

| | | | |
|--|-----------|---|-----------|
| 15. Befehle für mhchem | 24 | 27.2. Beschriftung | 47 |
| | | 27.3. Anpassung | 48 |
| | | 27.4. Pfeiltypen bearbeiten | 49 |
| 16. Reaktionsumgebungen | 25 | 28. Text unter Formeln | 50 |
| 16.1. Durch CHEMMACROS definiert . . | 25 | 28.1. Syntax | 50 |
| 16.2. Eigene Reaktionen | 27 | 28.2. Anpassung | 51 |
| 16.3. Liste der Reaktionen | 28 | 29. Format und Schrift | 51 |
| 17. Phasen | 29 | 30. Verwendung in Mathematik- | 53 |
| 17.1. Grundlagen | 29 | Umgebungen | |
| 17.2. Eigene Phasen definieren | 30 | 31. Weitere Beispiele | 54 |
| 18. Newman-Projektionen | 30 | IV. ghsystem | 55 |
| 19. s, p und Hybrid-Orbitale | 32 | 32. Setup | 55 |
| 20. Übersicht über die Optionen | 34 | 33. Die Gefahren- (H) und Sicherheits- | 56 |
| | | sätze (P) aufrufen | |
| III. chemformula | 36 | 33.1. Einfacher Aufruf | 56 |
| 21. Setup | 36 | 33.2. Sätze mit Platzhaltern | 57 |
| 22. Das Grundprinzip | 36 | 33.3. Sätze mit Lücken | 58 |
| 23. Stöchiometrische Faktoren | 38 | 33.4. Kombinierte Sätze | 59 |
| 24. Summenformeln | 39 | 34. Piktogramme | 59 |
| 24.1. Addukte | 39 | 34.1. Die Bilder | 59 |
| 24.2. Tiefstellungen | 40 | 34.2. Der Bildtyp hängt von der Engi- | 61 |
| 24.3. Befehle | 40 | ne ab | |
| 24.4. Ladungen und andere Hochstel- | 41 | 35. Verfügbare Sprachen | 62 |
| lungen | | 36. Liste aller Sätze | 62 |
| 24.5. Bindungen | 42 | | |
| 24.6. Anpassung | 42 | V. Anhang | 72 |
| 25. Spezielle Input-Typen | 44 | Vorschläge und Bugreports | 72 |
| 26. Geschützter Input | 45 | Quellen | 72 |
| 26.1. Text | 45 | | |
| 26.2. Mathematik | 45 | | |
| 27. Pfeile | 46 | | |
| 27.1. Pfeiltypen | 46 | | |

Teil I.

Bevor es los geht

1. Lizenz, Voraussetzungen und README

Das `CHEMMACROS`-Bundle steht unter der \LaTeX Project Public License (LPPL) Version 1.3 oder später. (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>)

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

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

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

Vielleicht erinnern Sie Sich, dass `CHEMMACROS`' Optionen alle verschiedenen Modulen angehören, siehe Abschnitt 5 für weitere Informationen. Sie werden in den linken Rand geschrieben, wenn die Option das erste Mal erwähnt wird. Abschnitt 20 listet alle Optionen von `CHEMMACROS` und ihre Module auf. In diesem Dokument werden Optionen `grün` und Module `rot` dargestellt.

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

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

2. Motivation und Hintergrund

`CHEMMACROS` entstand vor einigen Jahren als wachsende Liste von Makros, die ich häufig verwendete. Ich kann mich nicht mehr genau erinnern, wann und warum ich entschied, sie als Paket zu veröffentlichen. Nun – hier ist es und ich hoffe, Sie werden das eine oder andere ebenfalls nützlich finden.

Ich nehme an, dass fast jeder Chemiker, der \LaTeX für seine Dokumente verwendet, das großartige Paket `mhchem` kennt. Es gab immer ein paar Schwierigkeiten, `mhchem` und `CHEMMACROS` 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 zu `CHEMFORMULA`.

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

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 wurde¹⁶, 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 Regulation 1272/2008 entnommen [The08].

3. Installation und Laden des Bundles

Das Bundle enthält drei Style-Dateien¹⁷, 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`, `formula` and `ghs` are loaded
```

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

```
1 \usepackage[ghs=false]{chemmacros} % `chemmacros` and `formula` 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`, `formula` and `ghs` are loaded
2 or
3 \usepackage[ghs=false]{chemformula} % `chemmacros` and `formula` are loaded
```

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

¹⁶ http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation_e.html ¹⁷ Die mit der Endung sty.

4. Paketoptionen

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

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

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

Sowohl CHEMFORMULA als auch GHSYSTEM haben keine eigenen Paketoptionen. Wenn Sie sie explizit laden, können ihnen CHEMMACROS' Optionen gegeben werden. Sie werden dann an CHEMMACROS weitergereicht.

- 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 Ladungen¹⁸: 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** `detect-bold` = true/false *Diese Option ist veraltet und wird nicht mehr unterstützt!*
- option** `EZ` = chemmacros/cool *Diese Option ist veraltet und wird nicht mehr unterstützt!*
- option** `german` = true/false Diese Option ändert die Befehle `\pKa`, `\sld` und `\lqd`. Default = false.
option Diese Option hat den Alias `ngerman`.
- option** `ghs` = true/false Das Paket GHSYSTEM abschalten. Die Einstellung `ghs = false` wird das Laden von GHSYSTEM unterbinden. Default = true
- option** `iupac` = auto/restricted/strict Einstellen, wie die Nomenklatur-Befehle definiert werden. Siehe Seite 9. Default = `auto`
- option** `method` = chemformula/mhchem Sie können wählen, ob CHEMMACROS mhchem oder CHEMFORMULA für die Reaktionsumgebungen (siehe Abschnitt 16) und die Teilchen (siehe Abschnitt 6) verwendet. Default = `chemformula`. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.
- option** `Nu` = chemmacros/mathspec Das Paket mathspec¹⁹ definiert ebenfalls ein Makro `\Nu`. Diese Option entscheidet, welche Definition gilt, siehe Seite 7. 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** `version = 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** `xspace = true/false` Mit dieser Option werden die meisten Makros mit einem `\xspace` definiert. Default = `true`

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 Paketoptionen 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

```

$$\begin{array}{l}
 - + - + e^- p^+ \\
 - + \ominus \oplus e^- p^+ \\
 - + \ominus \oplus e^- p^+ \\
 \ominus \oplus \ominus \oplus e^\ominus p^\oplus \\
 \ominus \oplus \ominus \oplus e^\ominus p^\oplus
 \end{array}$$

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.

¹⁸ Vielen Dank an Christoph Schäfer, der mich darauf aufmerksam machte, dass `v1.1` die Ladungen zu nachlässig behandelte! ¹⁹ CTAN: `mathspec`

Teil II.

chemmacros

6. Teilchen, Ionen und Symbole

6.1. Vordefiniert

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

`\Hp1` H^+ (Proton)

`\Hyd` OH^- (Hydroxid)

`\Ht0` H_3O^+ (Oxoniumion) (H three O)

`\water` H_2O

`\el` e^- (Elektron)

`\prt` p^+ (Proton)

`\ntr` n^0 (Neutron)

`\Nu` Nu^- (Nukleophil). Das Paket `mathspec` definiert ebenfalls ein Makro `\Nu`. Wenn Sie die Paketoption `Nu = mathspec` wählen, definiert **CHEMMACROS** stattdessen `\Nuc`.

`\E1` E^+ (Elektrophil)

`\ba` ba^- (Base)

`\fplus` \oplus

`\fminus` \ominus

`\transitionstatesymbol` \ddagger

`\standardstate` \ominus . Dieses Symbol wird nur dann von **CHEMMACROS** bereitgestellt, wenn das Paket `chemstyle`²⁰ nicht geladen wurde. Die Idee ist von dort ausgeliehen²¹.

Ein weiterer Befehl erlaubt das Setzen von Radikalen mit Ladungen und Tiefstellungen.

`\Rad[<sign>]{<subscript>}`

```
1 \Rad[+]{tert} \Rad[-]{sek} \Rad{prim} R_{tert}^+ R_{sek}^- R_{prim}
```

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`²² geladen wurde, da sie dessen Befehl `\Lewis` verwendet.

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

6.2. 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 10) explizit einsetzen.

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

$\beta^+ \gamma \beta^-$

`\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.

7. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke

7.1. IUPAC-Namen

Ähnlich wie das Paket `bpchem` stellt `CHEMMACROS` einen Befehl²³ 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:

²⁰ CTAN: `chemstyle` ²¹ Vielen Dank an den Paketautoren `Joseph Wright`. ²² CTAN: `chemfig` ²³ Die Idee und die Umsetzung stammt aus dem Paket `bpchem` von Bjørn Pedersen.

