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch
2 \redox(a,b)[->,red]{ox}
3 \redox(a,b)[-<,blue][-1]{red}
4 \vspace{7mm}

```



Die Voreinstellung der vertikalen Linien kann mit

redox ► **dist** = <dim> → Default = .6em

angepasst werden:

```

1 \chemsetup{redox/dist=1em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}

```

$$\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+$$

Zusätzlich erlaubt die Option

redox ► **sep** = <dim> → Default = .2em

den Abstand zwischen Atom und Anfang der Linie zu verändern.

```

1 \chemsetup{redox/sep=.5em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}

```

$$\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+$$

Beispiele:

```

1 \ch{ 2 "\OX{o1,Na}" + "\OX{r1,Cl}" {}2 -> 2 "\OX{o2,Na}" \pch{} + 2
2 "\OX{r2,Cl}" \mch }
3 \redox(o1,o2){\small OX: $- 2\text{el}$}
4 \redox(r1,r2)[][-1]{\small RED: $+ 2\text{el}$}
5 \vspace{7mm}

```

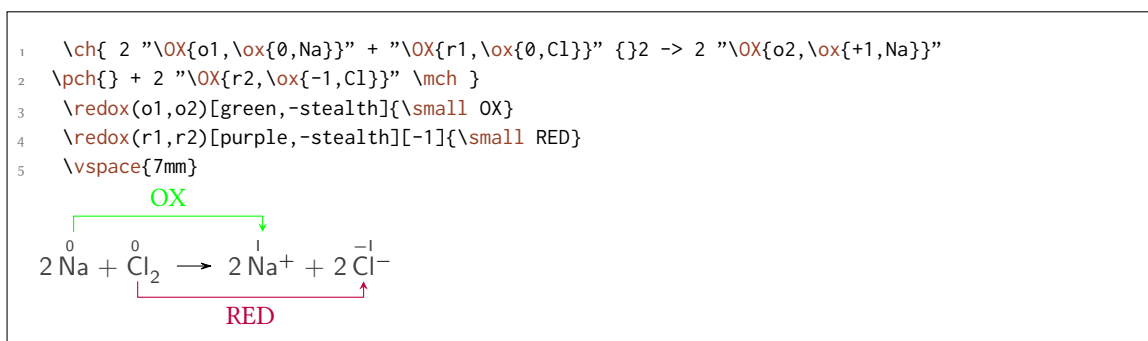
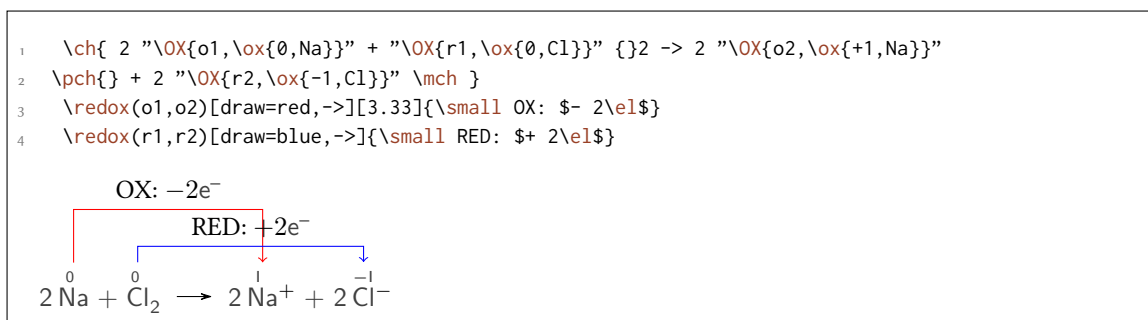
$$2 \text{Na} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2 \text{Na}^+ + 2 \text{Cl}^-$$

```

1 \ch{ 2 "\OX{o1,\ox{0,Na}}" + "\OX{r1,\ox{0,Cl}}" {}2 -> 2 "\OX{o2,\ox{+1,Na}}"
2 \pch{} + 2 "\OX{r2,\ox{-1,Cl}}" \mch }
3 \redox(o1,o2){\small OX: $- 2\text{el}$}
4 \redox(r1,r2)[][-1]{\small RED: $+ 2\text{el}$}
5 \vspace{7mm}

```


15. (Standard) Zustand, Thermodynamik



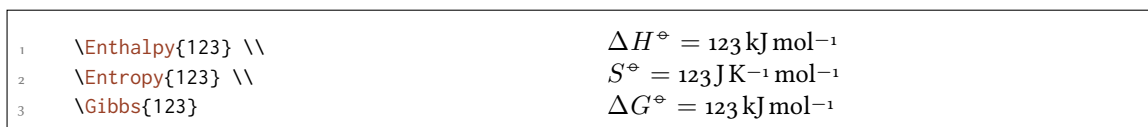
15. (Standard) Zustand, Thermodynamik

15.1. Thermodynamische Größen

Die folgenden Befehle verwenden siunitx:

- `\Enthalpy[<options>](<subscript>){<value>}`
- `\Entropy[<options>](<subscript>){<value>}`
- `\Gibbs[<options>](<subscript>){<value>}`

Ihre Verwendung ist ziemlich selbsterklärend:



Das Argument (<subscript>) Fügt eine Tiefstellung zur Spezifizierung hinzu: `\Enthalpy(r){123}`
 $\Delta_r H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Die Befehle können mit mehreren Optionen angepasst werden:

`-none-` ► `exponent = <anything>`

-none- ▶ `delta` = <anything>|false

-none- ▶ `subscript` = left|right

-none- ▶ `unit` = <unit>

Die Voreinstellung hängt vom jeweiligen Befehl ab:

1	<code>\Enthalpy[unit=\kilo\joule]{-285} \\\</code>	$\Delta H^\ominus = -285 \text{ kJ}$
2	<code>\Gibbs[delta=false]{0} \\\</code>	$G^\ominus = 0 \text{ kJ mol}^{-1}$
3	<code>\Entropy[delta=\Delta,exponent=]{56.7}</code>	$\Delta S = 56.7 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Die Zahl und die Einheit werden entsprechend der Regeln für siunitx gesetzt und hängen von dessen Einstellungen ab:

1	<code>\Enthalpy{-1234.56e3} \\\</code>	
2	<code>\sisetup{per-mode=symbol,exponent-product=\cdot,output-decimal-marker={,},group-four-digits=true}</code>	
3	<code>\Enthalpy{-1234.56e3}</code>	
		$\Delta H^\ominus = -1234.56 \times 10^3 \text{ kJ mol}^{-1}$
		$\Delta H^\ominus = -1\,234,56 \cdot 10^3 \text{ kJ/mol}$

15.1.1. Neue Größen definieren

Mit dem Befehl

▶ `\DeclareChemState[<options>]{<name>}{<symbol>}{<unit>}`

können neue Größen definiert werden.

1	<code>\DeclareChemState{Helmholtz}{A}{\kilo\joule\per\mole}</code>	
2	<code>\DeclareChemState[subscript-left=false,exponent=]{ElPot}{E}{\volt}</code>	
3	<code>\Helmholtz{123.4} \\\</code>	
4	<code>\ElPot{-1.1} \\\</code>	
5	<code>\ElPot[exponent=0]{\$\ch{Sn} \ch{Sn^2+} \ch{Pb^2+} \ch{Pb}\$}{0.01}</code>	
		$\Delta A^\ominus = 123.4 \text{ kJ mol}^{-1}$
		$\Delta E = -1.1 \text{ V}$
		$\Delta E_{\text{Sn} \text{Sn}^{2+} \text{Pb}^{2+} \text{Pb}}^0 = 0.01 \text{ V}$

Dieser Befehl hat fast die gleichen Optionen, wie die Größen selbst, mit denen die Voreinstellung für die neue Größe festgelegt werden können.

▶ `exponent` = <anything>

▶ `delta` = <anything>|false

-none- ▶ `subscript-left` = true|false

▶ `subscript` = <anything>

15.1.2. Größen umdefinieren

Mit

► `\RenewChemState[<options>]{<name>}{<symbol>}{<unit>}`

kann man bestehende Größen umdefinieren:

```
1 \RenewChemState{Enthalpy}{h}{\joule}
2 \Enthalpy{f}{12.5}
```

$$\Delta_f h^\ominus = 12.5 \text{ J}$$

Der Befehl ist analog zu `\DeclareChemState`, d. h. er hat dieselben Optionen.

Man könnte also – um thermodynamischen Konventionen zu folgen – eine molare und eine absolute Größe definieren:

```
1 \DeclareChemState[exponent=]{enthalpy}{h}{\kilojoule\per\mole}% molar
2 \RenewChemState[exponent=J]{Enthalpy}{H}{\kilojoule}% absolute
3 \enthalpy{-12.3} \Enthalpy{-12.3}
```

$$\Delta h = -12.3 \text{ kJ mol}^{-1} \quad \Delta H = -12.3 \text{ kJ}$$

15.2. Zustandsgrößen

Die Befehle, die in Abschnitt 15.1 vorgestellt wurden, verwenden intern den Befehl³¹

► `\State[<options>]{<symbol>}{<subscript>}`

Er kann verwendet werden, um die Größen ohne Wert und Einheit zu schreiben.

Beispiele:

```
1 \State{A}, \State{G}{f}, \State[subscript-left=false]{E}{\ch{Na}},
2 \State[exponent=\SI{1000}]{\celsius}{H}
```

$$\Delta A^\ominus, \Delta_f G^\ominus, \Delta E_{\text{Na}}^\ominus, \Delta H^{1000^\circ \text{C}}$$

Wieder hat er (fast) die gleichen Optionen:

`state` ► `exponent` = <anything>

`state` ► `subscript-left` = true|false

`state` ► `delta` = <anything>|false

16. Spektroskopie und Messdaten

16.1. Der `\NMR`-Befehl

Wenn Substanzen darauf untersucht werden, ob sie sind, was sie sein sollen, wird oft die NMR Spektroskopie eingesetzt. Die Messergebnisse werden dann etwa so aufgeschrieben:

³¹ Beachten Sie, dass `{<subscript>}` ein *optionales* Argument ist.

16. Spektroskopie und Messdaten

^1H -NMR (400 MHz, CDCl_3): $\delta = 1.59$

CHEMMACROS stellt einen Befehl zur Verfügung, der das vereinfacht (verwendet siunitx).

► `\NMR{<num>,<elem>}{<num>,<unit>}[<solvent>]`

► `\NMR*{<num>,<elem>}{<num>,<unit>}[<solvent>]`

Alle Argumente sind optional! Ohne Argumente³² erhalten wir:

1	<code>\NMR \</code>	^1H -NMR: δ
2	<code>\NMR*</code>	^1H -NMR

Das erste Argument spezifiziert die Art der NMR:

1	<code>\NMR{13,C}</code>	^{13}C -NMR: δ
---	-------------------------	--------------------------------

Mit dem zweiten Argument kann die verwendete Frequenz (in MHz) angegeben werden:

1	<code>\NMR(400)</code>	^1H -NMR (400 MHz): δ
---	------------------------	---------------------------------------

Auch mit Einheit:

1	<code>\NMR(4e8,\hertz)</code>	^1H -NMR (4×10^8 Hz): δ
---	-------------------------------	---

Bitte beachten Sie, dass das Setup von siunitx sich auch auf diesen Befehl auswirkt:

1	<code>\sisetup{exponent-product=\cdot}\NMR(4e8,\hertz)</code>	
		^1H -NMR ($4 \cdot 10^8$ Hz): δ

Mit dem dritten Befehl schließlich kann das Lösungsmittel angegeben werden:

1	<code>\NMR[CDCl3]</code>	^1H -NMR (CDCl_3): δ
---	--------------------------	---

16.2. Abkürzungen

Da man verschiedene Kerne in einem Dokument eventuell häufiger benötigt, bietet **CHEMMACROS** eine Möglichkeit, Abkürzungen zu definieren.

► `\DeclareChemNMR{<csname>}{<num>,<atom>}`

► `\RenewChemNMR{<csname>}{<num>,<atom>}`

Das definiert einen Befehl mit denselben Argumenten wie `\NMR`, außer `{<num>,<atom>}`.

³² Alle Argumente können beliebig kombiniert werden. Der Befehl kann auch im Mathematik-Modus eingesetzt werden.

1	<code>\DeclareChemNMR\HNMR{1,H}%</code>	^1H -NMR (400 MHz)
2	<code>\DeclareChemNMR\CNMR{13,C}%</code>	^{13}C -NMR (100 MHz)
3	<code>\CNMR*(100) \</code>	
4	<code>\HNMR*(400)</code>	

16.3. Eine Umgebung, um Messergebnisse darzustellen

Um ein bequemes Eingeben von Messergebnissen zu ermöglichen, bietet CHEMMACROS eine Umgebung.

- `\begin{experimental}` Daten `\end{experimental}` → Umgebung für die Ausgabe von Experimental-Daten. Innerhalb dieser Umgebung sind die folgenden Befehle definiert.
- `\data{<Typ>}[<Spezifikation>]` → Typ der Daten, z. B. IR, MS... In das optionale Argument können weitere Spezifikationen eingegeben werden, die in runden Klammern ausgegeben werden.
- `\data*{<Typ>}[<Spezifikation>]` → Wie `\data`, gibt aber anstelle des = ein : mit aus, wenn `use-equal = true` eingestellt ist.
- `\NMR{<num>,<elem>[<coupling core>]}(<num>,<unit>)[<solvent>]` → der Befehl bekommt ein weiteres Argument: `\NMR{13,C[^1H]}` $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR: δ
- `\J(<bonds>;<nuclei>)[<unit>]{<list of nums>}` → Kopplungskonstante, Werte werden mit ; getrennt eingegeben. Für NMR. Das Argument (`<bonds>;<nuclei>`) ist optional und ermöglicht die Angabe von genaueren Spezifikationen der Kopplung.
- `\#{<num>}` → Anzahl der Kerne. Für NMR.
- `\pos{<num>}` → Position/Nummer des Kerns. Für NMR.
- `\val{<num>}` → Zahlenwert, ein Alias für siunitx' `\num{<num>}`
- `\val{<num1>--<num2>}` → Ein Alias für siunitx' `\numrange{<num1>}{<num2>}`

1	<code>\begin{experimental}</code>
2	<code>\data{Typ1}</code> Daten.
3	<code>\data{Typ2}[Spezifikationen]</code> noch mehr Daten.
4	<code>\data*{Typ3}</code> weitere Daten.
5	<code>\end{experimental}</code>

Typ1 Daten. Typ2 (Spezifikationen) noch mehr Daten. Typ3 weitere Daten.

16.4. Anpassung

Die Ausgabe der Umgebung und der NMR-Befehle kann mir einer Reihe Optionen angepasst werden. Aus historischen Gründen gehören sie dem Modul `nmr` an.

`nmr` ► `unit = <unit>` → Default = `\mega\hertz`

- nmr** ▶ **nucleus** = {<num>,<atom>} → Default = {1,H}
- nmr** ▶ **format** = <commands> → zum Beispiel `\bfseries`
- nmr** ▶ **pos-number** = side|sub → Position der Zahl neben dem Atom. Default = side
- nmr** ▶ **coupling-unit** = <unit> → Eine siunitx Einheit. Default = `\hertz`
- nmr** ▶ **parse** = `true`|false → Das Lösungsmittel als mhchem/CHEMFORMULA-Formel behandeln oder nicht. Default = true
- nmr** ▶ **delta** = <tokens> → Die <tokens> werden nach δ eingefügt.
- nmr** ▶ **list** = `true`|false → Die Umgebung `\begin{nmr}[<optionen>] \end{nmr}` wird als Liste formatiert. Default = false
- nmr** ▶ **list-setup** = <setup> → Setup der Liste. Default = siehe unten.
- nmr** ▶ **use-equal** = `true`|false → Istgleich-Zeichen nach `\NMR` und `\data` einsetzen. Default = false

Das Default-Setup der Liste:

```

1 \topsep\z@skip \partopsep\z@skip
2 \itemsep\z@ \parsep\z@ \itemindent\z@
3 \leftmargin\z@

```

```

1 \begin{experimental}[format=\bfseries]
2 \data{Typ1} Daten.
3 \data{Typ2}[Spezifikationen] noch mehr Daten.
4 \data*{Typ3} weitere Daten.
5 \end{experimental}

```

Typ1 Daten. **Typ2 (Spezifikationen)** noch mehr Daten. **Typ3** weitere Daten.

Der Befehl `\NMR` und alle mit `\DeclareChemNMR` definierten Befehle können anstelle von `\data` für NMR-Daten eingesetzt werden.

