

chemmacros v1.0

2011/05/15

Clemens NIEDERBERGER

<http://www.mychemistry.eu/>
contact@mychemistry.eu

‘chemmacros’ ist eine Sammlung von Hilfs-Makros für Chemiker. Sie sind dazu gedacht, das Schreiben von chemischen Dokumenten bequemer zu machen.

Inhaltsverzeichnis

1	Lizenz, Voraussetzungen	2
2	Teilchen, Ionen und ein Symbol	3
3	Stereo-Deskriptoren, Nomenklatur	4
4	Oxidationszahlen und (echte) Ladungen	5
4.1	Ionenladungen	5
4.2	Oxidationszahlen	6
4.3	Partialladungen und ähnliches	6
5	Redoxreaktionen	7
6	(Standard) Zustand, Thermodynamik	9
6.1	Mit ‘siunitx’	9
6.2	State	10
7	Umgebungen für ‘mhchem’	11
8	Newman-Projektionen	13
9	p-Orbitale	14
10	Paket-Optionen	16
11	Liste der Befehle	17

1 Lizenz, Voraussetzungen

chemmacros v1.0 steht unter der L^AT_EX Project Public License Version 1.3 oder später. (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>)

chemmacros ruft intern die Pakete ‘xkeyval’¹, ‘amsmath’² und ‘tikz’ (Ti $\kern-.1em\mathit{k}$ Z = ‘pgf’³) auf. Sind sie nicht vorhanden, wird eine Fehlermeldung ausgegeben.

Manche Befehle haben allerdings unterschiedliche Definitionen, je nachdem ob andere Pakete vom Benutzer *vorher* geladen wurden oder nicht. Manche Befehle werden auch nur definiert, wenn ein bestimmtes Paket geladen ist. Das betrifft die Pakete ‘mhchem’⁴,

¹<http://www.ctan.org/pkg/xkeyval>

²<http://www.ctan.org/pkg/amsmath>

³<http://www.ctan.org/pkg/pgf>

⁴<http://www.ctan.org/pkg/mhchem>

‘siunitx’⁵ und ‘chemstyle’⁶ sowie die Befehle aus Abschnitt 2, `\ox` (Abschnitt 4.2), die Befehle aus Abschnitt 6 und die Umgebungen aus Abschnitt 7.

Für die Paketoption `xspace` (Abschnitt 10) wird das Paket ‘xspace’⁷ benötigt.

Wenn der Benutzer das Paket ‘mhchem’ *vor* chemmacros lädt, so werden außerdem die Pakete ‘mathtools’⁸ und ‘environ’⁹ benötigt.

Für den `\redox`-Befehl (Abschnitt 5) und den `\newman`-Befehl (Abschnitt 8) muss die Tikzlibrary ‘calc’ eingebunden werden.

Volle Funktionalität steht also mit folgender oder ähnlicher Präambel bereit:

```
1 \usepackage{siunitx,chemstyle}
2 \usepackage[version=3,arrows=pgf]{mhchem}
3 \usepackage[xspace=true]{chemmacros}
4 \usetikzlibrary{calc}
```

2 Teilchen, Ionen und ein Symbol

Eine Reihe einfacher Makros, um häufig gebrauchte Teilchen sowie ein Symbol darzustellen:

- `\Hp1` H^{\oplus} (Proton)
- `\Hyd` OH^{\ominus} (Hydroxid)
- `\Ht0` $\text{H}_3\text{O}^{\oplus}$ (Oxonium)
- `\e1` e^{\ominus} (Elektron)
- `\prt` p^{\oplus} (Proton)
- `\ntr` n^0 (Neutron)
- `\transitionstatesymbol` ≠ Übergangszustandssymbol (verwendet *TikZ*)

⁵<http://www.ctan.org/pkg/siunitx>

⁶<http://www.ctan.org/pkg/chemstyle>

⁷<http://www.ctan.org/pkg/xspace>

⁸<http://www.ctan.org/pkg/mathtools>

⁹<http://www.ctan.org/pkg/environ>

Diese Befehle sind sowohl im Text- wie im Mathematikmodus einsetzbar. Je nachdem, ob ‘mhchem’ geladen wurde oder nicht, werden die ersten drei Teilchen mit dem `\cf{}`-Befehl von ‘mhchem’ oder mit `\ensuremath{\text{}}` geschrieben.