`\iupac{<IUPAC name>}` Innerhalb dieses Befehls werden `\|` und `\-` verwendet, um Umbruchstellen oder einen umbrechenden Bindestrich anzugeben. `\^` kann als Abkürzung für `\textsuperscript`²⁴ eingesetzt werden.

```

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

Tetracyclo[2.2.2.11,4]-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 `\^`.

Der Befehl `\iupac` dient noch einem anderen Zweck. Unabhängig von der Paketoption `iupac` sind alle Befehle, die in diesem Abschnitt vorgestellt werden, *innerhalb* von `\iupac` immer definiert. Eine ganze Reihe der Nomenklatur-Befehle haben sehr allgemeine Namen: `\meta`, `\D`, `\E`, `\L`, `\R`, `\S`, `\trans` und so weiter. Das bedeutet, dass sie entweder schon definiert sind (`\L L`) oder leicht von anderen Paketen oder Klassen definiert werden (das Paket `cool`²⁵ definiert zum Beispiel sowohl `\D` als auch `\E`). Um Ihnen Kontrolle darüber zu geben, welche Befehle wie definiert sind, gibt es die Paketoption `iupac`. Sie hat drei Modi:

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

Tabelle 1 demonstriert die verschiedenen Modi.

Tabelle 1: Demonstration der verschiedenen `iupac`-Modi.

| | auto | restricted | strict |
|-------------------------|------|------------|--------|
| <code>\L</code> | Ł | Ł | L |
| <code>\iupac{\L}</code> | L | L | L |
| <code>\D</code> | D | -- | D |
| <code>\iupac{\D}</code> | D | D | D |

²⁴ Eigentlich verwendet `\^` einen `CHEMFORMULA`-Befehl. ²⁵ CTAN: cool

7.1.1. Vordefinierte Befehle

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 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\Butene} = \\
6 \iupac{\Z\2\Butene}, \\
7 \iupac{\cip{2E,4Z}\Hexa\|diene} \\
8 \iupac{\meta\Xylol} = \\
9 \iupac{1,3-Di\|methyl\|benzene}
```

D-Weinsäure =
(2S,3S)-Weinsäure
D-(–)-Threose =
(2S,3R)-(–)-2,3,4-Trihydroxybutanal
cis-2-Butene =
(Z)-2-Butene,
(2E,4Z)-Hexadiene
m-Xylol =
1,3-Dimethylbenzene

7.1.2. 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 % uses the 'upgreek' package
2 \DeclareChemIUPAC\hpto{\$\upeta\$}
3 Ferrocen = \iupac{Bis(\hpto^5-cyclo\|penta\|dienyl)eisen}
```

Ferrocen = Bis(η^5 -cyclopentadienyl)eisen

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

```

1 \iupac{\meta\-Xylol} \ \           m-Xylol
2 \RenewChemIUPAC\meta{\textit{m}} m-Xylol
3 \iupac{\meta\-Xylol}

```

7.2. Lateinische Ausdrücke

Zuletzt gibt es diese beiden Makros für lateinische Ausdrücke:

`\insitu` *in situ*

`\abinitio` *ab initio*

Wenn Sie das Paket `chemstyle` ebenfalls geladen haben²⁶, werden sie mit `chemstyle's` Befehl `\latin` definiert. Das bedeutet, dass ihr Erscheinungsbild dann von `chemstyle's` Option `abbremp` abhängt:

```

1 \insitu, \abinitio\ \           in situ, ab initio
2 \cstsetup{abbremp=false}
3 \insitu, \abinitio           in situ, ab initio

```

Wenn `chemstyle` nicht geladen wurde werden sie immer *kursiv* gesetzt.

8. Einheiten für die Verwendung mit `siunitx`

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

`\atmosphere` atm

`\atm` atm

`\calory` cal

`\cal` cal

`\cmc` cm³ Die Einheiten `\cmc`, `\molar` und `\Molar` werden durch das Paket `chemstyle` ebenfalls definiert. `CHEMMACROS` definiert sie nur, wenn `chemstyle` nicht geladen wurde.

`\molar` mol dm⁻³

`\moLar` mol L⁻¹

`\Molar` M

²⁶ `chemstyle` definiert andere ähnliche Befehle wie *et al.*, *in vacuo*.

`\MolMass` g mol⁻¹

`\normal` N

`\torr` torr

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

9. Säure/Base

Einfache Darstellung von pH, p*K*_S ... (der Befehl `\pKa` hängt von der Paketoption `german` ab, siehe Abschnitt 4.)

`\pH` pH

`\pOH` pOH

`\Ka` *K*_S

`\Kb` *K*_B

`\Kw` *K*_W

`\pKa[<num>]` `\pKa`: p*K*_S, `\pKa[1]`: p*K*_{S1}

`\pKb[<num>]` `\pKb`: p*K*_B, `\pKb[1]`: p*K*_{B1}

`\p{<anything>}` z. B.: `\p{\Kw}` p*K*_W

```
1 \Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1] \\      KS KB pKS pKS1 pKB pKB1
2 \chemsetup[option]{german=false}          KA KB pKA pKA1 pKB pKB1
3 \Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]
```

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]

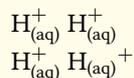
Es gibt eine Option, die den Stil, in dem das p dargestellt wird, ändert:

`acid-base` `p-style` = italics/slanted/upright Default = upright


```

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

```

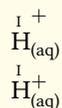


In den meisten Fällen wird das Verhalten unerwünscht sein, es kann jedoch Gelegenheiten geben, wo es nützlich sein kann:

```

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

```



10.2. Oxidationszahlen

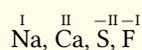
Eingabe von Oxidationszahlen::

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

```

1 \ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ox{-1,F}

```



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 $X^{1.2}$. Default = comma

```

1 \ox[roman=false]{2,Ca} \ox{2,Ca} \\ Ca2 CaII
2 \ox[pos=super]{3,Fe}-Oxid \\ FeIII-Oxid
3 \ox[pos=side]{3,Fe}-Oxid \\ Fe(III)-Oxid
4 \ox[parse=false]{?,Mn} Mn?

```

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

```

1 \ox{3,Fe} \ox*{3,Fe} FeIII FeIII

```

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

```

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

```

^{+I}Na, ^{+II}Ca, ^{-II±0}S, F₂

```

1 Vergleichen Sie \ox{-1,\ch{O2^2-}} mit \ch{"\ox{-1,0}" 2^2-}

```

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

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

```

1 \ox{.5,\ch{Br2}} \ch{"\ox{1/3,I}" 3+} Br20.5 1/3 I3+

```

Der Bruch verwendet den `\sfrac`-Befehl des `xfrac`²⁷-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.

²⁷ CTAN: `xfrac`

10.3. 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}}
```



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

`\scrip` +(scriptstyle + plus)

`\scrm` -(scriptstyle + minus)

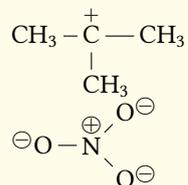
`\fscrip` \oplus

`\fscrm` \ominus

`\fsscrip` \oplus (verwendet `\scriptscriptstyle`)

`\fsscrm` \ominus

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



11. 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 $E1_{cb}$

12. Redoxreaktionen

`CHEMMACROS` stellt zwei Befehle zur Verfügung, mit denen die Übertragung von Elektronen in Redoxreaktionen angezeigt werden kann²⁸. Beide Befehle verwenden `TikZ`.

`\OX{<name>, <atom>}`

`\redox(<name1>, <name2>)[<tikz>][<num>]{<text>}`

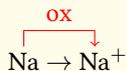
`\OX` setzt <atom> in einen Knoten (eine „Node“) mit dem Namen <name>. Wenn Sie zwei `\OX` verwendet haben, dann können sie mit `\redox` verbunden werden. Die Namen der zu verbindenden Knoten werden in runde Klammern geschrieben. Da `\redox` ein Tikzpicture mit den Optionen `remember picture, overlay`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

²⁸ Dank an Peter Cao, der dieses Feature vorgeschlagen hat.

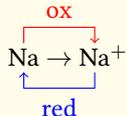
Diese Linie kann mit `TikZ`-Keys in `[<tikz>]` angepasst werden:

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



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}
```

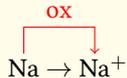


Die Voreinstellung der vertikalen Linien kann mit

`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}
```

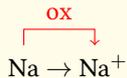


Zusätzlich erlaubt die Option

`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}
```

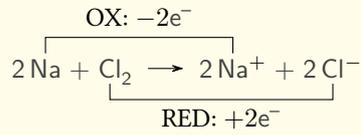


Beispiele:

```

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: $+ 2\el$}

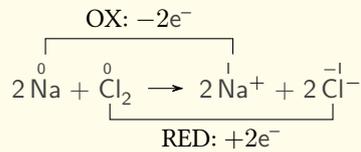
```



```

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: $+ 2\el$}

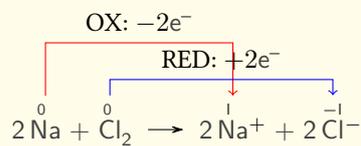
```



```

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: $- 2\el$}
4 \redox(r1,r2)[draw=blue,->]{\small RED: $+ 2\el$}

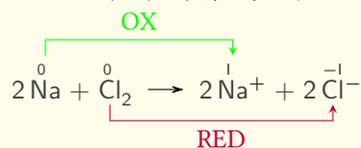
```



```

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}

```



13. (Standard) Zustand, Thermodynamik

13.1. Thermodynamische Größen

Die folgenden Befehle verwenden siunitx:

```
\Enthalpy[<keyval>](<subscript>){<value>}
```

```
\Entropy[<keyval>](<subscript>){<value>}
```

```
\Gibbs[<keyval>](<subscript>){<value>}
```

Ihre Verwendung ist ziemlich selbsterklärend:

```
1 \Enthalpy{123} \ \ \ \ \Delta H^\ominus = 123 \text{kJ mol}^{-1}
2 \Entropy{123} \ \ \ \ \ \ S^\ominus = 123 \text{JK}^{-1} \text{mol}^{-1}
3 \Gibbs{123} \ \ \ \ \ \ \ \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 \Enthalpy[unit=\kilo\joule]{-285} \ \ \ \ \Delta H^\ominus = -285 \text{kJ}
2 \Gibbs[delta=false]{0} \ \ \ \ \ \ \ G^\ominus = 0 \text{kJ mol}^{-1}
3 \Entropy[delta=\Delta,exponent=]{56.7} \ \ \ \Delta S = 56.7 \text{JK}^{-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}
```

$$\Delta H^\ominus = -1234.56 \times 10^3 \text{kJ mol}^{-1}$$
$$\Delta H^\ominus = -1\,234,56 \cdot 10^3 \text{kJ/mol}$$

13.1.1. Neue Größen definieren

Mit dem Befehl

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

können neue Größen definiert werden.