```

1 \begin{experimental}[format=\bfseries,use-equal]
2 \data{Typ1} Daten.
3 \data{Typ2}[Spezifikationen] noch mehr Daten.
4 \NMR weitere Daten.
5 \end{experimental}

```

Typ1 = Daten. **Typ2 (Spezifikationen)** = noch mehr Daten. **¹H-NMR: δ** = weitere Daten.

16.5. Anwendungsbeispiel

Der folgende Code in verschiedenen Ausgaben abhängig von der Auswahl der <optionen>. Die Optionen können selbstverständlich auch mit `\chemsetup` global gesetzt werden.

16. Spektroskopie und Messdaten

```
1 \sisetup{separate-uncertainty,per-mode=symbol,detect-all,range-phrase=--}
2 \begin{experimental}[<optionen>]
3 \data*{Ausbeute} \SI{17}{\milli\gram} gelbe Nadeln (\SI{0.04}{\milli\mole},
4 \SI{13}{\percent}).
5 %
6 \data{Smp.} \SI{277}{\celsius} (DSC).
7 %
8 \NMR{600}[CDC13] \val{2.01} (s, \#{24}, \pos{5}), \val{2.31} (s, \#{12}, \
9 pos{1}), \val{6.72--6.74} (m, \#{2}, \pos{11}), \val{6.82} (s, \#{8}, \pos
10 {3}), \val{7.05--7.07} (m, \#{2}, \pos{12}), \val{7.39--7.41} (m, \#{4}, \
11 pos{9}), \val{7.48--7.49} (m, \#{4}, \pos{8}).
12 %
13 \NMR{13,C}(150)[CDC13] \val{21.2} ($+$, \#{4}, \pos{1}), \val{23.4} ($+$,
14 \#{8}, \pos{5}), \val{126.0} ($+$, \#{4}, \pos{9}), \val{128.2} ($+$,
15 \#{8}, \pos{3}), \val{130.8} ($+$, \#{2}, \pos{12}), \val{133.6} ($+$,
16 \#{2}, \pos{11}), \val{137.0} ($+$, \#{4}, \pos{8}), \val{138.6} (q, \#{4},
17 \pos{2}), \val{140.6} (q, \#{2}, \pos{10}), \val{140.8} (q, \#{8}, \pos
18 {4}), \val{141.8} (q, \#{4}, \pos{6}), \val{145.6} (q, \#{2}, \pos{7}).
19 %
20 \data{MS}[DCP, EI, \SI{60}{\electronvolt}] \val{703} (2, \ch{M+}), \val{582}
21 (1), \val{462} (1), \val{249} (13), \val{120} (41), \val{105} (100).
22 %
23 \data{MS}[\ch{MeOH + H2O + KI}, ESI, \SI{10}{\electronvolt}] \val{720} (100,
24 \ch{M+ + OH-}), \val{368} (\ch{M+ + 2 OH-}).
25 %
26 \data{IR}[KBr] \val{3443} (w), \val{3061} (w), \val{2957} (m), \val{2918} (m
27 ), \val{2856} (w), \val{2729} (w), \val{1725} (w), \val{1606} (s), \val
28 {1592} (s), \val{1545} (w), \val{1446} (m), \val{1421} (m), \val{1402} (m),
29 \val{1357} (w), \val{1278} (w), \val{1238} (s), \val{1214} (s), \val{1172}
30 (s), \val{1154} (m), \val{1101} (w), \val{1030} (w), \val{979} (m), \val
31 {874} (m), \val{846} (s), \val{818} (w), \val{798} (m), \val{744} (w), \val
32 {724} (m), \val{663} (w), \val{586} (w), \val{562} (w), \val{515} (w).
33 %
34 \data*{UV-Vis} \SI{386}{\nano\metre} ($\varepsilon = \val{65984}$), \SI
35 {406}{\nano\metre} ($\varepsilon = \val{65378}$).
36 %
37 \data*{Quantenausbeute} $\Phi = \val{0.74+-0.1}$\,.
38 \end{experimental}
```

16.5.1. Beinahe Standard

Ausgabe für <optionen>: delta=(ppm), pos-number=sub, use-equal:

Ausbeute: 17 mg gelbe Nadeln (0.04 mmol, 13 %). Smp. = 277 °C (DSC). ¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 2.01 (s, 24 H, H₅), 2.31 (s, 12 H, H₁), 6.72–6.74 (m, 2 H, H₁₁), 6.82 (s, 8 H, H₃), 7.05–7.07 (m, 2 H, H₁₂), 7.39–7.41 (m, 4 H, H₉), 7.48–7.49 (m, 4 H, H₈). ¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 21.2 (+, 4 C, C₁), 23.4 (+, 8 C, C₅), 126.0 (+, 4 C, C₉), 128.2 (+, 8 C, C₃), 130.8 (+, 2 C, C₁₂), 133.6 (+, 2 C, C₁₁), 137.0 (+, 4 C, C₈), 138.6 (q, 4 C, C₂), 140.6 (q, 2 C, C₁₀), 140.8 (q, 8 C, C₄), 141.8 (q, 4 C, C₆), 145.6 (q, 2 C, C₇). MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M⁺), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100). MS (MeOH + H₂O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M⁺ + OH⁻), 368 (M⁺ + 2 OH⁻). IR (KBr) = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m),

1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m), 1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w). UV-Vis: 386 nm ($\varepsilon = 65\,984$), 406 nm ($\varepsilon = 65\,378$). Quantenausbeute: $\Phi = 0.74 \pm 0.10$.

16.5.2. Formatierte Liste

Ausgabe für <optionen>: `format=\bfseries,delta=(ppm),list=true,use-equal:`

Ausbeute: 17 mg gelbe Nadeln (0.04 mmol, 13 %).

Smp. = 277 °C (DSC).

¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 2.01 (s, 24 H, H-5), 2.31 (s, 12 H, H-1), 6.72–6.74 (m, 2 H, H-11), 6.82 (s, 8 H, H-3), 7.05–7.07 (m, 2 H, H-12), 7.39–7.41 (m, 4 H, H-9), 7.48–7.49 (m, 4 H, H-8).

¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): δ (ppm) = 21.2 (+, 4 C, C-1), 23.4 (+, 8 C, C-5), 126.0 (+, 4 C, C-9), 128.2 (+, 8 C, C-3), 130.8 (+, 2 C, C-12), 133.6 (+, 2 C, C-11), 137.0 (+, 4 C, C-8), 138.6 (q, 4 C, C-2), 140.6 (q, 2 C, C-10), 140.8 (q, 8 C, C-4), 141.8 (q, 4 C, C-6), 145.6 (q, 2 C, C-7).

MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M⁺), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

MS (MeOH + H₂O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M⁺ + OH⁻), 368 (M⁺ + 2 OH⁻).

IR (KBr) = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m), 1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m), 1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w).

UV-Vis: 386 nm ($\varepsilon = 65\,984$), 406 nm ($\varepsilon = 65\,378$).

Quantenausbeute: $\Phi = 0.74 \pm 0.10$.

16.5.3. Verrückt

Ausgabe für <optionen>:

```
1 format=\color{red}\itshape,
2 list=true,
3 delta=\textcolor{green}{\ch{M+ + H2O}},
4 pos-number=side,
5 coupling-unit=\mega\gram\per\square\second,
6 list-setup=,
7 use-equal
```

Ausbeute: 17 mg gelbe Nadeln (0.04 mmol, 13 %).

Smp. = 277 °C (DSC).

¹H-NMR (600 MHz, CDCl₃): δ **M⁺ + H₂O** = 2.01 (s, 24 H, H-5), 2.31 (s, 12 H, H-1), 6.72–6.74 (m, 2 H, H-11), 6.82 (s, 8 H, H-3), 7.05–7.07 (m, 2 H, H-12), 7.39–7.41 (m, 4 H, H-9), 7.48–7.49 (m, 4 H, H-8).

¹³C-NMR (150 MHz, CDCl₃): δ **M⁺ + H₂O** = 21.2 (+, 4 C, C-1), 23.4 (+, 8 C, C-5), 126.0 (+, 4 C, C-9), 128.2 (+, 8 C, C-3), 130.8 (+, 2 C, C-12), 133.6 (+, 2 C, C-11), 137.0 (+, 4 C, C-8), 138.6 (q, 4 C, C-2), 140.6 (q, 2 C, C-10), 140.8 (q, 8 C, C-4), 141.8 (q, 4 C, C-6), 145.6 (q, 2 C, C-7).

MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M⁺), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

MS (MeOH + H₂O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M⁺ + OH⁻), 368 (M⁺ + 2 OH⁻).

IR (KBr) = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m), 1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m), 1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w).

UV-Vis: 386 nm ($\varepsilon = 65\,984$), 406 nm ($\varepsilon = 65\,378$).

Quantenausbeute: $\Phi = 0.74 \pm 0.10$.

17. Befehle für mhchem

mhchem wird nicht mehr automatisch geladen, sondern nur noch, wenn Sie die Option `method = mhchem` in der Präambel verwenden. Als Voreinstellung verwendet CHEMMACROS stattdessen CHEMFORMULA.

CHEMMACROS stellt nur einen Befehl speziell für mhchem³³ bereit. Er erlaubt es, Text unter eine Formel zu schreiben.

► `\mhName[<options>]{<formula>}{<text>}`

Zum Beispiel:

```
1 \ce{4 C2H5Cl + Pb / Na -> \mhName{Pb(C2H5)4}{former antiknock additive} + NaCl}

4 C2H5Cl + Pb/Na → Pb(C2H5)4 + NaCl
                        former
                        antiknock
                        additive
```

Mit den folgenden Optionen kann `\mhName` angepasst werden:

`mhName` ► `align = <alignment command>` → Die Ausrichtung des Textes innerhalb der Box, in die er geschrieben wird. Default = `\centering`

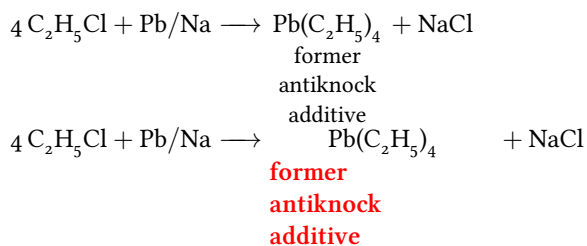
`mhName` ► `format = <anything>` → Das Format des Textes.

`mhName` ► `fontsize = ` → Die Schriftgröße des Textes. Default = `\tiny`

`mhName` ► `width = <dim>|auto` → Die Breite der Box, in die der Text geschrieben wird. Default = `auto`

```
1 \ce{4 C2H5Cl + Pb / Na -> \mhName[fontsize=\footnotesize]{Pb(C2H5)4}{former
   antiknock additive} + NaCl}\\
2 \chemsetup[mhName]{align=\raggedright, fontsize=\small, format=\bfseries\color{red}
   }, width=3cm}
3 \ce{4 C2H5Cl + Pb / Na -> \mhName{Pb(C2H5)4}{former antiknock additive} + NaCl}
```

³³ CHEMFORMULA hat seine eigene Möglichkeit.



18. Reaktionsumgebungen

18.1. Durch CHEMMACROS definiert

Es stehen folgende Umgebungen für nummerierte...

- `\begin{reaction} <formula or mhchem code> \end{reaction}`
- `\begin{reactions} <formula or mhchem code> \end{reactions}`

...und ihre gesternten Versionen für unnummerierte Reaktionen zur Verfügung.

- `\begin{reaction*} <formula or mhchem code> \end{reaction*}`
- `\begin{reactions*} <formula or mhchem code> \end{reactions*}`

Damit können Sie (un-) nummerierte Reaktionsgleichungen erstellen ähnlich den mathematischen Gleichungen.

Die Umgebungen `reaction/reaction*` verwenden intern `equation/equation*` Umgebungen und die Umgebungen `reactions/reactions*` verwenden die `align/align*` Umgebungen, um die Reaktionen darzustellen.

1	Reaktion mit Zähler:	Reaktion mit Zähler:	
2	<code>\begin{reaction}</code>		
3	<code>A -> B</code>	$A \longrightarrow B$	{1}
4	<code>\end{reaction}</code>		

1	Reaktion ohne Zähler:	Reaktion ohne Zähler:	
2	<code>\begin{reaction*}</code>		
3	<code>C -> D</code>	$C \longrightarrow D$	
4	<code>\end{reaction*}</code>		

1	mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler:
2	<code>\begin{reactions}</code>
3	<code>A &-> B + C \\\</code>
4	<code>D + E &-> F</code>
5	<code>\end{reactions}</code>

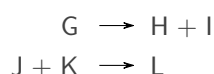
mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler:



1 mehrere ausgerichtete Reaktionen ohne Zähler:

```
2 \begin{reactions*}
3   G      &-> H + I \\
4   J + K &-> L
5 \end{reactions*}
```

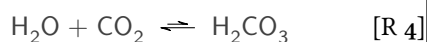
mehrere ausgerichtete Reaktionen ohne Zähler:



Wenn Sie das Layout der Zähler-Tags ändern wollen, verwenden Sie

► `\renewtagform{<tagname>}[<format>]{<right delim>}{<left delim>}`.³⁴

```
1 \renewtagform{reaction}[R \textbf{ }{}]
2 \begin{reaction}
3   H2O + CO2 <=> H2CO3
4 \end{reaction}
```



Seit Version 3.3 funktionieren Querverweise und $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}$ maths `\intertext` wie erwartet:

```
1 \begin{reactions}
2   A + 2 B &-> 3 C + D \label{rxn:test}
3   \intertext{Etwas Text zwischen ausgerichteten Reaktionen.}
4   3 E + F &<=> G + 1/2 H
5 \end{reactions}
6 Siehe Reaktion \ref{rxn:test}.
```



Etwas Text zwischen ausgerichteten Reaktionen.



Siehe Reaktion 5.

In der Standardeinstellung, d. h. mit `method = chemformula`, sollten Sie `\mch` und die verwandten Befehle innerhalb der `reaction` Umgebungen nicht verwenden. Sie bringen in den meisten Fällen die korrekte Ausrichtung durcheinander. In der Standardeinstellung erkennen Ladungen in den Umgebungen die Einstellung der Option `circled` automatisch, so dass die Befehle auch nicht benötigt werden.

³⁴ Durch das `mathtools` Paket zur Verfügung gestellt.

18.2. Eigene Reaktionen

Sie können mit dem Befehl

► `\DeclareChemReaction[<options>]{<name>}{<math name>}`

weitere Reaktionsumgebungen erstellen.

<name> wird der Name der neuen Umgebung sein. <math name> ist die verwendete Mathematikumgebung.

Der Befehl hat zwei Optionen.

-none- ► `star = true|false`

-none- ► `arg = true|false`

Zum einen `star`, die auch die gesternte Variante definiert, vorausgesetzt, die entsprechende Mathematikumgebung existiert. Falls nicht, wird es einen Fehler geben.

Dann gibt es `arg`, die verwendet wird, um eine Umgebung mit einem obligatorischen Argument zu erstellen. Auch das funktioniert natürlich nur, wenn die entsprechende Mathematikumgebung ebenfalls ein obligatorisches Argument besitzt.

Die vordefinierten Umgebungen wurden durch

► `\DeclareChemReaction[star]{reaction}{equation}` und

► `\DeclareChemReaction[star]{reactions}{align}`.

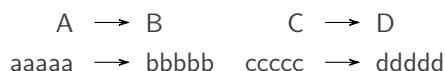
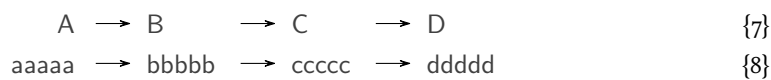
definiert.

Nehmen wir an, Sie wollen eine Umgebung mit dem Verhalten der `alignat` Umgebung für `CHEM-FORMULA`-/mhchem-Reaktionen. Sie könnten folgendes tun:

```
1 \DeclareChemReaction[star,arg]{reactionsat}{alignat}
```

Damit ist die `reactionsat`-Umgebung definiert.

```
1 \DeclareChemReaction[star,arg]{reactionsat}{alignat}
2 \begin{reactionsat}{3}
3   A      &-> B      &&-> C      &&-> D \\\
4   aaaaa &-> bbbbbb &&-> ccccc &&-> ddddd
5 \end{reactionsat}
6 \begin{reactionsat*}{2}
7   A      &-> B      & C              &-> D \\\
8   aaaaa &-> bbbbbb &\quad{} & ccccc &-> ddddd
9 \end{reactionsat*}
```



18.3. Liste der Reaktionen

CHEMMACROS stellt ebenso einen Befehl zur Verfügung, mit dem man eine Liste der Reaktionen ausgeben kann, die mit den Reaktionsumgebungen eingegeben wurden.

► `\listofreactions`

<pre>1 \listofreactions</pre>	
<h2 style="margin: 0;">List of reactions</h2>	
Reaction {1}	34
Reaction {2}	35
Reaction {3}	35
Reaction [R 4]	35
Reaction {5}	35
Reaction {6}	35
Reaction {7}	37
Reaction {8}	37
Reaction {9}: Autoprotolyse	38
Reaction {10}: first step of chain	38
Reaction {11}: second step of chain	38
Reaction {12}: Synthese von Alkanen	63

Der Output kann mit den folgenden Optionen angepasst werden:

reaction ► **list-name** = <name of the list> → Setzen der Listenüberschrift. Default = Reaktionsverzeichnis

reaction ► **list-entry** = <prefix to each entry> → Präfix zu jedem Eintrag. Default = Reaktion

option Beide Default-Werte reagieren auf die Option **german**.

Statt die Option **list-name** zu verwenden, könnten Sie auch `\reactionlistname` umdefinieren.

Im Verzeichnis werden alle Reaktionen mit Zählen gelistet und alle anderen nicht aufgenommen. Alle Reaktionsumgebungen ohne Stern haben ein optionales Argument, mit dem man eine Beschreibung für die Liste hinzufügen kann.