3 Stereo-Deskriptoren, Nomenklatur

Die folgenden Makros sollen das Schreiben von IUPAC-Namen etwas erleichtern:

- Cahn-Ingold-Prelog:

- `\Rcip` (*R*)
- `\Scip` (*S*)
- `\cip{<conf>}` z. B.: `\cip{R,S}` (*R,S*)

- Fischer:

- `\Dfi` *D*
- `\Lfi` *L*

- cis/trans u. zusammen/entgegen:

- `\Z` (*Z*)
- `\E` (*E*)
- `\cis` *cis*
- `\trans` *trans*

- ortho/meta/para:

- `\ortho` *o*
- `\meta` *m*
- `\para` *p*

Anzeigen der absoluten Konfiguration (verwendet `TikZ`):

- `\Rconf[<letter>]` `\Rconf:` \textcircled{R} `\Rconf[]:` $\textcircled{}$

- `\Sconf[<letter>]` `\Sconf:` \textcircled{S} `\Sconf[]:` $\textcircled{}$

```

1 \Dfi-Weinsäure = \cip{2S,3S}-Weinsäure, \Dfi-($-$)-
   Threose = \cip{2S,3R}-($-$)-2,3,4-Trihydroxybutanal\
2 \cis-2-Buten = \Z-2-Buten, \cip{2E,4Z}-Hexadien\
3 \meta-Xylol = 1,3-Dimethylbenzol
4
5 % mit 'bpchem'-Befehl \IUPAC:
6 \IUPAC{\Dfi-Wein\|säure} = \IUPAC{\cip{2S,3S}-Wein\|säure
   }, \IUPAC{\Dfi-($-$)-Threose} = \IUPAC{\cip{2S,3R
   }-($-$)-2,3,4-Tri\|hydroxy\|butanal}

```

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

D-Weinsäure = (2*S*,3*S*)-Weinsäure, D-(*-*)-Threose = (2*S*,3*R*)-(*-*)-2,3,4-Trihydroxybutanal

Im letzten Beispiel wurde der Befehl `\IUPAC` des Pakets 'bpchem'¹⁰ eingesetzt.

4 Oxidationszahlen und (echte) Ladungen

4.1 Ionenladungen

Einfaches Darstellen von Ladungen:

- `\pch[<number>]` positive Ladung (**plus + charge**), `\pch`, `Na\pch`, `Ca\pch[2]` \oplus , Na^\oplus , $\text{Ca}^{2\oplus}$
- `\mch[<number>]` negative Ladung (**minus + charge**), `\mch`, `F\mch`, `S\mch[2]` \ominus , F^\ominus , $\text{S}^{2\ominus}$

¹⁰<http://www.ctan.org/pkg/bpchem>

4.2 Oxidationszahlen

Setzen von Oxidationszahlen:

- `\ox{<number>,<atom>}` setzt <number> über <atom>; `\ox{+1,Na}`, `\ox{+I,Na}`,
`\ox{-2,S}`, `\ox{-II,S}` $\overset{+1}{\text{Na}}$, $\overset{+I}{\text{Na}}$, $\overset{-2}{\text{S}}$, $\overset{-II}{\text{S}}$

Wenn das Paket ‘mhchem’ geladen wurde, wird <atom> innerhalb des `\cf`-Befehls gesetzt: `\ox{+II,Ca}\ox{-I,F2}` $\overset{+II}{\text{Ca}}\overset{-I}{\text{F}_2}$. Ohne ‘mhchem’ funktioniert das so nicht ($\overset{+II}{\text{Ca}}\overset{-I}{\text{F}2}$) und die konventionelle Methode muss verwendet werden: `\ox{+II,Ca}\ox{-I,F$_2$}` $\overset{+II}{\text{Ca}}\overset{-I}{\text{CaF}_2}$.

4.3 Partialladungen und ähnliches

Vielleicht selten gebraucht, nichtsdestoweniger nützlich:

- `\delp` δ_{\oplus} (**d**elta + **p**lus)
- `\delm` δ_{\ominus} (**d**elta + **m**inus)

Diese Makros können zum Beispiel mit dem `\ox`-Befehl eingesetzt werden oder zusammen mit dem Paket ‘chemfig’¹¹:

```
1 \ox{\delp,H}\ox{\delm,Cl}\par
2 \chemfig{\chemabove[3pt]{\lewis{246,Br}}{\delm}-\chemabove[3pt]{H}{\delp}}
```



Auch die beiden folgenden Makros sind v.a. beim Einsatz mit ‘chemfig’ nützlich.

