

Das chemmacros Bundle

v3.0c

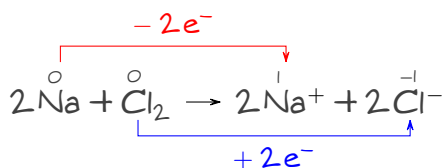
2012/02/05

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

Clemens NIEDERBERGER

<https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/>

contact@mychemistry.eu



| | | | |
|---|---|---|----|
| Inhaltsverzeichnis | | 7.3. Lateinische Ausdrücke | 10 |
| I. Bevor es los geht | 3 | 8. Einheiten für die Verwendung mit si-unitx | 11 |
| 1. Lizenz, Voraussetzungen und README | 3 | 9. Säure/Base | 12 |
| 2. Motivation | 3 | 10. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen | 12 |
| 3. Installation und Laden des Bundles | 4 | 10.1. Ionenladungen | 12 |
| 4. Paketoptionen | 5 | 10.2. Oxidationszahlen | 13 |
| 5. Setup | 6 | 10.3. Partialladungen und Ähnliches . | 15 |
| II. chemmacros | 7 | 11. Reaktionsmechanismen | 16 |
| 6. Teilchen, Ionen und Symbole | 7 | 12. Redoxreaktionen | 16 |
| 6.1. Vordefiniert | 7 | 13. (Standard) Zustand, Thermodynamik | 19 |
| 6.2. Eigene | 8 | 13.1. Thermodynamische Größen . . | 19 |
| 7. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke | 8 | 13.1.1. Neue Größen definieren | 20 |
| 7.1. IUPAC-Namen | 8 | 13.1.2. Größen umdefinieren . . | 20 |
| 7.2. Stereodeskriptoren und Nomenklatur | 9 | 13.2. Zustandsgrößen | 21 |
| | | 14. Spektroskopie | 21 |
| | | 15. Befehle für mhchem | 22 |

| | | | |
|--|---------------|---|---------------|
| 16. Reaktionsumgebungen | 23 | 28.2. Beschriftung | 43 |
| 16.1. Durch CHEMMACROS definiert . . | 23 | 28.3. Anpassung | 44 |
| 16.2. Eigene Reaktionen | 25 | 29. Text unter Formeln | 46 |
| 16.3. Liste der Reaktionen | 26 | 29.1. Syntax | 46 |
| 17. Phasen | 27 | 29.2. Anpassung | 46 |
| 18. Newman-Projektionen | 27 | 30. Format und Schrift | 47 |
| 19. s, p und Hybrid-Orbitale | 29 | 31. Verwendung in Mathematik- | 49 |
| 20. CHEMFORMULA-Unterstützung | 31 | Umgebungen | |
| 21. Übersicht über die Optionen | 32 | 32. Weitere Beispiele | 49 |
| III. chemformula | 34 | IV. ghsystem | 51 |
| 22. Setup | 34 | 33. Setup | 51 |
| 23. Das Grundprinzip | 34 | 34. Die Gefahren- (H) und Sicherheits- | 51 |
| 24. Stöchiometrische Faktoren | 35 | sätze (P) aufrufen | |
| 25. Summenformeln | 37 | 34.1. Einfacher Aufruf | 51 |
| 25.1. Addukte | 37 | 34.2. Sätze mit Platzhaltern | 52 |
| 25.2. Tiefstellungen | 38 | 34.3. Sätze mit Lücken | 53 |
| 25.3. Befehle | 38 | 34.4. Kombinierte Sätze | 54 |
| 25.4. Ladungen und andere Hochstel- | 38 | 35. Piktogramme | 54 |
| lungen | 38 | 35.1. Die Bilder | 54 |
| 25.5. Bindungen | 39 | 35.2. Der Bildtyp hängt von der Engi- | 57 |
| 25.6. Anpassung | 39 | ne ab | |
| 26. Spezielle Input-Typen | 41 | 36. Verfügbare Sprachen | 57 |
| 27. Geschützter Input | 41 | 37. Liste aller Sätze | 58 |
| 27.1. Text | 42 | V. Anhang | 68 |
| 27.2. Mathematik | 42 | Vorschläge und Bugreports | 68 |
| 28. Pfeile | 43 | Index | 69 |
| 28.1. Pfeiltypen | 43 | | |

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>)

CHEMMACROS verwendet die Pakete `expl3`, `xparse`¹, `l3keys2e`² und `xfrac`³, die Teil der `l3kernel`⁴- und `l3packages`⁵-Bundles sind. `expl3` ist Teil des `l3kernel` und `xparse`, `l3keys2e` und `xfrac` sind Teil der `l3packages`.

