

# Das chemmacros-Bundle

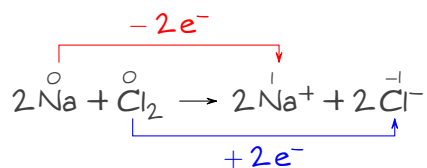
v3.3 2012/05/07

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

Clemens NIEDERBERGER

<https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/>  
[contact@mychemistry.eu](mailto:contact@mychemistry.eu)

deutsche Dokumentation



<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>II. chemmacros</b>	<b>9</b>
<b>I. Bevor es los geht</b>	<b>8. Teilchen, Ionen und Symbole</b>	<b>9</b>
	8.1. Vordefiniert . . . . .	9
	8.2. Eigene Teilchen definieren . . .	11
<b>1. Lizenz, Voraussetzungen und README</b>	<b>9. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke</b>	<b>11</b>
	9.1. IUPAC-Namen . . . . .	11
	9.1.1. Vordefinierte Befehle . .	13
	9.1.2. Eigene Nomenklatur-Befehle . . . . .	15
	9.2. Lateinische Ausdrücke . . . . .	15
<b>2. Motivation und Hintergrund</b>	<b>10. Einheiten für die Verwendung mit si-unitx</b>	<b>16</b>
<b>3. Installation und Laden des Bundles</b>	<b>11. Säure/Base</b>	<b>17</b>
<b>4. Paketoptionen</b>	<b>12. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen</b>	<b>17</b>
	12.1. Ionenladungen . . . . .	18
	12.2. Oxidationszahlen . . . . .	19
	12.3. Partialladungen und Ähnliches .	20
<b>5. Setup</b>	<b>13. Reaktionsmechanismen</b>	<b>21</b>
<b>6. Spracheinstellungen</b>		
6.1. Unterstützte Sprachen . . . . .		
6.2. Besonderheiten . . . . .		
6.2.1. Deutsch . . . . .		
6.2.2. Italienisch . . . . .		
<b>7. Neues</b>		
7.1. Version 3.3 . . . . .		

<b>14. Redoxreaktionen</b>	<b>22</b>	25.4. Ladungen und andere Hochstel- lungen . . . . .	47
<b>15. (Standard) Zustand, Thermodyna- mik</b>	<b>24</b>	25.5. Bindungen . . . . .	48
15.1. Thermodynamische Größen . . .	24	25.6. Anpassung . . . . .	48
15.1.1. Neue Größen definieren . . .	25	<b>26. Spezielle Input-Typen</b>	<b>50</b>
15.1.2. Größen umdefinieren . . .	25	26.1. Single-Token Input . . . . .	51
15.2. Zustandsgrößen . . . . .	26	26.2. Optionen Input . . . . .	51
<b>16. Spektroskopie und Messdaten</b>	<b>26</b>	<b>27. Geschützter Input</b>	<b>52</b>
16.1. Der \NMR-Befehl . . . . .	26	27.1. Text . . . . .	52
16.2. Abkürzungen . . . . .	27	27.2. Mathematik . . . . .	52
16.3. Eine Umgebung, um Messergeb- nisse darzustellen . . . . .	28	<b>28. Pfeile</b>	<b>53</b>
16.4. Anpassung . . . . .	28	28.1. Pfeiltypen . . . . .	53
16.5. Anwendungsbeispiel . . . . .	29	28.2. Beschriftung . . . . .	54
16.5.1. Beinahe Standard . . . . .	30	28.3. Anpassung . . . . .	55
16.5.2. Formatierte Liste . . . . .	31	28.4. Pfeiltypen bearbeiten . . . . .	56
16.5.3. Verrückt . . . . .	31	<b>29. Text unter Formeln</b>	<b>57</b>
<b>17. Befehle für mhchem</b>	<b>32</b>	29.1. Syntax . . . . .	57
<b>18. Reaktionsumgebungen</b>	<b>33</b>	29.2. Anpassung . . . . .	57
18.1. Durch CHEMMACROS definiert . .	33	<b>30. Format und Schrift</b>	<b>58</b>
18.2. Eigene Reaktionen . . . . .	34	<b>31. Verwendung in Mathematik- Umgebungen</b>	<b>60</b>
18.3. Liste der Reaktionen . . . . .	36	<b>32. Weitere Beispiele</b>	<b>60</b>
<b>19. Phasen</b>	<b>37</b>	<b>IV. ghsystem</b>	<b>62</b>
19.1. Grundlagen . . . . .	37	<b>33. Setup</b>	<b>62</b>
19.2. Eigene Phasen definieren . . . .	38	<b>34. Die Gefahren- (H) und Sicherheits- sätze (P) aufrufen</b>	<b>63</b>
<b>20. Newman-Projektionen</b>	<b>38</b>	34.1. Einfacher Aufruf . . . . .	63
<b>21. s, p und Hybrid-Orbitale</b>	<b>40</b>	34.2. Sätze mit Platzhaltern . . . . .	63
<b>III. chemformula</b>	<b>42</b>	34.3. Sätze mit Lücken . . . . .	65
<b>22. Setup</b>	<b>42</b>	34.4. Kombinierte Sätze . . . . .	65
<b>23. Das Grundprinzip</b>	<b>43</b>	<b>35. Piktogramme</b>	<b>66</b>
<b>24. Stöchiometrische Faktoren</b>	<b>44</b>	35.1. Die Bilder . . . . .	66
<b>25. Summenformeln</b>	<b>46</b>	35.2. Der Bildtyp hängt von der Engi- ne ab . . . . .	68
25.1. Addukte . . . . .	46	<b>36. Verfügbare Sprachen</b>	<b>68</b>
25.2. Tiefstellungen . . . . .	46		
25.3. Befehle . . . . .	47		

37. Liste aller Sätze	69	Vorschläge und Bugreports	82
V. Anhang	79	Quellen	82
Übersicht über die Optionen und Anpassungsmöglichkeiten	79	Index	83

# Teil I.

## Bevor es los geht

### 1. Lizenz, Voraussetzungen und README

Das **CHEMMACROS**-Bundle steht unter der **TeX** 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**<sup>1</sup>- und **l3packages**<sup>2</sup>-Bundles. Außerdem werden die Pakete **siunitx**<sup>3</sup>, **mathtools**<sup>4</sup>, **bm**<sup>5</sup>, **nicefrac**<sup>6</sup> und **environ**<sup>7</sup> sowie **tikz**<sup>8</sup> und die **TikZ** libraries **calc** und **arrows** benötigt.

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

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**<sup>12</sup>, **longtable**<sup>13</sup>, **ifpdf**<sup>14</sup> und **graphicx**<sup>15</sup>.

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

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

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 [The08].

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 IUPAC konforme Voreinstellungen

Vor allem der letzte Punkt benötigte zwar einige Schubser von Anwendern<sup>16</sup>, um die richtigen Einstellungen an vielen Stellen zu bekommen. Wenn Ihnen etwas auffällt, das nicht der IUPAC-Empfehlung entspricht<sup>17</sup>, 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.

---

<sup>16</sup> Vielen Dank an Dr. Paul King! <sup>17</sup> 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<sup>18</sup>, einem Ordner namens language/, der die Sprach-Definitions-Dateien für GHS enthält (Endung def) und einem Ordner pictures/, der eps-, jpg- 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} % 'chemmacros', 'chemformula' and 'ghsystem' are
   loaded
2 or
3 \usepackage[ghsystem=false]{chemformula} % 'chemmacros' and 'chemformula'
   are loaded
```

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

### 4. Paketooptionen

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 Paketooptionen. Wenn Sie sie explizit laden, können ihnen CHEMMACROS' Optionen gegeben werden. Sie werden dann an CHEMMACROS weitergereicht.

---

<sup>18</sup> Die mit der Endung sty.

- option** ▶ **bpchem** = true/false → Diese Option lädt bpchem und passt das Layout von `\NMR` den bpchem-Befehlen `\HNMR` und `\CNMR` an. Default = false
- option** ▶ **circled** = formal/all/none → **CHEMMACROS** unterscheidet zwischen zwei Typen von Ladungen<sup>19</sup>: reale (+/−) und formale ( $\oplus/\ominus$ ) 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`  $\oplus$  und `\oplus`  $\oplus$ . 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 10 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 12. 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`<sup>20</sup> definiert ebenfalls ein Makro `\Nu`. Diese Option entscheidet, welche Definition gilt, siehe Seite 9. 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`

<sup>19</sup> Vielen Dank an Christoph Schäfer, der mich darauf aufmerksam machte, dass v1.1 die Ladungen zu nachlässig behandelte! <sup>20</sup> 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
```

$- + - + e^- p^+$   
 $- + \ominus \oplus e^- p^+$   
 $- + \ominus \oplus e^- p^+$   
 $\ominus \oplus \ominus \oplus e^\ominus p^\oplus$   
 $\ominus \oplus \ominus \oplus e^\ominus p^\oplus$

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/ngerman. Die Sprachen american/british/english sind Aliase, ebenso die Sprachen german/ngerman.

Übersetzt werden

- Die Überschrift der Liste der Reaktionen.

- 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.



# 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.

- ▶ `\Hpl` →  $\text{H}^+$  (Proton)
- ▶ `\Hyd` →  $\text{OH}^-$  (Hydroxid)
- ▶ `\HtO` →  $\text{H}_3\text{O}^+$  (Oxoniumion) (H three O)
- ▶ `\water` →  $\text{H}_2\text{O}$
- ▶ `\el` →  $\text{e}^-$  (Elektron)
- ▶ `\prt` →  $\text{p}^+$  (Proton)
- ▶ `\ntr` →  $\text{n}^0$  (Neutron)
- ▶ `\Nu` →  $\text{Nu}^-$  (Nukleophil). Das Paket `mathspec` definiert ebenfalls ein Makro `\Nu`. Wenn Sie die Paketoption `Nu = mathspec` wählen, definiert **CHEMMACROS** stattdessen `\Nuc`.
- ▶ `\El` →  $\text{E}^+$  (Elektrophil)
- ▶ `\ba` →  $\text{ba}^-$  (Base)
- ▶ `\fplus` →  $\oplus$
- ▶ `\fminus` →  $\ominus$
- ▶ `\transitionstatesymbol` →  $\ddagger$
- ▶ `\standardstate` →  $\oslash$ . Dieses Symbol wird nur dann von **CHEMMACROS** bereitgestellt, wenn das Paket `chemstyle`<sup>21</sup> nicht geladen wurde. Die Idee ist von dort ausgeliehen<sup>22</sup>.
- ▶ `\Chemalpha` →  $\alpha$
- ▶ `\Chembeta` →  $\beta$
- ▶ `\Chemgamma` →  $\gamma$
- ▶ `\Chemdelta` →  $\delta$
- ▶ `\Chemepsilon` →  $\epsilon$

---

<sup>21</sup> CTAN: `chemstyle`    <sup>22</sup> Vielen Dank an den Paketautoren [Joseph Wright](#).

- `\Chemeta` →  $\eta$
- `\Chemmu` →  $\mu$
- `\Chemnu` →  $\nu$
- `\Chemrho` →  $\rho$
- `\Chempi` →  $\pi$
- `\Chemsigma` →  $\sigma$
- `\Chemomega` →  $\omega$
- `\ChemDelta` →  $\Delta$

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`<sup>23</sup> geladen wurde, da sie dessen Befehl `\Lewis` verwendet.

```

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

```

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

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`<sup>24</sup> geladen haben, werden dessen Buchstaben verwendet. Wenn Sie das Paket `upgreek`<sup>25</sup> 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>	$\alpha$	$\alpha$	$\alpha$
<code>\Chembeta</code>	$\beta$	$\beta$	$\beta$
<code>\ChemDelta</code>	$\Delta$	$\Delta$	$\Delta$

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

<sup>23</sup> CTAN: `chemfig`    <sup>24</sup> CTAN: `textgreek`    <sup>25</sup> CTAN: `upgreek`

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.

```
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 Befehl<sup>26</sup> 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`<sup>27</sup> eingesetzt werden.

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

```

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[2.2.2.1<sup>1,4</sup>]-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 kleiner 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

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

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

Der Befehl `\iupac` dient noch einem anderen Zweck. Unabhängig von der Paketooption `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`<sup>28</sup> definiert zum Beispiel sowohl `\D` als auch `\E`). Um Ihnen Kontrolle darüber zu geben, welche Befehle wie definiert sind, gibt es die Paketooption `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.

<sup>28</sup> CTAN: `cool`

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

	auto	restricted	strict
<code>\L</code>	L̸	L̸	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
- `\w` → ω

```
1 \iupac{5\a\androstano-3\b\ol} \\
2 \iupac{\a\-(tri\|chloro\|methyl)\-\w\chloro\|poly(1,4\phenylene\|methylene)}
```

5α-androstan-3β-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 \iupac{\N\methyl\|benz\amide} \\      N-methylbenzamide
2 \iupac{3\H\pyrrole} \\                3H-pyrrole
3 \iupac{\O\ethyl hexanethioate}         O-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.