```

1 \begin{reaction}[Autoprotolyse]
2   2 H2O <=> H3O+ + OH-
3 \end{reaction}

```

$$2 \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^- \quad \{9\}$$

Wenn Sie die reactions Umgebung verwenden, wird das allerdings nicht funktionieren. In diesem Fall können Sie

► `\AddRxnDesc{<description>}`

verwenden.

```

1 \begin{reactions}
2   Cl "\Lewis{0.,\vphantom{Cl}}" + CH4 &-> HCl + "\Lewis{4.,\vphantom{CH}}" CH3
   \AddRxnDesc{first~step~of~chain} \
3   "\Lewis{4.,\vphantom{CH}}" CH3 + Cl2 &-> CH3Cl + Cl "\Lewis{0.,\vphantom{Cl}}"
   \AddRxnDesc{second~step~of~chain}
4 \end{reactions}

```

$$\text{Cl}\cdot + \text{CH}_4 \rightarrow \text{HCl} + \cdot\text{CH}_3 \quad \{10\}$$

$$\cdot\text{CH}_3 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}\cdot \quad \{11\}$$

Nebenbei: Sie müssen die Phantom-Befehle nicht verwenden, wenn Sie das Format der Atome nicht geändert haben, siehe Abschnitt 30 an Seite 60.

19. Phasen

19.1. Grundlagen

Diese Befehle sollen helfen, die Phase einer Substanz anzuzeigen.

► `\sld` → (s)

► `\lqd` → (l)

► `\gas` → (g)

► `\aq` → (aq)

Das Default-Verhalten der Phasen-Befehle hat sich geändert, um der IUPAC-Empfehlung zu folgen. Sowohl `\sld` als auch `\lqd` haben kein optionales Argument mehr.

```

1 \ch{C\sld} + 2 H2O\lqd{} -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{}\\
2   der Vollständigkeit halber: NaCl\aq.

```

$$\text{C(s)} + 2 \text{H}_2\text{O(l)} \rightarrow \text{CO}_2\text{(g)} + 2 \text{H}_2\text{(g)}$$

der Vollständigkeit halber: NaCl(aq).

Mit der Paketoption `language = english` (siehe Abschnitt 4) erhalten Sie die englischen Versionen.

Die IUPAC-Empfehlung³⁵ um einen Aggregatzustand anzuzeigen ist es, sie in Klammern nach der Formel zu schreiben [Coh+08]. Es ist jedoch ebenfalls verbreitet, sie als Tiefstellung zu setzen.

The [...] symbols are used to represent the states of aggregation of chemical species. The letters are appended to the formula in parentheses and should be printed in Roman (upright) type without a full stop (period).
IUPAC Green Book [Coh+08, p. 54]

Es gibt zwei Optionen, um den Output anzupassen:

`phases` ► `pos = side|sub` → Umschalten der Position des Phasen-Anzeigers. Default = `side`

`phases` ► `space = <dim>` → Ändern des Zwischenraums zwischen Formel und dem Phasen-Anzeiger bei `pos = side`. Eine $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Dimension. Default = `.1333em`

```
1 \chemsetup{phases}{pos=sub}
2 \ch{C\sld{}} + 2 H2O\lqd{} -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{}\\
3 der Vollst\"andigkeit halber: NaCl\aq.

C(s) + 2 H2O(l) → CO2(g) + 2 H2(g)
der Vollständigkeit halber: NaCl(aq).
```

19.2. Eigene Phasen definieren

Abhängig vom Thema ihres Dokuments müssen Sie unter Umständen andere Aggregatzustände anzeigen. Sie können Sie einfach definieren.

- `\DeclareChemPhase{<cmd>}[<german>]{<english>}`
- `\RenewChemPhase{<cmd>}[<german>]{<english>}`
- `\phase{<phase>}` → Wenn Sie die Phase nur ein- oder zweimal verwenden müssen.

`\DeclareChemPhase` definiert die Phase nur dann, wenn `<cmd>` noch nicht existiert. Andernfalls wird `CHEMMACROS` entweder eine Warnung oder einen Fehler ausgeben, abhängig von der Option `strict`. `\RenewChemParticle` definiert eine Phase *nur*, wenn `<cmd>` schon existiert und gibt andernfalls eine Warnung/einen Fehler.

```
1 \DeclareChemPhase{\aqi}{aq,$\infty$}% aqueous solution at infinite dilution
2 \DeclareChemPhase{\cd}{cd}% condensed phase
3 \RenewChemPhase{\lqd}{lc}% liquid crystal
4 NaOH\aqi\ \ch{H2O\cd} U\phase{cr} A\lqd \\
5 \chemsetup{phases}{pos=sub}
6 NaOH\aqi\ \ch{H2O\cd} U\phase{cr} A\lqd

NaOH(aq, $\infty$ ) H2O (cd) U(cr) A(lc)
NaOH(aq, $\infty$ ) H2O(cd) U(cr) A(lc)
```

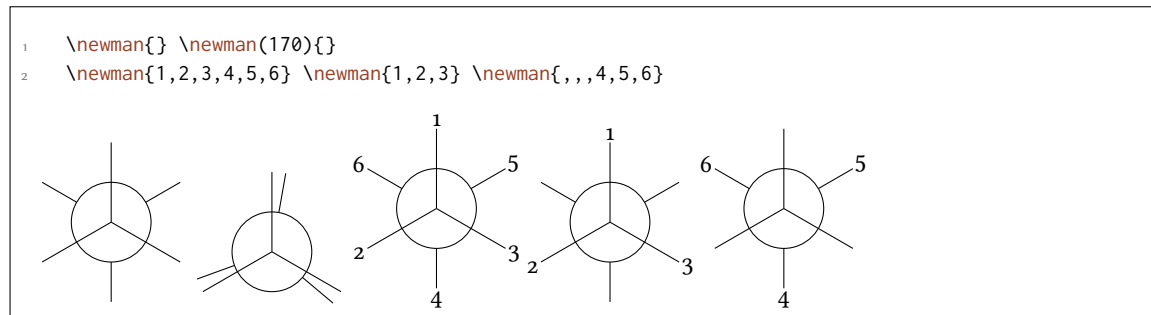
³⁵ Vielen Dank an Paul King für den Hinweis.

20. Newman-Projektionen

CHEMMACROS stellt den Befehl

► `\newman[<options>](<angle>){<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}`

zur Verfügung, der Ihnen erlaubt, Newman-Projektionen zu erstellen (verwendet *TikZ*). Das Argument (<angle>) dreht die hinteren Atome gegen den Uhrzeigersinn bezüglich der vorderen Atome.



Es gibt einige Optionen, um den Befehl anzupassen:

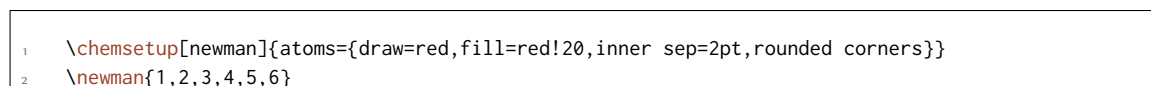
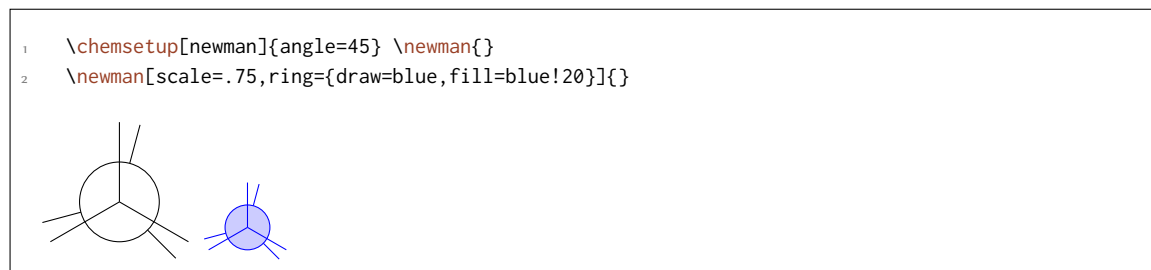
`newman` ► `angle` = <angle> → Voreingestellter Winkel. Default = 0

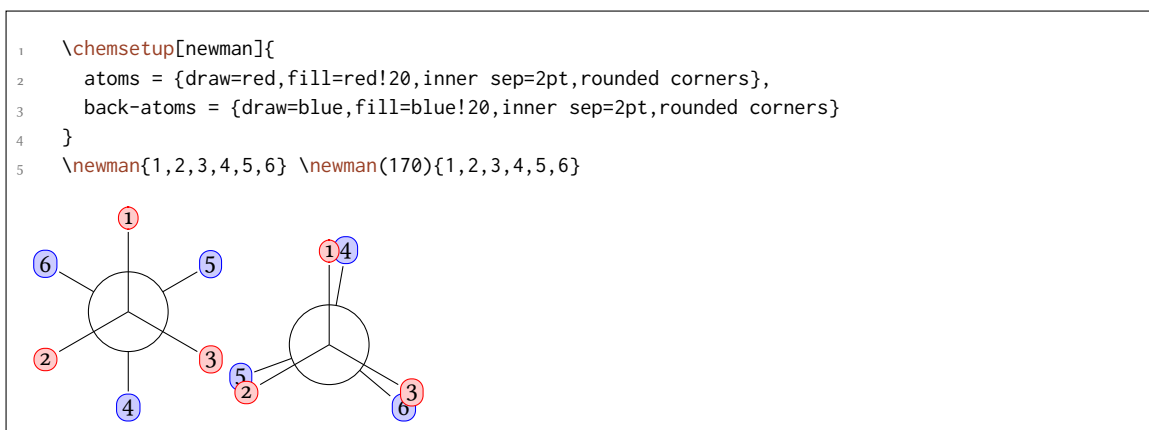
`newman` ► `scale` = <factor> → Skaliert die ganze Projektion. Default = 1

`newman` ► `ring` = <tikz> → Aussehen des Rings mit *TikZ*-Keys anpassen.

`newman` ► `atoms` = <tikz> → Aussehen der Knoten, in die die Atome geschrieben werden, mit *TikZ*-Keys anpassen.

`newman` ► `back-atoms` = <tikz> → Nur die hinteren Atome anpassen.





21. s, p und Hybrid-Orbitale

CHEMMACROS stellt einen Befehl bereit, mit dem Orbitale visualisiert werden können:

► `\orbital[<options>]{<type>}`

Dabei stehen folgende Typen für `{<type>}` zur Verfügung:

s

p

sp

sp²

sp³



Abhängig vom Typ stehen verschiedene Optionen zur Modifikation zur Auswahl:

`orbital` ► `phase = ±|-` → Ändern der Phase des Orbitals (alle Typen).

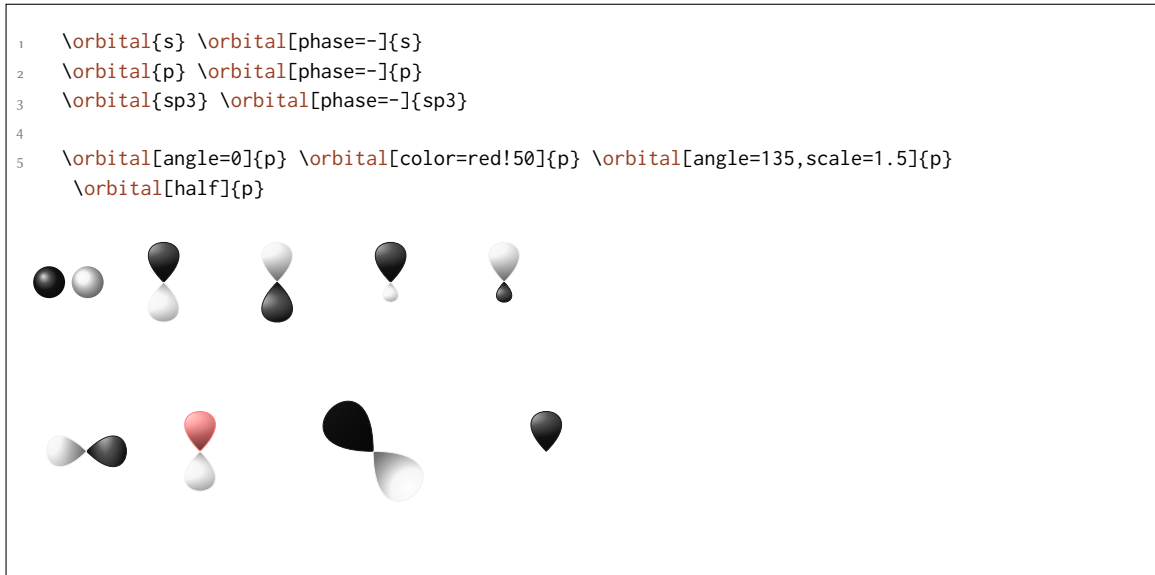
21. s, p und Hybrid-Orbitale

orbital ► **scale** = <factor> → Ändern der Größe des Orbitals (alle Typen).

orbital ► **color** = <color> → Ändern der Farbe des Orbitale (alle Typen).

orbital ► **angle** = <angle> → Rotiert die Orbitale mit einem p-Anteil gegen den Uhrzeigersinn (alle Typen außer s).

orbital ► **half** = true|false → stellt nur ein halbes Orbital dar (nur p).



Zusätzlich gibt es zwei Optionen, mit denen das *TikZ*-Verhalten beeinflusst werden kann:

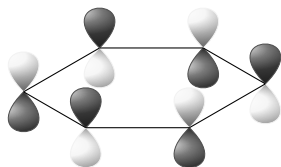
orbital ► **overlay** = true|false → Das Orbital „braucht keinen Platz“; es wird mit dem *TikZ*-Key `overlay` gezeichnet.

orbital ► **opacity** = <num> → Das Orbital wird durchsichtig; <value> kann Werte zwischen 1 (undurchsichtig) bis 0 (unsichtbar) annehmen.

```

1 \hspace{1cm}
2 \chemsetup[orbital]{
3   overlay,
4   p/color = black!70
5 }
6 \setbondoffset{0pt}
7 \chemfig{?\orbital{p}-[1.3]{\orbital[phase=-]{p}}-[:30,1.1]\orbital{p}
8   }-[:150,.9]{\orbital[phase=-]{p}}-[4,1.3]\orbital{p}-[: -150,1.1]{\orbital[phase
9   =-]{p}}??}
10 \vspace{7mm}

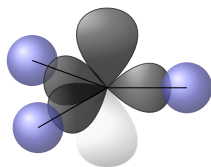
```



```

1 \hspace{2cm}
2 \setbondoffset{0pt}
3 \chemsetup[orbital]{
4   overlay ,
5   opacity = .75 ,
6   p/scale = 1.6 ,
7   s/color = blue!50 ,
8   s/scale = 1.6
9 }
10 \chemfig{\orbital{s}-[: -20]{\orbital[scale=2]{p}}{\orbital[half,angle=0]{p}}{\
11   \orbital[angle=170,half]{p}}{\orbital[angle=-150,half]{p}}(-[: -150]\orbital{s})
12   -\orbital{s}}
13 \vspace{1cm}

```



Teil III.

chemformula

22. Setup

Alle Optionen von `CHEMFORMULA` gehören dem Modul `chemformula` an. Das bedeutet, sie können via