```
1 \DeclareChemState{Helmholtz}{A}{\kilojoule\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>`

13.1.2. Größen umdefinieren

Mit

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

kann man bestehende Größen umdefinieren:

```
1 \RenewChemState{Enthalpy}{h}{\joule} \Delta_f h^\ominus = 12.5J
2 \Enthalpy(f){12.5}
```

Der Befehl ist analog zu `\setnewstate`, 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}
```

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

13.2. Zustandsgrößen

Die Befehle, die in Abschnitt 13.1 vorgestellt wurden, verwenden intern den Befehl²⁹

```
\State[<keyval>]{<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}
```

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

Wieder hat er (fast) die gleichen Optionen:

state exponent = <anything>

state subscript-left = true/false

state delta = <anything>/false

14. Spektroskopie

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:

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): $\delta = 1.59\dots$

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

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

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

Alle Argumente sind optional! Ohne Argumente³⁰ erhalten wir:

```
1 \NMR \ \ 1H-NMR:  $\delta$ 
2 \NMR* 1H-NMR
```

Das erste Argument spezifiziert die Art der NMR:

```
1 \NMR{13, C} 13C-NMR:  $\delta$ 
```

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

²⁹ Beachten Sie, dass {<subscript>} ein *optionales* Argument ist. ³⁰ Alle Argumente können beliebig kombiniert werden. Der Befehl kann auch im Mathematik-Modus eingesetzt werden.

```
1 \NMR(400) 1H-NMR (400 MHz):  $\delta$ 
```

Auch mit Einheit:

```
1 \NMR(4e8,\hertz) 1H-NMR (4 × 108 Hz):  $\delta$ 
```

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

```
1 \sisetup{exponent-product=\cdot}\NMR(4e8,\hertz)
1H-NMR (4 · 108 Hz):  $\delta$ 
```

Mit dem dritten Befehl schließlich kann das Lösungsmittel angegeben werden:

```
1 \NMR[CDCl3] 1H-NMR (CDCl3):  $\delta$ 
```

Die Optionen

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

`nmr` `nucleus` = {<num>, <elem>} Default = {1, H}

legen die Voreinstellungen fest.

Beispiele:

```
1 {\chemsetup[nmr]{nucleus={13,C}}\NMR(100) \NMR*(100) } \\  
2 \NMR*{19,F}[CFCl3] \NMR*{19,F}(285)[CFCl3] \\  
3 \NMR(400)[CDCl3] = \num{1.59} (q, 1\ch{H}, \textit{J} = \SI{11.6}{\hertz}, H-4)  
  
13C-NMR (100 MHz):  $\delta$  13C-NMR (100 MHz)  
19F-NMR (CFCl3) 19F-NMR (285 MHz, CFCl3)  
1H-NMR (400 MHz, CDCl3):  $\delta$  = 1.59 (q, 1H,  $J$  = 11.6 Hz, H-4)
```

15. 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 mhchem³¹ bereit. Er erlaubt es, Text unter eine Formel zu schreiben.

³¹ CHEMFORMULA hat seine eigene Möglichkeit.

`\mhName[<keyval>]{<formula>}{<text>}`

Zum Beispiel:

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

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

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

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

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

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

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

16. Reaktionsumgebungen

16.1. 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 -> B 4 \end{reaction}</pre> | <pre>Reaktion mit Zähler: A → B {1}</pre> |
|---|---|

| | |
|--|--|
| <pre>1 Reaktion ohne Zähler: 2 \begin{reaction*} 3 C -> D 4 \end{reaction*}</pre> | <pre>Reaktion ohne Zähler: C → D</pre> |
|--|--|

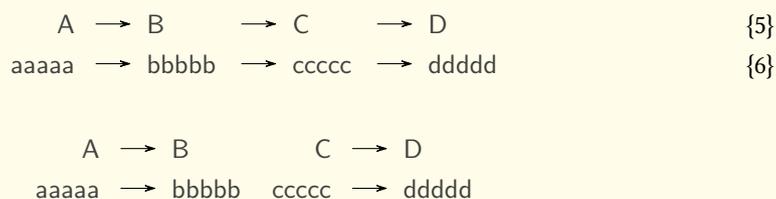
| | |
|--|---|
| <pre>1 mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler: 2 \begin{reactions} 3 A &-> B + C \\ 4 D + E &-> F 5 \end{reactions}</pre> | <pre>mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler: A → B + C {2} D + E → F {3}</pre> |
|--|---|

| | |
|---|--|
| <pre>1 mehrere ausgerichtete Reaktionen ohne Zähler: 2 \begin{reactions*} 3 G &-> H + I \\ 4 J + K &-> L 5 \end{reactions*}</pre> | <pre>mehrere ausgerichtete Reaktionen ohne Zähler: G → H + I J + K → L</pre> |
|---|--|

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

`\renewtagform{<tagname>}[<format>]{<right delim>}{<left delim>}`³².

³² Durch das `mathtools` Paket zur Verfügung gestellt.



16.3. Liste der Reaktionen

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

`\listofreactions`

```
1 \listofreactions
```

Reaktionsverzeichnis

| | |
|--|----|
| Reaktion {1} | 26 |
| Reaktion {2} | 26 |
| Reaktion {3} | 26 |
| Reaktion [4] | 27 |
| Reaktion {5} | 28 |
| Reaktion {6} | 28 |
| Reaktion {7}: Autoprotolyse | 28 |
| Reaktion {8}: Synthese von Alkanen | 54 |

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

Beide Default-Werte reagieren auf die Option `german`.

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

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

```

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

```

$$2 \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^- \quad \{7\}$$

17. Phasen

17.1. 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 Vollst\"andigkeit halber: NaCl\aq.
```

$C(f) + 2H_2O(fl) \rightarrow CO_2(g) + 2H_2(g)$
der Vollständigkeit halber: NaCl(aq).

Mit der Paketoption `german = false` (siehe Abschnitt 4) erhalten Sie die englischen Versionen:

```
1 \chemsetup[option]{german=false}
2 \ch{C\sld{} + 2 H2O\lqd{} -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{}}
```

$C(f) + 2H_2O(fl) \rightarrow CO_2(g) + 2H_2(g)$

Die IUPAC-Empfehlung³³ 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

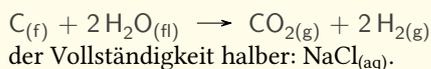
phases `space` = <dim> Ändern des Zwischenraums zwischen Formel und dem Phasen-Anzeiger bei `pos` = side. Eine \TeX -Dimension. Default = .1333em

³³ Vielen Dank an Paul King für den Hinweis.

```

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

```



17.2. 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>}`

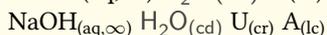
`\phase{<phase>}` Wenn Sie die Phase nur ein- oder zweimal verwenden müssen.

`\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{\aq}{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

```



18. Newman-Projektionen

`CHEMMACROS` stellt den Befehl

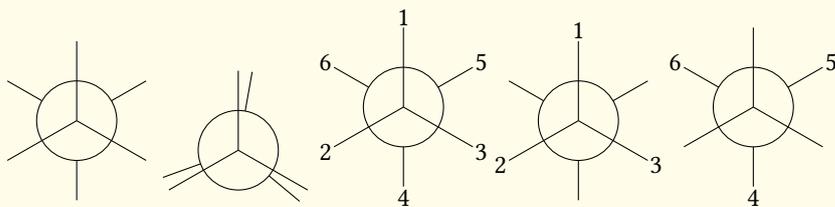
`\newman[<keyval>](<angle>){<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}`

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.

```

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

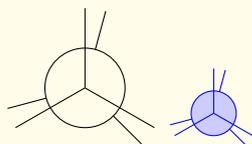
```



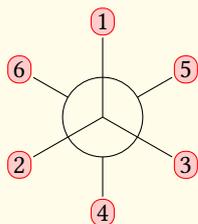
Es gibt einige Optionen, um den Befehl anzupassen:

- 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}
```



19. s, p und Hybrid-Orbitale

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

`\orbital[<keyval>]{<type>}`

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

s

p

sp

sp²

sp³

```
1 \orbital{s} \orbital{p} \orbital{sp} \orbital{sp2} \orbital{sp3}
```



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).