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

```

### 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\hapto{\Chemeta}
2 Ferrocen = \iupac{Bis(\hapto^5-cyclo\|penta\|dienyl)eisen}

Ferrocen = Bis(η5-cyclopentadienyl)eisen

```

`\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>	in situ, ab initio

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` → cm<sup>3</sup> 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<sup>-3</sup>
- `\moLar` → mol L<sup>-1</sup>
- `\Molar` → M
- `\MolMass` → g mol<sup>-1</sup>
- `\normal` → N
- `\torr` → torr

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



## 11. Säure/Base

Einfache Darstellung von pH,  $pK_S$  ... (der Befehl `\pKa` hängt von der Paketoption `language` ab).

- ▶ `\pH` → pH
- ▶ `\pOH` → pOH
- ▶ `\Ka` →  $K_S$
- ▶ `\Kb` →  $K_B$
- ▶ `\Kw` →  $K_W$
- ▶ `\pKa[<num>]` → `\pKa`:  $pK_S$ , `\pKa[1]`:  $pK_{S1}$
- ▶ `\pKb[<num>]` → `\pKb`:  $pK_B$ , `\pKb[1]`:  $pK_{B1}$
- ▶ `\p{<anything>}` → z. B.: `\p{\Kw}`  $pK_W$

1	<code>\Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]</code>	$K_S K_B pK_S pK_{S1} pK_B pK_{B1}$
---	--	-------------------------------------

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	<code>\pH, \pKa</code>	
2		
3	<code>\chemsetup[acid-base]{p-style=slanted} \pH, \pKa</code>	
4		
5	<code>\chemsetup[acid-base]{p-style=italics} \pH, \pKa</code>	
		$pH, pK_S$ $pH, pK_S$ $pH, pK_S$

## 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)

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

Das gleiche für formale Ladungen:

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

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

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

$$\begin{array}{cc} \text{H}_{(\text{aq})}^+ & \text{H}_{(\text{aq})}^+ \\ \text{H}_{(\text{aq})}^+ & \text{H}_{(\text{aq})}^+ \end{array}$$

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

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

$$\begin{array}{c} \text{I}^+ \\ \text{H}_{(\text{aq})} \\ \text{I}^+ \\ \text{H}_{(\text{aq})}^+ \end{array}$$

## 12.2. Oxidationszahlen

Eingabe von Oxidationszahlen:

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

1	<code>\ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ox{-1,F}</code>	$\overset{+1}{\text{Na}}, \overset{+2}{\text{Ca}}, \overset{-2}{\text{S}}, \overset{-1}{\text{F}}$
---	--	--

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

1	<code>\ox[roman=false]{2,Ca} \ox{2,Ca} \</code>	$\overset{2}{\text{Ca}} \overset{+2}{\text{Ca}}$
2	<code>\ox[pos=super]{3,Fe}-Oxid \</code>	$\text{Fe}^{\text{III}}\text{-Oxid}$
3	<code>\ox[pos=side]{3,Fe}-Oxid \</code>	$\text{Fe(III)-Oxid}$
4	<code>\ox[parse=false]{?,Mn}</code>	$\overset{?}{\text{Mn}}$

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

1	<code>\ox{3,Fe} \ox*{3,Fe}</code>	$\overset{+3}{\text{Fe}} \overset{+3}{\text{Fe}}$
---	-----------------------------------	---

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

1	<code>\chemsetup[ox]{explicit-sign = true}</code>	
2	<code>\ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ch{"\ox{0,F}" {2}}</code>	
		$\overset{+1}{\text{Na}}, \overset{+2}{\text{Ca}}, \overset{-2}{\text{S}}, \overset{0}{\text{F}}_2$

1	Vergleichen Sie <code>\ox{-1,\ch{O2^2-}}</code> mit <code>\ch{"\ox{-1,O}" {2}^2-}</code>
	Vergleichen Sie $\overset{-1}{\text{O}}_2^{2-}$ mit $\overset{-1}{\text{O}}_2^{2-}$

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

```
1 \ox{.5,\ch{Br2}} \ch{"\ox{1/3,I}" {}3+}
```

$$\text{Br}_2 \text{I}_3^{0.5 \frac{1}{3}+}$$

Der Bruch verwendet den `\sfrac`-Befehl des `xfrac`<sup>29</sup>-Pakets. Zu diesem Zweck wurde die Instanz `chemmacros-ox-frac` definiert.

```
1 \DeclareInstance{xfrac}{chemmacros-ox-frac}{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` →  $\delta\ominus$

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{\delp,H}-\ox{\delm,Cl}} \hspace*{1cm}
6 \chemfig{\chemabove[3pt]{\lewis{246,Br}}{\delm}-\chemabove[3pt]{H}{\delp}}
```

$$\begin{array}{cc} \delta\oplus & \delta\ominus & \delta\ominus & \delta\oplus \\ \text{H} - \text{Cl} & & |\text{Br} - \text{H} \end{array}$$

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

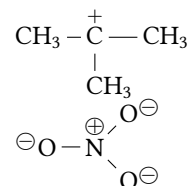
- `\scrip` →  $+$  (scriptstyle + plus)
- `\scrim` →  $-$  (scriptstyle + minus)
- `\fscrip` →  $\oplus$
- `\fscrim` →  $\ominus$

<sup>29</sup> CTAN: `xfrac`

► `\fsscrp` →  $\oplus$  (verwendet `\scriptscriptstyle`)

► `\fsscrm` →  $\ominus$

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



### 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  $E1$

► `\mech[e2]` → bimolekulare Eliminierung  $E2$

► `\mech[cb]` → unimolekulare Eliminierung „conjugated base“, d. h. via Carbanion  $E1_{cb}$

## 14. Redoxreaktionen

`CHEMMACROS` stellt zwei Befehle zur Verfügung, mit denen die Übertragung von Elektronen in Redoxreaktionen angezeigt werden kann<sup>30</sup>. 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.

```
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}
ox
┌
└
Na → Na+
└
┌
red
```

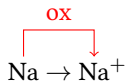
<sup>30</sup> Dank an Peter Cao, der dieses Feature vorgeschlagen hat.

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}
```



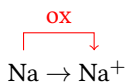
Na → Na<sup>+</sup>

Zusätzlich erlaubt die Option

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

den Abstand zwischen Atom und Anfang der Linie zu verändern.

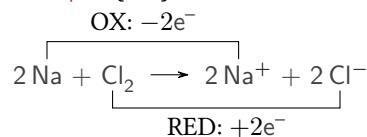
```
1 \chemsetup{redox/sep=.5em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}
```



Na → Na<sup>+</sup>

Beispiele:

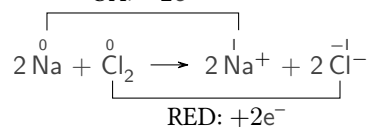
```
1 \ch{ 2 "\OX{o1,Na}" + "\OX{r1,Cl}" {}2 -> 2 "\OX{o2,Na}" \pch{} + 2
2 "\OX{r2,Cl}" \mch }
3 \redox(o1,o2){\small OX: $- 2\el$}
4 \redox(r1,r2)[[-1]{\small RED: $+ 2\el$}
5 \vspace{7mm}
```



OX: -2e<sup>-</sup>

RED: +2e<sup>-</sup>

```
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: $- 2\el$}
4 \redox(r1,r2)[[-1]{\small RED: $+ 2\el$}
5 \vspace{7mm}
```



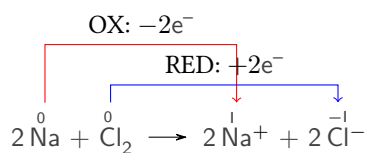
OX: -2e<sup>-</sup>

RED: +2e<sup>-</sup>

```

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)[draw=red,->][3.33]{\small OX: $- 2\text{e1}$}
4 \redox(r1,r2)[draw=blue,->]{\small RED: $+ 2\text{e1}$}

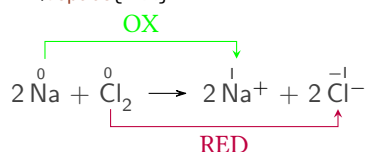
```



```

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)[green,-stealth]{\small OX}
4 \redox(r1,r2)[purple,-stealth][-1]{\small RED}
5 \vspace{7mm}

```



## 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:

1 <code>\Enthalpy{123} \</code>	$\Delta H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$
2 <code>\Entropy{123} \</code>	$S^\ominus = 123 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
3 <code>\Gibbs{123}</code>	$\Delta G^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$

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 \Enthalpy{-1234.56e3} \\  
2 \sisetup{per-mode=symbol,exponent-product=\cdot,output-decimal-marker={,},group-  
  four-digits=true}  
3 \Enthalpy{-1234.56e3}
```

$$\Delta H^\ominus = -1234.56 \times 10^3 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta H^\ominus = -1\,234,56 \cdot 10^3 \text{ kJ/mol}$$

### 15.1.1. Neue Größen definieren

Mit dem Befehl

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

können neue Größen definiert werden.

```
1 \DeclareChemState{Helmholtz}{A}{\kilo\joule\per\mole}  
2 \DeclareChemState[subscript-left=false,exponent=]{ElPot}{E}{\volt}  
3 \Helmholtz{123.4} \\  
4 \ElPot{-1.1} \\  
5 \ElPot[exponent=0]{$\ch{Sn}|\ch{Sn^2+}||\ch{Pb^2+}|\ch{Pb}$}{0.01}
```

$$\Delta A^\ominus = 123.4 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta E = -1.1 \text{ V}$$

$$\Delta E_{\text{Sn}|\text{Sn}^{2+}||\text{Pb}^{2+}|\text{Pb}}^0 = 0.01 \text{ V}$$

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=]{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 Befehl<sup>31</sup>

► `\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}}, \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:

$$^1\text{H-NMR (400 MHz, CDCl}_3\text{): } \delta = 1.59$$

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

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

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

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

Alle Argumente sind optional! Ohne Argumente<sup>32</sup> erhalten wir:

1	<code>\NMR \</code>	<sup>1</sup> H-NMR: $\delta$
2	<code>\NMR*</code>	<sup>1</sup> H-NMR

Das erste Argument spezifiziert die Art der NMR:

1	<code>\NMR{13,C}</code>	<sup>13</sup> C-NMR: $\delta$
---	-------------------------	-------------------------------

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

1	<code>\NMR(400)</code>	<sup>1</sup> H-NMR (400 MHz): $\delta$
---	------------------------	--

Auch mit Einheit:

1	<code>\NMR(4e8,\hertz)</code>	<sup>1</sup> H-NMR ( $4 \times 10^8$ Hz): $\delta$
---	-------------------------------	--

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

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

Mit dem dritten Befehl schließlich kann das Lösungsmittel angegeben werden:

1	<code>\NMR[CDCl3]</code>	<sup>1</sup> H-NMR (CDCl <sub>3</sub> ): $\delta$
---	--------------------------	---

## 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>}`.

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

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

### 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.
- ▶ `\J[<unit>]{<list of nums>}` → Kopplungskonstante, Werte werden mit ; getrennt eingegeben. Für NMR.
- ▶ `\#{<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 \begin{experimental}
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.