```

1 \chemsetup[chemformula]{<options>} oder
2 \chemsetup{chemformula/<option1>,chemformula/<option2>}

```

eingestellt werden.

Sie können außerdem direkt als Option an den Befehl `\ch` weitergegeben werden.

23. Das Grundprinzip

CHEMFORMULA hat einen Hauptbefehl.

► `\ch[<options>]{<input>}`

Die Verwendung wird Ihnen sehr vertraut vorkommen, wenn Ihnen `mhchem` geläufig ist:

1 <code>\ch{H2O} \\\</code>	H_2O
2 <code>\ch{Sb2O3} \\\</code>	Sb_2O_3
3 <code>\ch{H+} \\\</code>	H^+
4 <code>\ch{CrO4^2-} \\\</code>	CrO_4^{2-}
5 <code>\ch{AgCl2-} \\\</code>	AgCl_2^-
6 <code>\ch{[AgCl2]-} \\\</code>	$[\text{AgCl}_2]^-$
7 <code>\ch{Y^{99+}} \\\</code>	Y^{99+}
8 <code>\ch{Y^{99+}} \\\</code>	Y^{99+}
9 <code>\ch{H2_{(aq)}} \\\</code>	$\text{H}_{2(\text{aq})}$
10 <code>\ch{NO3-} \\\</code>	NO_3^-
11 <code>\ch{(NH4)2S} \\\</code>	$(\text{NH}_4)_2\text{S}$
12 <code>\ch^{227}_{90}{Th+} \\\</code>	$^{227}_{90}\text{Th}^+$
13 <code>\$V_{\ch{H2O}}\$ \\\</code>	$V_{\text{H}_2\text{O}}$
14 <code>\ch{Ce^{IV}} \\\</code>	Ce^{IV}
15 <code>\ch{KCr(SO4)2 * 12 H2O}</code>	$\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$

Es gibt jedoch Unterschiede. Der wichtigste: **CHEMFORMULA** unterscheidet zwischen verschiedenen Input-Typen. Diese verschiedenen Typen *müssen* durch Leerzeichen getrennt eingegeben werden:

► `\ch{type1 type2 type3 type4}`

Ein Leerzeichen im Input ist *niemals* ein Leerzeichen im Output. Die Rolle des Leerzeichens gilt strikt und kann zu Fehlern oder fehlerhaften Output führen, wenn sie nicht beachtet wird.

Ein weiterer wichtiger Unterschied: **CHEMFORMULA** versucht, den Mathematikmodus weitestgehend zu vermeiden:

1 <code>\ch{A + B ->[a] C} \\\</code>	$\text{A} + \text{B} \xrightarrow{\text{a}} \text{C}$
2 <code>\ce{A + B ->[a] C}</code>	$\text{A} + \text{B} \xrightarrow{\text{a}} \text{C}$

Der erste Punkt bedeutet, dass `\ch{2H2O}` als *ein* Teil behandelt wird, in diesem Fall als Summenformel.

24. Stöchiometrische Faktoren

1	<code>\ch{2H2O} \</code>	$2\text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch{2 H2O}</code>	$2\text{H}_2\text{O}$

Das bedeutet außerdem, dass ein Teil kein Leerzeichen enthalten kann, da ein Leerzeichen ihn automatisch in zwei Teile teilen würde. Wenn Sie ein Leerzeichen im Output benötigen, müssen sie ein ~ eingeben. Da die meisten Makros ein folgendes Leerzeichen schlucken, wird jedoch ein Input wie `\ch{\command ABC}` als einzelner Teil behandelt. Wenn Sie einen solchen Input teilen wollen, müssen Sie eine leere Gruppe eingeben: `\ch{\command{} ABC}`. Die verschiedenen Input-Typen werden in den folgenden Abschnitten einzeln behandelt.

Der `\ch`-Befehl hat einige Optionen, mit denen der Output verändert werden kann. Sie können entweder lokal als optionales Argument oder global mit dem Befehl

► `\chemsetup[chemformula]{<options>}`

gesetzt werden. Alle Optionen von `CHEMFORMULA` gehören dem Modul `chemformula` an.

24. Stöchiometrische Faktoren

Ein stöchiometrischer Faktor darf nur aus Ziffern und den Zeichen . , _ / () bestehen.

1	<code>\ch{2} \</code>	
2	<code>\ch{12}</code>	2
3		12
4	% decimals:	3.5
5	<code>\ch{3.5} \</code>	5.75
6	<code>\ch{5,75}</code>	$\frac{3}{2}$
7		$1\frac{1}{2}$
8	% fractions:	
9	<code>\ch{3/2} \</code>	
10	<code>\ch{1_1/2}</code>	

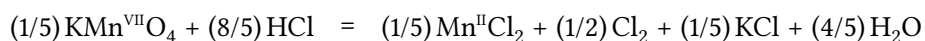
Sie müssen bei dem Input ein wenig auf die richtige Syntax achten, aber ich denke, sie ist recht intuitiv.

1 das wird nicht funktionieren sondern einen Fehler geben: `\ch{1/1_1}`

Wenn die stöchiometrischen Faktoren in Klammern geschrieben werden, werden die Brüche nicht umgewandelt. Was in den Klammern steht, wird genauso geschrieben.

1	<code>\ch{(1/2) H2O} \ch{1/2 H2O} \ch{0.5 H2O}</code>	$(1/2)\text{H}_2\text{O}$ $\frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$ $0.5\text{H}_2\text{O}$
---	---	---

Viele Beispiele wie das folgende für die Verwendung von Klammern um stöchiometrische Faktoren finden Sie z. B. im „IUPAC Green Book“ [[Coh+08](#)]:



Der Output kann mit diesen Optionen angepasst werden:

24. Stöchiometrische Faktoren

- **decimal-marker** = <marker> → Das Symbol, das als Dezimalzeichen verwendet wird. Default = .
- **frac-style** = math|xfrac|nicefrac → Bestimmt, wie Brüche dargestellt werden. Default = math
- **stoich-space** = <dim> → Der Leerraum nach einem stöchiometrischen Faktor. Eine \TeX -Länge. Default = .1667em

```
1 \ch[decimal-marker={,}]{3.5} \ch[decimal-marker={\cdot}]{3,5}
3,5 3·5
```

Die Option **frac-style** = xfrac verwendet den Befehl `\sfrac` des xfrac-Pakets. Der Output kann sehr von der gewählten Schrift abhängen.

```
1 \ch[frac-style=xfrac]{3/2} \ch[frac-style=xfrac]{1_1/2}
3/2 1½
```

CHEMFORMULA definiert die Instanz `formula-text-frac`, die nach dem eigenen Bedarf umdefiniert werden kann. Default ist folgendes:

```
1 \DeclareInstance{xfrac}{chemformula-text-frac}{text}
2 {
3   slash-left-kern = -.15em ,
4   slash-right-kern = -.15em
5 }
```

Dieses Dokument verwendet den Font LINUX LIBERTINE O und folgende Definition:

```
1 \DeclareInstance{xfrac}{chemformula-text-frac}{text}
2 {
3   scale-factor      = 1 ,
4   denominator-bot-sep = -.2ex ,
5   denominator-format = \scriptsize #1 ,
6   numerator-top-sep = -.2ex ,
7   numerator-format = \scriptsize #1
8 }
```

Die Option **frac-style** = nicefrac verwendet den Befehl `\nicefrac` des nicefrac-Pakets.

```
1 \ch[frac-style=nicefrac]{3/2} \ch[frac-style=nicefrac]{1_1/2}
3/2 1½
```

Die Option **stoich-space** erlaubt Ihnen, den Leerraum zwischen stöchiometrischem Faktor und Summenformel einzustellen.

1	<code>\ch{2 H2O} \\</code>	$2 \text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch[stoich-space=.3em]{2 H2O}</code>	$2 \text{H}_2\text{O}$

25. Summenformeln

CHEMFORMULA bestimmt Summenformeln als den Typ, der “nirgendwo sonst hineinpasst”. Das wird klarer werden, wenn Sie die anderen Typen kennen.

1	<code>\ch{H2SO4} \\</code>	H_2SO_4
2	<code>\ch{[Cu(NH3)4]^2+}</code>	$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$

25.1. Addukte

CHEMFORMULA hat zwei Identifier, die Addukte erzeugen.

► `\ch{A.B} → A · B`

► `\ch{A*B} → A · B`

1	<code>\ch{CaSO4.H2O} \\</code>	$\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch{CaSO4*H2O}</code>	$\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Da Ziffern in einer Summenformel immer als Tiefstellung betrachtet werden (siehe Abschnitt 25.2), müssen Sie manchmal einen Leerraum lassen, damit der stöchiometrische Faktor korrekt erkannt wird:

1	<code>\ch{Na3PO4*12H2O} \\</code>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot {}_{12}\text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch{Na3PO4* 12 H2O} \\</code>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$
3	<code>\ch{Na3PO4 * 12 H2O}</code>	$\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$

25.2. Tiefstellungen

Alle Ziffern in einer Substanz werden als Tiefstellung behandelt.

1	<code>\ch{H2SO4}</code>	H_2SO_4
---	-------------------------	-------------------------

Wenn Sie einen Buchstaben als Tiefstellung möchten, verwenden Sie die Mathematik-Syntax:

1	<code>\ch{A_nB_m}</code>	A_nB_m
---	--------------------------	------------------------

Die Tiefstellung erkennt Gruppen. Sie können darin auch Mathematikmodus verwenden.

1	<code>\ch{A_{n\$}B_{m\$}} \\\</code>	$A_n B_m$
2	<code>\ch{NaCl_{(aq)}}</code>	$\text{NaCl}_{(\text{aq})}$

25.3. Befehle

Befehle sind in einer Summenformel erlaubt:

1	<code>\ch{\textbf{A2}B3} \ch{A2\color{red}B3}</code>	$A_2 B_3 \quad A_2 B_3$
---	--	-------------------------

Wenn jedoch ein Befehl eine Ziffer als Argument benötigt, wie z. B. Leerraum-Befehle oder der `\ox`-Befehl, wird die direkte Verwendung schiefgehen. Das liegt daran, dass die Ziffern als Tiefstellung behandelt werden, *bevor* der Befehl expandiert.

1	<code>\ch{A\hspace{2mm}B}</code> wird einen Fehler geben, da <code>\hspace</code> in etwa so etwas sieht: <code>\hspace{\$_2\$mm}</code> .
---	--

Siehe Abschnitt 27.1 für einen Ausweg.

25.4. Ladungen und andere Hochstellungen

Grundlagen Wenn eine Summenformel mit einem Plus- oder Minus-Zeichen *endet*, wird es als Ladungssymbol interpretiert und hochgestellt. An anderen Stellen repräsentiert ein Plus eine Dreifachbindung und ein Dash eine Einfachbindung, siehe Abschnitt 25.5.

1	<code>\ch{A+B} \ch{AB+} \\\</code>	$A \equiv B \quad AB^+$
2	<code>\ch{A-B} \ch{AB-}</code>	$A - B \quad AB^-$

Für längere Ladungsgruppen oder andere Hochstellungen können Sie die Mathematik-Syntax verwenden. Sie beachtet Gruppen und erlaubt Mathematik in ihnen. Innerhalb dieser Gruppen werden weder + noch - als Bindungen interpretiert. Wenn sich ein Punkt . in einer Hochstellung befindet, zeigt er kein Addukt an sondern ein Radikal. Ein * gibt den angeregten Zustand.

1	<code>\ch{A^{x-}} \\\</code>	A^{x-}
2	<code>\ch{A^x-} \\\</code>	A^{x-}
3	<code>\ch{A^{x}-} \\\</code>	A^{x-}
4	<code>\ch{A^{x-\$}} \\\</code>	A^{x-}
5	<code>\ch{RNO2^{-.}} \\\</code>	$\text{RNO}_2^{\cdot-}$
6	<code>\ch{^31H} \\\</code>	^3H
7	<code>\ch{^{14}6C} \\\</code>	$^{14}_6\text{C}$
8	<code>\ch{^{58}_{26}Fe} \\\</code>	$^{58}_{26}\text{Fe}$
9	<code>\ch{NO^*}</code>	NO^*

Ionen und Ionenverbindungen mit mehr als einer Ladung werden genauso eingegeben:

1	<code>\ch{SO4^2-} \ch{Ca^2+ SO4^2-}</code>	$\text{SO}_4^{2-} \quad \text{Ca}^{2+} \text{SO}_4^{2-}$
---	--	--

Ladungsbefehle Man benötigt kein `\mch` und ähnliche Befehle innerhalb von `\ch`. Tatsächlich sollte man sie vermeiden, da sie die Ausrichtung der Hoch- und Tiefstellungen durcheinander bringen können. Die `CHEMMACROS`-Option `circled=all` wird von `\ch` beachtet.

<pre> 1 \chemsetup[option]{circled=all} 2 \ch{H+ + OH- <=> H2O} </pre>	$\text{H}^{\oplus} + \text{OH}^{\ominus} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$
--	---

Verhalten Die Hochstellungen verhalten sich unterschiedlich abhängig von ihrer Position in einer Summenformel, falls Hoch- und Tiefstellung direkt aufeinander folgen.

<pre> 1 \ch{^33B} \ch{{}^33B} \ch{3^3B} \ch{B^3} \ch{B3^3} \ 2 \ch{^{23}_{123}B} \ch{{}^{23}_{123}B} \ch{{}_{123}^{23}B} \ch{B^{23}} \ch{B _{123}^{23}} \ 3 \ch{^{123}_{23}B} \ch{{}^{123}_{23}B} \ch{{}_{23}^{123}B} \ch{B^{123}} \ch{B 23^{123}} </pre>	$ \begin{array}{c} {}^3\text{B} \quad {}^3\text{B} \quad {}^3\text{B} \quad \text{B}^3 \quad \text{B}_3^3 \\ {}^{23}_{123}\text{B} \quad {}^{23}_{123}\text{B} \quad {}^{23}_{123}\text{B} \quad \text{B}^{23} \quad \text{B}_{123}^{23} \\ {}^{123}_{23}\text{B} \quad {}^{123}_{23}\text{B} \quad {}^{123}_{23}\text{B} \quad \text{B}^{123} \quad \text{B}_{23}^{123} \end{array} $
---	--

- Wenn eine Formel mit einer Hochstellung *startet*, werden Hoch- und Tiefstellung *rechts* ausgerichtet, ansonsten *links*.
- Wenn eine Hochstellung einer Tiefstellung *folgt*, wird sie zusätzlich um eine Länge verschoben, die durch die Option `charge-hshift = <dim>` bestimmt wird, siehe auch Seite 51f.

Der zweite Punkt folgt der IUPAC-Empfehlung:

In writing the formula for a complex ion, spacing for charge number can be added (staggered arrangement), as well as parentheses: SO_4^{2-} , $(\text{SO}_4)^{2-}$. The staggered arrangement is now recommended.
IUPAC Green Book [Coh+08, p. 51]

25.5. Bindungen

25.5.1. Natürliche Bindungen

`CHEMFORMULA` kennt drei Sorten Bindungen, die ich “natürliche Bindungen” nennen werde:

<pre> 1 einfach: \ch{CH3-CH3} \ 2 doppel: \ch{CH2=CH2} \ 3 dreifach: \ch{CH#CH} </pre>	<pre> einfach: CH₃-CH₃ doppel: CH₂=CH₂ dreifach: CH≡CH </pre>
--	---

25.5.2. Flexible Bindungen

Predefined Bindungen Zusätzlich zu den drei natürlichen Bindungen gibt es ein paar weitere, die mit folgendem Befehl aufgerufen werden können:

► `\bond{<bond name>}`

Tabelle 3: Bindungen, die mit `\bond` aufgerufen werden können.

Name	Aussehen	Aliase
single	—	normal, sb
double	=	db
triple	≡	tp
dotted	⋯	semisingle
deloc	⋯	semidouble
tdeloc	≡	semitriple
co>	→	coordright
<co	←	coordleft

Die vordefinierten Bindungstypen sind in Tabelle 3 aufgeführt.

```

1 \ch{C\bond{sb}C\bond{db}C\bond{tp}C\bond{deloc}C\bond{tdeloc}C\bond{co>}C\bond{<
  co}C}

C-C=C≡C⋯C≡C→C←C

```

Eigene Bindungen `CHEMFORMULA` stellt Befehle bereit, mit denen eigene Bindungen definiert werden können:

- ▶ `\DeclareChemBond{<name>}{<code>}`
- ▶ `\RenewChemBond{<name>}{<code>}`
- ▶ `\DeclareChemBondAlias{<new name>}{<old name>}`
- ▶ `\ShowChemBond{<name>}`

Die Verwendung wird am ehesten durch ein Beispiel beschrieben. Schauen Sie zunächst, wie die `single` und die `co>` Bindung definiert sind:

```

1 \DeclareChemBond{single}
2 { \draw[chembond] (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond-end) ; }
3 \DeclareChemBond{coordright}
4 { \draw[chembond,butt cap->] (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond
  -end) ; }
5 \DeclareChemBondAlias{co>}{coordright}

```

Hier sind zwei Dinge wichtig: die Namen der Anfangs- und der Endkoordinaten, `chemformula-bond-start` und `chemformula-bond-end`, und der `TikZ`-Stil der Bindungen `chembond`.

Sagen wir, Sie wollen eine bestimmte Art von gestrichelter Bindung definieren. Sie könnten folgendes tun:

```

1 \usetikzlibrary{decorations.pathreplacing}
2 \makeatletter
3 \DeclareChemBond{dashed}
4 {
5   \draw[
6     chembond,
7     decorate,
8     decoration={ticks,segment length=\chemformula@bondlength/10,amplitude=1.5
9     pt}]
10    (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond-end) ;
11 }
12 \makeatother
13 \chemsetup[chemformula]{bond-length=2ex}
14 \ch{C\bond{dashed}C}

```

C≡C

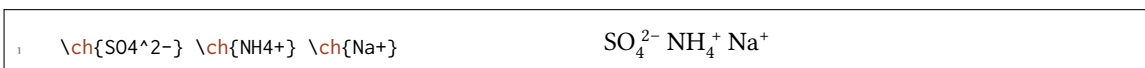
Dieses Beispiel zeigte Ihnen ein weiteres Makro: `\chemformula@bondlength`. Es existiert nur, damit Sie die Länge der Bindung, wie sie mit `bond-length` festgelegt wird, direkt verwenden können.

25.6. Anpassung

Diese Optionen ermöglichen Ihnen, den Output anzupassen:

- ▶ `subscript-vshift` = <dim> → Extra vertikale Verschiebung der Tiefstellungen. Default = 0pt
- ▶ `subscript-style` = text|math → Stil, der für die Tiefstellungen verwendet wird. Default = text
- ▶ `charge-hshift` = <dim> → Verschiebung von Hochstellungen, wenn sie einer Tiefstellung folgen. Default = .5ex
- ▶ `charge-style` = text|math → Stil, der für Hochstellungen verwendet wird. Default = text
- ▶ `adduct-space` = <dim> → Leerraum links und rechts des Addukt-Punktes. Default = .1333em
- ▶ `bond-length` = <dim> → Die Länge der Bindungen. Default = 1.1667ex
- ▶ `bond-offset` = <dim> → Der Abstand zwischen Atom und Bindung. Default = .07em
- ▶ `bond-style` = <tikz> → Ti k Z-Optionen für die Bindungen. Zunächst undefiniert.
- ▶ `radical-style` = <tikz> → Ti k Z-Optionen für den Radikalpunkt. Zunächst undefiniert.
- ▶ `radical-radius` = <dim> → Der Radius des Radikalpunktes. Default = .2ex

Vielleicht ist Ihnen aufgefallen, dass bei manchen Ionen die Ladungen nach rechts verschoben sind:



Sie werden verschoben, wenn sie einer Tiefstellung *folgen*, was der IUPAC-Empfehlung entspricht [Coh+08, p. 51]. Den Betrag der Verschiebung kann man mit der Option `charge-hshift` festlegen.