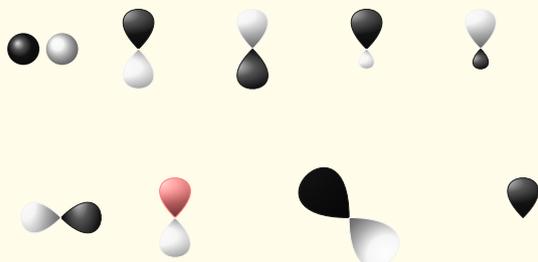
`orbital` `angle` = <angle> Rotiert die Orbitale mit einem p-Anteil gegen den Uhrzeigersinn (alle Typen außer s).

`orbital` `half` = true/false stellt nur ein halbes Orbital dar (nur p).

```

1 \orbital{s} \orbital[phase=-]{s}
2 \orbital{p} \orbital[phase=-]{p}
3 \orbital{sp3} \orbital[phase=-]{sp3}
4
5 \orbital[angle=0]{p} \orbital[color=red!50]{p} \orbital[angle=135, scale=1.5]{p} \
  \orbital[half]{p}

```



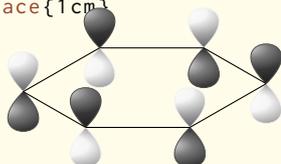
Zusätzlich gibt es zwei Optionen, mit denen das *TikZ*-Verhalten beeinflusst werden kann:

- 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 \vspace{1cm}\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}-[150,.9]{\
  \orbital[phase=-]{p}}-[4,1.3]\orbital{p}-[-150,1.1]{\orbital[phase=-]{p}}??}
8 \vspace{1cm}

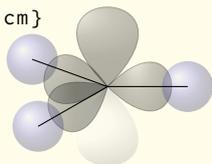
```



```

1 \vspace{2cm}\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}}{\
    orbital[angle=170 , half]{p}}{\orbital[angle=-150 , half]{p}}(-[: -150]\orbital{s})-\
    orbital{s}}
11 \vspace{2cm}

```



20. Übersicht über die Optionen

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

`\chemsetup[<module>]{<keyval>}` oder

`\chemsetup<module>/<keyval>` gesetzt werden.

Manche Optionen können ohne Wert verwendet werden. Dann wird der unterstrichene Wert verwendet.

| Option | Modul | Werte | Default | |
|-------------------------|---------------------|--------------------------|------------|---------|
| Paketoptionen: | | | | |
| <code>bpchem</code> | <code>option</code> | <u>true</u> /false | false | Seite 5 |
| <code>circled</code> | <code>option</code> | formal/ <u>all</u> /none | formal | Seite 5 |
| <code>circletype</code> | <code>option</code> | chem/math | chem | Seite 5 |
| <code>german</code> | <code>option</code> | <u>true</u> /false | false | Seite 5 |
| <code>ghs</code> | <code>option</code> | <u>true</u> /false | true | Seite 5 |
| <code>iupac</code> | <code>option</code> | auto/restricted/strict | auto | Seite 5 |
| <code>method</code> | <code>option</code> | chemformula/formula | formula | Seite 5 |
| <code>Nu</code> | <code>option</code> | chemmacros/mathspec | chemmacros | Seite 5 |

| Option | Modul | Werte | Default | |
|--|------------------------|---|-----------------------------|----------|
| <code>strict</code> | <code>option</code> | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 5 |
| <code>synchronize</code> | <code>option</code> | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 6 |
| <code>version</code> | <code>option</code> | <code>1/2/bundle</code> | <code>bundle</code> | Seite 6 |
| <code>xspace</code> | <code>option</code> | <code>true/false</code> | <code>true</code> | Seite 6 |
| <code>\ba, \Nu:</code> | | | | |
| <code>elpair</code> | <code>particle</code> | <code>dots/dash/false</code> | <code>false</code> | Seite 8 |
| <code>\pch, \mch, \fpch, \fmch:</code> | | | | |
| <code>append</code> | <code>charges</code> | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 14 |
| <code>acid/base:</code> | | | | |
| <code>p-style</code> | <code>acid-base</code> | <code>slanted/italics/upright</code> | <code>upright</code> | Seite 13 |
| <code>\ox:</code> | | | | |
| <code>parse</code> | <code>ox</code> | <code>true/false</code> | <code>true</code> | Seite 15 |
| <code>roman</code> | <code>ox</code> | <code>true/false</code> | <code>true</code> | Seite 15 |
| <code>pos</code> | <code>ox</code> | <code>top/super/side</code> | <code>top</code> | Seite 15 |
| <code>explicit-sign</code> | <code>ox</code> | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 15 |
| <code>decimal-marker</code> | <code>ox</code> | <code>comma/point</code> | <code>point</code> | Seite 16 |
| <code>\OX, \redox:</code> | | | | |
| <code>dist</code> | <code>redox</code> | <code><dim></code> | <code>.6em</code> | Seite 19 |
| <code>sep</code> | <code>redox</code> | <code><dim></code> | <code>.2em</code> | Seite 19 |
| <code>\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:</code> | | | | |
| <code>exponent</code> | | <code><anything></code> | <code>\standardstate</code> | Seite 21 |
| <code>delta</code> | | <code><anything>/false</code> | | Seite 21 |
| <code>subscript</code> | | <code>left/right</code> | | Seite 21 |
| <code>unit</code> | | <code><unit></code> | | Seite 21 |
| <code>\DeclareChemState, \RenewChemState:</code> | | | | |
| <code>exponent</code> | | <code><anything></code> | <code>\standardstate</code> | Seite 21 |
| <code>delta</code> | | <code><anything>/false</code> | | Seite 21 |
| <code>subscript</code> | | <code><anything></code> | | Seite 21 |
| <code>subscript-left</code> | | <code>true/false</code> | | Seite 22 |
| <code>\State:</code> | | | | |
| <code>exponent</code> | <code>state</code> | <code><anything></code> | <code>\standardstate</code> | Seite 23 |
| <code>delta</code> | <code>state</code> | <code><anything>/false</code> | | Seite 23 |
| <code>subscript-left</code> | <code>state</code> | <code>true/false</code> | | Seite 23 |
| <code>\NMR:</code> | | | | |
| <code>unit</code> | <code>nmr</code> | <code><unit></code> | <code>\mega\hertz</code> | Seite 24 |
| <code>nucleus</code> | <code>nmr</code> | <code>{<num>, <atom symbol>}</code> | <code>{1,H}</code> | Seite 24 |
| <code>\DeclareChemReaction:</code> | | | | |
| <code>star</code> | | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 27 |
| <code>arg</code> | | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 27 |
| <code>list-name</code> | <code>reaction</code> | <code><anything></code> | List of reactions | Seite 28 |
| <code>list-entry</code> | <code>reaction</code> | <code><anything></code> | Reaction | Seite 28 |
| <code>\mhName:</code> | | | | |
| <code>align</code> | <code>mhName</code> | <code><alignment></code> | <code>\centering</code> | Seite 25 |
| <code>format</code> | <code>mhName</code> | <code><commands></code> | | Seite 25 |
| <code>fontsize</code> | <code>mhName</code> | <code><fontsize></code> | <code>\tiny</code> | Seite 25 |
| <code>width</code> | <code>mhName</code> | <code><dim></code> | | Seite 25 |
| <code>phases:</code> | | | | |
| <code>pos</code> | <code>phases</code> | <code>side/sub</code> | <code>side</code> | Seite 29 |
| <code>space</code> | <code>phases</code> | <code><dim></code> | <code>.1333em</code> | Seite 29 |
| <code>\newman:</code> | | | | |

| Option | Modul | Werte | Default | |
|---|----------------|------------|---------|----------|
| angle | newman | <angle> | 0 | Seite 31 |
| scale | newman | <factor> | 1 | Seite 31 |
| ring | newman | <tikz> | | Seite 31 |
| atoms | newman | <tikz> | | Seite 31 |
| back-atoms | newman | <tikz> | | Seite 31 |
| \backslash orbital <type> = s/p/sp/sp2/sp3: | | | | |
| phase | orbital/<type> | +/- | + | Seite 32 |
| scale | orbital/<type> | <factor> | 1 | Seite 32 |
| color | orbital/<type> | <color> | black | Seite 32 |
| angle | orbital/<type> | <angle> | 90 | Seite 32 |
| half | orbital/p | true/false | false | Seite 32 |
| overlay | orbital | true/false | false | Seite 33 |
| opacity | ornital | <num> | 1 | Seite 33 |

Teil III.

chemformula

21. 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.

22. Das Grundprinzip

`CHEMFORMULA` hat einen Hauptbefehl.