### 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  $\delta$  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. <sup>1</sup>H-NMR:  $\delta$  = 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.

```
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}, \SI{13}{\percent}).
4 %
5 \data{Smp.} \SI{277}{\celsius} (DSC).
6 %
7 \NMR(600)[CDCl3] \val{2.01} (s, \#{24}, \pos{5}), \val{2.31} (s, \#{12}, \pos{1}), \val{6.72--6.74} (m, \#{2}, \pos{11}), \val{6.82} (s, \#{8}, \pos{3}), \val{7.05--7.07} (m, \#{2}, \pos{12}), \val{7.39--7.41} (m, \#{4}, \pos{9}), \val{7.48--7.49} (m, \#{4}, \pos{8}).
```

```

8 %
9 \NMR{13,C}(150)[CDCl3] \val{21.2} ($+$, \#{4}, \pos{1}), \val{23.4} ($+$,
  \#{8}, \pos{5}), \val{126.0} ($+$, \#{4}, \pos{9}), \val{128.2} ($+$, \#{8},
  \pos{3}), \val{130.8} ($+$, \#{2}, \pos{12}), \val{133.6} ($+$, \#{2}, \pos
  {11}), \val{137.0} ($+$, \#{4}, \pos{8}), \val{138.6} (q, \#{4}, \pos{2}), \
  val{140.6} (q, \#{2}, \pos{10}), \val{140.8} (q, \#{8}, \pos{4}), \val{141.8}
  (q, \#{4}, \pos{6}), \val{145.6} (q, \#{2}, \pos{7}).
10 %
11 \data{MS}[DCP, EI, \SI{60}{\electronvolt}] \val{703} (2, \ch{M+}), \val{582}
  (1), \val{462} (1), \val{249} (13), \val{120} (41), \val{105} (100).
12 %
13 \data{MS}[\ch{MeOH + H2O + KI}, ESI, \SI{10}{\electronvolt}] \val{720} (100, \
  ch{M+ + OH-}), \val{368} (\ch{M+ + 2 OH-}).
14 %
15 \data{IR}[KBr] \val{3443} (w), \val{3061} (w), \val{2957} (m), \val{2918} (m),
  \val{2856} (w), \val{2729} (w), \val{1725} (w), \val{1606} (s), \val{1592} (s
  ), \val{1545} (w), \val{1446} (m), \val{1421} (m), \val{1402} (m), \val{1357}
  (w), \val{1278} (w), \val{1238} (s), \val{1214} (s), \val{1172} (s), \val
  {1154} (m), \val{1101} (w), \val{1030} (w), \val{979} (m), \val{874} (m), \
  val{846} (s), \val{818} (w), \val{798} (m), \val{744} (w), \val{724} (m), \
  val{663} (w), \val{586} (w), \val{562} (w), \val{515} (w).
16 %
17 \data*{UV-Vis} \SI{386}{\nano\metre} ($\varepsilon = \val{65984}$), \SI{406}{\
  nano\metre} ($\varepsilon = \val{65378}$).
18 %
19 \data*{Quantenausbeute} $\Phi = \val{0.74+-0.1}$\,,.
20 \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). <sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ (ppm) = 2.01 (s, 24 H, H<sub>5</sub>), 2.31 (s, 12 H, H<sub>1</sub>), 6.72–6.74 (m, 2 H, H<sub>11</sub>), 6.82 (s, 8 H, H<sub>3</sub>), 7.05–7.07 (m, 2 H, H<sub>12</sub>), 7.39–7.41 (m, 4 H, H<sub>9</sub>), 7.48–7.49 (m, 4 H, H<sub>8</sub>). <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ (ppm) = 21.2 (+, 4 C, C<sub>1</sub>), 23.4 (+, 8 C, C<sub>5</sub>), 126.0 (+, 4 C, C<sub>9</sub>), 128.2 (+, 8 C, C<sub>3</sub>), 130.8 (+, 2 C, C<sub>12</sub>), 133.6 (+, 2 C, C<sub>11</sub>), 137.0 (+, 4 C, C<sub>8</sub>), 138.6 (q, 4 C, C<sub>2</sub>), 140.6 (q, 2 C, C<sub>10</sub>), 140.8 (q, 8 C, C<sub>4</sub>), 141.8 (q, 4 C, C<sub>6</sub>), 145.6 (q, 2 C, C<sub>7</sub>). MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M<sup>+</sup>), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100). MS (MeOH + H<sub>2</sub>O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M<sup>+</sup> + OH<sup>-</sup>), 368 (M<sup>+</sup> + 2 OH<sup>-</sup>). 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 (ε = 65 984), 406 nm (ε = 65 378). Quantenausbeute: Φ = 0.74 ± 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).

**<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>):** 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).

**<sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CDCl<sub>3</sub>):** 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<sup>+</sup>), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

**MS (MeOH + H<sub>2</sub>O + KI, ESI, 10 eV)** = 720 (100, M<sup>+</sup> + OH<sup>-</sup>), 368 (M<sup>+</sup> + 2 OH<sup>-</sup>).

**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 (ε = 65 984), 406 nm (ε = 65 378).

**Quantenausbeute:** Φ = 0.74 ± 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).

**<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>):** δ **M<sup>+</sup> + H<sub>2</sub>O** = 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).

**<sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CDCl<sub>3</sub>):** δ **M<sup>+</sup> + H<sub>2</sub>O** = 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<sup>+</sup>), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

**MS (MeOH + H<sub>2</sub>O + KI, ESI, 10 eV)** = 720 (100, M<sup>+</sup> + OH<sup>-</sup>), 368 (M<sup>+</sup> + 2 OH<sup>-</sup>).

*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 mhchem<sup>33</sup> 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.

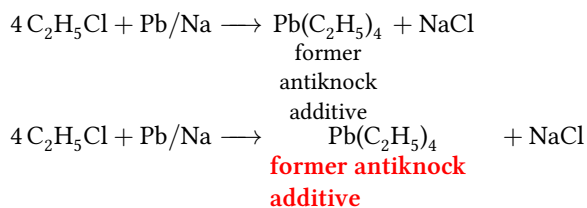
**mhName** ► `fontsize = <font size command>` → Die Schriftgröße des Textes. Default = `\tiny`

**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}
```

<sup>33</sup> 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.

<pre> 1 Reaktion mit Zähler: 2 \begin{reaction} 3 A -&gt; B 4 \end{reaction} </pre>	<p style="text-align: center;">Reaktion mit Zähler:</p> $A \longrightarrow B \quad \{1\}$
---	---

<pre> 1 Reaktion ohne Zähler: 2 \begin{reaction*} 3 C -&gt; D 4 \end{reaction*} </pre>	<p style="text-align: center;">Reaktion ohne Zähler:</p> $C \longrightarrow D$
--	--

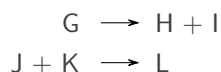
<pre> 1 mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler: 2 \begin{reactions} 3 A &amp;-&gt; B + C \\ 4 D + E &amp;-&gt; F 5 \end{reactions} </pre>	<p style="text-align: center;">mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler:</p> $ \begin{array}{rcl} A & \longrightarrow & B + C \\ D + E & \longrightarrow & F \end{array} \begin{array}{l} \{2\} \\ \{3\} \end{array} $
--	---

```

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>}`<sup>34</sup>.

```

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

```

$$\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO}_3 \quad [\text{R } 4]$$

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.

## 18.2. Eigene Reaktionen

Sie können mit dem Befehl

<sup>34</sup> Durch das `mathtools` Paket zur Verfügung gestellt.

► `\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 &-> bbbbb &&-> ccccc &&-> ddddd
5 \end{reactionsat}
6 \begin{reactionsat*}{2}
7   A &-> B & C &-> D \\
8   aaaaa &-> bbbbb &\quad{} & ccccc &-> ddddd
9 \end{reactionsat*}
```

$$\begin{array}{ccccccc} A & \longrightarrow & B & & \longrightarrow & C & \longrightarrow D & \{7\} \\ aaaaa & \longrightarrow & bbbbb & & \longrightarrow & ccccc & \longrightarrow ddddd & \{8\} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccccc} A & \longrightarrow & B & & C & \longrightarrow & D \\ aaaaa & \longrightarrow & bbbbb & & ccccc & \longrightarrow & ddddd \end{array}$$

### 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.

► \listoreactions

1	\listoreactions
<b>Reaktionsverzeichnis</b>	
Reaktion {1}	33
Reaktion {2}	33
Reaktion {3}	33
Reaktion [R 4]	34
Reaktion {5}	34
Reaktion {6}	34
Reaktion {7}	35
Reaktion {8}	35
Reaktion {9}: Autoprotolyse	36
Reaktion {10}: first step of chain	37
Reaktion {11}: second step of chain	37
Reaktion {12}: Synthese von Alkanen	61

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-	2 H <sub>2</sub> O ⇌ H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + OH <sup>-</sup> {9}
3	\end{reaction}	

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

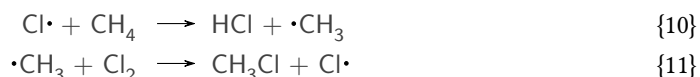
► \AddRxnDesc{<description>}

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}

```



Nebenbei: Sie müssen die Phantom-Befehle nicht verwenden, wenn Sie das Format der Atome nicht geändert haben, siehe Abschnitt 30 an Seite 58.

## 19. Phasen

### 19.1. Grundlagen

Diese Befehle sollen helfen, die Phase einer Substanz anzuzeigen.

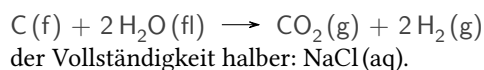
- `\sld` → (f)
- `\lqd` → (fl)
- `\gas` → (g)
- `\aq` → (aq)

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.

```



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

Die IUPAC-Empfehlung<sup>35</sup> 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).

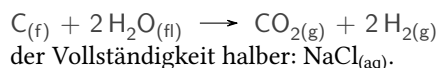
*IUPAC Green Book [Coh+08, p. 54]*

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.
```



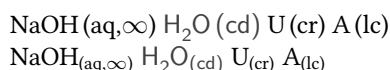
## 19.2. Eigene Phasen definieren

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
```



## 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.

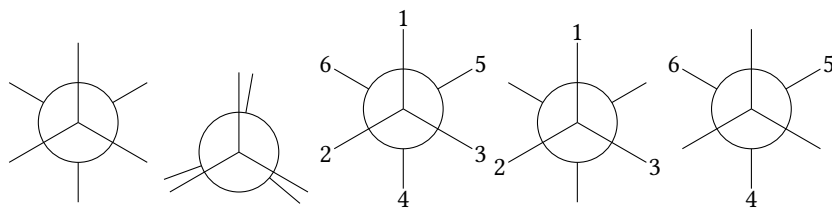
---

<sup>35</sup> Vielen Dank an Paul King für den Hinweis.

```

1 \newman{} \newman(170){}
2 \newman{1,2,3,4,5,6} \newman{1,2,3} \newman{,,4,5,6}

```



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.

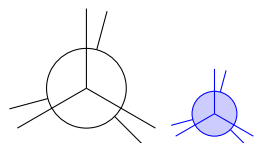
**newman** ► **atoms** = <tikz> → Aussehen der Knoten, in die die Atome geschrieben werden, mit **TikZ**-Keys anpassen.

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

```

1 \chemsetup[newman]{angle=45} \newman{}
2 \newman[scale=.75,ring={draw=blue,fill=blue!20}]{}

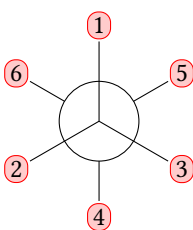
```



```

1 \chemsetup[newman]{atoms={draw=red,fill=red!20,inner sep=2pt,rounded corners}}
2 \newman{1,2,3,4,5,6}

```



```

1 \chemsetup[newman]{
2   atoms = {draw=red,fill=red!20,inner sep=2pt,rounded corners},
3   back-atoms = {draw=blue,fill=blue!20,inner sep=2pt,rounded corners}
4 }
5 \newman{1,2,3,4,5,6} \newman(170){1,2,3,4,5,6}

```



## 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

sp<sup>2</sup>

sp<sup>3</sup>



Abhängig vom Typ stehen verschiedene Optionen zur Modifikation zur Auswahl:

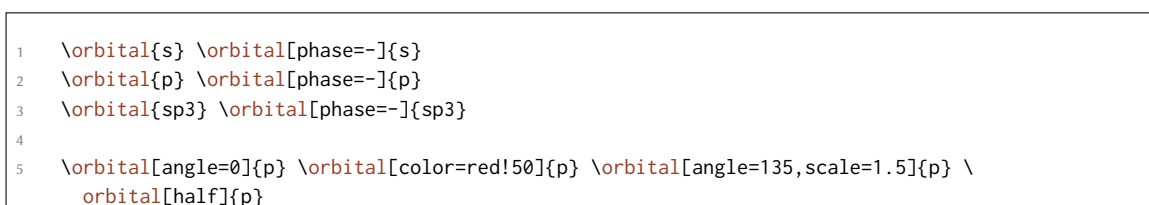
`orbital` ► `phase = +/-` → Ändern der Phase des Orbitals (alle Typen).

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

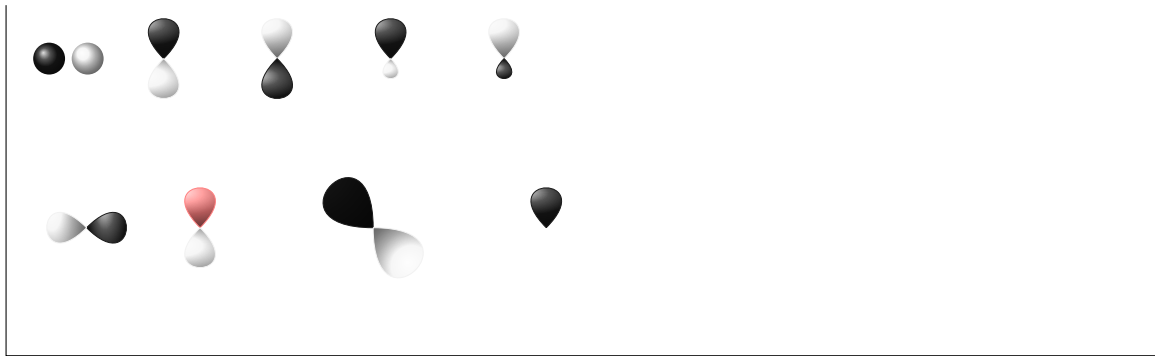
`orbital` ► `color = <color>` → Ändern der Farbe des Orbitale (alle Typen).