Offensichtlich werden **CHEMFORMULA** und **GHSYSTEM** als Teil dieses Bundles geladen.

CHEMMACROS verwendet zudem `siunitx`⁶, `mathtools`⁷, `bm`⁸ und `environ`⁹ sowie `tikz`¹⁰ und die `TikZ` libraries `calc` und `arrows`.

Die Paketoption `bpchem` (Abschnitt 4) benötigt `bpchem`¹¹, die Paketoption `xspace` benötigt `xspace`¹² und die Paketoption `method = mhchem` benötigt `mhchem`¹³.

CHEMMACROS wurde 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 21 listet alle von **CHEMMACROS'** Optionen und ihre Module auf. In diesem Dokument werden Optionen **grün** und Module **rot** dargestellt.

CHEMFORMULA verwendet die Pakete **CHEMMACROS** und `nicefrac`¹⁴. **CHEMFORMULA** hat keine eigenen Paketoptionen sondern leitet alle weiter an **CHEMMACROS**.

GHSYSTEM verwendet die Pakete **CHEMMACROS**, `tabu`¹⁵, `longtable`¹⁶, `ifpdf`¹⁷ und `graphicx`¹⁸. **GHSYSTEM** hat keine eigenen Paketoptionen sondern leitet alle weiter an **CHEMMACROS**.

2. Motivation

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. **CHEMFORMULA** soll *kein* Ersatz für `mhchem` sondern eine Alternative sein. Ich überlegte eine ganze Zeit lang hin und her, ob ich **CHEMFORMULA** wirklich schreiben sollte. Ein paar Kleinigkeiten in `mhchem` haben mich 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. Letztlich hat mich der Spaß und die Herausforderung überzeugt.

¹ CTAN: `xparse` ² CTAN: `l3keys2e` ³ CTAN: `xfrac` ⁴ CTAN: `l3kernel` ⁵ CTAN: `l3packages` ⁶ CTAN: `siunitx`
⁷ CTAN: `mathtools` ⁸ CTAN: `bm` ⁹ CTAN: `environ` ¹⁰ CTAN: `pgf` ¹¹ CTAN: `bpchem` ¹² CTAN: `xspace` ¹³ CTAN: `mhchem`
¹⁴ CTAN: `nicefrac` ¹⁵ CTAN: `tabu` ¹⁶ CTAN: `longtable` ¹⁷ CTAN: `ifpdf` ¹⁸ 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. Wenn Sie zufrieden mit mhchem sind, gibt es keinen Grund, zu **CHEMFORMULA** zu wechseln. Aber vielleicht sind Sie ja neugierig.

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 wurde¹⁹, 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.

3. Installation und Laden des Bundles

Das Bundle enthält drei Style-Dateien²⁰, 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).

¹⁹ http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation_e.html ²⁰ 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 Ladungen²¹: 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 bestimmt, ob Makros wie `\pKa` eine fette Schriftserie erkennen. **fetter pK_S Text** vs. **fetter pK_S Text**. Default = `false`
- option `EZ` = `chemmacros/cool` Der Befehl `\E` wird durch das Paket `cool`²² ebenfalls definiert. Mit dieser Option können Sie wählen, welche Definition verwendet wird, siehe Seite 9. Default = `chemmacros`. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.
- 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 `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`²³ Das Paket `mathspec` 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.