- `\scrip` \oplus (**s**criptstyle + **p**lus)
- `\scrm` \ominus (**s**criptstyle + **m**inus)

Zum Beispiel:

¹¹<http://www.ctan.org/pkg/chemfig>

```

1 {\setatomsep{1.8em}\chemfig{CH_3-CH_2-\chemabove{\lewis
  {026,0}}{\hspace{5mm}\scrm}}}

```



5 Redoxreaktionen

chemmacros stellt zwei Befehle zur Verfügung¹², mit denen die Elektronenübertragungen bei Redoxreaktionen angezeigt werden können. Beide Befehle verwenden ‘TikZ’, der zweite benötigt außerdem die Tikzlibrary ‘calc’, **die daher in der Präambel geladen werden muss**.

```

1 \OX{<name>,<atom>}
2 \redox(<name1>,<name2>)[<tikz>][<dim>]{<text>}

```

Mit \OX wird ein <atom> in eine Node geschrieben, die den Namen <name> bekommt. Hat man zwei \OX gesetzt, können Sie mit \redox mit einer Linie verbunden werden. Dazu werden die Namen der zu verbindenden Nodes in die runden Klammern geschrieben. Da \redox ein Tikzpicture mit den Optionen remember picture,overlay zeichnet, muss das Dokument *mindestens zweimal kompiliert* werden.

```

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

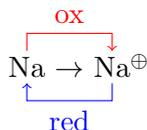
```

Die Linie kann via <tikz> mit TikZ-Keys angepasst werden:

```

1 \begin{center}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red
  ]{ox}\redox(a,b)[<-,blue][-.6em]{red}
3 \end{center}

```



Mit <dim> kann die Länge der vertikalen Linie festgelegt werden. Diese ist per Default .6em lang. Gibt man hier einen negativen Wert an, wird die Linie *unterhalb* des Textes geschrieben.

¹²Dank an Peter Cao, der das Feature vorschlug.

```

1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch
2 \redox(a,b)[->]{ox}
3 \redox(a,b)[<-][-.6em]{red}

```

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

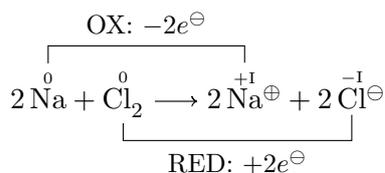
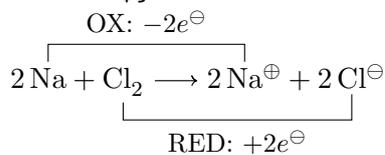
↑ OX ↓
↑ red ↓

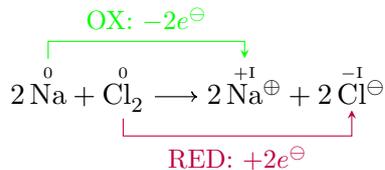
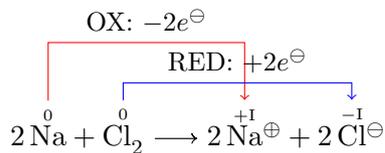
Die Befehle funktionieren auch mit dem ‘mhchem’-Befehl `\ce` und in Verbindung mit dem `\ox`-Befehl (Abschnitt 4.2).

```

1 \ce{ 2 \OX{o1,Na} + \OX{r1,Cl2} -> 2 \OX{o2,Na}\pch + 2 \
  \OX{r2,Cl}\mch }
2 \redox(o1,o2){\small OX: $- 2\el$}
3 \redox(r1,r2)[][-.6em]{\small RED: $+ 2\el$}
4
5 \vskip2cm
6 \ce{ 2 \OX{o1,\ox{0,Na}} + \OX{r1,\ox{0,Cl2}} -> 2 \OX{o
  2,\ox{+I,Na}}\pch + 2 \OX{r2,\ox{-I,Cl}}\mch }
7 \redox(o1,o2){\small OX: $- 2\el$}
8 \redox(r1,r2)[][-.6em]{\small RED: $+ 2\el$}
9
10 \vskip3cm
11 \ce{ 2 \OX{o1,\ox{0,Na}} + \OX{r1,\ox{0,Cl2}} -> 2 \OX{o
  2,\ox{+I,Na}}\pch + 2 \OX{r2,\ox{-I,Cl}}\mch }
12 \redox(o1,o2)[draw=red,->][2em]{\small OX: $- 2\el$}
13 \redox(r1,r2)[draw=blue,->]{\small RED: $+ 2\el$}
14
15 \vskip1cm
16 \ce{ 2 \OX{o1,\ox{0,Na}} + \OX{r1,\ox{0,Cl2}} -> 2 \OX{o
  2,\ox{+I,Na}}\pch + 2 \OX{r2,\ox{-I,Cl}}\mch }
17 \redox(o1,o2)[green,-stealth]{\small OX: $- 2\el$}
18 \redox(r1,r2)[purple,-stealth][-.6em]{\small RED: $+ 2\el
  $}

