

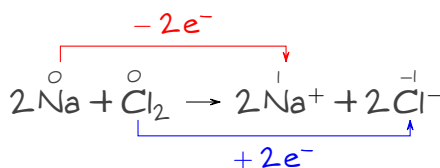
Das chemmacros Bundle

v3.1a 2012/02/26

Pakete **chemmacros**, **chemformula** und **ghsystem**

Clemens NIEDERBERGER

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



Inhaltsverzeichnis

		7.1.2. Eigene Nomenklatur-Befehle	11
		7.2. Lateinische Ausdrücke	12
I. Bevor es los geht	3	8. Einheiten für die Verwendung mit si-unitx	12
1. Lizenz, Voraussetzungen und README	3	9. Säure/Base	13
2. Motivation und Hintergrund	3	10. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen	14
3. Installation und Laden des Bundles	4	10.1. Ionenladungen	14
4. Paketooptionen	5	10.2. Oxidationszahlen	15
5. Setup	6	10.3. Partialladungen und Ähnliches .	17
		11. Reaktionsmechanismen	18
II. chemmacros	7	12. Redoxreaktionen	18
6. Teilchen, Ionen und Symbole	7	13. (Standard) Zustand, Thermodynamik	21
6.1. Vordefiniert	7	13.1. Thermodynamische Größen . .	21
6.2. Eigene Teilchen definieren . . .	8	13.1.1. Neue Größen definieren	22
		13.1.2. Größen umdefinieren . .	22
7. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke	8	13.2. Zustandsgrößen	23
7.1. IUPAC-Namen	8		
7.1.1. Vordefinierte Befehle . .	10	14. Spektroskopie	23

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

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

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

Sowohl CHEMFORMULA als auch GHSYSTEM haben keine eigenen Paketoptionen. Wenn Sie sie explizit laden, 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 `mathspec`¹⁹ 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

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

```

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

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

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`.

`\El` E^+ (Elektrophil)

`\ba` ba^- (Base)

`\fplus` \oplus

`\fminus` \ominus

`\transitionstatesymbol` \ddagger

`\standardstate` \ominus . Dieses Symbol wird nur dann von **CHEMMACROS** bereitgestellt, wenn das Paket `chemstyle`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}` $\text{R}_{\text{tert}}^+ \text{R}_{\text{sek}}^- \text{R}_{\text{prim}}$

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

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

Tabelle 1 demonstriert die verschiedenen Modi.

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

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

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 Paketooption `iupac = strict` verwenden. `\DeclareChemIUPAC` wird jedoch die Definition eines bestehenden Nomenklatur-Befehls *nicht* überschreiben, sondern eine Warnung/einen Fehler melden (abhängig von der Paketooption `strict`).

```
1 % uses the 'upgreek' package
2 \DeclareChemIUPAC\hapto{\$upeta\$}
3 Ferrocen = \iupac{Bis(\hapto^5-cyclo\|penta\|dienyl)eisen}
```

Ferrocen = Bis(η^5 -cyclopentadienyl)eisen

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

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

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 `abbremph` abhängt:

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

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	<code>\Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]\</code>	<i>K</i> _S <i>K</i> _B p <i>K</i> _S p <i>K</i> _{S1} p <i>K</i> _B p <i>K</i> _{B1}
2	<code>\chemsetup[option]{german=false}</code>	<i>K</i> _A <i>K</i> _B p <i>K</i> _A p <i>K</i> _{A1} p <i>K</i> _B p <i>K</i> _{B1}
3	<code>\Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]</code>	

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

The operator p [...] shall be printed in Roman type.

IUPAC Green Book [Coh+08, p. 103]

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

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

```

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

pH, pKs
pH, pKs

pH, pKs


```

10. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen

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

10.1. Ionenladungen

Einfache Verwendung von (realen) Ladungen:

`\pch[<number>]` positive Ladung (**p**lus + **ch**arge)

`\mch[<number>]` negative Ladung (**m**inus + **ch**arge)