²¹ Vielen Dank an Christoph Schäfer, der mich darauf aufmerksam machte, dass `v1.1` die Ladungen zu nachlässig behandelte! ²² CTAN: `cool` ²³ CTAN: `mathspec`

Teil II.

chemmacros

6. Teilchen, Ionen und Symbole

6.1. Vordefiniert

Einige einfache Makros, um häufig verwendete Teilchen darzustellen. Außerdem ein Symbol. 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)

`\HtO` 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` \neq (verwendet `TikZ`)

`\standardstate` \ominus . Dieses Symbol wird nur dann von `CHEMMACROS` bereitgestellt, wenn das Paket `chemstyle`²⁴ nicht geladen wurde. Die Idee ist von dort ausgeliehen²⁵.

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

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

1 `\R[+]{tert}` `\R[-]{sek}` `\R{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`²⁶ geladen wurde, da sie dessen Befehl `\Lewis` verwendet.

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

6.2. Eigene

Wenn Sie mögen, können Sie eigene Teilchen definieren.

`\DeclareParticle{<cmd>}{<definition>}`

Abhängig von der `method`, die Sie gewählt haben, ist `<definition>` entweder eine mit `mhchem` oder mit `CHEMFORMULA` definierte Formel. Das so definierte Teilchen wird sich wie die schon vorgestellten verhalten mit einer Ausnahme: wenn Sie `method = mhchem` gewählt haben, wird das Teilchen die Option `circled` *nicht beachten*. Wenn Sie in diesem Fall formale Ladungen für das Teilchen wollen, müssen Sie es mit den von `CHEMMACROS` zur Verfügung gestellten Befehlen (siehe Abschnitt 10) definieren. Wenn Sie allerdings `method = chemformula` gewählt haben, *wird* das Teilchen die Option `circled` beachten.

```
1 \DeclareParticle{\Sod}{Na+}
2 \DeclareParticle{\Pot}{K+}
3 \Sod \Pot \chemsetup{option}[circled=all] \Sod \Pot

Na+ K+ Na⊕ K⊕
```

Die Teilchen werden nur definiert, wenn `<cmd>` nicht schon bereits für einen anderen Befehl vergeben ist. Ist er vergeben, wird `CHEMMACROS` entweder eine Warnung oder eine Fehlermeldung bringen, abhängig von der Option `strict`.

7. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke

7.1. IUPAC-Namen

Ähnlich wie das Paket `bpchem` stellt `CHEMMACROS` einen Befehl²⁷ 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:

²⁴ CTAN: `chemstyle` ²⁵ Vielen Dank an den Paketautoren `Joseph Wright`. ²⁶ CTAN: `chemfig` ²⁷ 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`²⁸ 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 `\^`.

7.2. Stereodeskriptoren und Nomenklatur

Die Makros dieses Abschnitts sollen das Schreiben von IUPAC-Namen vereinfachen.

Cahn-Ingold-Prelog

`\Rcip` (*R*)

`\Scip` (*S*)

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

Fischer

`\Dfi` *D*

`\Lfi` *L*

cis/trans, zusammen/entgegen, syn/anti & tert Bitte beachten Sie, dass die Befehle `\cis` und `\trans` auch von bpchem definiert werden. Wenn Sie das Paket laden, werden sie von CHEMMACROS überschrieben. Bei bpchem haben sie *immer* ein `\xspace` angehängt, bei CHEMMACROS *nie*.

`\cis` *cis*

`\trans` *trans*

`\Z` (*Z*)

`\E` (*E*) (`\E` wird auch durch das Paket cool definiert. Durch Verwenden der Paketooption `EZ = cool` werden anstelle von `\E` und `\Z` durch CHEMMACROS `\Ent` und `\Zus` bereitgestellt.)

`\syn` *syn*

²⁸ Eigentlich verwendet `\^` einen CHEMFORMULA-Befehl.