```

1 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\
2 \chemsetup[chemformula]{charge-hshift=.5ex} SO42- NH4+ Na+
3 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\
4 \chemsetup[chemformula]{charge-hshift=.5pt} SO42- NH4+ Na+
5 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}

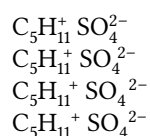
```

Ungeachtet der IUPAC-Empfehlung erstellt **CHEMFORMULA** keine voll gestaffelten Hochstellungen in der Voreinstellung, da ich die in manchen Fällen schwer zu lesen und in anderen Fällen hässlich finde. Da das aber eine subjektive Empfindung ist, gibt Ihnen **CHEMFORMULA** nicht nur die Möglichkeit, einen absoluten Wert für die Verschiebung festzulegen, sondern stellt auch eine Möglichkeit für voll gestaffelte Hochstellungen bereit. Dafür verwenden Sie `charge-hshift = full`.

```

1 \ch[charge-hshift=0pt]{C5H11+} \ch[charge-hshift=0pt]{SO4^2-} \\
2 \ch{C5H11+} \ch{SO4^2-} \\
3 \ch[charge-hshift=1ex]{C5H11+} \ch[charge-hshift=1ex]{SO4^2-} \\
4 \ch[charge-hshift=full]{C5H11+} \ch[charge-hshift=full]{SO4^2-}

```

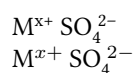


Wenn Sie nicht wollen, dass die Ladungen im Textmodus gesetzt werden, können Sie zum Mathematikmodus schalten:

```

1 \ch{M^x+} \ch{SO4^2-} \\
2 \chemsetup[chemformula]{charge-style = math}
3 \ch{M^x+} \ch{SO4^2-}

```

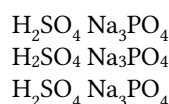


Die Option `subscript-vshift` kann verwendet werden, um die vertikale Verschiebung der Tiefstellungen anzupassen.

```

1 \ch{H2SO4} \ch{Na3PO4} \\
2 \chemsetup[chemformula]{subscript-vshift=.5ex}
3 \ch{H2SO4} \ch{Na3PO4} \\
4 \chemsetup[chemformula]{subscript-vshift=-.2ex}
5 \ch{H2SO4} \ch{Na3PO4}

```

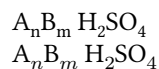


Sie können außerdem wählen, in welchem Modus die Tiefstellungen gesetzt werden:

```

1 \ch{A_nB_m} \ch{H2SO4} \\
2 \chemsetup[chemformula]{subscript-style = math}
3 \ch{A_nB_m} \ch{H2SO4}

```

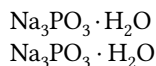


Mit der Option `adduct-space` kann der Leerraum links und rechts des Addukt-Zeichens festgesetzt werden.

```

1 \ch{Na3PO3*H2O} \\
2 \chemsetup[chemformula]{adduct-space=.2em}
3 \ch{Na3PO3*H2O}

```

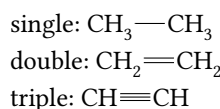


Die Länge der Bindungen ändern:

```

1 \chemsetup[chemformula]{bond-length=4mm}%
2 single: \ch{CH3-CH3} \\
3 double: \ch{CH2=CH2} \\
4 triple: \ch{CH#CH}

```

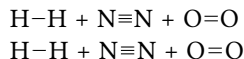


Sie können ebenfalls den Abstand zwischen Atom und Bindung einstellen:

```

1 \ch{H-H + N#N + O=O} \\
2 \ch[bond-offset=1pt]{H-H + N#N + O=O}

```



26. Spezielle Input-Typen

Es gibt einige "spezielle Input-Typen".

26.1. Single-Token Input

Die erste Sorte besteht nur aus einem Token, nämlich einem der folgenden:

- `\ch{ + }` → + Erstellt ein Plus-Zeichen zwischen Formeln mit Leerraum links und rechts:
`\ch{2 Na + Cl2}` $2 Na + Cl_2$
- `\ch{ v }` → ↓ Zeichen für eine Fällung/Niederschlag: `\ch{BaSO4 v}` $BaSO_4\downarrow$
- `\ch{ ^ }` → ↑ Zeichen für entweichendes Gas: `\ch{H2 ^}` $H_2\uparrow$

Der Leerraum links und rechts des Plus kann mit einer Option angepasst werden:

- `plus-space = <dim>` → Eine TeX-Länge. Default = .3em

```

1 \ch{A + B}\\
2 \ch[plus-space=4pt]{A + B}

```



26.2. Optionen Input

Manchmal möchte man eine Option nur auf einen Teil einer, sagen wir, Reaktion anwenden. Natürlich können Sie `\ch` mehrmals verwenden.

```

1 \ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-> H3O+ + HSO4-} \\
2 \ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-> H3O+ + HSO4-}

H2O + H2SO4 → H3O+ + HSO4-
H2O + H2SO4 → H3O+ + HSO4-

```

Das unterbricht allerdings die Eingabe im Quelltext und *könnte* die Abstände beeinflussen. Deshalb gibt es eine Alternative:

- `\ch{ @<options> }` → Die angegebenen Optionen sind *nur* aktiv bis nach der *nächsten* Summenformel.

```

1 \ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-> H3O+ + HSO4-} \\
2 \ch{H2O + @<format=\color{red}> H2SO4 -> H3O+ + HSO4-} \\
3 oder nat\urlich:\\
4 \ch{H2O + \textcolor{red}{H2SO4} -> H3O+ + HSO4-}\\[1em]
5 \ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-> H3O+ + HSO4-} \\
6 \ch{H2O + @<subscript-vshift=2pt> H2SO4 -> H3O+ + HSO4-}

H2O + H2SO4 → H3O+ + HSO4-
H2O + H2SO4 → H3O+ + HSO4-
oder natürlich:
H2O + H2SO4 → H3O+ + HSO4-

H2O + H2SO4 → H3O+ + HSO4-
H2O + H2SO4 → H3O+ + HSO4-

```

Das ist ein experimentelles Feature und mag in zukünftigen Versionen fallen gelassen werden.

27. Geschützter Input

In manchen Fällen kann es wünschenswert sein, `CHEMFORMULA` davon abzuhalten, den Input zu verarbeiten. Es gibt zwei Möglichkeiten, das zu tun.

27.1. Text

Wenn Sie etwas zwischen " " oder ' ' setzen, dann wird der Input als normaler Text behandelt, abgesehen davon, das Leerzeichen nicht erlaubt sind und mit ~ eingegeben werden müssen.

- `\ch{ "<escaped text>" }`
- `\ch{ '<escaped text>' }`

```

1 \ch{"\ox{2,Ca}" O} \\\
2 \ch{"\ldots\," Na + "\ldots\," Cl2 -> "\ldots\," NaCl} \\\
3 \ch{'A~->~B'}


$$\text{CaO}$$


$$\dots \text{Na} + \dots \text{Cl}_2 \longrightarrow \dots \text{NaCl}$$


$$A \rightarrow B$$


```

In vielen Fällen wird das nicht nötig sein. Aber wenn Sie Schwierigkeiten haben, einen Befehl innerhalb von `\ch` zu verwenden, versuchen Sie die geschützte Methode.

27.2. Mathematik

Wenn Sie speziell Mathematik-Input haben, setzen Sie ihn einfach zwischen `$ $`. Der Output unterscheidet sich vom geschützten Text (abgesehen von Mathe-Layout) darin, dass ihm ein Leerraum folgt.

► `\ch{ $<escaped math>$ }`

1 escaped text: <code>\ch{"\$x\$" H2O} \\\</code>	escaped text: $x\text{H}_2\text{O}$
2 escaped math: <code>\ch{"\$x\$ H2O"} \\\</code>	escaped math: $x\text{H}_2\text{O}$
3 <code>\ch{"\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl"} \\\</code>	$2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$

Der Leerraum, der nach dem geschützten Mathe-Input ausgegeben wird, kann angepasst werden.

► `math-space = <dim>` Eine \TeX -Länge. Default = .1667em

1 <code>\ch{"\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl"} \\\</code>	$2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$
2 <code>\chemsetup[chemformula]{math-space=.25em}</code>	$2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$
3 <code>\ch{"\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl"} \\\</code>	$A- > B$
4 <code>\ch{"\$A->B\$"} \\\</code>	

28. Pfeile

28.1. Pfeiltypen

Pfeile werden auf die gleiche intuitive Weise eingegeben wie bei `mhchem`. Es gibt eine Reihe verschiedener Typen:

- `\ch{ -> } \rightarrow` Standardpfeil nach rechts
- `\ch{ <- } \rightarrow` Standardpfeil nach links
- `\ch{ -/> } \rightarrow` reagiert nicht (rechts)
- `\ch{ </- } \rightarrow` reagiert nicht (links)
- `\ch{ <-> } \rightarrow` Mesomerie-Pfeil

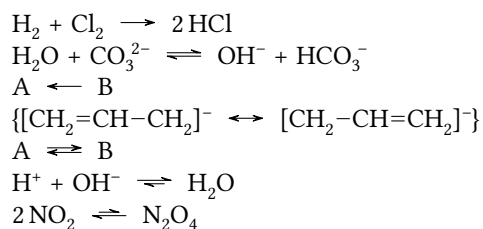
- `\ch{ <> }` → \rightleftharpoons Reaktion in beide Richtungen
- `\ch{ == }` → $=$ stöchiometrische Gleichung
- `\ch{ <=> }` → \rightleftharpoons Gleichgewichts-Pfeil
- `\ch{ <=>> }` → \rightleftharpoons Gleichgewicht liegt rechts
- `\ch{ <=>< }` → \rightleftharpoons Gleichgewicht liegt links
- `\ch{ <o> }` → \longleftrightarrow Isolobal-Pfeil

Diese Pfeile werden alle mit *TikZ* gezeichnet.

```

1 \ch{H2 + Cl2 -> 2 HCl} \\
2 \ch{H2O + CO3^2- <=> OH- + HCO3-} \\
3 \ch{A <- B} \\
4 \ch{\{[CH2=CH-CH2]- <-> [CH2-CH=CH2]- \}} \\
5 \ch{A <> B} \\
6 \ch{H+ + OH- <=>> H2O} \\
7 \ch{2 NO2 <=>< N2O4}

```



28.2. Beschriftung

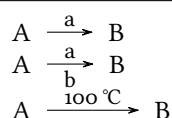
Die Pfeile haben zwei optionale Argumente für Beschriftungen.

- `\ch{ ->[<above>][<below>] }`

```

1 \ch{A ->[a] B} \\
2 \ch{A ->[a][b] B} \\
3 \ch{A ->[\SI{100}{\celsius}] B}

```

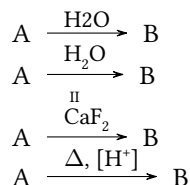


Der Beschriftungstext kann unabhängig vom Pfeil verarbeitet werden. Das Rezept ist einfach: verwenden Sie Leerzeichen.

```

1 \ch{A ->[H2O] B} \\
2 \ch{A ->[ H2O ] B} \\
3 \ch{A ->[ "\ox{2,Ca}" F2 ] B} \\
4 \ch{A ->[\Delta,~ \text{H}^+] B}

```

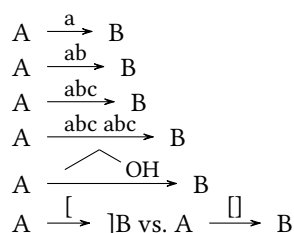


Mit den Leerzeichen verarbeitet `CHEMFORMULA` den Teil zwischen den Klammern als normalen Input. Die Pfeile lesen ihre Argumente erst *nach* der Verarbeitung. Wie Sie sehen können “wachsen” die Pfeile mit der Länge der Beschriftungen. Konstant bleibt der überstehende Teil. Im letzten Beispiel können Sie außerdem sehen, dass eckige Klammern in den Pfeilargumenten durch `\[` und `\]` erstellt werden sollten. Außerhalb von `\ch` behalten Sie natürlich ihre übliche Bedeutung. Diese Befehle sind nötig da die sonst übliche Methode (Verstecken der Klammern in geschweiften Klammern) aufgrund der Art, wie `\ch` sein Argument liest, nicht funktioniert.

```

1 \ch{A ->[a] B} \
2 \ch{A ->[ab] B} \
3 \ch{A ->[abc] B} \
4 \ch{A ->[abc~abc] B} \
5 % needs the 'chemfig' package:
6 \setatomsep{15pt}
7 \ch{A ->[ "\chemfig{-[:30]-[:~30]OH}" ] B} \
8 \ch{A ->[[ ] B} vs. \ch{A ->[\[ \] B}

```



28.3. Anpassung

Mit folgenden Optionen können Sie das Erscheinungsbild der Pfeile anpassen:

- ▶ `arrow-offset` = <dim> → Die Länge, die ein Pfeil links und rechts über die Beschriftung hinausragt. Die Länge eines leeren Pfeils beträgt zwei mal `arrow-offset`. Eine $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = 1.5ex
- ▶ `arrow-yshift` = <dim> → Verschiebt einen Pfeil nach oben (positiver Wert) oder nach unten (negativer Wert). Eine $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = 0pt
- ▶ `arrow-ratio` = <factor> → Das Verhältnis der Pfeillängen der ver unbalancierten Gleichgewichtspfeile. .4 würde bedeuten, dass der kürzere Pfeil 0.4 mal so lang ist, wie der längere Pfeil. Default = .6
- ▶ `compound-sep` = <dim> → Der Leerraum zwischen Formeln und Pfeilen. Eine $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = 1ex
- ▶ `label-offset` = <dim> → Der Leerraum zwischen Pfeilen und ihrer Beschriftung. Eine $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = 2pt
- ▶ `label-style` = → Die relative Schriftgröße der Beschriftung. Default = `\footnotesize`

Der folgende Code zeigt die Effekte der verschiedenen Optionen auf den `<=>` Pfeil:

```

1 Standard: \ch{A <=>[x][y] B} \\
2 l\"anger: \ch[arrow-offset=12pt]{A <=>[x][y] B} \\
3 h\"oher: \ch[arrow-yshift=2pt]{A <=>[x][y] B} \\
4 ausbalancierter: \ch[arrow-ratio=.8]{A <=>[x][y] B} \\
5 Bschriftung weiter weg: \ch[label-offset=4pt]{A <=>[x][y] B} \\
6 gr\"o\ss erer Abstand zu Formeln: \ch[compound-sep=2ex]{A <=>[x][y] B} \\
7 kleinere Beschriftungen: \ch[label-style=\tiny]{A <=>[x][y] B}

```

Standard: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
 länger: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
 höher: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
 ausbalancierter: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
 Bschriftung weiter weg: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
 größerer Abstand zu Formeln: A $\xrightarrow[y]{x}$ B
 kleinere Beschriftungen: A $\xrightarrow[y]{x}$ B

28.4. Pfeiltypen bearbeiten

Die Pfeile wurden mit dem Befehl

► `\DeclareChemArrow{<tokens>}{<tikz>}`

definiert. {<tokens>} sind die Zeichen, die ersetzt werden mit dem tatsächlichen Pfeilcode. Der Hauptpfeil wurde z. B. via

```

1 \DeclareChemArrow{->}{\draw[-cf] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end) ;}

```

definiert. Wenn Sie selbst Pfeile definieren wollen, benötigen Sie grundlegende Kenntnisse von **TikZ**.³⁶

Es gibt einige vordefinierte Koordinaten, die Sie verwenden können und sollten:

(cf_arrow_start) Der Pfeilanzfang.

(cf_arrow_end) Das Pfeilende.

(cf_arrow_mid) Die Pfeilmitte.

(cf_arrow_mid_start) Der Anfang des kürzeren Pfeils in Typen wie <=>.

(cf_arrow_mid_end) Das Ende des kürzeren Pfeils in Typen wie <=>.

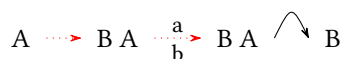
cf, left cf, right cf Für **CHEMFORMULA** definierte Pfeilspitzen.