```

1 \pch, Na\pch, Ca\pch[2]\      +, Na+, Ca2+
2 \mch, F\mch, S\mch[2]        −, F−, S2−

```

Das gleiche für formale Ladungen:

`\fpch[<number>]` positive Ladung

`\fmch[<number>]` negative Ladung

```

1 \fpch\ \fmch\ \fpch[3] \fmch[3]  ⊕ ⊖ 3⊕ 3⊖

```

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

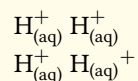
charges **append** = true/false Wenn auf true gesetzt, wird die Ladung mit einer leeren Gruppe angehängt.
Default = false

Das hat folgende Auswirkungen:

```

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

```

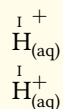


In den meisten Fällen wird das Verhalten unerwünscht sein, es kann jedoch Gelegenheiten geben, wo es nützlich sein kann:

```

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

```



10.2. Oxidationszahlen

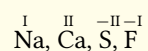
Eingabe von Oxidationszahlen::

`\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}
Na+I, Ca+II, S-II±0, F20
```

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

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

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

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

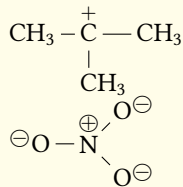
`\fscrip` \oplus

`\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>}`

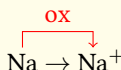
`\OX` setzt <atom> in einen Knoten (eine „Node“) mit dem Namen <name>. Wenn Sie zwei `\OX` verwendet haben, dann können sie mit `\redox` verbunden werden. Die Namen der zu verbindenden Knoten werden in runde Klammern geschrieben. Da `\redox` ein Tikzpicture mit den Optionen `remember picture, overlay`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

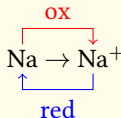
Diese Linie kann mit `TikZ`-Keys in `[<tikz>]` angepasst werden:

```
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}
```

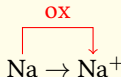


Die Voreinstellung der vertikalen Linien kann mit

`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}
```

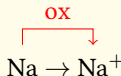


Zusätzlich erlaubt die Option

`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}
```

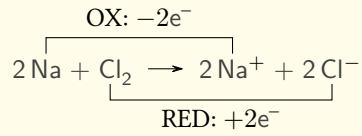


Beispiele:

```

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: $+ 2\el$}

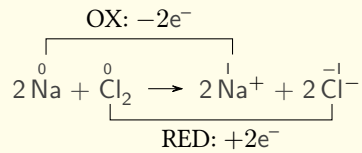
```



```

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: $+ 2\el$}

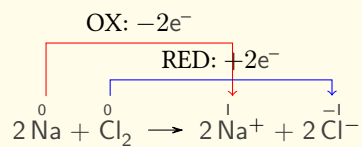
```



```

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: $+ 2\el$}

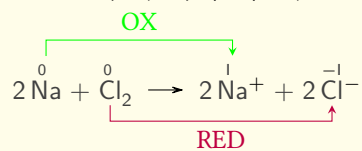
```



```

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

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

Die Befehle können mit mehreren Optionen angepasst werden:

-none- `exponent = <anything>`

-none- `delta = <anything>/false`

-none- `subscript = left/right`

-none- `unit = <unit>`

Die Voreinstellung hängt vom jeweiligen Befehl ab:

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

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

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

13.1.1. Neue Größen definieren

Mit dem Befehl

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

können neue Größen definiert werden.

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

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

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

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

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

`exponent` = <anything>

`delta` = <anything>/false

-none- `subscript-left` = true/false

`subscript` = <anything>

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}{\kilo\joule\per\mole}% molar
2 \RenewChemState[exponent=]{Enthalpy}{H}{\kilo\joule}% 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): δ = 1.59...

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

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

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

Alle Argumente sind optional! Ohne 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): δ

Auch mit Einheit:

```
1 \NMR(4e8,\hertz)
```

¹H-NMR (4×10^8 Hz): δ

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