```





6 (Standard) Zustand, Thermodynamik

6.1 Mit 'siunitx'

Wenn das Paket 'siunitx' geladen ist, stehen die folgenden Befehle zur Verfügung:

- `\Enthalpy[<kind>,<exponent>,<unit>]{<value>}`
- `\Entropy[<kind>,<exponent>,<unit>]{<value>}`
- `\Gibbs[<kind>,<exponent>,<unit>]{<value>}`

Ihr Einsatz ist eigentlich selbsterklärend: mit `\Enthalpy{123}` wird $\Delta H^{\ominus} = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$ gesetzt. Möchte man genauer spezifizieren, wofür die Enthalpie gelten soll, kann man das über das erste optionale Argument machen:

`\Enthalpy[r]{123}` $\Delta_r H^{\ominus} = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Das Standardzustandssymbol kann durch das zweite optionale Argument ersetzt werden...

`\Enthalpy[,0]{123}` $\Delta H^0 = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$

... und wird sowieso nur dann als Standardzustand gesetzt, wenn das Paket 'chemstyle' geladen wurde, siehe Abschnitt 6.2.

Mit dem dritten optionalen Argument schließlich kann die Einheit geändert werden:

`\Enthalpy[,kcal/mol]{123}` $\Delta H^{\ominus} = 123 \text{ kcal/mol}$

Die Einheit wird jeweils entsprechend der Regeln von 'siunitx' gesetzt und hängt von den dort gewählten Optionen ab.

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

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

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

Ganz entsprechendes gilt für

```
1 \Entropy{12.3}, \Gibbs{-12.3}.
```

$$S^\ominus = 12.3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}, \Delta G^\ominus = -12.3 \text{ kJ mol}^{-1}.$$

Mit dem Befehl `\setnewstate[<standard exponent>,<Delta symbol>]{<name>}{<symbol>}{<unit>}` können Sie auch neue entsprechende Befehle festlegen:

```
1 \setnewstate{Helmholtz}{A}{\kilo\joule\per\mole}
2 \setnewstate{ElPot}{E}{Volt}
3 \Helmholtz{123.4} \ElPot{-1.1}
```

$$\Delta A^\ominus = 123.4 \text{ kJ mol}^{-1} \quad \Delta E^\ominus = -1.1 \text{ Volt}$$

Tatsächlich wurden

```
1 \Enthalpy, \Entropy, \Gibbs
```

über

```
1 \setnewstate{Enthalpy}{H}{\kilo\joule\per\mole}
2 \setnewstate[, ]{Entropy}{S}{\joule\per\kelvin\per\mole}
3 \setnewstate{Gibbs}{G}{\kilo\joule\per\mole}
```

definiert.