```

1 \DeclareChemArrow{.>}{\draw[-cf,dotted,red] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end);}
2 \DeclareChemArrow{n>}{\draw[-cf] (cf_arrow_start) .. controls ([yshift=3ex]cf_
  arrow_mid) .. (cf_arrow_end);}
3 \ch{A .> B} \ch{A n>[a][b] B} \ch{A n> B}

```

³⁶ Bitte lesen Sie dazu das pgfmanual.



Wenn Sie einen existierenden Pfeil umdefinieren möchten, können Sie folgende zwei Befehle verwenden:

► `\RenewChemArrow{<tokens>}{<tikz>}`

► `\ShowChemArrow{<tokens>}`

Der zweite zeigt Ihnen die bestehende Definition, der erste definiert den bestehenden Pfeil neu.

```

1 \texttt{\ShowChemArrow{->}} \
2 \RenewChemArrow{->}{\draw[->,red] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end) ;}
3 \texttt{\ShowChemArrow{->}} \
4 \ch{A -> B}

\draw [-cf](cf_arrow_start) (cf_arrow_end);
\draw [->,red] (cf_arrow_start) (cf_arrow_end) ;
A  $\longrightarrow$  B

```

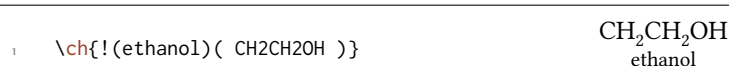
29. Text unter Formeln

29.1. Syntax

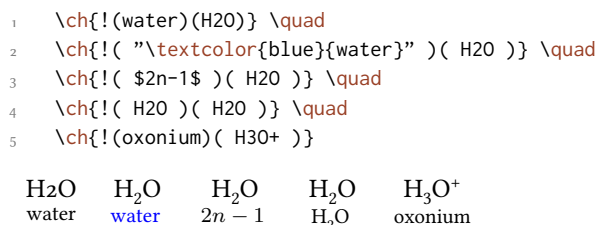
CHEMFORMULA hat eine eingebaute Syntax, um Text unter Formeln zu schreiben. Sie funktioniert ähnlich wie die optionalen Argumente der Pfeile.

► `\ch{ !(<name>)(<formula>) }`

Wenn ein Ausrufezeichen von einem Paar von Klammern gefolgt wird, macht **CHEMFORMULA** folgendes:



Das gleiche, was für die Pfeilbeschriftungen gilt, gilt auch hier: wenn Sie Leerzeichen lassen, werden die verschiedenen Teile entsprechend ihres Typs verarbeitet, bevor der Text unter die Formel geschrieben wird.



Wenn Sie aus irgendeinem Grund ein Ausrufezeichen wollen, *ohne* dass es einen Text unter eine Formel setzt, müssen Sie lediglich darauf achten, dass ihm keine Klammern folgen.

1	<code>\ch{H2O~(!)} \\\</code>	H ₂ O (!)
2	<code>\ch{A!{}}{()}\</code>	A!()

29.2. Anpassung

CHEMFORMULA stellt zwei Optionen bereit, um den Text anzupassen:

- **name-format** = <commands> → Das Ausgabeformat des Textes. Das kann beliebiger Input sein. Default = `\scriptsize\centering`
- **name-width** = <dim>|auto → Die Breite der Box, in die der Text geschrieben wird. auto erkennt die Breite der Beschriftung und setzt die Box auf diese Breite. Default = auto

1	<code>\ch{!(S\"aure)(H2SO4) -> B} \\\</code>
2	<code>\ch[name-format=\sffamily\small]{!(S\"aure)(H2SO4) -> B} \\\</code>
3	<code>\ch[name-format=\scriptsize N:~]{!(S\"aure)(H2SO4) -> B} \\\</code>
4	<code>\ch[name-width=3em,name-format=\scriptsize\raggedright]{!(S\"aure)(H2SO4) -> B}</code> }

H ₂ SO ₄	→	B
Säure		
H ₂ SO ₄	→	B
Säure		
H ₂ SO ₄	→	B
N: Säure		
H ₂ SO ₄	→	B
Säure		

30. Format und Schrift

Als Standardeinstellung nimmt **CHEMFORMULA** keine Veränderungen am Output der Formeln vor. Lassen Sie uns einen Nonsens-Input nehmen, der alle **CHEMFORMULA**-Features zeigt:

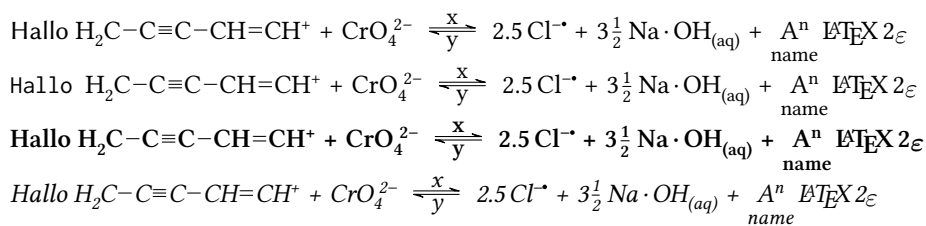
1	<code>\newcommand*\sample{\ch{H2C-C+C-CH=CH+ + CrO4^2- <=>[x][y] 2.5 Cl^{-.} + 3_1/2</code> <code>Na*OH_{(aq)} + !(name)(A^n) "\LaTeXe"}}</code>
2	<code>\sample</code>

$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^{\cdot-} + 3\frac{1}{2} \text{Na}\cdot\text{OH}_{(\text{aq})} + \underset{\text{name}}{\text{A}^n \text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\varepsilon}}$$

Nun ändern wir verschiedene Aspekte der Schrift und sehen, was passiert:

1	<code>\sffamily Hallo \sample \\\</code>
2	<code>\ttfamily Hallo \sample \normalfont \\\</code>
3	<code>\bfseries Hallo \sample \normalfont \\\</code>
4	<code>\itshape Hallo \sample</code>

30. Format und Schrift



Wie Sie sehen, adaptieren die meisten Features die Einstellungen des umliegenden Fonts.

Wenn Sie dieses Default-Verhalten oder das Default-Format ändern wollen, können Sie diese Option verwenden:

- **format** = <anything> → Fügt zu Beginn des **ch**-Befehls beliebigen Code ein.

```

1 % blau und serifenlos:
2 \definecolor{newblue}{rgb}{.1,.1,.5}\chemsetup[chemformula]{format=\color{
   newblue}\sffamily}
3 \sffamily Hallo \sample \
4 \ttfamily Hallo \sample \normalfont \
5 \bfseries Hallo \sample \normalfont \
6 \itshape Hallo \sample

Hallo  $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na}\cdot\text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^{\text{n}}$ 
Hallo  $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na}\cdot\text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^{\text{n}}$ 
Hallo  $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na}\cdot\text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^{\text{n}}$ 
Hallo  $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na}\cdot\text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^{\text{n}}$ 

```

Sie können ebenfalls speziell die Schriftfamilie, Schriftserie und Schriftform des Output setzen:

- **font-family** = <family> → Ändert die Schriftfamilie des Output mit: **fontfamily**{<family>}\selectfont.
- **font-series** = <series> → Ändert die Schriftserie des Output mit: **fontseries**{<series>}\selectfont.
- **font-shape** = <shape> → Ändert die Schriftform des Output mit: **fontshape**{<shape>}\selectfont.

```

1 % immer fett:
2 \chemsetup[chemformula]{font-series=bx}
3 Hallo \sample \
4 \sffamily Hallo \sample \normalfont \
5 \chemsetup[chemformula]{font-family=lmr,font-series=m} Hallo \sample \normalfont
   \
6 \itshape Hallo \sample

```

31. Verwendung in Mathematik-Umgebungen

Hallo $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon
 Hallo $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon
 Hallo $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon
 Hallo $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon

Wenn Sie \LaTeX oder Lua\LaTeX verwenden und das Paket `fontspec`³⁷ geladen haben, können Sie die Schrift von `CHEMFORMULA` auch damit ändern:

► `font-spec` = {} oder mit Optionen

► `font-spec` = {[<options>]}

```
1 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Linux Biolinum O}} \sample \\
2 \chemsetup[chemformula]{font-spec={[Color=darkgray]Augie}} \sample \\
3 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Tipbrush Script}} \sample \\
4 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Latin Modern Sans}} \sample \\
5 \bfseries \sample \normalfont \\
6 \chemsetup[chemformula]{font-spec={Feathergraphy Decoration}} \sample
```

$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon
 $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon
 $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon
 $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon
 $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon
 $\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightarrow{\frac{x}{y}} 2.5 \text{Cl}^- + 3\frac{1}{2} \text{Na} \cdot \text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n$ \LaTeX 2\epsilon

31. Verwendung in Mathematik-Umgebungen

Der Befehl `\ch` kann in Mathematikumgebungen eingesetzt werden. Er erkennt `\` und `&` und reicht sie weiter. Sie können aber die optionalen Argumente von `\` nicht innerhalb von `\ch` verwenden.

³⁷ CTAN: `fontspec`

```

1 \begin{align}
2 \quad \text{\texttt{\textbackslash ch}}
3 \quad \text{H2O} \& \text{-->[a] H2SO4} \text{\texttt{\textbackslash\}}
4 \quad \text{Cl2} \& \text{-->[x][y] CH4}
5 \quad \text{\texttt{\textbackslash}}
6 \quad \text{\texttt{\textbackslash end}{align}}
7 \quad \text{\texttt{\textbackslash begin}{align*}}
8 \quad \text{\texttt{\textbackslash ch}}
9 \quad \text{RNO2} \& \text{<=>[ + e- ] RNO2^{-.}} \text{\texttt{\textbackslash\}}
10 \quad \text{RNO2^{-.}} \& \text{<=>[ + e- ] RNO2^{2-}}
11 \quad \text{\texttt{\textbackslash}}
12 \quad \text{\texttt{\textbackslash end}{align*}}

```

$$\text{H}_2\text{O} \xrightarrow{\text{a}} \text{H}_2\text{SO}_4 \quad (1)$$

$$\text{Cl}_2 \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} \text{CH}_4 \quad (2)$$

$$\text{RNO}_2 \xrightleftharpoons{+ \text{e}^-} \text{RNO}_2^{-\bullet}$$

$$\text{RNO}_2^{-\bullet} \xrightleftharpoons{+ \text{e}^-} \text{RNO}_2^{2-}$$

32. Weitere Beispiele

Dieser Abschnitt zeigt weitere Beispiele für die Verwendung von **CHEMFORMULA**, auch im Zusammenspiel mit **CHEMMACROS**' reaction-Umgebungen.

```

1 \begin{reaction}[Synthese von Alkanen]
2 \!{Synthesegas}( $n$ CO + $(2n+1)$ H2 ) ->[\SI{200}{\celsius}][\text{CoNi}] C_{n$}
3 \end{reaction}

```

$$n \text{ CO} + (2n + 1) \text{ H}_2 \xrightarrow[\text{Synthesegas}]{200^\circ\text{C} \text{ [CoNi]}} \text{C}_n\text{H}_{2n+2} + n \text{ H}_2\text{O} \quad \{12\}$$

```

1 \begin{reactions*}
2 "a)" && \text{CH4} + \text{Cl2} &\text{-->} \text{CH3Cl} + \text{HCl} && "\text{\small Chlormethan/Methylchlorid}"
3 \\\
4 "b)" && \text{CH3Cl} + \text{Cl2} &\text{-->} \text{CH2Cl2} + \text{HCl} && "\text{\small Dichlormethan/Methylenchlorid}"
5 \\\
6 "c)" && \text{CH2Cl2} + \text{Cl2} &\text{-->} \text{CHCl3} + \text{HCl} && "\text{\small Trichlormethan/Chloroform}"
7 \\\
8 "d)" && \text{CHCl3} + \text{Cl2} &\text{-->} \text{CCl4} + \text{HCl} && "\text{\small Tetrachlormethan/}
9 \text{Tetrachlorkohlenstoff}"
10 \end{reactions*}

```

a)	$\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$	Chlormethan/Methylchlorid
b)	$\text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{HCl}$	Dichlormethan/Methylenchlorid
c)	$\text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{CHCl}_3 + \text{HCl}$	Trichlormethan/Chloroform
d)	$\text{CHCl}_3 + \text{Cl}_2 \longrightarrow \text{CCl}_4 + \text{HCl}$	Tetrachlormethan/Tetrachlorkohlenstoff

32. Weitere Beispiele

$$\begin{array}{c} \delta- \quad \delta+ \\ \text{C}-\text{M} \end{array} \quad (\longleftrightarrow \begin{array}{c} \delta+ \quad \delta- \\ \text{C}-\text{Br} \end{array})$$

$$\text{X} \cdot + \cdot \text{Y} \rightleftharpoons \text{X}-\text{Y} + \text{Bindungsenergie}$$

$$\Delta_f H^\ominus \quad \text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_2(\text{g}) \longrightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \Delta H^\ominus$$

$$\quad \quad \quad \text{??} \quad \quad \quad \text{O} \quad \quad \quad -94.3 \quad -57.9 \quad -192.1$$

```

1 \begin{reactions*}
2 CH3MgBr + "\ox*[1,Cu]" X &-> "\glqq" CH3 "\ox*[1,Cu]\grqq" + MgBrX "\quad X
   ~$=$~Br,I,CN" \\\
3 2 MeLi + CuI &-> !(Dimethylcuprat~(Gilmann-Cuprat))( Me2CuLi ) + Li
4 \end{reactions*}

```

$$\begin{array}{lcl}
 \text{CH}_3\text{MgBr} + \text{Cu}^{\text{I}}\text{X} & \longrightarrow & \text{„CH}_3\text{Cu}^{\text{I}}\text{“} + \text{MgBrX} \quad \text{X = Br,I,CN} \\
 2 \text{ MeLi} + \text{CuI} & \longrightarrow & \text{Me}_2\text{CuLi} \quad + \text{Li} \\
 & & \text{Dimethylcuprat} \\
 & & \text{(Gilmann-Cuprat)}
 \end{array}$$

```

1 % needs ‘chemfig’
2 \begin{reactions*}
3   H3C-CH3 + Cl2 &->[\Delta][\h\nu] H3CCH2Cl + HCl
      &&"\Enthalpy{-27.1}" \\
4   H3C-CH3 + "\Lewis{0.,Cl}" &-> H3CCH2 "\Lewis{0.,\vphantom{H}}" +
      HCl &&"\Enthalpy{-5.0}" \\
5   H3C-CH2 "\Lewis{0.,\vphantom{H}}" + Cl2 &-> H3CCH2Cl + "\Lewis{0.,Cl}"
      &&"\Enthalpy{-23.0}"
6 \end{reactions*}

```

$$\begin{array}{lll}
 \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3 + \text{Cl}_2 & \xrightarrow[h\nu]{\Delta} & \text{H}_3\text{CCH}_2\text{Cl} + \text{HCl} & \Delta H = -27.1 \text{ kJ} \\
 \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3 + \text{Cl}\cdot & \longrightarrow & \text{H}_3\text{CCH}_2\cdot + \text{HCl} & \Delta H = -5.0 \text{ kJ} \\
 \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2\cdot + \text{Cl}_2 & \longrightarrow & \text{H}_3\text{CCH}_2\text{Cl} + \text{Cl}\cdot & \Delta H = -23.0 \text{ kJ}
 \end{array}$$

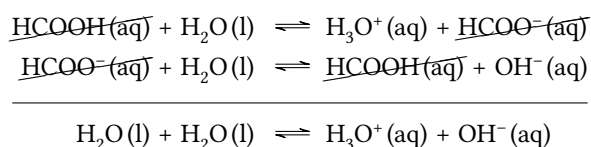
Das folgende Beispiel zeigt, wie das kürzen von Formeln erreicht werden kann.³⁸

³⁸ Inspiriert durch eine Frage auf TeX.SE: <http://tex.stackexchange.com/q/30118/5049>


```

1 % needs 'cancel'
2 \begin{align*}
3 \centering
4 \ch{\cancel{HCOOH\aq} + H2O\lqd{}} &\rightleftharpoons H3O^+\aq{} + \cancel{HCOO^-\aq{}} \\
5 \ch{\cancel{HCOO^-\aq{}} + H2O\lqd{}} &\rightleftharpoons \cancel{HCOOH\aq{}} + OH^-\aq{} \\
6 \cline{1-2}
7 \ch{H2O\lqd{}} + H2O\lqd{} &\rightleftharpoons H3O^+\aq{} + OH^-\aq{}
8 \end{align*}

```



Teil IV.

ghsystem

33. Setup

Alle Optionen von **GHSYSTEM** gehören dem Modul **ghsystem** an. Sie können also mit

- ▶ `\chemsetup[ghsystem]{<options>}` oder
- ▶ `\chemsetup{ghsystem/<option1>,ghsystem/<option2>}`

eingestellt werden. Sie können den entsprechenden Befehlen auch lokal als optionales Argument mitgegeben werden.

34. Die Gefahren- (H) und Sicherheitssätze (P) aufrufen

34.1. Einfacher Aufruf

Der prinzipielle Aufruf ist einfach:

- ▶ `\ghs[<options>]{<type>}{<number>}`
- ▶ `\ghs*[<options>]{<type>}{<number>}`

Es gibt drei Typen von Sätzen: h, euh und p. Das `{<type>}` Argument ignoriert Groß- und Kleinschreibung.

34. Die Gefahren- (H) und Sicherheitssätze (P) aufrufen

```
1 \ghs{h}{200} \\
2 \ghs{H}{224} \\
3 \ghs{euh}{001} \\
4 \ghs{Euh}{202} \\
5 \ghs{p}{201}
```

Die gesternte Version versteckt die Nummer und liefert nur den Satz. Wenn Sie den Satz verstecken und nur die Nummer ausgeben wollen, können Sie diese Option verwenden:

► `hide = true|false`

Außerdem gibt es eine Option, mit der der Output angepasst werden kann.

► `space = <space command> →` Leerraum zwischen `<type>` und `<number>`.