```
1 \sisetup{exponent-product=\cdot}\NMR(4e8,\hertz)
```

¹H-NMR ($4 \cdot 10^8$ Hz): δ

Mit dem dritten Befehl schließlich kann das Lösungsmittel angegeben werden:

```
1 \NMR[CDCl3]
```

¹H-NMR (CDCl₃): δ

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): δ ¹³C-NMR (100 MHz)
¹⁹F-NMR (CFCl₃) ¹⁹F-NMR (285 MHz, CFCl₃)
¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 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 CHEM-FORMULA.

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}
```

$$4 \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl} + \text{Pb}/\text{Na} \longrightarrow \underset{\substack{\text{former antiknock} \\ \text{additive}}}{\text{Pb}(\text{C}_2\text{H}_5)_4} + \text{NaCl}$$

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}
```

$$4 \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl} + \text{Pb}/\text{Na} \longrightarrow \underset{\substack{\text{former} \\ \text{antiknock} \\ \text{additive}}}{\text{Pb}(\text{C}_2\text{H}_5)_4} + \text{NaCl}$$

$$4 \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl} + \text{Pb}/\text{Na} \longrightarrow \underset{\substack{\text{former antiknock} \\ \text{additive}}}{\text{Pb}(\text{C}_2\text{H}_5)_4} + \text{NaCl}$$

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 gesternt 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>	<p>Reaktion mit Zähler:</p> $A \rightarrow B \quad \{1\}$
---	---

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

```

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

```

mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler:

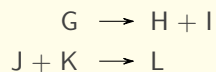
$A \rightarrow B + C$	$\{2\}$
$D + E \rightarrow F$	$\{3\}$

```

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

```

mehrere ausgerichtete Reaktionen ohne Zähler:



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

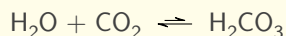
`\renewtagform{<tagname>}[<format>]{<right delim>}{<left delim>}`³².

³² Durch das `mathtools` Paket zur Verfügung gestellt.

```

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

```



[R 4]

16.2. Eigene Reaktionen

Sie können mit dem Befehl

```
\DeclareChemReaction[<keyval>]{<name>}{<math name>}
```

weitere Reaktionsumgebungen erstellen.

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

Der Befehl hat zwei Optionen.

-none- `star = true/false`

-none- `arg = true/false`

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

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

Die vordefinierten Umgebungen wurden durch

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

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

definiert.

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

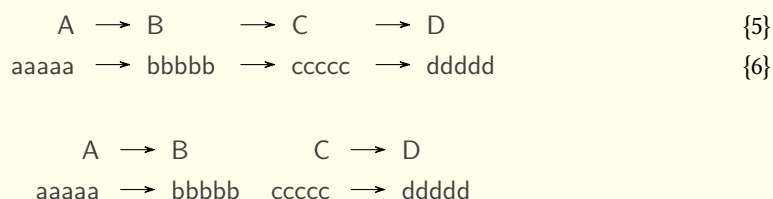
```
1 \DeclareChemReaction[star,arg]{reactionsat}{alignat}
```

Damit ist die reactionsat-Umgebung definiert.

```

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

```



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.

`\listoreactions`

```
1 \listoreactions
```

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 Vollständigkeit halber: NaCl\aq.
```

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

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{}}
```

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

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

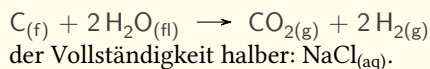
phases `space` = <dim> Ändern des Zwischenraums zwischen Formel und dem Phasen-Anzeiger bei `pos`
= side. Eine TeX-Dimension. Default = .1333em

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>}`

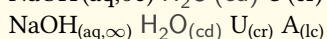
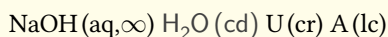
`\phase{<phase>}` Wenn Sie die Phase nur ein- oder zweimal verwenden müssen.

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