`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).







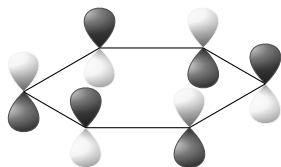
Zusätzlich gibt es zwei Optionen, mit denen das **TikZ**-Verhalten beeinflusst werden kann:

- 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}

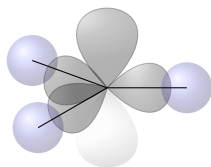
```



```

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>	$\text{H}_2\text{O}$
2 <code>\ch{Sb2O3} \\\</code>	$\text{Sb}_2\text{O}_3$
3 <code>\ch{H+} \\\</code>	$\text{H}^+$
4 <code>\ch{CrO4^2-} \\\</code>	$\text{CrO}_4^{2-}$
5 <code>\ch{AgCl2-} \\\</code>	$\text{AgCl}_2^-$
6 <code>\ch{[AgCl2]-} \\\</code>	$[\text{AgCl}_2]^-$
7 <code>\ch{Y^{99+}} \\\</code>	$\text{Y}^{99+}$
8 <code>\ch{Y^{99+}} \\\</code>	$\text{Y}^{99+}$
9 <code>\ch{H2_{(aq)}} \\\</code>	$\text{H}_{2(\text{aq})}$
10 <code>\ch{NO3-} \\\</code>	$\text{NO}_3^-$
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>	$\text{Ce}^{\text{IV}}$
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 -&gt;[a] C} \\\</code>	$\text{A} + \text{B} \xrightarrow{\text{a}} \text{C}$
2 <code>\ce{A + B -&gt;[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.

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:

- **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  $\text{\TeX}$ -Länge. Default = .1667em

```
1 \ch[decimal-marker={,}]{3.5} \ch[decimal-marker={\cldot$}]{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-fraction, die nach dem eigenen Bedarf umdefiniert werden kann. Default ist folgendes:

```
1 \DeclareInstance{xfrac}{chemformula-text-fraction}{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-fraction}{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>	$\text{H}_2\text{SO}_4$
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}` →  $A \cdot B$

► `\ch{A*B}` →  $A \cdot B$

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>	$\text{H}_2\text{SO}_4$
---	-------------------------	-------------------------

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>	$A_nB_m$
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>	$A_2B_3 \quad A_2B_3$
---	--	-----------------------

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>	$A=B \quad AB^+$
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>	$\text{RNO}_2^{--}$
6	<code>\ch{^31H} \\\</code>	$^3\text{H}$
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>	$\text{NO}^*$

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- &lt;=&gt; 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 49f.

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:  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $(\text{SO}_4)^{2-}$ . The staggered arrangement is now recommended.

*IUPAC Green Book [Coh+08, p. 51]*

## 25.5. Bindungen

`CHEMFORMULA` kennt drei Sorten Bindungen:

1	einfach: <code>\ch{CH3-CH3}</code> \	einfach: $\text{CH}_3\text{-CH}_3$
2	doppel: <code>\ch{CH2=CH2}</code> \	doppel: $\text{CH}_2\text{=CH}_2$
3	dreifach: <code>\ch{CH+CH}</code>	dreifach: $\text{CH}\equiv\text{CH}$

## 25.6. Anpassung

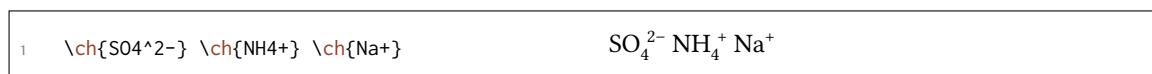
Diese Optionen ermöglichen Ihnen, den Output anzupassen:

- `subscript-vshift = <dim>` → Extra vertikale Verschiebung der Tiefstellungen. Default = 0pt

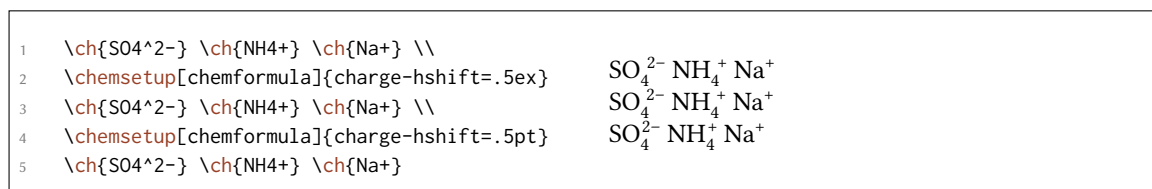


- **subscript-style** = text/math → Stil, der für die Tiefstellungen verwendet wird. Default = text
- **charge-hshift** = <dim> → Verschiebung von Hochstellungen, wenn sie einer Tiefstellung folgen. Default = .5ex
- **charge-style** = text/math → Stil, der für Hochstellungen verwendet wird. Default = text
- **adduct-space** = <dim> → Leerraum links und rechts des Addukt-Punktes. Default = .1333em
- **bond-length** = <dim> → Die Länge der Bindungen. Als Default-Länge wird die Länge eines Halbgeviertstrichs verwendet, wie sie mit `\settowidth{<len>}{\textendash}` bestimmt wird.
- **bond-offset** = <dim> → Der Abstand zwischen Atom und Bindung. Default = 0pt

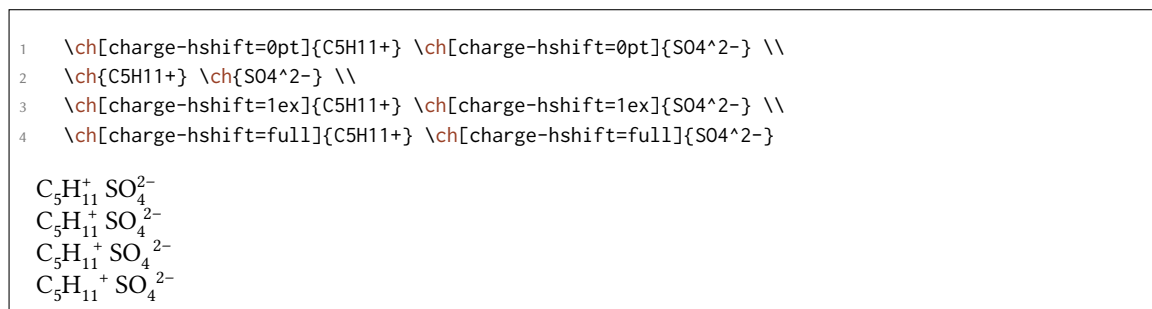
Vielleicht ist Ihnen aufgefallen, dass bei manchen Ionen die Ladungen nach rechts verschoben sind:



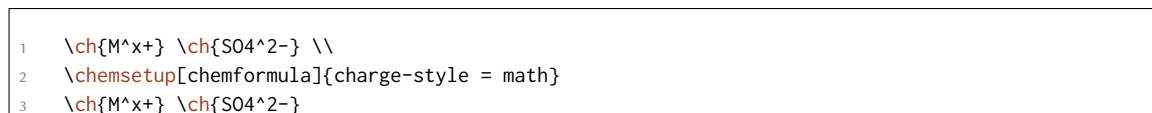
Sie werden verschoben, wenn sie einer Tiefstellung *folgen*. Den Betrag der Verschiebung kann man mit der Option **charge-hshift** festlegen.

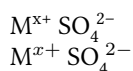


Ungeachtet der IUPAC-Empfehlung erstellt **CHEMFORMULA** keine voll gestaffelten Hochstellungen in der Voreinstellung, da ich die in manchen Fällen schwer zu lesen und in anderen Fällen hässlich finde. Da das aber eine subjektive Empfindung ist, gibt Ihnen **CHEMFORMULA** nicht nur die Möglichkeit, einen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



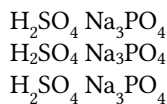
Wenn Sie nicht wollen, dass die Ladungen im Textmodus gesetzt werden, können Sie zum Mathematikmodus schalten:





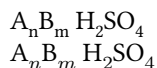
Die Option `subscript-vshift` kann verwendet werden, um die vertikale Verschiebung der Tiefstellungen anzupassen.

```
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}
```



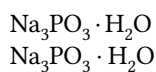
Sie können außerdem wählen, in welchem Modus die Tiefstellungen gesetzt werden:

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



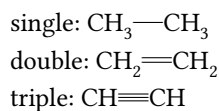
Mit der Option `adduct-space` kann der Leerraum links und rechts des Addukt-Zeichens festgesetzt werden.

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



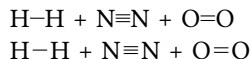
Die Länge der Bindungen ändern:

```
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<sub>2</sub>
- `\ch{ v }` → ↓ Zeichen für eine Fällung/Niederschlag: `\ch{BaSO4 v}` BaSO<sub>4</sub>↓
- `\ch{ ^ }` → ↑ Zeichen für entweichendes Gas: `\ch{H2 ^}` H<sub>2</sub>↑

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

- `plus-space = <dim>` → Eine T<sub>E</sub>X-Länge. Default = .3em

1	<code>\ch{A + B}\</code>	A + B
2	<code>\ch[plus-space=4pt]{A + B}</code>	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	<code>\ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-&gt; H3O+ + HSO4-} \</code>
2	<code>\ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-&gt; H3O+ + HSO4-} \</code>
	$\text{H}_2\text{O} + \textcolor{red}{\text{H}_2\text{SO}_4} \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HSO}_4^-$ $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{SO}_4 \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HSO}_4^-$

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	<code>\ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-&gt; H3O+ + HSO4-} \</code>
2	<code>\ch{H2O + @\format=\color{red}} H2SO4 -&gt; H3O+ + HSO4-} \</code>
3	<code>oder nat"urlich:\</code>
4	<code>\ch{H2O + \textcolor{red}{H2SO4} -&gt; H3O+ + HSO4-}\</code>
5	<code>\ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-&gt; H3O+ + HSO4-} \</code>
6	<code>\ch{H2O + @\subscript-vshift=2pt} H2SO4 -&gt; H3O+ + HSO4-}</code>
	$\text{H}_2\text{O} + \textcolor{red}{\text{H}_2\text{SO}_4} \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HSO}_4^-$ $\text{H}_2\text{O} + \textcolor{red}{\text{H}_2\text{SO}_4} \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HSO}_4^-$ <p>oder natürlich:</p> $\text{H}_2\text{O} + \textcolor{red}{\text{H}_2\text{SO}_4} \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HSO}_4^-$ $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{SO}_4 \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HSO}_4^-$ $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{SO}_4 \longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HSO}_4^-$

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'}
```

$$\overset{\text{II}}{\text{CaO}}$$
$$\dots \text{Na} + \dots \text{Cl}_2 \longrightarrow \dots \text{NaCl}$$
$$\text{A} \rightarrow \text{B}$$

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 -&gt; \$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  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = .1667em

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

## 28. Pfeile

### 28.1. Pfeiltypen

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

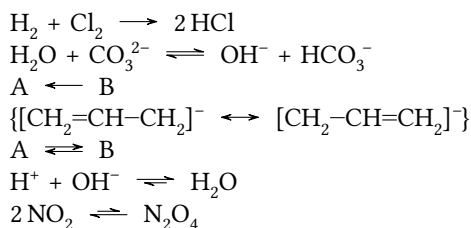
- ▶ `\ch{ -> }` → → Standardpfeil nach rechts
- ▶ `\ch{ <- }` → ← Standardpfeil nach links
- ▶ `\ch{ -/> }` →  $\nrightarrow$  reagiert nicht (rechts)
- ▶ `\ch{ </- }` →  $\nleftarrow$  reagiert nicht (links)
- ▶ `\ch{ <-> }` →  $\longleftrightarrow$  Mesomerie-Pfeil
- ▶ `\ch{ <> }` →  $\rightleftharpoons$  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}