```
\ch[<options>]{<input>}
```

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

| | | |
|----|--|--|
| 1 | <code>\ch{H2O} \\ </code> | H ₂ O |
| 2 | <code>\ch{Sb2O3} \\ </code> | Sb ₂ O ₃ |
| 3 | <code>\ch{H+} \\ </code> | H ⁺ |
| 4 | <code>\ch{CrO4^2-} \\ </code> | CrO ₄ ²⁻ |
| 5 | <code>\ch{AgCl2-} \\ </code> | AgCl ₂ ⁻ |
| 6 | <code>\ch{[AgCl2]-} \\ </code> | [AgCl ₂] ⁻ |
| 7 | <code>\ch{Y^{99+}} \\ </code> | Y ⁹⁹⁺ |
| 8 | <code>\ch{Y^{99+}} \\ </code> | Y ⁹⁹⁺ |
| 9 | <code>\ch{H2_{(aq)}} \\ </code> | H _{2(aq)} |
| 10 | <code>\ch{NO3-} \\ </code> | NO ₃ ⁻ |
| 11 | <code>\ch{(NH4)2S} \\ </code> | (NH ₄) ₂ S |
| 12 | <code>\ch{^{227}_{90}Th+} \\ </code> | ²²⁷ ₉₀ Th ⁺ |
| 13 | <code>\$V_{\ch{H2O}}\$ \\ </code> | V _{H₂O} |
| 14 | <code>\ch{Ce^{IV}} \\ </code> | Ce ^{IV} |
| 15 | <code>\ch{KCr(SO4)2 * 12 H2O}</code> | KCr(SO ₄) ₂ · 12 H ₂ O |

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

`\ch{type1 type2 type3 type4}`

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

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

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

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

| | | |
|---|--------------------------------|-------------------------------|
| 1 | <code>\ch{2H2O} \\ </code> | ₂ H ₂ O |
| 2 | <code>\ch{2 H2O}</code> | 2 H ₂ 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.

23. Stöchiometrische Faktoren

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

```
1 \ch{2} \\
2 \ch{12}
3
4 % decimals:
5 \ch{3.5} \\
6 \ch{5,75}
7
8 % fractions:
9 \ch{3/2} \\
10 \ch{1_1/2}
```

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}
```

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

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

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

```
1 \ch[frac-style=xfrac]{3/2} \ch[frac-style=xfrac]{1_1/2}
¾ 1½
```

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

```

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

```

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

```

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

```

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

```

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

```

$\frac{3}{2}$ $1\frac{1}{2}$

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

```

1 \ch{2 H2O} \ \ 2H2O
2 \ch[stoich-space=.2em]{2 H2O} 2 H2O

```

24. Summenformeln

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

```

1 \ch{H2SO4} \ \ H2SO4
2 \ch{[Cu(NH3)4]^2+} [Cu(NH3)4]2+

```

24.1. Addukte

`CHEMFORMULA` hat zwei Identifier, die Addukte erzeugen.

`\ch{A.B}`

`\ch{A*B}`

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

Da Ziffern in einer Summenformel immer als Tiefstellung betrachtet werden (siehe Abschnitt 24.2), 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> | $\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ |

24.2. Tiefstellungen

Alle Ziffern in einer Substanz werden als Tiefstellung behandelt.

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

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

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

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

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

24.3. Befehle

Befehle sind in einer Summenformel erlaubt:

| | | |
|---|--|-----------------|
| 1 | <code>\ch{\textbf{A2}B3} \ch{A2\color{red}B3}</code> | $A_2B_3 A_2B_3$ |
|---|--|-----------------|

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 `\ch{A\hspace{2mm}B}` wird einen Fehler geben, da `\hspace` in etwa so etwas sieht:
`\hspace{$_2$mm}`.

Siehe Abschnitt 26.1 für einen Ausweg.

24.4. 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 24.5.

1 `\ch{A+B}` `\ch{AB+}` `\` $A=B AB^+$
 2 `\ch{A-B}` `\ch{AB-}` $A-B AB^-$

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 `\ch{A^{x-}}` `\` A^{x-}
 2 `\ch{A^x-}` `\` A^{x-}
 3 `\ch{A^{x}-}` `\` A^{x-}
 4 `\ch{A^{x-$}}` `\` A^{x-}
 5 `\ch{RNO2^{-.}}` `\` RNO_2^{--}
 6 `\ch{^31H}` `\` 3_1H
 7 `\ch{^{14}6C}` `\` $^{14}_6C$
 8 `\ch{^{58}_{26}Fe}` `\` $^{58}_{26}Fe$
 9 `\ch{NO^*}` NO^*

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

1 `\ch{SO4^2-}` `\ch{Ca^2+ SO4^2-}` $SO_4^{2-} Ca^{2+}SO_4^{2-}$

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 wird von `\ch` beachtet.

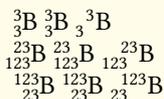
1 `\chemsetup[option]{circled=all}` $H^{\oplus} + OH^{\ominus} \rightleftharpoons H_2O$
 2 `\ch{H+ + OH- <=> H2O}`

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

```

1 \ch{^33B} \ch{{}^33B} \ch{3^3B} \\
2 \ch{^{23}_{123}B} \ch{{}^{23}_{123}B} \ch{_{123}^{23}B} \\
3 \ch{^{123}_{23}B} \ch{{}^{123}_{23}B} \ch{_{23}^{123}B}

```



- 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 42f.

Der zweite Punkt folgt der IUPAC-Empfehlung:

In writing the formula for a complex ion, spacing for charge number can be added (staggered arrangement), as well as parentheses: SO_4^{2-} , $(\text{SO}_4)^{2-}$. The staggered arrangement is now recommended.

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

24.5. Bindungen

CHEMFORMULA kennt drei Sorten Bindungen:

```

1 einfach: \ch{CH3-CH3} \\          einfach: CH3-CH3
2 doppel: \ch{CH2=CH2} \\        doppel: CH2=CH2
3 dreifach: \ch{CH+CH}           dreifach: CH≡CH

```

24.6. 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 = 1ex

`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.

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

```
1 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}          SO42- NH4+ Na+
```

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

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

SO₄²⁻ NH₄⁺ Na⁺
SO₄²⁻ NH₄⁺ Na⁺
SO₄²⁻ NH₄⁺ Na⁺

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

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

M^{x+} SO₄²⁻
M^{x+} SO₄²⁻

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}
```

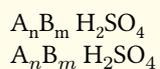
H₂SO₄ Na₃PO₄
H₂SO₄ Na₃PO₄
H₂SO₄ Na₃PO₄

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}

```

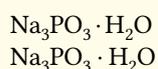


Mit der Option `adduct-space` kann der Leerraum links und rechts des Addukt-Zeichens festgesetzt werden.

```

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

```

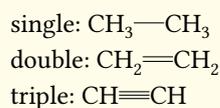


Die Länge der Bindungen ändern:

```

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

```



25. Spezielle Input-Typen

Es gibt einige „spezielle Input-Typen“. Sie bestehen nur aus einem Token, nämlich einem der folgenden:

`\ch{ + }` + Erstellt ein Plus-Zeichen zwischen Formeln mit Leerraum links und rechts:
`\ch{2 Na + Cl2}` 2Na + Cl₂

`\ch{ v }` ↓ Zeichen für eine Fällung/Niederschlag: `\ch{BaSO4 v}` BaSO₄↓

`\ch{ ^ }` ↑ Zeichen für entweichendes Gas: `\ch{H2 ^}` H₂↑

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

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

| | | |
|---|---|-------|
| 1 | <code>\ch{A + B}\</code> | A + B |
| 2 | <code>\ch[plus-space=4pt]{A + B}</code> | A + B |

26. Geschützter Input

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

26.1. 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 | <code>\ch{"\ox{2,Ca}" O} \</code> | |
| 2 | <code>\ch{"\ldots\," Na + "\ldots\," Cl2 -> "\ldots\," NaCl} \</code> | |
| 3 | <code>\ch{'A~->~B'}</code> | |

CaO
 ...Na + ...Cl₂ → ...NaCl
 A->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.

26.2. 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: xH_2O |
| 2 | escaped math: <code>\ch{"\$x\$ H2O} \</code> | escaped math: $x H_2O$ |
| 3 | <code>\ch{"\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl}</code> | $2n Na + n Cl_2 \rightarrow 2n NaCl$ |

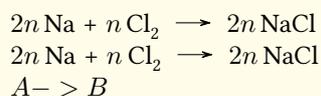
Der Leerraum, der nach dem geschützten Mathe-Input ausgegeben wird, kann angepasst werden.

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

```

1 \ch{$2n$ Na + $n$ Cl2 -> $2n$ NaCl} \\
2 \chemsetup[chemformula]{math-space=.2em}
3 \ch{$2n$ Na + $n$ Cl2 -> $2n$ NaCl} \\
4 \ch{$A->B$}

```



27. Pfeile

27.1. 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{ -/> }` ⇏ reagiert nicht (rechts)

`\ch{ </- }` ⇏ reagiert nicht (links)