```



18. Newman-Projektionen

`CHEMMACROS` stellt den Befehl

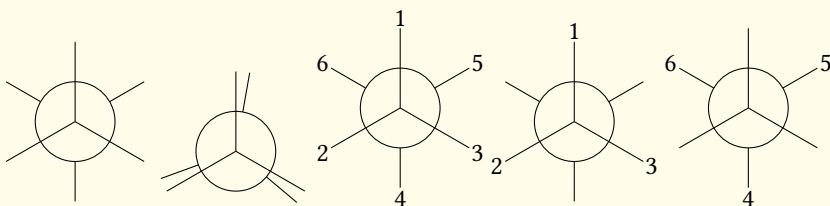
`\newman[<keyval>](<angle>){<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}`

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}

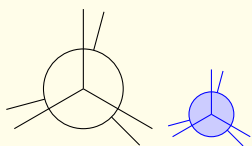
```



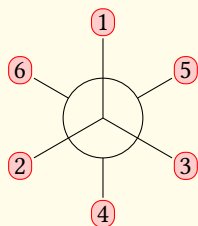
Es gibt einige Optionen, um den Befehl anzupassen:

- 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.

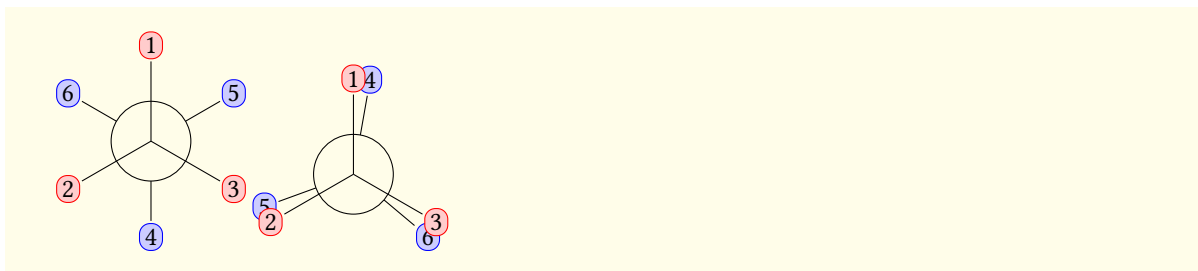
```
1 \chemsetup[newman]{angle=45} \newman{}
2 \newman[scale=.75,ring={draw=blue,fill=blue!20}]{}
```



```
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).

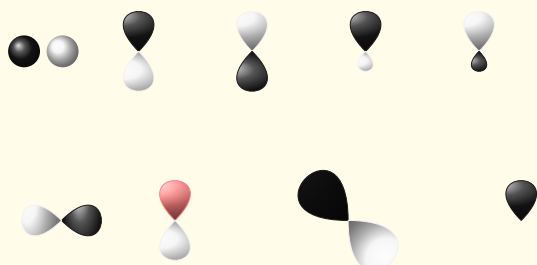
`orbital` `angle` = <angle> Rotiert die Orbitale mit einem p-Anteil gegen den Uhrzeigersinn (alle Typen außer s).

`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:

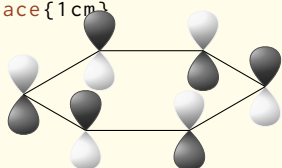
orbital **overlay** = true/false Das Orbital „braucht keinen Platz“; es wird mit dem *TikZ*-Key **overlay** gezeichnet.