Sie können mit `\setnewstate` auch die vordefinierten Befehle überschreiben:

```
1 \setnewstate{Enthalpy}{X}{\joule\per\mole}
2 \Enthalpy[f]{12.5}
```

$$\Delta_f X^\ominus = 12.5 \text{ J mol}^{-1}$$

6.2 State

Die in Abschnitt 6.1 vorgestellten Befehle verwenden alle den auch ohne ‘siunitx’ definierten Befehl

```
1 \State [<exponent>,<Delta symbol>]{<symbol>}{<kind>}
```

Mit diesem Befehl können die thermodynamischen Größen auch ohne Zahl und Einheit angegeben werden.

```
1 \State{G}{f}, \State[ ]{E}{}, \State[\SI{1000}{\celsius}]{H}{f}
```

$\Delta_f G^\ominus$, ΔE , $\Delta_f H^{1000^\circ\text{C}}$

Das Standardzustandssymbol wird nur angezeigt, wenn das Paket ‘chemstyle’ geladen wurde und mit dem Befehl `\standardstate` zur Verfügung steht. `\State{A}{b}`: Wenn ‘chemstyle’ geladen wurde $\Delta_b A^\ominus$, sonst $\Delta_b A$.

7 Umgebungen für ‘mhchem’

Falls das Paket ‘mhchem’ geladen wurde, stehen die Umgebungen

```
1 \begin{reaction}
2   <mhchem code>
3 \end{reaction}
4 \begin{reactions}
5   <mhchem code>
6 \end{reactions}
```

sowie die Varianten

```
1 \begin{reaction*}
2   <mhchem code>
3 \end{reaction*}
4 \begin{reactions*}
5   <mhchem code>
6 \end{reactions*}
```

zur Verfügung. Die Umgebung `reaction/reaction*` verwendet die Mathematik-Umgebung `equation/equation*`, die Umgebung `reactions/reactions*` die Mathematik-Umgebung `align/align*`, um die Reaktionen zu setzen.

```
1 Reaktion mit Zähler:
2 \begin{reaction}
3   H2 + 1/2 O2 -> H2O
4 \end{reaction}
5 Reaktion ohne Zähler:
6 \begin{reaction*}
```

```

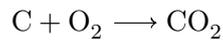
7 C + O2 -> CO2
8 \end{reaction*}
9 mehrere Reaktionen mit Zähler:
10 \begin{reactions}
11 Cl2 & \rightarrow 2 Cl. \\
12 Cl.\{ } + CH4 & \rightarrow HCl + \{ }.CH3 \\
13 \{ }\{ }.CH3 + Cl2 & \rightarrow CH3Cl + Cl.
14 \end{reactions}
15 mehrere Reaktionen ohne Zähler:
16 \begin{reactions*}
17 \Hpl + \Hyd & \rightleftharpoons H2O \\
18 SO4 \mch[2] + Ba \pch[2] & \rightarrow BaSO4 v
19 \end{reactions*}

```

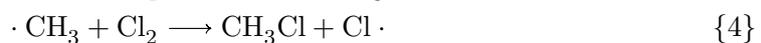
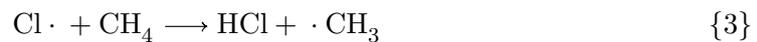
Reaktion mit Zähler:



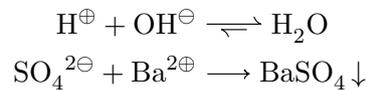
Reaktion ohne Zähler:



mehrere Reaktionen mit Zähler:



mehrere Reaktionen ohne Zähler:



Wenn Sie das Aussehen des Zählers ändern wollen, so können Sie `\renewtagform{<tagname>}[<format>]{<right delim>}{<left delim>}`¹³ verwenden.

```

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

```



¹³Durch das Paket ‘mathtools’ zur Verfügung gestellt

8 Newman-Projektionen

Mit dem Befehl

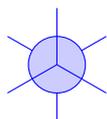
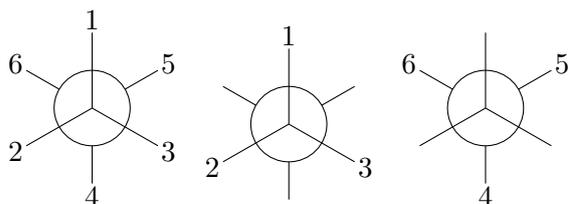
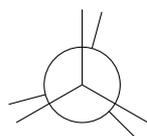
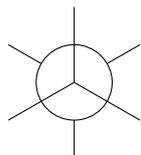
```
1 \newman[<angle>,<scale>,<tikz>]{<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}
```

lassen sich Newman-Projektionen erstellen (verwendet TikZ). **Dazu müssen sie in der Präambel die Tikzlibrary 'calc' einbinden:**

```
1 \usetikzlibrary{calc}
```