`\ch{ <-> }` ↔ Mesomerie-Pfeil

`\ch{ <> }` ⇌ Reaktion in beide Richtungen

`\ch{ <=> }` ⇌ Gleichgewichts-Pfeil

`\ch{ <=>> }` ⇌ Gleichgewicht liegt rechts

`\ch{ <<=> }` ⇌ Gleichgewicht liegt links

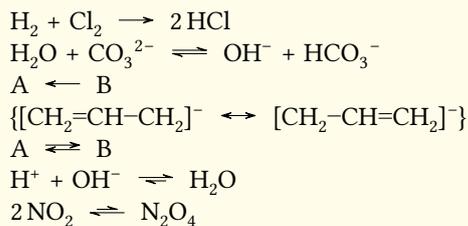
`\ch{ <o> }` ⇌ Isolobal-Pfeil

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}

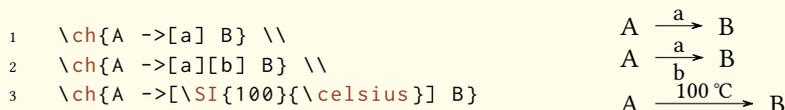
```



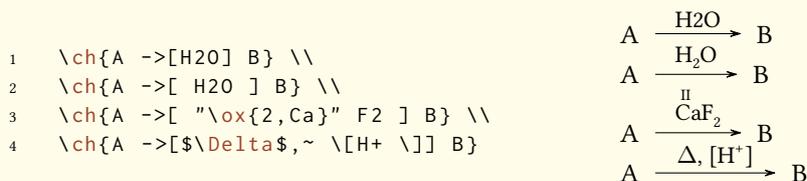
27.2. Beschriftung

Die Pfeile haben zwei optionale Argumente für Beschriftungen.

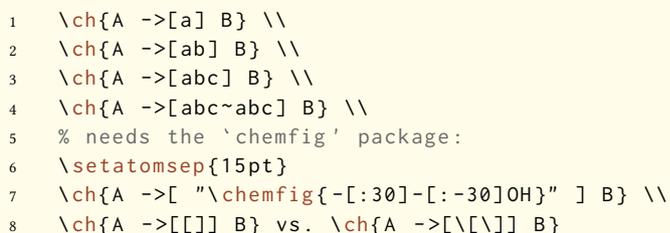
`\ch{ ->[<above>][<below>] }`

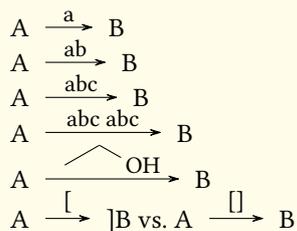


Der Beschriftungstext kann unabhängig vom Pfeil verarbeitet werden. Das Rezept ist einfach: verwenden Sie Leerzeichen.



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.





27.3. 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 T_EX-Länge. Default = 1.5ex

arrow-yshift = <dim> Verschiebt einen Pfeil nach oben (positiver Wert) oder nach unten (negativer Wert). Eine T_EX-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 T_EX-Länge. Default = 1ex

label-offset = <dim> Der Leerraum zwischen Pfeilen und ihrer Beschriftung. Eine T_EX-Länge. Default = 2pt

label-style = Die relative Schriftgröße der Beschriftung. Default = `\footnotesize`

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

```

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

```

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

27.4. 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*³⁴.

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

(cf_arrow_start) Der Pfeilanfang.

(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 \DeclareChemArrow{==}{
4 \draw ([yshift=.2ex]cf_arrow_mid_start) -- ([yshift=.2ex]cf_arrow_mid_end);
5 \draw ([yshift=-.2ex]cf_arrow_mid_start) -- ([yshift=-.2ex]cf_arrow_mid_end);
6 }
7 \ch{A .> B} \ch{A .>[a][b] B} \ch{A n> B} \ch{A == B}
```



³⁴ Bitte lesen Sie dazu das pgfmanual.

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

```
\RenewChemArrow{<tokens>}{<tikz>}
```

```
\ShowChemArrow{<tokens>}
```

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

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

28. Text unter Formeln

28.1. 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 \ch{!(ethanol)( CH2CH2OH )} 
$$\begin{array}{c} \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH} \\ \text{ethanol} \end{array}$$

```

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

$$\begin{array}{ccccc} \text{H}_2\text{O} & \text{H}_2\text{O} & \text{H}_2\text{O} & \text{H}_2\text{O} & \text{H}_3\text{O}^+ \\ \text{water} & \text{water} & 2n-1 & \text{H}_2\text{O} & \text{oxonium} \end{array}$$

```

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 \ch{H2O~(!)} \ \ H2O (!)
2 \ch{A!{}} \ \ A!()

```

28.2. 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}

```

$$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{B}$$
 Säure

$$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{B}$$
 Säure

$$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{B}$$
 N: Säure

$$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{B}$$
 Säure

29. 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

```

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

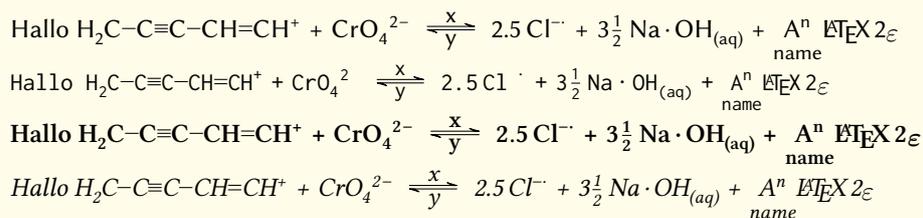
name

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

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

```

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

font-family = <family> Ändert die Schriftfamilie des Output mit: `\fontfamily{<family>}\selectfont`.

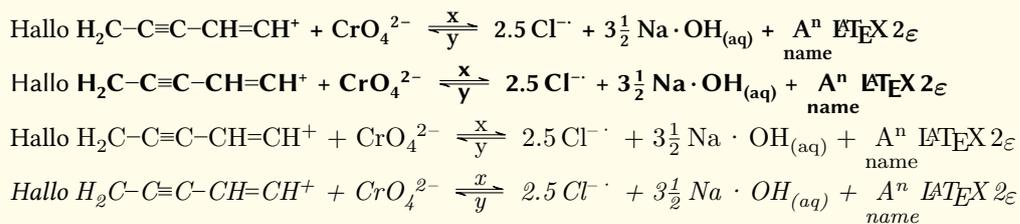
font-series = <series> Ändert die Schriftserie des Output mit: `\fontseries{<series>}\selectfont`

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

```

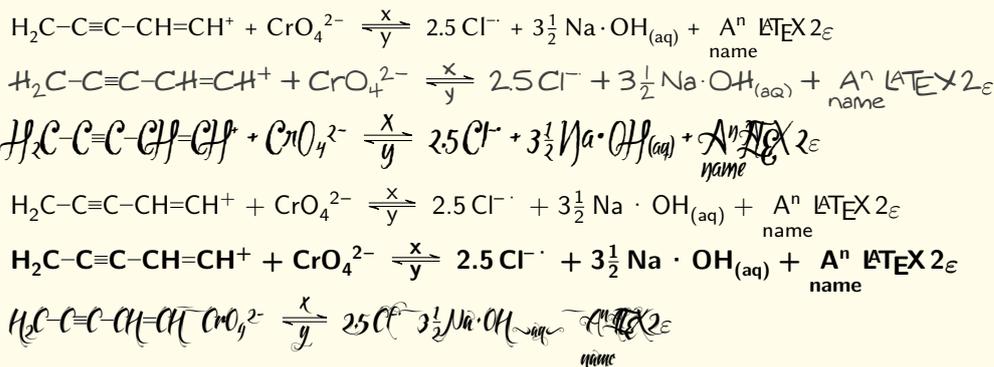


Wenn Sie $\text{X}_{\text{L}}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ oder $\text{LuaL}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ verwenden und das Paket `fontspec`³⁵ geladen haben, können Sie die Schrift von `CHEMFORMULA` auch damit ändern:

`font-spec` = {} oder mit Optionen

`font-spec` = {[<options>]}

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



30. 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.

³⁵ CTAN: `fontspec`

```

1 \begin{align}
2 \quad \text{\ch}
3 \quad \text{H}_2\text{O} \text{ \&->[a] H}_2\text{SO}_4 \text{ \&\&}
4 \quad \text{Cl}_2 \text{ \&->[x][y] CH}_4 \text{ \&\&}
5 \quad \text{\&\&}
6 \end{align}
7 \begin{align*}
8 \quad \text{\ch}
9 \quad \text{RNO}_2 \text{ \&\&=>[ + e^- ] RNO}_2^{\cdot-} \text{ \&\&}
10 \quad \text{RNO}_2^{\cdot-} \text{ \&\&=>[ + e^- ] RNO}_2^{2-} \text{ \&\&}
11 \quad \text{\&\&}
12 \end{align*}

```

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

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

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

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

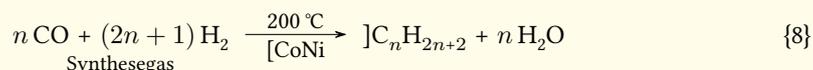
31. Weitere Beispiele

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_{2n+2}
3 \end{reaction}

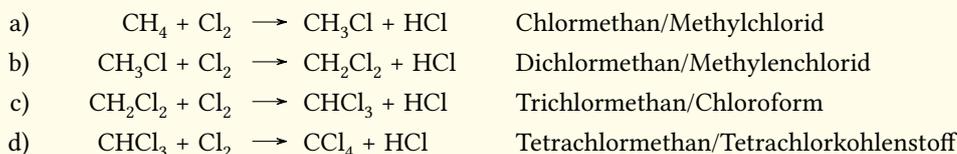
```



```

1 \begin{reactions*}
2 "a)" \&\& CH4 + Cl2 \&-> CH3Cl + HCl \&\& "{\small Chlormethan/Methylchlorid}" \&\&
3 "b)" \&\& CH3Cl + Cl2 \&-> CH2Cl2 + HCl \&\& "{\small Dichlormethan/Methylenchlorid}" \&\&
4 "c)" \&\& CH2Cl2 + Cl2 \&-> CHCl3 + HCl \&\& "{\small Trichlormethan/Chloroform}" \&\&
5 "d)" \&\& CHCl3 + Cl2 \&-> CCl4 + HCl \&\& "{\small Tetrachlormethan/
Tetrachlorkohlenstoff}"
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}{??})( CH4\gas{} ) + !(\num{0})( 2 O2\gas{} ) -> !(\num{-94.3})( CO2\gas{} ) + !(\num{-57.9})( H2O\lqd{} ) + !(\num{-192.1})( "\State{H}" )}

```



```

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

```

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

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

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

```

H200: Instabil, explosiv
H224: Flüssigkeit und Dampf extrem entzündbar.
EUH001: In trockenem Zustand explosionsgefährlich.
EUH202: Cyanacrylat. Gefahr. Klebt innerhalb von Sekunden Haut und Augenlider zusammen. Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.
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 dies Option verwenden:

```
hide = true/false
```

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

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

```

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

```

H200: Instabil, explosiv
H 200: Instabil, explosiv
Instabil, explosiv
H200

33.2. 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` Show placeholders. 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.

33.3. 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.

33.4. 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.*

34. Piktogramme

34.1. 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 34.2](#).