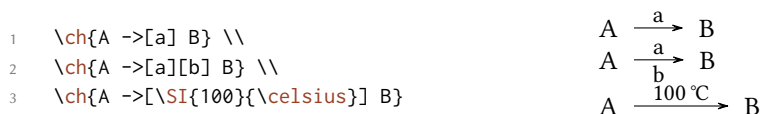
```



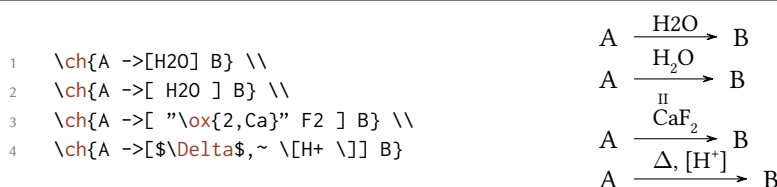
## 28.2. Beschriftung

Die Pfeile haben zwei optionale Argumente für Beschriftungen.

► `\ch{ ->[<above>][<below>] }`



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

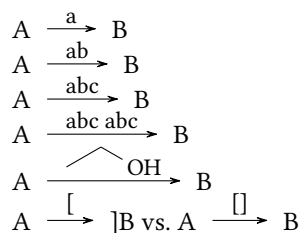


Mit den Leerzeichen verarbeitet `CHEMFORMULA` den Teil zwischen den Klammern als normalen Input. Die Pfeile lesen ihre Argumente erst *nach* der Verarbeitung. Wie Sie sehen können „wachsen“ die Pfeile mit der Länge der Beschriftungen. Konstant bleibt der überstehende Teil. Im letzten Beispiel können 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** = <font command> → Die relative Schriftgröße der Beschriftung. Default = `\footnotesize`

Der folgende Code zeigt die Effekte der verschiedenen Optionen auf den  $\Leftrightarrow$  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:  $A \xrightleftharpoons{x}{y} B$   
 länger:  $A \xrightleftharpoons[x]{y} B$   
 höher:  $A \xrightleftharpoons{x}{y} B$   
 ausbalancierter:  $A \xrightleftharpoons{x}{y} B$   
 Bschriftung weiter weg:  $A \xrightleftharpoons{x}{y} B$   
 größerer Abstand zu Formeln:  $A \xrightleftharpoons{x}{y} B$   
 kleinere Beschriftungen:  $A \xrightleftharpoons{x}{y} B$

## 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**<sup>36</sup>.

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

(cf\_arrow\_start) Der Pfeilanzfang.

(cf\_arrow\_end) Das Pfeilende.

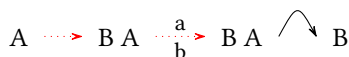
(cf\_arrow\_mid) Die Pfeilmitte.

(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 .>[a][b] B} \ch{A n> B}
```



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}
```

<sup>36</sup> Bitte lesen Sie dazu das pgfmanual.



```
\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:

1	<code>\ch{!(ethanol)( CH2CH2OH )}</code>	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ethanol
---	--	--

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.

1	<code>\ch{!(water)(H2O)} \quad</code>	
2	<code>\ch{!( "\textcolor{blue}{water}" )( H2O )} \quad</code>	
3	<code>\ch{!( \$2n-1\$ )( H2O )} \quad</code>	
4	<code>\ch{!( H2O )( H2O )} \quad</code>	
5	<code>\ch{!(oxonium)( H3O+ )}</code>	

$\text{H}_2\text{O}$	$\text{H}_2\text{O}$	$\text{H}_2\text{O}$	$\text{H}_2\text{O}$	$\text{H}_3\text{O}^+$
water	water	$2n - 1$	$\text{H}_2\text{O}$	oxonium

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~(!)} \quad</code>	$\text{H}_2\text{O} (!)$
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 \ch{!(S"aure)( H2SO4 ) -> B} \\
2 \ch[name-format=\sffamily\small]{!(S"aure)( H2SO4 ) -> B} \\
3 \ch[name-format=\scriptsize N:~]{!(S"aure)( H2SO4 ) -> B} \\
4 \ch[name-width=3em,name-format=\scriptsize\raggedright]{!(S"aure)( H2SO4 ) -> B}

H2SO4 → B
Säure
H2SO4 → B
Säure
H2SO4 → B
N: Säure
H2SO4 → B
Säure

```

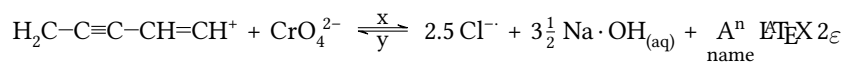
### 30. Format und Schrift

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

```

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

```

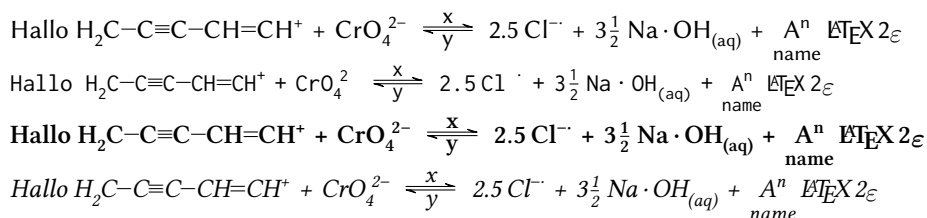


Nun ändern wir verschiedene Aspekte der Schrift und sehen, was passiert:

```

1 \sffamily Hallo \sample \\
2 \ttfamily Hallo \sample \normalfont \\
3 \bfseries Hallo \sample \normalfont \\
4 \itshape Hallo \sample

```



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

```



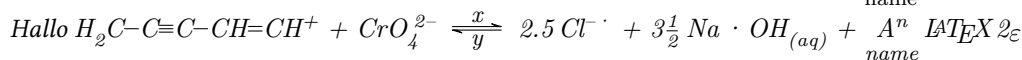
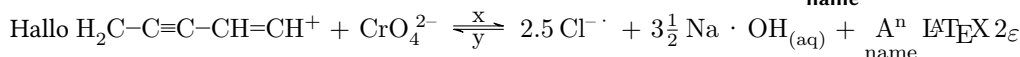
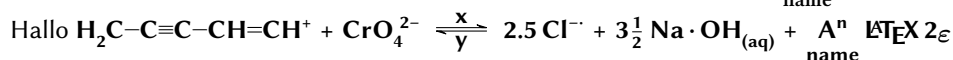
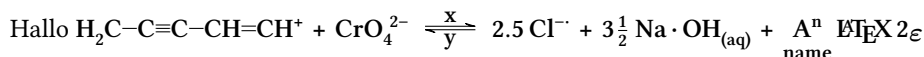
Sie können ebenfalls speziell die Schriftfamilie, Schriftserie und Schriftform des Output setzen:

- **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

```



Wenn Sie Xe<sub>La</sub>TeX oder Lua<sub>La</sub>TeX verwenden und das Paket fontspec<sup>37</sup> geladen haben, können Sie die Schrift von **CHEMFORMULA** auch damit ändern:

- **font-spec** = {<font>} oder mit Optionen
- **font-spec** = {[<options>]<font>}

<sup>37</sup> CTAN: fontspec

```

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

```

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

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

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

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

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

## 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.

```

1 \begin{align}
2 \ch{
3   H2O & \rightarrow[a] H2SO4 \\
4   Cl2 & \rightarrow[x][y] CH4
5 }
6 \end{align}
7 \begin{align*}
8 \ch{
9   RNO2 & \rightleftharpoons[+ e^-] RNO2^{\cdot-} \\
10  RNO2^{\cdot-} & \rightleftharpoons[+ e^-] RNO2^{2-}
11 }
12 \end{align*}

```

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

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

$$\text{RNO}_2 \rightleftharpoons[+ e^-] \text{RNO}_2^{\cdot-}$$

$$\text{RNO}_2^{\cdot-} \rightleftharpoons[+ e^-] \text{RNO}_2^{2-}$$

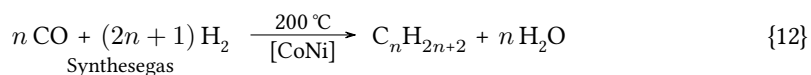
## 32. Weitere Beispiele

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}][\CoNi] C_{\n$}H_{\n$}
3 \end{reaction}

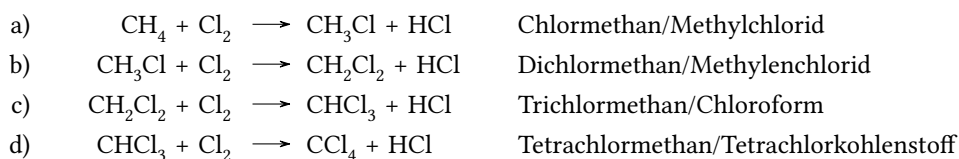
```



```

1 \begin{reactions*}
2 "a)" && \text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl} && "{\small \text{Chlormethan/Methylchlorid}}\\"
3 "b)" && \text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{HCl} && "{\small \text{Dichlormethan/Methylenchlorid}}\\"
4 "c)" && \text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CHCl}_3 + \text{HCl} && "{\small \text{Trichlormethan/Chloroform}}\\"
5 "d)" && \text{CHCl}_3 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CCl}_4 + \text{HCl} && "{\small \text{Tetrachlormethan/}}\\"
6 \end{reactions*}

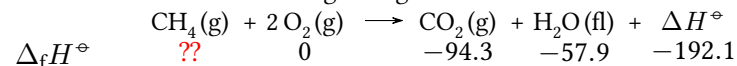
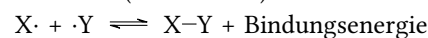
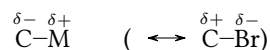
```



```

1 \chemsetup[ox]{parse=false}\ch{"\ox{\delm,C}" -{\} "\ox{\delp,M}" \quad ( <-> "\ox{\delp,C}" -{\} "\ox{\delm,Br}" )} \\\
2 \ch[adduct-space=0pt]{X. + .Y <=> X-Y + Bindungsenergie} \\\
3 \ch[name-format=\normalsize]{!(\State{H}{f}\quad)(\textcolor{red}{??})(\text{CH}_4\gas{ }) + !(\num{0})(\text{2 O}_2\gas{ }) -> !(\num{-94.3})(\text{CO}_2\gas{ }) + !(\num{-57.9})(\text{H}_2\text{O}\lq{ }) + !(\num{-192.1})(\State{H})}

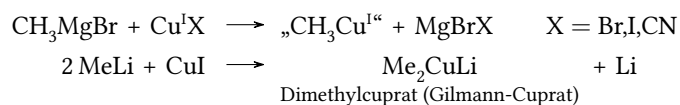
```



```

1 \begin{reactions*}
2 \text{CH}_3\text{MgBr} + "\ox*{1,Cu}" \text{X} &\rightarrow& "\glqq" \text{CH}_3 "\ox*{1,Cu}\grqq" + \text{MgBrX} "\quad \text{X} \\ && \sim \$\sim \text{Br, I, CN}" \\\
3 2 \text{MeLi} + \text{CuI} &\rightarrow& !(\text{Dimethylcuprat} \sim (\text{Gilmann-Cuprat}))(\text{Me}_2\text{CuLi}) + \text{Li}
4 \end{reactions*}

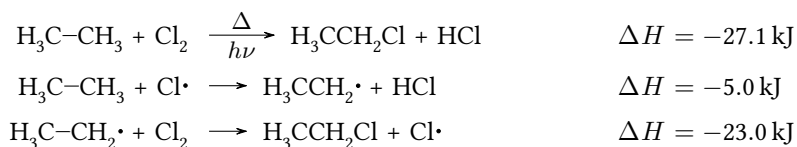
```



```

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*}

```

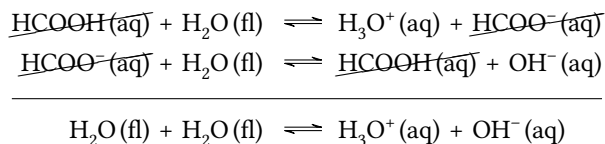


Das folgende Beispiel zeigt, wie das kürzen von Formeln erreicht werden kann<sup>38</sup>.

```

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>}`

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

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.

1	<code>\ghs{h}{200} \\\</code>	H200: Instabil, explosiv
2	<code>\ghs{H}{224} \\\</code>	H224: Flüssigkeit und Dampf extrem entzündbar.
3	<code>\ghs{euh}{001} \\\</code>	EUH001: In trockenem Zustand explosionsgefährlich.
4	<code>\ghs{Euh}{202} \\\</code>	EUH202: Cyanacrylat. Gefahr. Klebt innerhalb von Sekunden Haut und Augenlider zusammen. Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.
5	<code>\ghs{p}{201}</code>	P201: Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.

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	<code>\ghs{h}{200} \\\</code>	H200: Instabil, explosiv
2	<code>\ghs[space=\,]{h}{200} \\\</code>	H 200: Instabil, explosiv
3	<code>\ghs*{h}{200} \\\</code>	Instabil, explosiv
4	<code>\ghs[hide]{h}{200}</code>	H200

### 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}
```

H340: Kann genetische Defekte verursachen.

H340: Kann genetische Defekte verursachen. *<Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht>*

H360: Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen.

H360: Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. *<konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt> <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht>*

H370: Schädigt die Organe.

H370: Schädigt die Organe *<oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt>. <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht>*

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

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

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}
```

H340: Kann genetische Defekte verursachen. So werden Sie der Gefahr ausgesetzt.

H360: Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. Das sind die Effekte

H370: Schädigt dieses Organ.

EUH208: Enthält Substanz. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.



### 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}
```

P301: BEI VERSCHLUCKEN:

P401: ... aufbewahren.

P411: Bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.