Beispiele:

```
1 \newman{}\par% Standard: gestaffelt
2 \newman[165]{}\par% gedreht => ekliptisch
3 \newman{1,2,3,4,5,6} \newman{1,2,3} \newman{,,4,5,6}\par
   % mit Atomen
4 \newman[,.75,draw=blue,fill=blue!20]{}% verkleinert und
   mit TikZ angepasst
```

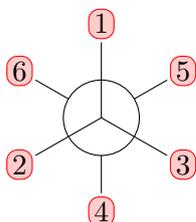


Mit einer weiteren Option können die Nodes der Atome gestaltet werden:

```

1 \newman[<tikz nodes>]{<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}
2 % Beispiel:
3 \newman[draw=red,fill=red!20,inner sep=2pt,rounded
   corners]{1,2,3,4,5,6}

```

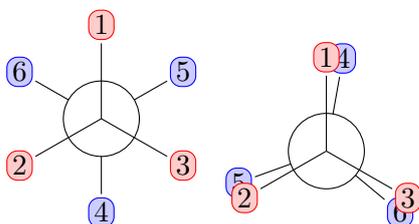


Wenn Sie die „vorderen“ und „hinteren“ Nodes verschieden gestalten wollen, können Sie noch eine dritte Option verwenden:

```

1 \newman[<tikz front nodes>][<tikz back nodes
   >]{<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}
2 % Beispiel:
3 \newman[draw=red,fill=red!20,inner sep=2pt,rounded
   corners][draw=blue,fill=blue!20,inner sep=2pt,rounded
   corners]{1,2,3,4,5,6} \newman[170][draw=red,fill=red
   !20,inner sep=2pt,rounded corners][draw=blue,fill=blue
   !20,inner sep=2pt,rounded corners]{1,2,3,4,5,6}

```



9 p-Orbitale

chemmacros stellt auch Befehle zur Verfügung, mit denen p-Orbitale visualisiert werden können.

```

1 \porb[<size factor>,<color>,<angle>]
2 \phorb[<size factor>,<color>,<angle>]
3 \setorbheight{<length>}

```


10 Paket-Optionen

chemmacros hat zwei Paketooptionen:

- `xspace=<boolean>` Mit der Option `xspace=true` bekommen folgende Befehle ein `\xspace` angehängt:
`\Hyd \HtO Text \Hyd, \HtO, Text OH⊖ H3O⊕ Text OH⊖, H3O⊕, Text`
Default: `xspace=false`
- `circled=<boolean>` Nicht alle mögen Kreise um die Ladungssymbole (\oplus und \ominus) sondern bevorzugen sie ohne Kreise (+ und -). Dieses Verhalten kann mit dieser Option gesteuert werden. Mit `circled=false` verwenden alle Befehle von chemmacros die Symbole ohne Kreis.
Default: `circled=true`

11 Liste der Befehle

<code>\el, \prt, \ntr</code> <code>\HtO, \Hpl, \Hyd</code> <code>\transitionstatesymbol</code>	Abschnitt 2: Teilchen, Ionen und ein Symbol
<code>\cip, \Rcip, \Scip</code> <code>\Dfi, \Lfi</code> <code>\E, \Z, \cis, \trans</code> <code>\Rconf, \Sconf</code> <code>\ortho, \meta, \para</code>	Abschnitt 3: Stereo-Deskriptoren, Nomenklatur
<code>\delm, \delp</code> <code>\mch, \pch</code> <code>\ox</code> <code>\scrm, \scrp</code>	Abschnitt 4: Oxidationszahlen und (echte) Ladungen
<code>\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs</code> <code>\setnewstate</code> <code>\State</code>	Abschnitt 6: (Standard) Zustand, Thermodynamik
<code>\newman</code>	Abschnitt 8: Newman-Projektionen
<code>\redox, \OX</code>	Abschnitt 5: Redoxreaktionen
<code>\begin{reaction},</code> <code>\begin{reaction*},</code> <code>\begin{reactions},</code> <code>\begin{reactions*}</code>	Abschnitt 7: Umgebungen für ‘mhchem’
<code>\phorb, \porb, \pxorb,</code> <code>\pyorb, \pzorb</code> <code>\setorbheight</code>	Abschnitt 9: p-Orbitale