```
1 \ghspic{skull}
```



Wenn Ihnen die Defaultgröße nicht gefällt, können Sie die Option

```
scale = <factor> Scales the pictogram. Default = 1
```

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

```
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 | | | |

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

34.2. Der Bildtyp hängt von der Engine ab

Sie wissen vermutlich, dass Sie nicht jeden Bildtyp mit jeder Compiler-engine verwenden können. $\text{PDF}\text{T}\text{E}\text{X}$ im DVI -Modus verlangt eps-Dateien, während $\text{PDF}\text{T}\text{E}\text{X}$ im PDF -Modus, $\text{X}\text{Y}\text{T}\text{E}\text{X}$ und $\text{Lua}\text{T}\text{E}\text{X}$ eps-Dateien in pdf-Dateien konvertieren, vorausgesetzt, der Anwender hat Schreibrechte in dem Verzeichnis, in dem die Bilder gespeichert sind.

Die letztgenannte können jedoch jpg- und png-Dateien ohne Schwierigkeiten einbinden, während $\text{PDF}\text{T}\text{E}\text{X}$ im DVI -Modus das nicht kann.

Um das Problem zu lösen, testet `GHSYSTEM`, welche Engine verwendet wird und falls es $\text{PDF}\text{T}\text{E}\text{X}$ 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.

35. 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`³⁶ oder `polyglossia`³⁷ (noch) nicht.

Sie können die Sprache auch explizit wählen.

```
language = english/german
```

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

H201: Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.
H201: Explosive; mass explosion hazard.

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 mich³⁸ gerne. Ich stelle Ihnen dann eine Template-Datei, ein pdf mit den offiziellen Übersetzungen sowie jede weitere Hilfe, die sie benötigen.

36. 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 booktabs39 Paket, dass Sie dann einbinden müssen. Default = default
```

³⁶ CTAN: babel ³⁷ CTAN: polyglossia ³⁸ contact@mychemistry.eu ³⁹ CTAN: booktabs

`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:

```
1 \ghslistall[fill-in,table-rules=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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|--------|---|
| 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. |
| 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><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |
| H341 | Kann vermutlich genetische Defekte verursachen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |
| H350 | Kann Krebs erzeugen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|--------|---|
| H351 | Kann vermutlich Krebs erzeugen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |
| H360 | Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. <i><konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt> <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |
| H361 | Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. <i><konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt> <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |
| H362 | Kann Säuglinge über die Muttermilch schädigen. |
| H370 | Schädigt die Organe <i><oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt></i> . <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |
| H371 | Kann die Organe <i><oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt></i> schädigen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |
| H372 | Schädigt die Organe <i><oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt></i> bei längerer oder wiederholter Exposition. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |
| H373 | Kann die Organe <i><oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt></i> schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|---------|---|
| 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. |
| 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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|---------|---|
| 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. |
| 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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|-------------|--|
| 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 nichtessen, trinken oderrauchen. |
| 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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|--------|--|
| 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. |
| 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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|--------------------|--|
| 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. |
| 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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|--------------------|--|
| 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. |
| 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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|-------------|---|
| 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. |

Teil V.

Anhang

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-Mail⁴⁰ 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!

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.
- [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.

⁴⁰ contact@mychemistry.eu

Index

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

Symbols

| | |
|-----------------------|----|
| <code>\-</code> | 9 |
| <code>\[</code> | 47 |
| <code>\^</code> | 9 |
| <code>\ </code> | 9 |
| <code>\]</code> | 47 |

A

| | |
|---------------------------------|--------|
| <code>\abinitio</code> | 12 |
| Absolute Konfiguration..... | 11 |
| <code>acid-base</code> | |
| <code>p-style</code> | 13 |
| <code>adduct-space</code> | 42, 44 |
| <code>align</code> | 25 |
| <code>angle</code> | 31 f. |
| ANHANG | 72 |
| <code>\anti</code> | 10 |
| <code>append</code> | 14 |
| <code>\aq</code> | 29 |
| <code>arg</code> | 27 |
| <code>arrow-offset</code> | 48 |
| <code>arrow-ratio</code> | 48 |
| <code>arrow-yshift</code> | 48 |
| <code>\atm</code> | 12 |
| <code>\atmosphere</code> | 12 |
| <code>atoms</code> | 31 |

B

| | |
|---------------------------------|---------|
| <code>\ba</code> | 7, 35 |
| <code>babel</code> | 62 |
| <code>back-atoms</code> | 31 |
| Befehle für mhchem | 24 f. |
| BEVOR ES LOS GEHT | 3–6 |
| <code>bm</code> | 3 |
| <code>bond-length</code> | 42 |
| <code>booktabs</code> | 62 |
| <code>bpchem</code> | 3, 5 |
| <code>bpchem</code> | 3, 5, 8 |

C

| | |
|----------------------------------|--------------------------------|
| <code>C-temperature</code> | 58 |
| Cahn-Ingold-Prelog..... | 10 |
| <code>\cal</code> | 12 |
| <code>\calory</code> | 12 |
| <code>\centering</code> | 35 |
| <code>\ch</code> | 36 f., 40 f., 44–47, 50, 52 f. |
| <code>charge-hshift</code> | 42 f. |
| <code>charge-style</code> | 42 |
| <code>charges</code> | |
| <code>append</code> | 14 |
| <code>chemfig</code> | 8, 17 |
| CHEMFORMULA | 36–55 |
| CHEMMACROS | 7–36 |
| <code>\chemsetup</code> | 6, 34, 37 |
| <code>chemstyle</code> | 7, 12 f. |
| <code>\cip</code> | 10 |
| <code>circled</code> | 5, 8 |
| <code>circletype</code> | 5 |
| <code>\cis</code> | 10 |
| <code>cis/trans</code> | 10 |
| <code>\cmc</code> | 12 |
| <code>color</code> | 32 |
| <code>compound-sep</code> | 48 |
| <code>cool</code> | 9 f. |

D

| | |
|---|--------|
| <code>\D</code> | 9 f. |
| <code>decimal-marker</code> | 16, 38 |
| <code>\DeclareChemArrow</code> | 49 |
| <code>\DeclareChemIUPAC</code> | 11 |
| <code>\DeclareChemParticle</code> | 8 |
| <code>\DeclareChemPhase</code> | 30 |
| <code>\DeclareChemReaction</code> | 27, 35 |
| <code>\DeclareChemState</code> | 22, 35 |
| <code>\delm</code> | 17 |
| <code>\delp</code> | 17 |
| <code>delta</code> | 21 ff. |
| <code>detect-bold</code> | 5 |
| <code>dist</code> | 19 |
| <code>dots</code> | 58 |

E

| | |
|-----------------------|------|
| <code>\E</code> | 9 f. |
|-----------------------|------|

| | |
|---------------------------------------|------------------|
| effect | 57 |
| Einheiten | 12 f. |
| \El | 7 |
| \el | 7 |
| elpair | 8 |
| \Enthalpy | 21, 35 |
| \Entropy | 21, 35 |
| environ | 3 |
| explicit-sign | 15 f. |
| exponent | 21 ff. |
| exposure | 57 |
| EZ | 5 |
| F | |
| F-temperature | 58 |
| \fdelm | 17 |
| \fdelp | 17 |
| fill-in | 57 |
| Fischer | 10 |
| \fmch | 14, 35 |
| \fminus | 7 |
| font-family | 52 |
| font-series | 52 |
| font-shape | 52 |
| font-spec | 53 |
| fontsize | 25 |
| fontspec | 53 |
| format | 25, 52 |
| Format und Schrift | 51 ff. |
| \fpch | 14, 35 |
| \fplus | 5, 7 |
| frac-style | 38 f. |
| \fscrm | 17 |
| \fscrp | 17 |
| \fsscrm | 17 |
| \fsscrp | 17 |
| G | |
| \gas | 29 |
| Gefahren- und Sicherheitssätze | 56–59 |
| german | 5, 13, 28 f., 62 |
| Geschützter Input | 45 f. |
| math | 45 |
| text | 45 |
| \ghs | 56 |
| ghs | 5 |
| \ghs* | 56 |
| \ghslistall | 62 |
| \ghspic | 59 |
| GHSYSTEM | 55–72 |
| Aufruf | 56 |
| kombinierte Sätze | 59 |
| Platzhalter | 57 |
| Sätze mit Lücken | 58 |
| \Gibbs | 21, 35 |
| graphicx | 3 |
| H | |
| half | 32 |
| \hertz | 35 |
| hide | 56 |
| \Hpl | 7 |
| \HtO | 7 |
| \Hyd | 7 |
| I | |
| ifpdf | 3 |
| includegraphics | 60 |
| \insitu | 12 |
| Installation | 4 |
| Ionenladungen | 14 f. |
| \iupac | 9 f. |
| iupac | 5, 9, 11 |
| IUPAC-Namen | 8–12 |
| Cahn-Ingold-Prelog | 10 |
| cis/trans | 10 |
| eigene | 11 |
| Fischer | 10 |
| ortho/meta/para | 10 |
| tert | 10 |
| vordefiniert | 10 |
| zusammen/entgegen | 10 |
| IUPAC Names | |
| syn/anti | 10 |
| K | |
| \Ka | 13 |
| \Kb | 13 |
| kg-mass | 58 |
| \Kw | 13 |
| L | |
| \L | 9 f. |