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

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[dots=Arzt kontaktieren!]{p}{301} \\
2 \ghs[text=here]{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}
```

P301: BEI VERSCHLUCKEN:

P401: ... aufbewahren.

P411: Bei Temperaturen von nicht mehr als 50 °C aufbewahren.

P413: Schüttgut in Mengen von mehr als 5.0 kg bei Temperaturen von nicht mehr als 50 °C aufbewahren.

### 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}
```

P235 + P410: Kühl halten. Vor Sonnenbestrahlung schützen.

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

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 3](#) 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`, `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.

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




























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







► `includegraphics = {<includegraphics keyvals>}`

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



Tabelle 3: 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	
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	

Name	Piktogramm	Name	Piktogramm
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 $\TeX$  im DVI-Modus verlangt eps-Dateien, während pdf $\TeX$  im PDF-Modus, Xe $\TeX$  und Lua $\TeX$  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 $\TeX$  im DVI-Modus das nicht kann.

Um das Problem zu lösen, testet `GHSYSTEM`, welche Engine verwendet wird und falls es pdf $\TeX$  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/jpg/png`

jedoch frei wählen.

## 36. Verfügbare Sprachen

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

Sie können die Sprache auch explizit wählen.

► `language = english/german`

<sup>39</sup> CTAN: `babel`    <sup>40</sup> CTAN: `polyglossia`

1	<code>\ghs{h}{201}</code>	H201: Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.
2		
3	<code>\chemsetup[ghsystem]{language=english}</code>	H201: Explosive; mass explosion hazard.
4	<code>\ghs{h}{201}</code>	

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 mich<sup>41</sup> 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
- `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`<sup>42</sup> 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 4](#) erzeugt wurde:

<sup>41</sup> [contact@mychemistry.eu](mailto:contact@mychemistry.eu)    <sup>42</sup> CTAN: `booktabs`

Tabelle 4: Alle H, EUH und P Sätze.

Nummer	Satz
H200	Instabil, explosiv
H201	Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.
H202	Explosiv; große Gefahr durch Splitter, Spreng- und Wurfstücke.
H203	Explosiv; Gefahr durch Feuer, Luftdruck oder Splitter, Spreng- und Wurfstücke.
H204	Gefahr durch Feuer oder Splitter, Spreng- und Wurfstücke.
H205	Gefahr der Massenexplosion bei Feuer.
H220	Extrem entzündbares Gas.
H221	Entzündbares Gas.
H222	Extrem entzündbares Aerosol.
H223	Entzündbares Aerosol.
H224	Flüssigkeit und Dampf extrem entzündbar.
H225	Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar.
H226	Flüssigkeit und Dampf entzündbar.
H228	Entzündbarer Feststoff.
H240	Erwärmung kann Explosion verursachen.
H241	Erwärmung kann Brand oder Explosion verursachen.
H242	Erwärmung kann Brand verursachen.
H250	Entzündet sich in Berührung mit Luft von selbst.
H251	Selbsterhitzungsfähig; kann in Brand geraten.
H252	In großen Mengen selbsterhitzungsfähig; kann in Brand geraten.
H260	In Berührung mit Wasser entstehen entzündbare Gase, die sich spontan entzünden können.
H261	In Berührung mit Wasser entstehen entzündbare Gase.
H270	Kann Brand verursachen oder verstärken; Oxidationsmittel.
H271	Kann Brand oder Explosion verursachen; starkes Oxidationsmittel.
H272	Kann Brand verstärken; Oxidationsmittel.
H280	Enthält Gas unter Druck; kann bei Erwärmung explodieren.
H281	Enthält tiefkaltes Gas; kann Kälteverbrennungen oder -Verletzungen verursachen.
H290	Kann gegenüber Metallen korrosiv sein.

*weiter auf der nächsten Seite*

Nummer	Satz
H300	Lebensgefahr bei Verschlucken.
H301	Giftig bei Verschlucken.
H302	Gesundheitsschädlich bei Verschlucken.
H304	Kann bei Verschlucken und Eindringen in die Atemwege tödlich sein.
H310	Lebensgefahr bei Hautkontakt.
H311	Giftig bei Hautkontakt.
H312	Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt.
H314	Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden.
H315	Verursacht Hautreizungen.
H317	Kann allergische Hautreaktionen verursachen.
H318	Verursacht schwere Augenschäden.
H319	Verursacht schwere Augenreizung.
H330	Lebensgefahr bei Einatmen.
H331	Giftig bei Einatmen.
H332	Gesundheitsschädlich bei Einatmen.
H334	Kann bei Einatmen Allergie, asthmaartige Symptome oder Atembeschwerden verursachen.
H335	Kann die Atemwege reizen.
H336	Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen.
H340	Kann genetische Defekte verursachen. <i>&lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H341	Kann vermutlich genetische Defekte verursachen. <i>&lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H350	Kann Krebs erzeugen. <i>&lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H351	Kann vermutlich Krebs erzeugen. <i>&lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H360	Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. <i>&lt;konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt&gt; &lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>

*weiter auf der nächsten Seite*

Nummer	Satz
H361	Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. <i>&lt;konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt&gt; &lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H362	Kann Säuglinge über die Muttermilch schädigen.
H370	Schädigt die Organe <i>&lt;oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt&gt;. &lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H371	Kann die Organe <i>&lt;oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt&gt;</i> schädigen. <i>&lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H372	Schädigt die Organe <i>&lt;oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt&gt;</i> bei längerer oder wiederholter Exposition. <i>&lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H373	Kann die Organe <i>&lt;oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt&gt;</i> schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. <i>&lt;Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht&gt;</i>
H400	Sehr giftig für Wasserorganismen.
H410	Sehr giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
H411	Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
H412	Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
H413	Kann für Wasserorganismen schädlich sein, mit langfristiger Wirkung.
H350i	Kann bei Einatmen Krebs erzeugen.
H360F	Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.
H360D	Kann das Kind im Mutterleib schädigen.
H361f	Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.
H361d	Kann vermutlich das Kind im Mutterleib schädigen.
H360FD	Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen. Kann das Kind im Mutterleib schädigen.
H361fd	Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen. Kann vermutlich das Kind im Mutterleib schädigen.
H360Fd	Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen. Kann vermutlich das Kind im Mutterleib schädigen.
H360Df	Kann das Kind im Mutterleib schädigen. Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.

*weiter auf der nächsten Seite*



Nummer	Satz
EUH001	In trockenem Zustand explosionsgefährlich.
EUH006	Mit und ohne Luft explosionsfähig.
EUH014	Reagiert heftig mit Wasser.
EUH018	Kann bei Verwendung explosionsfähige/entzündbare Dampf/Luft-Gemische bilden.
EUH019	Kann explosionsfähige Peroxide bilden.
EUH044	Explosionsgefahr bei Erhitzen unter Einschluss.
EUH029	Entwickelt bei Berührung mit Wasser giftige Gase.
EUH031	Entwickelt bei Berührung mit Säure giftige Gase.
EUH032	Entwickelt bei Berührung mit Säure sehr giftige Gase.
EUH066	Wiederholter Kontakt kann zu spröder oder rissiger Haut führen.
EUH070	Giftig bei Berührung mit den Augen.
EUH071	Wirkt ätzend auf die Atemwege.
EUH059	Die Ozonschicht schädigend.
EUH201	Enthält Blei. Nicht für den Anstrich von Gegenständen verwenden, die von Kindern gekaut oder gelutscht werden könnten.
EUH201A	Achtung! Enthält Blei.
EUH202	Cyanacrylat. Gefahr. Klebt innerhalb von Sekunden Haut und Augenlider zusammen. Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.
EUH203	Enthält Chrom(VI). Kann allergische Reaktionen hervorrufen.
EUH204	Enthält Isocyanate. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.
EUH205	Enthält epoxidhaltige Verbindungen. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.
EUH206	Achtung! Nicht zusammen mit anderen Produkten verwenden, da gefährliche Gase (Chlor) freigesetzt werden können.
EUH207	Achtung! Enthält Cadmium. Bei der Verwendung entstehen gefährliche Dämpfe. Hinweise des Herstellers beachten. Sicherheitsanweisungen einhalten.
EUH208	Enthält <Name des sensibilisierenden Stoffes>. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.
EUH209	Kann bei Verwendung leicht entzündbar werden.
EUH209A	Kann bei Verwendung entzündbar werden.
EUH210	Sicherheitsdatenblatt auf Anfrage erhältlich.
EUH401	Zur Vermeidung von Risiken für Mensch und Umwelt die Gebrauchsanleitung einhalten.

*weiter auf der nächsten Seite*

Nummer	Satz
P101	Ist ärztlicher Rat erforderlich, Verpackung oder Kennzeichnungsetikett bereithalten.
P102	Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.
P103	Vor Gebrauch Kennzeichnungsetikett lesen.
P201	Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.
P202	Vor Gebrauch alle Sicherheitshinweise lesen und verstehen.
P210	Von Hitze/Funken/offener Flamme/heißen Oberflächen fernhalten. Nicht rauchen.
P211	Nicht gegen offene Flamme oder andere Zündquelle sprühen.
P220	Von Kleidung/.../brennbaren Materialien fernhalten/entfernt aufbewahren.
P221	Mischen mit brennbaren Stoffen/... unbedingt verhindern.
P222	Kontakt mit Luft nicht zulassen.
P223	Kontakt mit Wasser wegen heftiger Reaktion und möglichem Aufflammen unbedingt verhindern.
P230	Feucht halten mit ...
P231	Unter inertem Gas handhaben.
P232	Vor Feuchtigkeit schützen.
P233	Behälter dicht verschlossen halten.
P234	Nur im Originalbehälter aufbewahren.
P235	Kühl halten.
P240	Behälter und zu befüllende Anlage erden.
P241	Explosionsschutz elektrische Betriebsmittel/Lüftungsanlagen/Beleuchtung/... verwenden.
P242	Nur funkenfreies Werkzeug verwenden.
P243	Maßnahmen gegen elektrostatische Aufladungen treffen.
P244	Druckminderer frei von Fett und Öl halten.
P250	Nicht schleifen/stoßen/.../reiben.
P251	Behälter steht unter Druck: Nicht durchstechen oder verbrennen, auch nicht nach der Verwendung.
P260	Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen.
P261	Einatmen von Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol vermeiden.
P262	Nicht in die Augen, auf die Haut oder auf die Kleidung gelangen lassen.
P263	Kontakt während der Schwangerschaft und der Stillzeit vermeiden.
P264	Nach Gebrauch ... gründlich waschen.
P270	Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen.

*weiter auf der nächsten Seite*

Nummer	Satz
P271	Nur im Freien oder in gut belüfteten Räumen verwenden.
P272	Kontaminierte Arbeitskleidung nicht außerhalb des Arbeitsplatzes tragen.
P273	Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
P280	Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P281	Vorgeschriebene persönliche Schutzausrüstung verwenden.
P282	Schutzhandschuhe/Gesichtsschild/Augenschutz mit Kälteisolierung tragen.
P283	Schwer entflammbare/flammhemmende Kleidung tragen.
P284	Atemschutz tragen.
P285	Bei unzureichender Belüftung Atemschutz tragen.
P231 + P232	Unter inertem Gas handhaben. Vor Feuchtigkeit schützen.
P235 + P410	Kühl halten. Vor Sonnenbestrahlung schützen.
P301	BEI VERSCHLUCKEN:
P302	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT:
P303	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT (oder dem Haar):
P304	BEI EINATMEN:
P305	BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN:
P306	BEI KONTAMINierter KLEIDUNG:
P307	BEI Exposition:
P308	BEI Exposition oder falls betroffen:
P309	BEI Exposition oder Unwohlsein:
P310	Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P311	GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P312	Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P313	Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P314	Bei Unwohlsein ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P315	Sofort ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P320	Besondere Behandlung dringend erforderlich (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett).
P321	Besondere Behandlung (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett).
P322	Gezielte Maßnahmen (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett).
P330	Mund ausspülen.

*weiter auf der nächsten Seite*

Nummer	Satz
P331	KEIN Erbrechen herbeiführen.
P332	Bei Hautreizung:
P333	Bei Hautreizung oder -ausschlag:
P334	In kaltes Wasser tauchen/nassen Verband anlegen.
P335	Lose Partikel von der Haut abbürsten.
P336	Vereiste Bereiche mit lauwarmem Wasser auftauen. Betroffenen Bereich nicht reiben.
P337	Bei anhaltender Augenreizung:
P338	Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter ausspülen.
P340	Die betroffene Person an die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.
P341	Bei Atembeschwerden an die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.
P342	Bei Symptomen der Atemwege:
P350	Behutsam mit viel Wasser und Seife waschen.
P351	Einige Minuten lang behutsam mit Wasser ausspülen.
P352	Mit viel Wasser und Seife waschen.
P353	Haut mit Wasser abwaschen/duschen.
P360	Kontaminierte Kleidung und Haut sofort mit viel Wasser abwaschen und danach Kleidung ausziehen.
P361	Alle kontaminierten Kleidungsstücke sofort ausziehen.
P362	Kontaminierte Kleidung ausziehen und vor erneutem Tragen waschen.
P363	Kontaminierte Kleidung vor erneutem Tragen waschen.
P370	Bei Brand:
P371	Bei Großbrand und großen Mengen:
P372	Explosionsgefahr bei Brand.
P373	KEINE Brandbekämpfung, wenn das Feuer explosive Stoffe/Gemische/Erzeugnisse erreicht.
P374	Brandbekämpfung mit üblichen Vorsichtsmaßnahmen aus angemessener Entfernung.
P375	Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen.
P376	Undichtigkeit beseitigen, wenn gefahrlos möglich.
P377	Brand von ausströmendem Gas:Nicht löschen, bis Undichtigkeit gefahrlos beseitigt werden kann.
P378	... zum Löschen verwenden.
P380	Umgebung räumen.