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}

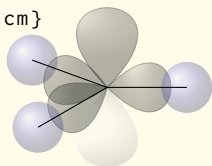
```



```

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>	option	<u>true/false</u>	false	Seite 5
<code>synchronize</code>	option	<u>true/false</u>	false	Seite 6
<code>version</code>	option	1/2/bundle	bundle	Seite 6
<code>xspace</code>	option	<u>true/false</u>	true	Seite 6
<code>\ba, \Nu:</code>				
<code>elpair</code>	particle	<u>dots/dash/false</u>	false	Seite 8
<code>\pch, \mch, \fpch, \fmch:</code>				
<code>append</code>	charges	<u>true/false</u>	false	Seite 14
<code>acid/base:</code>				
<code>p-style</code>	acid-base	slanted/italics/upright	upright	Seite 13
<code>\ox:</code>				
<code>parse</code>	ox	<u>true/false</u>	true	Seite 15
<code>roman</code>	ox	<u>true/false</u>	true	Seite 15
<code>pos</code>	ox	top/super/side	top	Seite 15
<code>explicit-sign</code>	ox	<u>true/false</u>	false	Seite 15
<code>decimal-marker</code>	ox	comma/point	point	Seite 16
<code>\OX, \redox:</code>				
<code>dist</code>	redox	<dim>	.6em	Seite 19
<code>sep</code>	redox	<dim>	.2em	Seite 19
<code>\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:</code>				
<code>exponent</code>		<anything>	<code>\standardstate</code>	Seite 21
<code>delta</code>		<anything>/false		Seite 21
<code>subscript</code>		left/right		Seite 21
<code>unit</code>		<unit>		Seite 21
<code>\DeclareChemState, \RenewChemState:</code>				
<code>exponent</code>		<anything>	<code>\standardstate</code>	Seite 21
<code>delta</code>		<anything>/false		Seite 21
<code>subscript</code>		<anything>		Seite 21
<code>subscript-left</code>		<u>true/false</u>		Seite 22
<code>\State:</code>				
<code>exponent</code>	state	<anything>	<code>\standardstate</code>	Seite 23
<code>delta</code>	state	<anything>/false		Seite 23
<code>subscript-left</code>	state	<u>true/false</u>		Seite 23
<code>\NMR:</code>				
<code>unit</code>	nmr	<unit>	<code>\mega\hertz</code>	Seite 24
<code>nucleus</code>	nmr	{<num>, <atom symbol>}	{1,H}	Seite 24
<code>\DeclareChemReaction:</code>				
<code>star</code>		<u>true/false</u>	false	Seite 27
<code>arg</code>		<u>true/false</u>	false	Seite 27
<code>list-name</code>	reaction	<anything>	List of reactions	Seite 28
<code>list-entry</code>	reaction	<anything>	Reaction	Seite 28
<code>\mhName:</code>				
<code>align</code>	mhName	<alignment>	<code>\centering</code>	Seite 25
<code>format</code>	mhName	<commands>		Seite 25
<code>fontsize</code>	mhName	<fontsize>	<code>\tiny</code>	Seite 25
<code>width</code>	mhName	<dim>		Seite 25
<code>phases:</code>				
<code>pos</code>	phases	side/sub	side	Seite 29
<code>space</code>	phases	<dim>	.1333em	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
\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_2O
2	<code>\ch{Sb2O3}</code>	Sb_2O_3
3	<code>\ch{H+}</code>	H^+
4	<code>\ch{CrO4^2-}</code>	CrO_4^{2-}
5	<code>\ch{AgCl2-}</code>	AgCl_2^-
6	<code>\ch{[AgCl2]-}</code>	$[\text{AgCl}_2]^-$
7	<code>\ch{Y^{99+}}</code>	Y^{99+}
8	<code>\ch{Y^{99+}}</code>	Y^{99+}
9	<code>\ch{H2_{(aq)}}</code>	$\text{H}_{2(\text{aq})}$
10	<code>\ch{NO3-}</code>	NO_3^-
11	<code>\ch{(NH4)2S}</code>	$(\text{NH}_4)_2\text{S}$
12	<code>\ch{^{227}_{90}Th+}</code>	$^{227}_{90}\text{Th}^+$
13	<code>\$V_{\ch{H2O}}\$</code>	$V_{\text{H}_2\text{O}}$
14	<code>\ch{Ce^{IV}}</code>	Ce^{IV}
15	<code>\ch{KCr(SO4)2 * 12 H2O}</code>	$\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$

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

`\ch{type1 type2 type3 type4}`

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

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

1	<code>\ch{A + B ->[a] C}</code>	$A + B \xrightarrow{a} C$
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>	$2\text{H}_2\text{O}$
2	<code>\ch{2 H2O}</code>	$2 \text{H}_2\text{O}$