| | |
|------------------------------|--------------------------|
| l3kernel | 3 |
| l3packages | 3 |
| label-offset | 48 |
| label-style | 48 |
| Laden des Bundles | 4 |
| language | 62 |
| Lateinische Ausdrücke | 12 |
| lbs-mass | 58 |
| list-entry | 28 |
| list-name | 28 |
| Liste aller Sätze | 62–72 |
| \listofreactions | 28 |
| longtable | 3, 62 |
| \lqd | 5, 29 |
| M | |
| math-space | 45 |
| Mathematik-Umgebungen | 53 f. |
| mathspec | 5, 7 |
| mathtools | 3, 26 |
| \mch | 14, 35, 41 |
| \mch | 18 |
| \mega | 35 |
| \meta | 9 f. |
| method | 3, 5, 8, 24 |
| mhchem | 3 ff., 8, 24, 27, 36, 46 |
| \mhName | 25, 35 |
| mhName | |
| align | 25 |
| fontsize | 25 |
| format | 25 |
| width | 25 |
| \Molar | 12 |
| \moLar | 12 |
| \molar | 12 |
| \MolMass | 13 |
| N | |
| name-format | 51 |
| name-width | 51 |
| \newman | 30, 35 |
| newman | |
| angle | 31 |
| atoms | 31 |
| back-atoms | 31 |
| ring | 31 |
| scale | 31 |
| Newman-Projektionen | 30 ff. |
| ngerman | 5 |
| nicefrac | 3, 39 |
| \NMR | 5, 23, 35 |
| nmr | |
| nucleus | 24 |
| unit | 24 |
| \NMR* | 23 |
| \normal | 13 |
| \ntr | 7 |
| \Nu | 5, 7, 35 |
| Nu | 5, 7 |
| \Nuc | 7 |
| nucleus | 24 |
| O | |
| opacity | 33 |
| option | |
| bpchem | 5 |
| circled | 5 |
| circletype | 5 |
| detect-bold | 5 |
| EZ | 5 |
| german | 5, 13, 28, 62 |
| ghs | 5 |
| iupac | 5, 9, 11 |
| method | 5, 24 |
| ngerman | 5 |
| Nu | 5, 7 |
| strict | 5 |
| synchronize | 6 |
| version | 6 |
| xspace | 6 |
| \orbital | 32, 36 |
| orbital | |
| angle | 32 |
| color | 32 |
| half | 32 |
| opacity | 33 |
| overlay | 33 |
| phase | 32 |
| scale | 32 |
| Orbitale | 32 ff. |
| organs | 57 |
| \ortho | 10 |

| | |
|-------------------------------|------------|
| ortho/meta/para..... | 10 |
| overlay..... | 33 |
| \OX..... | 18, 35 |
| \ox..... | 15, 17, 35 |
| ox | |
| decimal-marker..... | 16 |
| explicit-sign..... | 15 f. |
| parse..... | 15 |
| pos..... | 15 f. |
| roman..... | 15 |
| \ox*..... | 16 |
| Oxidationszahlen | 15 f. |
| P | |
| \p..... | 13 |
| p-style..... | 13 |
| Paketoptionen | 5 f. |
| \para..... | 10 |
| parse..... | 15 |
| Partialladungen | 17 |
| particle | |
| elpair..... | 8 |
| \pch..... | 14, 35 |
| Pfeile | 46–50 |
| Anpassung..... | 48 |
| Beschriftung..... | 47 |
| Typen..... | 46 |
| bearbeiten..... | 49 |
| \pH..... | 13 |
| \phase..... | 30 |
| phase..... | 32 |
| Phasen | 29 f. |
| eigene..... | 30 |
| Grundlagen..... | 29 |
| phases | |
| pos..... | 29 |
| space..... | 29 |
| pic-type..... | 61 |
| Piktogramme | 59 ff. |
| \pKa..... | 5, 13 |
| \pKb..... | 13 |
| plus-space..... | 44 |
| \pOH..... | 13 |
| polyglossia..... | 62 |
| pos..... | 15 f., 29 |
| \prt..... | 7 |

| | |
|------------------------------------|---------------------|
| R | |
| \R..... | 9 f. |
| \Rad..... | 7 |
| \Rconf..... | 11 |
| reaction | |
| list-entry..... | 28 |
| list-name..... | 28 |
| reaction (env.)..... | 25 |
| reaction* (env.)..... | 25 |
| \reactionlistname..... | 28 |
| reactions (env.)..... | 25 |
| reactions* (env.)..... | 25 |
| Reaktionsmechanismen | 18 |
| Reaktionsumgebungen | 25–28 |
| \redox..... | 18, 35 |
| redox | |
| dist..... | 19 |
| sep..... | 19 |
| Redoxreaktionen | 18 ff. |
| \RenewChemArrow..... | 50 |
| \RenewChemIUPAC..... | 11 |
| \RenewChemParticle..... | 8, 30 |
| \RenewChemPhase..... | 30 |
| \RenewChemState..... | 22, 35 |
| \renewtagform..... | 26 |
| ring..... | 31 |
| roman..... | 15 |
| S | |
| \S..... | 9 f. |
| Säure/Base | 13 f. |
| scale..... | 31 f., 59 |
| \Sconf..... | 11 |
| \scrm..... | 17 |
| \scrp..... | 17 |
| sep..... | 19 |
| \setnewstate..... | 22 |
| Setup | 6 |
| \ShowChemArrow..... | 50 |
| siunitx..... | 3, 12 f., 21, 23 f. |
| \sld..... | 5, 29 |
| space..... | 29, 56 |
| Spektroskopie | 23 f. |
| Spezielle Input-Typen | 44 f. |
| \standardstate..... | 7, 35 |
| star..... | 27 |

| | | | |
|---|--------------|---|---------------------------------|
| <code>\State</code> | 23, 35 | <code>tabu</code> | 3 |
| <code>state</code> | | Teilchen, Ionen und Symbole | 7 f. |
| <code>delta</code> | 23 | eigene | 8 |
| <code>exponent</code> | 23 | vordefiniert | 7 |
| <code>subscript-left</code> | 23 | <code>tert</code> | 10 |
| Stereodeskriptoren und Nomenklatur . | 10 f. | <code>\tert</code> | 10 |
| Stöchiometrische Faktoren | 38 f. | <code>text</code> | 58 |
| <code>nicefrac</code> | 39 | Text unter Formeln | 50 f. |
| <code>space</code> | 39 | Anpassung | 51 |
| <code>xfrac</code> | 38 | syntax | 50 |
| <code>stoich-space</code> | 38 f. | Thermodynamik | 21 ff. |
| <code>strict</code> | 5, 8, 11, 30 | <code>TikZ</code> | 3, 11, 18 f., 30 f., 33, 46, 49 |
| <code>subscript</code> | 21 f. | <code>tikz</code> | 3 |
| <code>subscript-left</code> | 22 f. | <code>\tiny</code> | 35 |
| <code>subscript-style</code> | 42 | <code>\torr</code> | 13 |
| <code>subscript-vshift</code> | 42 f. | <code>\trans</code> | 9 f. |
| <code>substance</code> | 57 | <code>\transitionstatesymbol</code> | 7 |
| Summenformeln | 39–44 | | |
| Addukte | 39 | U | |
| Anpassung | 42 | Übersicht über die Optionen (chemmacros) | |
| Befehle | 40 | 34 ff. | |
| Bindungen | 42 | <code>unit</code> | 21, 24 |
| Länge | 44 | | |
| Hochstellungen | 41 | V | |
| Ladungsbefehle | 41 | <code>version</code> | 6 |
| Verhalten | 42 | | |
| Ladungen | 41 | W | |
| Verschiebung | 43 | <code>\water</code> | 7 |
| Tiefstellungen | 40 | <code>width</code> | 25 |
| Verschiebung | 43 | | |
| <code>\syn</code> | 10 | X | |
| <code>synchronize</code> | 6 | <code>xfrac</code> | 16, 38 |
| | | <code>xspace</code> | 3, 6 |
| T | | <code>xspace</code> | 3 |
| <code>table-caption</code> | 62 | | |
| <code>table-caption-short</code> | 62 | Z | |
| <code>table-foot-rule</code> | 63 | <code>\Z</code> | 10 |
| <code>table-head-number</code> | 62 | zusammen/entgegen | 10 |
| <code>table-head-rule</code> | 63 | | |
| <code>table-head-text</code> | 62 | | |
| <code>table-label</code> | 62 | | |
| <code>table-last-foot-rule</code> | 63 | | |
| <code>table-next-page</code> | 62 | | |
| <code>table-row-sep</code> | 62 | | |
| <code>table-rules</code> | 62 | | |
| <code>table-top-head-rule</code> | 63 | | |