```
1 \ghs{h}{200} \\
2 \ghs[space=\,]{h}{200} \\
3 \ghs*{h}{200} \\
4 \ghs[hide]{h}{200}
```

34.2. Sätze mit Platzhaltern

Einige Sätze verwenden Platzhalter. Es gibt vier Stück:

- *<Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht>*
- *<konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt>*
- *<oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt>*
- *<Name des sensibilisierenden Stoffes>*

Außer dem letzten, der ersetzt werden muss, sind sie in der Voreinstellung versteckt. Durch die Option

► `fill-in = true|false → Default = false`

können sie sichtbar gemacht werden.

```
1 \ghs{h}{340} \\
2 \ghs[fill-in]{h}{340} \\
3 \ghs{h}{360} \\
4 \ghs[fill-in]{h}{360} \\
5 \ghs{h}{370} \\
6 \ghs[fill-in]{h}{370} \\
7 \ghs{euh}{208} \\
8 \ghs[fill-in]{euh}{208}
```

34. Die Gefahren- (H) und Sicherheitssätze (P) aufrufen

Mit folgenden Optionen können die Platzhalter ersetzt werden:

- ▶ **exposure** = <text> → Expositions-Platzhalter
- ▶ **effect** = <text> → Effekt-Platzhalter
- ▶ **organs** = <text> → Organ-Platzhalter
- ▶ **substance** = <text> → Substanz-Platzhalter

```
1 \ghs[exposure=So werden Sie der Gefahr ausgesetzt.]{h}{340} \\
2 \ghs[effect=Das sind die Effekte]{h}{360} \\
3 \ghs[organs=dieses Organ]{h}{370} \\
4 \ghs[substance=Substanz]{euh}{208}
```

34.3. Sätze mit Lücken

Manche Sätze haben Lücken:

```
1 \ghs{p}{301} \\
2 \ghs{p}{401} \\
3 \ghs{p}{411} \\
4 \ghs{p}{413}
```

Mit den folgenden Optionen können diese Lücken gefüllt werden:

- ▶ **text** = <text> → Füllt “unsichtbare Lücke”, die einem Doppelpunkt folgt.
- ▶ **dots** = <text> → Füllt Lücke, die durch “...” angezeigt wird.
- ▶ **C-temperature** = <num> → Füllt Celsius-Temperatur.
- ▶ **F-temperature** = <num> → Füllt Fahrenheit-temperatur.
- ▶ **kg-mass** = <num> → Füllt Kilogramm-Masse.
- ▶ **lbs-mass** = <num> → Füllt Pfund-Masse.

```

1 \ghs[text=Arzt kontaktieren!]{p}{301} \\
2 \ghs[dots=hier]{p}{401} \\
3 \ghs[C-temperature=50, F-temperature=122]{p}{411} \\
4 \ghs[kg-mass=5.0, lbs-mass=11, C-temperature=50, F-temperature=122]{p}{413}

```

34.4. Kombinierte Sätze

Es existieren einige Kombinationen von Sätzen. Sie werden mit einem + zwischen den Nummern eingegeben:

```

1 \ghs{p}{235+410} \\
2 \ghs{p}{301+330+331}

```

Beachten Sie, dass sie nur offizielle Kombinationen eingeben können. *Sie können die Sätze nicht frei kombinieren.*

35. Piktogramme

35.1. Die Bilder

Das GHS beinhaltet einige Piktogramme:



Der Befehl

► `\ghspic[<options>]{<name>}`

lädt sie. Tabelle 4 zeigt alle Piktogramme und ihre Dateinamen. Genauer: sie zeigt die Namen, die beim Befehl `\ghspic` verwendet werden müssen. Tatsächlich heißen sie `ghsystem_<name>.<filetype>`, wobei `<filetype>` entweder `eps`, `pdf`, `jpg` oder `png` ist, siehe auch Abschnitt 35.2.

```

1 \ghspic{skull}

```



Wenn Ihnen die Defaultgröße nicht gefällt, können Sie die Option

► `scale = <factor>` → Skaliert das Piktogramm. Default = 1

verwenden. Tatsächlich sind die Bilder recht groß. Die Voreinstellung (Faktor = 1) skaliert die Bilder auf ein Zwanzigstel ihrer echten Größe.

35. Piktogramme

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



Wenn Sie spezielle `\includegraphics`-Optionen verwenden wollen, z. B. das Piktogramm rotieren, verwenden Sie diese Option:

► `\includegraphics = {<includegraphics keyvals>}`

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



Tabelle 4: Alle verfügbaren GHS Piktogramme.

Name	Piktogramm	Name	Piktogramm
explos		explos-1	
explos-2		explos-3	
explos-4		explos-5	
explos-6			
flame		flame-2-white	
flame-2-black		flame-3-white	
flame-3-black		flame-4-1	
flame-4-2		flame-4-3-white	

Name	Piktogramm	Name	Piktogramm
flame-4-3-black		flame-5-2-white	
flame-5-2-black			
flame-0		flame-0-5-1	
bottle		bottle-2-black	
bottle-2-white			
acid		acid-8	
skull		skull-2	
skull-6			
exclam			
health			
aqpol			

35.2. Der Bildtyp hängt von der Engine ab

Sie wissen vermutlich, dass Sie nicht jeden Bildtyp mit jeder Compiler-Engine verwenden können. pdf_T_EX im d_VI-Modus verlangt eps-Dateien, während pdf_T_EX im p_DF-Modus, X_E_L_A und Lua_T_EX eps-Dateien in pdf-Dateien konvertieren, vorausgesetzt, der Anwender hat Schreibrechte in dem Verzeichnis, in dem die Bilder gespeichert sind.

Die letztgenannten können jedoch jpg- und png-Dateien ohne Schwierigkeiten einbinden, während pdf_T_EX im d_VI-Modus das nicht kann.

Um das Problem zu lösen, testet `GHSYSTEM`, welche Engine verwendet wird und falls es pdf_T_EX ist, in welchem Modus es verwendet wird. Dann wird entweder das eps- oder das png-Bild für die

Piktogramme verwendet. Sie können den Bildtyp über die Option

► `pic-type = eps|pdf|jpg|png`

jedoch frei wählen.

36. Verfügbare Sprachen

Bis jetzt sind die H- und P-Sätze nur auf deutsch, englisch und italienisch verfügbar. Das Paket reagiert auf die `CHEMMACROS` Option `german`, erkennt aber die Spracheinstellung von `babel`³⁹ oder `polyglossia`⁴⁰ (noch) nicht.

Sie können die Sprache auch explizit wählen.

► `language = english|german|italian`

```
1 \ghs{h}{201}
2
3 \chemsetup[ghsystem]{language=english}
4 \ghs{h}{201}
```

Ich werde in irgendwann in der Zukunft weitere Sprachen implementieren. Das kann aber eine Weile dauern. Wenn Sie gerne zu `GHSYSTEM` beisteuern möchten und die Sätze in einer anderen Sprache tippen wollen, kontaktieren Sie mich⁴¹ gerne. Ich stelle Ihnen dann eine Template-Datei, ein pdf mit den offiziellen Übersetzungen sowie jede weitere Hilfe, die sie benötigen.

37. Liste aller Sätze

Wenn Sie gerne alle Sätze auflisten wollen, können Sie

► `\ghslistall[<options>]`

verwenden.

Dieser Befehl erstellt eine Tabelle aller Sätze mit der `longtable`-Umgebung des `longtable` Pakets. Ihr Erscheinungsbild kann mit den folgenden Optionen angepasst werden.

- `table-head-number = <text> → Default = Nummer`
- `table-head-text = <text> → Default = Satz`
- `table-next-page = <text> → Default = weiter auf der nächsten Seite`
- `table-caption = <text> → <text> in \caption{<text>}. Default = All H, EUH, and P Statements.`
- `table-caption-short = <text> → <short> in \caption[<short>]{<text>}.`
- `table-label = <text> → Das Label, mit dem man auf die Tabelle \ref und ähnlichen Befehlen verweisen kann. Default = tab:ghs-hp-statements`

³⁹ CTAN: `babel` ⁴⁰ CTAN: `polyglossia` ⁴¹ contact@mychemistry.eu

- ▶ `table-row-sep` = <dim> → Abstand zwischen den Zeilen. Eine \TeX -Länge. Default = 3pt
- ▶ `table-rules` = `default`|`booktabs`|`none` → Der Stil der horizontalen Linien in der Tabelle. `default` verwendet `\hline`, `booktabs` verwendet `\toprule`, `\midrule` und `\bottomrule`. Dieser Wert benötigt das `booktabs`⁴² Paket, dass Sie dann einbinden müssen. Default = `default`
- ▶ `table-top-head-rule` = `default`|`booktabs`|`none` → Explizites Ändern der Linie. Default = `default`
- ▶ `table-head-rule` = `default`|`booktabs`|`none` → Explizites Ändern der Linie. Default = `default`
- ▶ `table-foot-rule` = `default`|`booktabs`|`none` → Explizites Ändern der Linie. Default = `default`
- ▶ `table-last-foot-rule` = `default`|`booktabs`|`none` → Explizites Ändern der Linie. Default = `default`

Der folgende Code zeigt, wie Tabelle 5 erzeugt wurde:

```
1 \ghslistall[fill-in,table-rules=booktabs]
```

Tabelle 5:

Teil V. Anhang

Übersicht über die Optionen und Anpassungsmöglichkeiten

Optionen

In der folgenden Tabelle werden alle Optionen aufgelistet, die `CHEMMACROS` bietet. Alle Optionen, die einem Modul angehören, können mit

- ▶ `\chemsetup[<module>]{<options>}` oder
- ▶ `\chemsetup{<module>/<options>}` gesetzt werden.

Manche Optionen können ohne Wert verwendet werden. Dann wird der unterstrichene Wert verwendet. Die Optionen der Module `chemformula` und `ghssystem` werden hier nicht extra aufgelistet.

⁴² CTAN: `booktabs`

Übersicht über die Optionen und Anpassungsmöglichkeiten

Option	Modul	Werte	Default	
Paketoptionen:				
<code>bpchem</code>	option	<u>true</u> false	false	Seite 5
<code>circled</code>	option	formal <u>all</u> none	formal	Seite 6
<code>circletype</code>	option	chem math	chem	Seite 6
<code>cmversion</code>	option	1 2 bundle	bundle	Seite 6
<code>ghsystem</code>	option	<u>true</u> false	true	Seite 6
<code>iupac</code>	option	auto restricted strict	auto	Seite 6
<code>language</code>	option	<language>	english	Seite 6
<code>method</code>	option	chemformula mhchem	chemformula	Seite 6
<code>Nu</code>	option	chemmacros mathspec	chemmacros	Seite 6
<code>strict</code>	option	<u>true</u> false	false	Seite 6
<code>synchronize</code>	option	<u>true</u> false	false	Seite 6
<code>greek</code>	option	math textgreek <u>upgreek</u>	upgreek	Seite 6
<code>xspace</code>	option	<u>true</u> false	true	Seite 6
\ba, \Nu:				
<code>elpair</code>	particle	<u>dots</u> dash/false	false	Seite 10
IUPAC-Befehle:				
<code>break-space</code>	iupac	<dim>	.01em	Seite 13
<code>bridge-number</code>	iupac	sub super	sub	Seite 16
<code>cip-kern</code>	iupac	<dim>	.1ex	Seite 14
<code>coord-use-hyphen</code>	iupac	<u>true</u> false	true	Seite 16
<code>hyphen-pre-space</code>	iupac	<dim>	.01em	Seite 12
<code>hyphen-post-space</code>	iupac	<dim>	-.03em	Seite 13
\DeclareChemLatin:				
<code>format</code>	latin	<anything>	\itshape	Seite 17
\pch, \mch, \fpch, \fmch:				
<code>append</code>	charges	<u>true</u> false	false	Seite 19
acid/base:				
<code>p-style</code>	acid-base	slanted italics upright	upright	Seite 18
\ox:				
<code>align</code>	ox	center right	center	Seite 20
<code>parse</code>	ox	<u>true</u> false	true	Seite 20
<code>roman</code>	ox	<u>true</u> false	true	Seite 20
<code>pos</code>	ox	top super side	top	Seite 20
<code>explicit-sign</code>	ox	<u>true</u> false	false	Seite 20
<code>decimal-marker</code>	ox	comma point	point	Seite 20
\OX, \redox:				
<code>dist</code>	redox	<dim>	.6em	Seite 24
<code>sep</code>	redox	<dim>	.2em	Seite 24
\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:				
<code>exponent</code>		<anything>	\standardstate	Seite 25
<code>delta</code>		<anything>/false		Seite 26
<code>subscript</code>		left right		Seite 26
<code>unit</code>		<unit>		Seite 26
\DeclareChemState, \RenewChemState:				
<code>exponent</code>		<anything>	\standardstate	Seite 25
<code>delta</code>		<anything> false		Seite 26
<code>subscript</code>		<anything>		Seite 26
<code>subscript-left</code>		<u>true</u> false		Seite 26

Übersicht über die Optionen und Anpassungsmöglichkeiten

Option	Modul	Werte	Default	
\State:				
exponent	state	<anything>	\standardstate	Seite 27
delta	state	<anything> false		Seite 27
subscript-left	state	true false		Seite 27
\NMR, \begin{spectroscopy} \end{spectroscopy}:				
unit	nmr	<unit>	\mega\hertz	Seite 29
nucleus	nmr	{<num>,<atom symbol>}	{1,H}	Seite 30
format	nmr	<anything>		Seite 30
pos-number	nmr	side/sub	side	Seite 30
coupling-unit	nmr	<unit>	\hertz	Seite 30
parse	nmr	true false	true	Seite 30
delta	nmr	<anything>		Seite 30
list	nmr	true false	false	Seite 30
list-setup	nmr		siehe Text	Seite 30
use-equal	nmr	true false	false	Seite 30
\DeclareChemReaction:				
star		true false	false	Seite 36
arg		true false	false	Seite 36
list-name	reaction	<anything>	List of reactions	Seite 37
list-entry	reaction	<anything>	Reaction	Seite 37
\mhName:				
align	mhName	<alignment>	\centering	Seite 33
format	mhName	<commands>		Seite 33
fontsize	mhName	<fontsize>	\tiny	Seite 33
width	mhName	<dim>		Seite 33
phases:				
pos	phases	side sub	side	Seite 39
space	phases	<dim>	.1333em	Seite 39
\newman:				
angle	newman	<angle>	0	Seite 40
scale	newman	<factor>	1	Seite 40
ring	newman	<tikz>		Seite 40
atoms	newman	<tikz>		Seite 40
back-atoms	newman	<tikz>		Seite 40
\orbital <type> = s p sp sp2 sp3:				
phase	orbital/<type>	+ -	+	Seite 41
scale	orbital/<type>	<factor>	1	Seite 42
color	orbital/<type>	<color>	black	Seite 42
angle	orbital/<type>	<angle>	90	Seite 42
half	orbital/p	true false	false	Seite 42
overlay	orbital	true false	false	Seite 42
opacity	ornital	<num>	1	Seite 42

Anpassungsbefehle

Eine ganze Reihe von Befehlen wurde vorgestellt, mit denen die Möglichkeiten von CHEMMACROS erweitert werden können. Sie werden hier noch einmal aufgelistet.

- \DeclareChemArrow → Neuen Pfeil definieren, siehe Seite 58.
- \RenewChemArrow → Bestehende Pfeile verändern.

- ▶ `\DeclareChemBond` → Eine neue Bindung definieren, siehe Seite 50.
- ▶ `\RenewChemBond` → Eine Bindung umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemBondAlias` → Ein Alias zu einer existierenden Bindung definieren.
- ▶ `\DeclareChemIUPAC` → Neuen IUPAC-Befehl definieren, siehe Seite 16.
- ▶ `\RenewChemIUPAC` → IUPAC-Befehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemLatin` → Neue lateinische Ausdrücke definieren, siehe Seite 17.
- ▶ `\RenewChemLatin` → Lateinische Ausdrücke umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemNMR` → Neuen NMR-Befehl definieren, siehe Seite 28.
- ▶ `\RenewChemNMR` → NMR-Befehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemParticle` → Neues Teilchen definieren, siehe Seite 11.
- ▶ `\RenewChemParticle` → Teilchen umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemPhase` → Neuen Phasenbefehl definieren, siehe Seite 39.
- ▶ `\RenewChemPhase` → Phasenbefehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemReaction` → Neue Reaktionsumgebung definieren, siehe Seite 36.
- ▶ `\DeclareChemState` → Neue Zustandsgröße definieren, siehe Seite 26.
- ▶ `\RenewChemState` → Zustandsgröße umdefinieren.

Vorschläge und Bugreports

Feedback zu [CHEMMACROS](#), [CHEMFORMULA](#) und [GHSYSTEM](#) ist hochwillkommen! Wenn Sie Vorschläge haben, Ihnen Features fehlen oder Ihnen Bugs auffallen, zögern Sie nicht, mich zu kontaktieren. Wenn Sie irgendwelche Fehler finden, seien es chemische, falsche Dokumentation usw., wäre ich über eine kurze E-Mail⁴³ dankbar.

Wenn Sie einen Bug finden, wäre es am besten, Sie schicken mir ein minimales Beispiel, mit dem ich den Bug reproduzieren kann. Sie können ihn auch als "Issue" auf <https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/> melden.

Vielen Dank an alle, die mir schon Feedback zukommen ließen, vor allem (in alphabetischer Reihenfolge):

- [Peter Cao](#)
- Christina Lüdigg
- Dr. Paul King
- Jonas Rivetti (Besonderen Dank für seine Übersetzung der H- und P-Sätze ins Italienische!)
- Christoph Schäfer
- Timo Stein

⁴³ contact@mychemistry.eu

Quellen

- [Coh+08] E. Richard Cohan, Tomislav Cvitaš, Jeremy G. Frey, Bertil Holmström, Kozo Kuchitsu, Roberto Marquardt, Ian Mills, Franco Pavese, Martin Quack, Jürgen Stohner, Herbert L. Strauss, Michio Takami und Anders J Thor. *“Quantities, Symbols and Units in Physical Chemistry”*, *IUPAC Green Book*. 3rd Edition. 2nd Printing. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 2008.
- [Con+05] Neil G. Connelly, Ture Damhus, Richard M. Hartshorn und Alan T. Hutton. *“Nomenclature of Inorganic Chemistry”*, *IUPAC Red Book*. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 2005. ISBN: 0-85404-438-8.
- [Eur12] United Nations Economic Commission for Europe. *GHS Implementation*. 20. März 2012. URL: http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation_e.html (besucht am 20. 03. 2012).
- [Theo8] The European Parliament and The Council of the European Union. *Regulation (EC) No 1272/2008 of the European Parliament and of the Council. on classification, labelling and packaging of substances and mixtures, amending and repealing Directives 67/548/EEC and 1999/45/EC, and amending Regulation (EC) No 1907/2006*. 16. Dez. 2008.

Index

Überschriften werden **fett**,
Pakete serifenlos, Befehle
`\braun`, Optionen **grün** und
Module (nur **CHEMMACROS**)
rot gesetzt.

Symbols

`\#` 29
`\-` 12
`\[` 57
`\]` 57
`\^` 12

A

`\a` 13
`\abinitio` 17
Absolute Konfiguration 15
acid-base
 p-style 18
`\AddRxnDesc` 38
adduct-space 51, 53
align 20, 33
angle 40, 42
ANHANG 72
`\anti` 15
append 19
`\aq` 38
arg 36
arrow-offset 57
arrow-ratio 57
arrow-yshift 57
`\atm` 17
`\atmosphere` 17
atoms 40

B

`\b` 13
`\ba` 10, 73
babel 71
back-atoms 40
Befehle für mhchem 33 f.
BEVOR ES LOS GEHT ...
 3-9
bm 3

`\bond` 9, 49 f.
bond-length 51
bond-offset 51
bond-style 9, 51
booktabs 72
bpchem 3, 5
`bpchem` 3, 5, 12
break-space 13
`\bridge` 8, 16
bridge-number 16

C

C-temperature 67
Cahn-Ingold-Prelog ... 14
`\cal` 18
`\calory` 18
`\centering` 74
`\ch` 44 f., 47, 49, 53-57, 59,
 61 f.
charge-hshift ... 49, 51 f.
charge-style 51
charges
 append 19
`\Chemalpha` 6, 10 f.
`\Chembeta` 10 f.
`\ChemDelta` 10 f.
`\Chemdelta` 10
`\Chemepsilon` 10
`\Chemeta` 10
chemfig 10, 22
CHEMFORMULA . 43-65
`\Chemgamma` 10
`\Chemkappa` 10
CHEMMACROS 9-43
`\Chemmu` 10
`\Chemnu` 10
`\Chemomega` 10
`\Chempi` 10
`\Chemrho` 10
`\chemsetup` 7, 30, 45, 65, 72
`\Chemsigma` 10
chemstyle 10, 17 f.
`\cip` 14

cip-kern 9, 14
circled 6, 11, 35
circletype 6
`\cis` 15
cis/trans 15
`\cmc` 18
cmversion 6
color 42
compound-sep 57
cool 13, 15
coord-use-hyphen 16
coupling-unit 30

D

`\D` 13, 15
`\d` 13
`\data` 29 f.
`\data*` 29
decimal-marker ... 20, 46
`\DeclareChemArrow` 58, 74
`\DeclareChemBond` . 50, 75
`\DeclareChemBondAlias` ..
 50, 75
`\DeclareChemIUPAC` 16, 75
`\DeclareChemLatin` 17, 73,
 75
`\DeclareChemNMR` .. 28, 30,
 75
`\DeclareChemParticle` ...
 11 f., 75
`\DeclareChemPhase` 39, 75
`\DeclareChemReaction` 36,
 74 f.
`\DeclareChemState` . 26 f.,
 73, 75
`\delm` 21
`\delp` 21
delta 26 f., 30
dist 24
dots 67

E

`\E` 13, 15
effect 67

INDEX

Einheiten 17 f.
`\El` 10
`\el` 9
`elpair` 10
`\Enthalpy` 25, 73
`\Entropy` 25, 73
`environ` 3
`experimental` (Umg.) 8, 29
`explicit-sign` 20 f.
`exponent` 25 ff.
`exposure` 67

F

`F-temperature` 67
`\fdelm` 21
`\fdelp` 21
`fill-in` 66
Fischer 15
`\fmch` 19, 73
`\fminus` 10
`font-family` 61
`font-series` 61
`font-shape` 61
`font-spec` 62
`fontsize` 33
`fontspec` 62
`format` 17, 30, 33, 61
Format und Schrift . 60 ff.
`\fpch` 19, 73
`\fplus` 6, 10
`frac-style` 46
`\fscrm` 22
`\fscrp` 22
`\fsscrm` 22
`\fsscrp` 22

G

`\g` 13
`\gas` 38

Gefahren- und

Sicherheitssätze .
 65–68

`german` 8, 37, 71

Geschützter Input ... 54 f.

`math` 55

`text` 54

`ghs` 6
`\ghs` 65
`\ghs*` 65
`\ghslistall` 71
`\ghspic` 68
GHSYSTEM 65–72
 Aufruf 65
 kombinierte Sätze . 68
 Platzhalter 66
 Sätze mit Lücken .. 67
`ghsystem` 6
`\Gibbs` 25, 73
`graphicx` 3
`greek` 6, 8, 11

H

`\H` 14
`half` 42
`\hapto` 8, 16
`\hertz` 74
`hide` 66
`\Hpl` 9
`\HtO` 9
`\Hyd` 9
`hyphen-post-space` 13
`hyphen-pre-space` 12

I

`ifpdf` 3
`includegraphics` 69
`\insitu` 17
Installation 5
`\intertext` 35
`\invacuo` 17

Ionenladungen 19 f.

`iupac` 6, 13, 16

iupac

`break-space` 13
`bridge-number` 16
`cip-kern` 14
`coord-use-hyphen` 16
`hyphen-post-space` 13
`hyphen-pre-space` 12

`\iupac` 12–15

IUPAC-Namen 12–17

Cahn-Ingold-Prelog ..

14

`cis/trans` 15

`eigene` 16

Fischer 15

griechische

Buchstaben ... 13

Heteroatome 14

`ortho/meta/para` .. 15

`tert` 15

`vordefiniert` 13

`zusammen/entgegen` .

15

IUPAC Namen

`syn/anti` 15

J

`\J` 29

K

`\k` 13

`\Ka` 18

`\Kb` 18

`kg-mass` 67

`\Kw` 18

L

`\L` 13, 15

`l3kernel` 3

`l3packages` 3

`label-offset` 57

`label-style` 57

Laden des Bundles 5

`language` ... 6, 8, 18, 39, 71

Lateinische Ausdrücke 17

latin

`format` 17

`\latin` 17

`lbs-mass` 67

`list` 30

`list-entry` 37

`list-name` 37

`list-setup` 30

Liste aller Sätze 71 f.

`\listofreactions` 37

`longtable` 3, 71

`\lqd` 8, 38

INDEX

- M**
- `\m` 14
 - `math-space` 55
 - Mathematik-Umgebungen**
 - 62 f.
 - `mathspec` 6, 10
 - `mathtools` 3, 35
 - `\mch` 19, 35, 49, 73
 - `\mech` 22 f.
 - `\mega` 74
 - `\meta` 13, 15
 - `method` 3, 6, 11, 33, 35
 - `mhchem` . 3 f., 6, 11, 30, 33, 36, 44, 55
 - `mhName`
 - `align` 33
 - `fontsize` 33
 - `format` 33
 - `width` 33
 - `\mhName` 33, 74
 - `\Molar` 18
 - `\moLar` 18
 - `\molar` 18
 - `\MolMass` 18
- N**
- `\N` 14
 - `\n` 14
 - `name-format` 60
 - `name-width` 60
 - Neues** 8 f.
 - `newman`
 - `angle` 40
 - `atoms` 40
 - `back-atoms` 40
 - `ring` 40
 - `scale` 40
 - `\newman` 40, 74
 - Newman-Projektionen** .. 40 f.
 - `ngerman` 8
 - `nicefrac` 3, 46
 - `\NMR` 5, 28 ff., 74
 - `nmr`
 - `coupling-unit` ... 30
 - `delta` 30
 - `format` 30
 - `list` 30
 - `list-setup` 30
 - `nucleus` 30
 - `parse` 30
 - `pos-number` 30
 - `unit` 29
 - `use-equal` 30
 - `nmr (Umg.)` 30
 - `\NMR*` 28
 - `\normal` 18
 - `\ntr` 9
 - `Nu` 6, 10
 - `\Nu` 6, 10, 73
 - `\Nuc` 10
 - `nucleus` 30
- O**
- `\O` 14
 - `opacity` 42
 - option**
 - `bpchem` 5
 - `circled` 6
 - `circletype` 6
 - `cmversion` 6
 - `german` 37, 71
 - `ghsystem` 6
 - `greek` 6, 11
 - `iupac` 6, 13, 16
 - `language` 6
 - `method` 6, 33
 - `Nu` 6, 10
 - `strict` 6
 - `synchronize` 6
 - `xspace` 6
 - orbital**
 - `angle` 42
 - `color` 42
 - `half` 42
 - `opacity` 42
 - `overlay` 42
 - `phase` 41
 - `scale` 42
 - `\orbital` 41, 74
 - Orbitale** 41 ff.
 - `organs` 67
- `\ortho` 15
- `ortho/meta/para` 15
- `overlay` 42
- `\OX` 23, 73
- ox**
- `align` 20
 - `decimal-marker` .. 20
 - `explicit-sign` .. 20 f.
 - `parse` 20
 - `pos` 20 f.
 - `roman` 20
- `\ox` 4, 20, 22, 73
- `\ox*` 4, 21
- Oxidationszahlen** ... 20 f.
- P**
- `\P` 14
 - `\p` 18
 - `p-style` 18
 - Paketoptionen** 5 f.
 - `\para` 15
 - `parse` 20, 30
 - Partialladungen** 21 f.
 - particle**
 - `elpair` 10
 - `\pch` 19, 73
 - Pfeile** 55–59
 - Anpassung 57
 - Beschriftung 56
 - Typen 55
 - bearbeiten 58
 - `\pH` 18
 - `phase` 41
 - `\phase` 39
 - Phasen** 38 f.
 - eigene 39
 - Grundlagen 38
 - phases**
 - `pos` 39
 - `space` 39
 - `pic-type` 71
 - Piktogramme** 68–71
 - `\pKa` 8, 18
 - `\pKb` 18
 - `plus-space` 53
 - `\pOH` 18

INDEX

polyglossia 71
 pos 20 f., 39
 \pos 29
 pos-number 30
 \prt 9

R

\R 13 f.
 \Rad 10
 radical-radius 51
 radical-style 51
 \Rconf 15
 reaction
 list-entry 37
 list-name 37
 reaction (Umg.) 8, 34
 reaction* (Umg.) 34
 \reactionlistname ... 37
 reactions (Umg.) 34
 reactions* (Umg.) 34
 Reaktionsmechanismen ..
 22 f.
 Reaktionsumgebungen ..
 34–38

redox

 dist 24
 sep 24
 \redox 23, 73
 Redoxreaktionen ... 23 ff.
 \RenewChemArrow .. 59, 74
 \RenewChemBond ... 50, 75
 \RenewChemIUPAC ... 16, 75
 \RenewChemLatin ... 17, 75
 \RenewChemNMR 28, 75
 \RenewChemParticle . 11 f.,
 39, 75
 \RenewChemPhase .. 39, 75
 \RenewChemState 27, 73, 75
 \renewtagform 35
 ring 40
 roman 20

S

\S 13 f.
 Säure/Base 18 f.
 scale 40, 42, 68

\Sconf 15
 \scrm 22
 \scrp 22
 sep 24
 Setup 7
 \Sf 14
 \ShowChemArrow 59
 \ShowChemBond 50
 \sin 8
 siunitx .. 3, 17 f., 25 f., 28 ff.
 \sld 8, 38
 space 39, 66
 spectroscopy (Umg.) .. 74
 Spektroskopie 27–33
 Spezielle Input-Typen ...
 53 f.
 Optionen Input ... 54
 Single-Token Input 53
 Spracheinstellung 7 f.
 \standardstate .. 10, 73 f.
 star 36
 \State 27, 74
 state
 delta 27
 exponent 27
 subscript-left .. 27
 Stereodeskriptoren und
 Nomenklatur ...
 13–16
 Stöchiometrische
 Faktoren .. 45 ff.
 nicefrac 46
 space 46
 xfrac 46
 stoich-space 46
 strict 6, 12, 16, 39
 subscript 26
 subscript-left 26 f.
 subscript-style 51
 subscript-vshift ... 51 f.
 substance 67
 Summenformeln .. 47–53
 Addukte 47
 Anpassung 51
 Befehle 48
 Bindungen 49

 Länge 53
 Hochstellungen ... 48
 Ladungsbefehle . 49
 Verhalten 49
 Ladungen 48
 Verschiebung ... 51
 Tiefstellungen 47
 Verschiebung ... 52
 \syn 15
 synchronize 6

T

table-caption 71
 table-caption-short . 71
 table-foot-rule 72
 table-head-number 71
 table-head-rule 72
 table-head-text 71
 table-label 71
 table-last-foot-rule 72
 table-next-page 71
 table-row-sep 72
 table-rules 72
 table-top-head-rule . 72
 tabu 3
 Teilchen, Ionen und
 Symbole ... 9–12
 eigene 11
 vordefiniert 9
 \ter 8
 tert 15
 \tert 15
 text 67
 textgreek 11, 13
 Text unter Formeln . 59 f.
 Anpassung 60
 syntax 59
 Thermodynamik ... 25 ff.
 TikZ 3, 15, 23, 40, 42, 50 f.,
 56, 58
 tikz 3
 \tiny 74
 \torr 18
 \trans 13, 15
 \transitionstatesymbol .
 10

INDEX

U		
Übersicht über die		
Optionen		
(chemmacros) ...		
72–75		
Umgebungen		
experimental .. 8, 29		
nmr 30		
reaction 8, 34		
reaction* 34		
reactions 34		
	reactions* 34	
	spectroscopy 74	
	unit 26, 29	
	upgreek 8	
	upgreek 11, 13	
	use-equal 29 f.	
V		
	\val 29	
W		
	\w 14	
		\water 9
		width 33
		X
		xfrac 21, 46
		xspace 3, 6
		xspace 3
		Z
		\Z 15
		zusammen/entgegen ... 15