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

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

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

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

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}
```

$$\begin{array}{r} 2 \\ 12 \\ 3.5 \\ 5.75 \\ \frac{3}{2} \\ 1\frac{1}{2} \end{array}$$

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}
```

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

 $3/2 \quad 1^{1/2}$

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

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

24. Summenformeln

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

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

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>	$A_2B_3 \text{ } A_2\textcolor{red}{B}_3$
---	--	---

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

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

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

```
1 \ch{SO4^2-} \ch{Ca^2+ SO4^2-} \\\           SO42- Ca2+SO42-
```

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⊕ + OH⊖ ⇌ H2O
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}

3B 3B 3B
23123B 23123B 23123B
12323B 12323B 12323B

```

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

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}
```

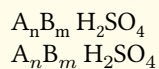
H₂SO₄ Na₃PO₄
 H₂SO₄ Na₃PO₄
 H₂SO₄ Na₃PO₄

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}

```

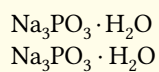


Mit der Option `adduct-space` kann der Leerraum links und rechts des Addukt-Zeichens festgesetzt werden.

```

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

```

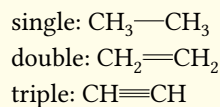


Die Länge der Bindungen ändern:

```

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}` $2Na + Cl_2$

`\ch{ v }` ↓ Zeichen für eine Fällung/Niederschlag: `\ch{BaSO4 v}` $BaSO_4\downarrow$

`\ch{ ^ }` ↑ Zeichen für entweichendes Gas: `\ch{H2 ^}` $H_2\uparrow$

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

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

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

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

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

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

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{ $<escaped math>$ }`

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

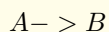
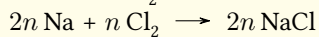
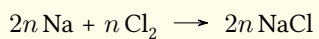
Der Leerraum, der nach dem geschützten Mathe-Input ausgegeben wird, kann angepasst werden.

`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

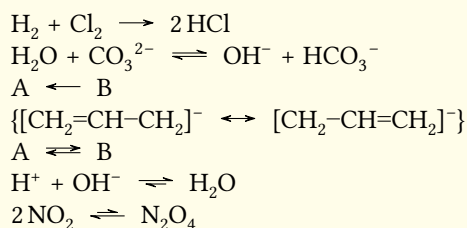
`\ch{ <o> }` ⇌ Isolobal-Pfeil

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}

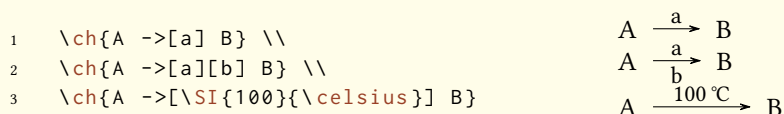
```



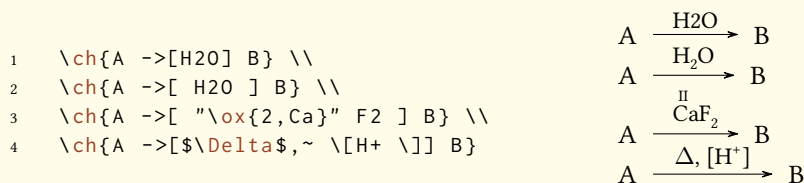
27.2. Beschriftung

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.

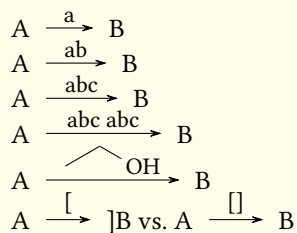


Mit den Leerzeichen verarbeitet `CHEMFORMULA` den Teil zwischen den Klammern als normalen Input. Die Pfeile lesen ihre Argumente erst *nach* der Verarbeitung. Wie Sie sehen können „wachsen“ die Pfeile mit der Länge der Beschriftungen. Konstant bleibt der überstehende Teil. Im letzten Beispiel können 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.