*weiter auf der nächsten Seite*

Nummer	Satz
P381	Alle Zündquellen entfernen, wenn gefahrlos möglich.
P390	Verschüttete Mengen aufnehmen, um Materialschäden zu vermeiden.
P391	Verschüttete Mengen aufnehmen.
P301 + P310	BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P301 + P312	BEI VERSCHLUCKEN: Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P301 + P330 + P331	BEI VERSCHLUCKEN: Mund ausspülen. KEIN Erbrechen herbeiführen.
P302 + P334	BEI KONTAKT MIT DER HAUT: In kaltes Wasser tauchen/nassen Verband anlegen.
P302 + P350	BEI KONTAKT MIT DER HAUT: Behutsam mit viel Wasser und Seife waschen.
P302 + P352	BEI KONTAKT MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen.
P303 + P361 + P353	BEI KONTAKT MIT DER HAUT (oder dem Haar): Alle verschmutzten, getränkten Kleidungsstücke sofort ausziehen. Haut mit Wasser abwaschen/duschen.
P304 + P340	BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.
P304 + P341	BEI EINATMEN: Bei Atembeschwerden an die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.
P305 + P351 + P338	BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
P306 + P360	BEI KONTAKT MIT DER KLEIDUNG: Kontaminierte Kleidung und Haut sofort mit viel Wasser abwaschen und danach Kleidung ausziehen.
P307 + P311	BEI Exposition: GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P308 + P313	BEI Exposition oder falls betroffen: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P309 + P311	BEI Exposition oder Unwohlsein: GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P332 + P313	Bei Hautreizung: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P333 + P313	Bei Hautreizung oder -ausschlag: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.

*weiter auf der nächsten Seite*

Nummer	Satz
P335 + P334	Lose Partikel von der Haut abbürsten. In kaltes Wasser tauchen/nassen Verband anlegen.
P337 + P313	Bei anhaltender Augenreizung: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P342 + P311	Bei Symptomen der Atemwege: GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P370 + P376	Bei Brand: Undichtigkeit beseitigen, wenn gefahrlos möglich.
P370 + P378	Bei Brand: ... zum Löschen verwenden.
P370 + P380	Bei Brand: Umgebung räumen.
P370 + P380 + P375	Bei Brand: Umgebung räumen. Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen.
P371 + P380 + P375	Bei Großbrand und großen Mengen: Umgebung räumen. Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen.
P401	... aufbewahren.
P402	An einem trockenen Ort aufbewahren.
P403	An einem gut belüfteten Ort aufbewahren.
P404	In einem geschlossenen Behälter aufbewahren.
P405	Unter Verschluss aufbewahren.
P406	In korrosionsbeständigem/... Behälter mit korrosionsbeständiger Auskleidung aufbewahren.
P407	Luftspalt zwischen Stapeln/Paletten lassen.
P410	Vor Sonnenbestrahlung schützen.
P411	Bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.
P412	Nicht Temperaturen von mehr als 50 °C aussetzen.
P413	Schüttgut in Mengen von mehr als kg bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.
P420	Von anderen Materialien entfernt aufbewahren.
P422	Inhalt in/unter ... aufbewahren.
P402 + P404	In einem geschlossenen Behälter an einem trockenen Ort aufbewahren.
P403 + P233	Behälter dicht verschlossen an einem gut belüfteten Ort aufbewahren.
P403 + P235	Kühl an einem gut belüfteten Ort aufbewahren.
P410 + P403	Vor Sonnenbestrahlung geschützt an einem gut belüfteten Ort aufbewahren.
P410 + P412	Vor Sonnenbestrahlung schützen und nicht Temperaturen von mehr als 50 °C aussetzen.
P411 + P235	Kühl und bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.
P501	Inhalt/Behälter ... zuführen.

*weiter auf der nächsten Seite*

Nummer	Satz

## 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.

Option	Modul	Werte	Default	
Paketooptionen:				
<code>bpchem</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	false	Seite 6
<code>circled</code>	<code>option</code>	formal/ <u>all</u> /none	formal	Seite 6
<code>circletype</code>	<code>option</code>	chem/math	chem	Seite 6
<code>cmversion</code>	<code>option</code>	1/2/bundle	bundle	Seite 6
<code>ghssystem</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	true	Seite 6
<code>iupac</code>	<code>option</code>	auto/restricted/strict	auto	Seite 6
<code>language</code>	<code>option</code>	<language>	english	Seite 6
<code>method</code>	<code>option</code>	chemformula/formula	formula	Seite 6
<code>Nu</code>	<code>option</code>	chemmacros/mathspec	chemmacros	Seite 6
<code>strict</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	false	Seite 6
<code>synchronize</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	false	Seite 6
<code>greek</code>	<code>option</code>	math/textgreek/ <u>upgreek</u>	upgreek	Seite 6
<code>xspace</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	true	Seite 6
<code>\ba</code> , <code>\Nu</code> :				
<code>elpair</code>	<code>particle</code>	<u>dots</u> /dash/false	false	Seite 10
<code>\ </code> , <code>\-:</code> :				
<code>hyphen-pre-space</code>	<code>iupac</code>	<dim>	.01em	Seite 12
<code>hyphen-post-space</code>	<code>iupac</code>	<dim>	-.03em	Seite 12
<code>break-space</code>	<code>iupac</code>	<dim>	.01em	Seite 12
<code>\DeclareChemLatin</code> :				
<code>format</code>	<code>latin</code>	<anything>	<code>\itshape</code>	Seite 16
<code>\pch</code> , <code>\mch</code> , <code>\fpch</code> , <code>\fmch</code> :				

Option	Modul	Werte	Default	
append	charges	<u>true/false</u>	false	Seite 18
acid/base:				
p-style	acid-base	slanted/italics/upright	upright	Seite 17
\ox:				
parse	ox	<u>true/false</u>	true	Seite 19
roman	ox	<u>true/false</u>	true	Seite 19
pos	ox	top/super/side	top	Seite 19
explicit-sign	ox	<u>true/false</u>	false	Seite 19
decimal-marker	ox	comma/point	point	Seite 19
\OX, \redox:				
dist	redox	<dim>	.6em	Seite 23
sep	redox	<dim>	.2em	Seite 23
\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:				
exponent		<anything>	\standardstate	Seite 24
delta		<anything>/false		Seite 24
subscript		left/right		Seite 24
unit		<unit>		Seite 24
\DeclareChemState, \RenewChemState:				
exponent		<anything>	\standardstate	Seite 24
delta		<anything>/false		Seite 24
subscript		<anything>		Seite 24
subscript-left		<u>true/false</u>		Seite 25
\State:				
exponent	state	<anything>	\standardstate	Seite 26
delta	state	<anything>/false		Seite 26
subscript-left	state	<u>true/false</u>		Seite 26
\NMR, \begin{spectroscopy} \end{spectroscopy}:				
unit	nmr	<unit>	\mega\hertz	Seite 28
nucleus	nmr	{<num>,<atom symbol>}	{1,H}	Seite 28
format	nmr	<anything>		Seite 28
pos-number	nmr	side/sub	side	Seite 28
coupling-unit	nmr	<unit>	\hertz	Seite 28
parse	nmr	<u>true/false</u>	true	Seite 28
delta	nmr	<anything>		Seite 28
list	nmr	<u>true/false</u>	false	Seite 29
list-setup	nmr		siehe Text	Seite 29
use-equal	nmr	<u>true/false</u>	false	Seite 29
\DeclareChemReaction:				
star		<u>true/false</u>	false	Seite 35
arg		<u>true/false</u>	false	Seite 35
list-name	reaction	<anything>	List of reactions	Seite 36
list-entry	reaction	<anything>	Reaction	Seite 36
\mhName:				
align	mhName	<alignment>	\centering	Seite 32
format	mhName	<commands>		Seite 32
fontsize	mhName	<fontsize>	\tiny	Seite 32
width	mhName	<dim>		Seite 32
phases:				
pos	phases	side/sub	side	Seite 38
space	phases	<dim>	.1333em	Seite 38



Option	Modul	Werte	Default	
<code>\newman:</code>				
<code>angle</code>	<code>newman</code>	<code>&lt;angle&gt;</code>	0	Seite 39
<code>scale</code>	<code>newman</code>	<code>&lt;factor&gt;</code>	1	Seite 39
<code>ring</code>	<code>newman</code>	<code>&lt;tikz&gt;</code>		Seite 39
<code>atoms</code>	<code>newman</code>	<code>&lt;tikz&gt;</code>		Seite 39
<code>back-atoms</code>	<code>newman</code>	<code>&lt;tikz&gt;</code>		Seite 39
<code>\orbital &lt;type&gt; = s/p/sp/sp2/sp3:</code>				
<code>phase</code>	<code>orbital/&lt;type&gt;</code>	<code>+/-</code>	<code>+</code>	Seite 40
<code>scale</code>	<code>orbital/&lt;type&gt;</code>	<code>&lt;factor&gt;</code>	1	Seite 40
<code>color</code>	<code>orbital/&lt;type&gt;</code>	<code>&lt;color&gt;</code>	<code>black</code>	Seite 40
<code>angle</code>	<code>orbital/&lt;type&gt;</code>	<code>&lt;angle&gt;</code>	90	Seite 40
<code>half</code>	<code>orbital/p</code>	<code>true/false</code>	<code>false</code>	Seite 40
<code>overlay</code>	<code>orbital</code>	<code>true/false</code>	<code>false</code>	Seite 41
<code>opacity</code>	<code>ornital</code>	<code>&lt;num&gt;</code>	1	Seite 41

## 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 56.
- ▶ `\RenewChemArrow` → Bestehende Pfeile verändern.
- ▶ `\DeclareChemIUPAC` → Neuen IUPAC-Befehl definieren, siehe Seite 15.
- ▶ `\RenewChemIUPAC` → IUPAC-Befehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemLatin` → Neue lateinische Ausdrücke definieren, siehe Seite 16.
- ▶ `\RenewChemLatin` → Lateinische Ausdrücke umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemNMR` → Neuen NMR-Befehl definieren, siehe Seite 27.
- ▶ `\RenewChemNMR` → NMR-Befehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemParticle` → Neues Teilchen definieren, siehe Seite 11.
- ▶ `\RenewChemParticle` → Teilchen umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemPhase` → Neuen Phasenbefehl definieren, siehe Seite 38.
- ▶ `\RenewChemPhase` → Phasenbefehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemReaction` → Neue Reaktionsumgebung definieren, siehe Seite 35.
- ▶ `\DeclareChemState` → Neue Zustandsgröße definieren, siehe Seite 25.
- ▶ `\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-Mail<sup>43</sup> 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
- Christoph Schäfer

## 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.
- [Eur12] United Nations Economic Commission for Europe. *GHS Implementation*. 20. März 2012. URL: [http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation\\_e.html](http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation_e.html) (besucht am 20. 03. 2012).
- [The08] 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.

---

<sup>43</sup> [contact@mychemistry.eu](mailto:contact@mychemistry.eu)

## Index

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

### Symbols

<b>\#</b> .....	28
<b>\-</b> .....	11 f., 79
<b>\[</b> .....	54
<b>\]</b> .....	54
<b>\^</b> .....	11 f.