```

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

```



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 \rightleftharpoons Pfeil:

```

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

```

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

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 Pfeilanzfang.

(cf_arrow_end) Das Pfeilende.

(cf_arrow_mid) Die Pfeilmitte.

(cf_arrow_mid_start) Der Anfang des kürzeren Pfeils in Typen wie \rightleftharpoons .

(cf_arrow_mid_end) Das Ende des kürzeren Pfeils in Typen wie \rightleftharpoons .

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{=}{\draw ([yshift=.2ex]cf_arrow_mid_start) -- ([yshift=.2ex]cf_arrow_mid_end);
4 \draw ([yshift=-.2ex]cf_arrow_mid_start) -- ([yshift=-.2ex]cf_arrow_mid_end);
5 }
6 \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 )}
```

$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
ethanol

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

```
1 \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+ )}
```

H_2O	H_2O	H_2O	H_2O	H_3O^+
water	water	$2n-1$	H_2O	oxonium

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

```

1 \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

```

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

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

```

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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
```

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

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

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

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

Wenn Sie Xe_{La}TeX oder Lua_{La}TeX verwenden und das Paket fontspec³⁵ geladen haben, können Sie die Schrift von CHEMFORMULA auch damit ändern:

font-spec = {} oder mit Optionen

font-spec = {[<options>]}

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

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

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

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

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

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

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

30. Verwendung in Mathematik-Umgebungen

Der Befehl \ch kann in Mathematikumgebungen eingesetzt werden. Er erkennt \ and & 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{\texttt{\textbackslash ch}}{
3 \quad \quad \text{H2O} \& \text{>[a]} \text{H2SO4} \text{\textbackslash\textbackslash}
4 \quad \quad \text{Cl2} \& \text{>[x][y]} \text{CH4}
5 \quad }
6 \end{align}
7 \begin{align*}
8 \quad \text{\texttt{\textbackslash ch}}{
9 \quad \quad \text{RNO2} \& \text{<=>[ + e- ]} \text{RNO2}^{\{-.\}} \text{\textbackslash\textbackslash}
10 \quad \quad \text{RNO2}^{\{-.\}} \& \text{<=>[ + e- ]} \text{RNO2}^{2-}
11 \quad }
12 \end{align*}

```

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

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

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

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

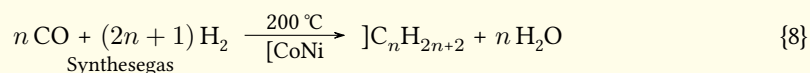
31. Weitere Beispiele

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} + $n$ H2O
3 \end{reaction}

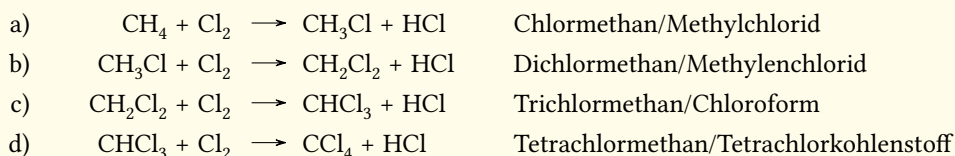
```



```

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

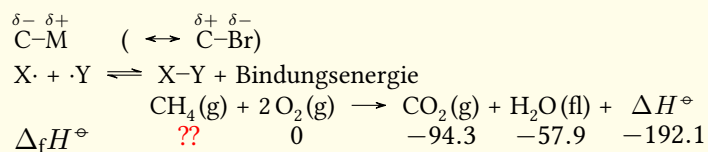
```



```

1 \chemsetup[ox]{parse=false}\ch{"\ox{\delm,C}" -{\ "ox{\delp,M}" \quad ( <-> "\ox{\delp,C}" -{\ "ox{\delm,Br}" }} \text{\textbackslash\textbackslash}
2 \ch[adduct-space=0pt]{X. + .Y <=> X-Y + Bindungsenergie} \text{\textbackslash\textbackslash}
3 \ch[name-format=\normalsize]{!(\State{H}{f}\quad)}!(\textcolor{red}{???})( \text{CH4}\gas{} ) + !(\num{0})( \text{2 O2}\gas{} ) -> !(\num{-94.3})( \text{CO2}\gas{} ) + !(\num{-57.9})( \text{H2O}\lqd{} ) + !(\num{-192.1})( "\State{H}" )}

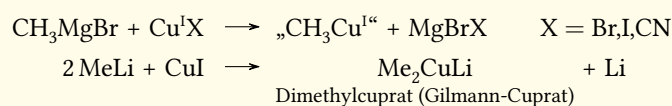
```



```

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

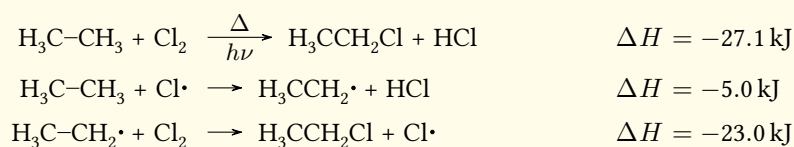
```



```

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

```



Teil IV.

ghsystem

32. Setup

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

```

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 diese Option verwenden:

```
hide = true/false
```

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

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

```

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

```

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. `pdfTeX` im `DVI`-Modus verlangt eps-Dateien, während `pdfTeX` im `PDF`-Modus, `XyTeX` und `LuaTeX` 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 `pdfTeX` im `DVI`-Modus das nicht kann.

Um das Problem zu lösen, testet `GHSYSTEM`, welche Engine verwendet wird und falls es `pdfTeX` 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 `booktabs`³⁹ 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 nicht essen, trinken oder rauchen.
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
acid-base	
<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
charges	
<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	\ghs*	56
Einheiten	12 f.	\ghslistall	62
\El	7	\ghspic	59
\el	7	GHSYSTEM	55–72
elpair	8	Aufruf	56
\Enthalpy	21, 35	kombinierte Sätze	59
\Entropy	21, 35	Platzhalter	57
environ	3	Sätze mit Lücken	58
explicit-sign	15 f.	\Gibbs	21, 35
exponent	21 ff.	graphicx	3
exposure	57		
EZ	5	H	
F		half	32
F-temperature	58	\hertz	35
\fdelm	17	hide	56
\fdelp	17	\Hp1	7
fill-in	57	\Ht0	7
Fischer	10	\Hyd	7
\fmch	14, 35	I	
\fminus	7	ifpdf	3
font-family	52	includegraphics	60
font-series	52	\insitu	12
font-shape	52	Installation	4
font-spec	53	Ionenladungen	14 f.
fontsize	25	\iupac	9 f.
fontspec	53	iupac	5, 9, 11
format	25, 52	IUPAC-Namen	8–12
Format und Schrift	51 ff.	Cahn-Ingold-Prelog	10
\fpch	14, 35	cis/trans	10
\fplus	5, 7	eigene	11
frac-style	38 f.	Fischer	10
\fscrm	17	ortho/meta/para	10
\fscrp	17	tert	10
\fsscrm	17	vordefiniert	10
\fsscrp	17	zusammen/entgegen	10
G		IUPAC Names	
\gas	29	syn/anti	10
Gefahren- und Sicherheitssätze	56–59	K	
german	5, 13, 28 f., 62	\Ka	13
Geschützter Input	45 f.	\Kb	13
math	45	kg-mass	58
text	45	\Kw	13
\ghs	56	L	
ghs	5	\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
\mech	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	<code>syntax</code>	50
<code>stoich-space</code>	38 f.	Thermodynamik	21 ff.
<code>strict</code>	5, 8, 11, 30	TikZ	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
		<code>xspace</code>	3
T			
<code>table-caption</code>	62	Z	
<code>table-caption-short</code>	62	<code>\Z</code>	10
<code>table-foot-rule</code>	63	zusammen/entgegen	10
<code>table-head-number</code>	62		
<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		