### A

<b>\a</b> .....	13
<b>\abinitio</b> .....	15
Absolute Konfiguration .....	14
<b>acid-base</b>	
<b>p-style</b> .....	17
<b>\AddRxnDesc</b> .....	36
<b>adduct-space</b> .....	49 f.
<b>align</b> .....	32
<b>angle</b> .....	39 f.
<b>ANHANG</b> .....	79
<b>\anti</b> .....	14
<b>append</b> .....	18
<b>\aq</b> .....	37
<b>arg</b> .....	35
<b>arrow-offset</b> .....	55
<b>arrow-ratio</b> .....	55
<b>arrow-yshift</b> .....	55
<b>\atm</b> .....	16
<b>\atmosphere</b> .....	16
<b>atoms</b> .....	39

### B

<b>\b</b> .....	13
<b>\ba</b> .....	9 f., 79
<b>babel</b> .....	68
<b>back-atoms</b> .....	39
<b>Befehle für mhchem</b> .....	32 f.
<b>BEVOR ES LOS GEHT</b> .....	3–8
<b>bm</b> .....	3
<b>bond-length</b> .....	49
<b>bond-offset</b> .....	49

<b>booktabs</b> .....	69
<b>bpchem</b> .....	3, 6
<b>bpchem</b> .....	3, 6, 11
<b>break-space</b> .....	12

### C

<b>C-temperature</b> .....	65
<b>Cahn-Ingold-Prelog</b> .....	14
<b>\cal</b> .....	16
<b>\calory</b> .....	16
<b>\centering</b> .....	80
<b>\ch</b> .....	43 f., 46, 48, 51–54, 57 f., 60
<b>charge-hshift</b> .....	48 f.
<b>charge-style</b> .....	49
<b>charges</b>	
<b>append</b> .....	18
<b>\Chemalpha</b> .....	6, 9 f.
<b>\Chembeta</b> .....	9 f.
<b>\ChemDelta</b> .....	10
<b>\Chemdelta</b> .....	9
<b>\Chemepsilon</b> .....	9
<b>\Chemeta</b> .....	10
<b>chemfig</b> .....	10, 20
<b>CHEMFORMULA</b> .....	42–62
<b>\Chemgamma</b> .....	9
<b>CHEMMACROS</b> .....	9–42
<b>\Chemmu</b> .....	10
<b>\Chemnu</b> .....	10
<b>\Chemomega</b> .....	10
<b>\Chempi</b> .....	10
<b>\Chemrho</b> .....	10
<b>\chemsetup</b> .....	7, 29, 44, 62, 79
<b>\Chemsigma</b> .....	10
<b>chemstyle</b> .....	9, 15 f.
<b>\cip</b> .....	14
<b>circled</b> .....	6, 11, 34
<b>circletype</b> .....	6
<b>\cis</b> .....	14
<b>cis/trans</b> .....	14
<b>\cmc</b> .....	16
<b>cmversion</b> .....	6
<b>color</b> .....	40
<b>compound-sep</b> .....	55

cool	12, 14
coupling-unit	28
<b>D</b>	
\D	12, 14
\d	13
\data	28 f.
\data*	28
decimal-marker	19, 45
\DeclareChemArrow	56, 81
\DeclareChemIUPAC	15, 81
\DeclareChemLatin	16, 79, 81
\DeclareChemNMR	27, 29, 81
\DeclareChemParticle	11, 81
\DeclareChemPhase	38, 81
\DeclareChemReaction	35, 80 f.
\DeclareChemState	25 f., 80 f.
\delm	20
\delp	20
delta	24 ff., 28
dist	23
dots	65
<b>E</b>	
\E	12, 14
effect	64
<b>Einheiten</b>	16
\El	9
\el	9
elpair	10
\Enthalpy	24, 80
\Entropy	24, 80
environ	3
experimental (Umg.)	8, 28
explicit-sign	19
exponent	24 ff.
exposure	64
<b>F</b>	
F-temperature	65
\fdelm	20
\fdelp	20
fill-in	64
Fischer	14
\fmch	18, 79
\fminus	9
font-family	59

font-series	59
font-shape	59
font-spec	59
fontsize	32
fontspec	59
format	16, 28, 32, 58
<b>Format und Schrift</b>	58 ff.
\fpch	18, 79
\fplus	6, 9
frac-style	45
\fscrm	20
\fscrp	20
\fsscrm	21
\fsscrp	21
<b>G</b>	
\g	13
\gas	37
<b>Gefahren- und Sicherheitssätze</b>	63 ff.
german	8, 36, 68
<b>Geschützter Input</b>	52 f.
math	52
text	52
ghs	6
\ghs	63
\ghs*	63
\ghslistall	69
\ghspic	66
<b>GHSYSTEM</b>	62–79
Aufruf	63
kombinierte Sätze	65
Platzhalter	63
Sätze mit Lücken	65
ghsystem	6
\Gibbs	24, 80
graphicx	3
greek	6, 8, 10
<b>H</b>	
\H	13
half	40
\hertz	80
hide	63
\Hpl	9
\HtO	9
\Hyd	9

hyphen-post-space.....12  
hyphen-pre-space.....12

## I

ifpdf ..... 3  
includegraphics.....66  
\insitu ..... 15  
**Installation** ..... 5  
\intertext ..... 34  
\invacu ..... 16  
**Ionenladungen** ..... 18  
iupac.....6, 12 f., 15

iupac  
    break-space ..... 12  
    hyphen-post-space ..... 12  
    hyphen-pre-space ..... 12  
\iupac ..... 11 f., 14

**IUPAC-Namen** ..... 11–15  
    Cahn-Ingold-Prelog ..... 14  
    cis/trans ..... 14  
    eigene ..... 15  
    Fischer ..... 14  
    griechische Buchstaben ..... 13  
    Heteroatome ..... 13  
    ortho/meta/para ..... 14  
    tert ..... 14  
    vordefiniert ..... 13  
    zusammen/entgegen ..... 14

**IUPAC Namen**  
    syn/anti ..... 14

## J

\J ..... 28

## K

\Ka ..... 17  
\Kb ..... 17  
kg-mass ..... 65  
\Kw ..... 17

## L

\L ..... 12, 14  
l3kernel ..... 3  
l3packages ..... 3  
label-offset ..... 55  
label-style ..... 55  
**Laden des Bundles** ..... 5

language ..... 6, 8, 17, 37, 68

**Lateinische Ausdrücke** ..... 15 f.

## latin

    format ..... 16  
\latin ..... 15  
lbs-mass ..... 65  
list ..... 29  
list-entry ..... 36  
list-name ..... 36  
list-setup ..... 29  
**Liste aller Sätze** ..... 69–79  
\listofreactions ..... 36  
longtable ..... 3, 69  
\lqd ..... 8, 37

## M

math-space ..... 52  
**Mathematik-Umgebungen** ..... 60  
mathspec ..... 6, 9  
mathtools ..... 3, 34  
\mch ..... 18, 34, 48, 79  
\mech ..... 21  
\mega ..... 80  
\meta ..... 12, 14  
method ..... 3, 6, 11, 32, 34  
mhchem ..... 3 f., 6, 11, 28, 32, 35, 43, 53

## mhName

    align ..... 32  
    fontsize ..... 32  
    format ..... 32  
    width ..... 32  
\mhName ..... 32, 80  
\Molar ..... 16  
\moLar ..... 16  
\molar ..... 16  
\MolMass ..... 16

## N

\N ..... 13  
name-format ..... 57  
name-width ..... 57  
**Neues** ..... 8

## newman

    angle ..... 39  
    atoms ..... 39  
    back-atoms ..... 39

ring	39	angle	40
scale	39	color	40
\newman	38, 81	half	40
Newman-Projektionen	38 ff.	opacity	41
ngerman	8	overlay	41
nicefrac	3, 45	phase	40
\NMR	6, 26 f., 29, 80	scale	40
nmr		\orbital	40, 81
coupling-unit	28	Orbitale	40 ff.
delta	28	organs	64
format	28	\ortho	14
list	29	ortho/meta/para	14
list-setup	29	overlay	41
nucleus	28	\OX	22, 80
parse	28	ox	
pos-number	28	decimal-marker	19
unit	28	explicit-sign	19
use-equal	29	parse	19
nmr (Umg.)	29	pos	19
\NMR*	27	roman	19
\normal	16	\ox	4, 19 f., 80
\ntr	9	\ox*	4, 19
Nu	6, 9	Oxidationszahlen	19 f.
\Nu	6, 9 f., 79		
\Nuc	9	<b>P</b>	
nucleus	28	\P	13
		\p	17
<b>O</b>		p-style	17
\O	13	Paketoptionen	5 f.
opacity	41	\para	14
option		parse	19, 28
bpchem	6	Partialladungen	20 f.
circled	6	particle	
circletype	6	elpair	10
cmversion	6	\pch	18, 79
german	36, 68	Pfeile	53–57
ghsystem	6	Anpassung	55
greek	6, 10	Beschriftung	54
iupac	6, 12, 15	Typen	53
language	6	bearbeiten	56
method	6, 32	\pH	17
Nu	6, 9	phase	40
strict	6	\phase	38
synchronize	6	Phasen	37 f.
xspace	6	eigene	38
orbital		Grundlagen	37

<b>phases</b>		
pos	38	
space	38	
pic-type	68	
<b>Piktogramme</b>	66 ff.	
\pKa	8, 17	
\pKb	17	
plus-space	51	
\pOH	17	
polyglossia	68	
pos	19, 38	
\pos	28	
pos-number	28	
\prt	9	
<b>R</b>		
\R	12, 14	
\Rad	10	
\Rconf	14	
<b>reaction</b>		
list-entry	36	
list-name	36	
reaction (Umg.)	8, 33	
reaction* (Umg.)	33	
\reactionlistname	36	
reactions (Umg.)	33	
reactions* (Umg.)	33	
<b>Reaktionsmechanismen</b>	21	
<b>Reaktionsumgebungen</b>	33–37	
<b>redox</b>		
dist	23	
sep	23	
\redox	22, 80	
<b>Redoxreaktionen</b>	22 ff.	
\RenewChemArrow	56, 81	
\RenewChemIUPAC	15, 81	
\RenewChemLatin	16, 81	
\RenewChemNMR	27, 81	
\RenewChemParticle	11, 38, 81	
\RenewChemPhase	38, 81	
\RenewChemState	25, 80 f.	
\renewtagform	34	
ring	39	
roman	19	
<b>S</b>		
\S	12, 14	
<b>Säure/Base</b>	17	
scale	39 f., 66	
\Sconf	14	
\scrm	20	
\scrp	20	
sep	23	
<b>Setup</b>	7	
\Sf	13	
\ShowChemArrow	56	
\sin	8	
siunitx	3, 16, 24–28	
\sld	8, 37	
space	38, 63	
spectroscopy (Umg.)	80	
<b>Spektroskopie</b>	26–32	
<b>Spezielle Input-Typen</b>	50 ff.	
Optionen Input	51	
Single-Token Input	51	
<b>Spracheinstellung</b>	7 f.	
\standardstate	9, 80	
star	35	
\State	26, 80	
<b>state</b>		
delta	26	
exponent	26	
subscript-left	26	
<b>Stereodeskriptoren und Nomenklatur</b>	13 ff.	
<b>Stöchiometrische Faktoren</b>	44 ff.	
nicefrac	45	
space	45	
xfrac	45	
stoich-space	45	
strict	6, 11, 15, 38	
subscript	24 f.	
subscript-left	25 f.	
subscript-style	49	
subscript-vshift	48, 50	
substance	64	
<b>Summenformeln</b>	46–50	
Addukte	46	
Anpassung	48	
Befehle	47	
Bindungen	48	
Länge	50	

Hochstellungen .....	47	Umgebungen	
Ladungsbefehle .....	48	experimental .....	8, 28
Verhalten .....	48	nmr .....	29
Ladungen .....	47	reaction .....	8, 33
Verschiebung .....	49	reaction* .....	33
Tiefstellungen .....	46	reactions .....	33
Verschiebung .....	50	reactions* .....	33
\syn .....	14	spectroscopy .....	80
synchronize .....	6	unit .....	24, 28
<b>T</b>		upgreek .....	8
table-caption .....	69	upgreek .....	10, 13
table-caption-short .....	69	use-equal .....	28 f.
table-foot-rule .....	69	<b>V</b>	
table-head-number .....	69	\val .....	28
table-head-rule .....	69	<b>W</b>	
table-head-text .....	69	\w .....	13
table-label .....	69	\water .....	9
table-last-foot-rule .....	69	width .....	32
table-next-page .....	69	<b>X</b>	
table-row-sep .....	69	xfrac .....	20, 45
table-rules .....	69	xspace .....	3, 6
table-top-head-rule .....	69	xspace .....	3
tabu .....	3	<b>Z</b>	
<b>Teilchen, Ionen und Symbole</b> .....	9 ff.	\Z .....	14
eigene .....	11	zusammen/entgegen .....	14
vordefiniert .....	9		
\ter .....	8		
tert .....	14		
\tert .....	14		
text .....	65		
textgreek .....	10, 13		
<b>Text unter Formeln</b> .....	57 f.		
Anpassung .....	57		
syntax .....	57		
<b>Thermodynamik</b> .....	24 ff.		
TikZ .....	3, 14, 22, 38 f., 41, 53, 56		
tikz .....	3		
\tiny .....	80		
\torr .....	16		
\trans .....	12, 14		
\transitionstatesymbol .....	9		
<b>U</b>			
<b>Übersicht über die Optionen (chemmacros)</b>			
79 ff.			