`\anti` *anti*

`\tert` *tert*

ortho/meta/para

`\ortho` *o*

`\meta` *m*

`\para` *p*

Absolute Konfiguration (verwendet TikZ)

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

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

Beispiele:

```
1 \iupac{\Dfi\Wein\|s"aure} = \\
2 \iupac{\cip{2S,3S}\Wein\|s"aure} \\
3 \iupac{\Dfi\-(\$-\$)\-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

7.3. Lateinische Ausdrücke

Zuletzt gibt es diese beiden Makros für lateinische Ausdrücke:

`\insitu` *in situ*

`\abinitio` *ab initio*

Wenn Sie das Paket chemstyle ebenfalls geladen haben²⁹, werden sie mit chemstyles Befehl `\latin` definiert. Das bedeutet, dass ihr Erscheinungsbild dann von chemstyles Option `abbremp` abhängt:

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

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

`\MolMass` g mol⁻¹

`\normal` N

`\torr` torr

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

²⁹ chemstyle definiert andere ähnliche Befehle wie *et al.*, *in vacuo*.

9. Säure/Base

Einfache Darstellung von pH , pK_S ... (der Befehl `\pKa` hängt von der Paketooption `german` ab, siehe Abschnitt 4.)

`\pH` pH

`\pOH` pOH

`\Ka` K_S

`\Kb` K_B

`\Kw` K_W

`\pKa[<num>]` `\pKa:` pK_S , `\pKa[1]:` pK_{S1}

`\pKb[<num>]` `\pKb:` pK_B , `\pKb[1]:` pK_{B1}

`\p{<anything>}` z. B.: `\p{\Kw}` pK_W

| | |
|---|--|
| <pre>1 \Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1] \\ 2 \chemsetup[option]{german=true} 3 \Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]</pre> | $K_S \ K_B \ pK_S \ pK_{S1} \ pK_B \ pK_{B1}$ $K_S \ K_B \ pK_S \ pK_{S1} \ pK_B \ pK_{B1}$ |
|---|--|

10. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen

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

10.1. Ionenladungen

Einfache Verwendung von (realen) Ladungen:

`\pch[<number>]` positive Ladung (plus + charge)

`\mch[<number>]` negative Ladung (minus + charge)

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

Das gleiche für formale Ladungen:

`\fpch[<number>]` positive Ladung

`\fmch[<number>]` negative Ladung

```
1 \fpch\ \fmch\ \fpch[3] \fmch[3]  $\oplus \ominus 3\oplus 3\ominus$ 
```

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

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

Das hat folgende Auswirkungen:

```
1 \chemsetup[charges]{append=false}
2 \ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}
3
4 \chemsetup[charges]{append=true}
5 \ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}
```

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

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

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

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

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}
```

$$\overset{\text{I}}{\text{Na}}, \overset{\text{II}}{\text{Ca}}, \overset{-\text{II}-\text{I}}{\text{S}}, \text{F}$$

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

ox **parse** = true/false Wenn false, dann kann ein beliebiger Eintrag für <number> gemacht werden.
Default = true

ox **roman** = true/false schaltet von römischen auf arabische Ziffern um. Default = true

ox **pos** = top/super/side; top setzt <number> über <atom>, super rechts oben als Hochstellung und side rechts daneben in Klammern. Default = top

ox **explicit-sign** = true/false gibt + für positive Zahlen und ± für die 0 aus. Default = false

ox **decimal-marker** = comma/point Wahl des Dezimalzeichens für Oxidationszahlen wie $\overset{1.2}{X}$. Default = comma

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

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

```
1 \ox{3,Fe} \ox*{3,Fe} \quad \overset{III}{Fe} 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}

+INa, +IICa, -II±0S, F2
```

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

Vergleichen Sie $\overset{-I}{O}_2^{2-}$ mit $\overset{-I}{O}_2^{2-}$

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

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

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

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

Natürlich können Sie sie nachj Ihren Vorstellungen umdefinieren.

10.3. Partialladungen und Ähnliches

Vielleicht selten genutzt, manchmal aber praktisch:

`\delp` $\delta+$ (delta + plus)

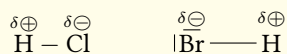
`\delm` $\delta-$ (delta + minus)

`\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)

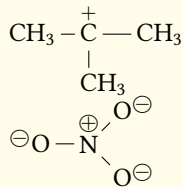
`\fscrip` \oplus

`\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

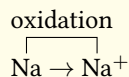
`CHEMMACROS` stellt zwei Befehle zur Verfügung, mit denen die Übertragung von Elektronen in Redoxreaktionen angezeigt werden kann³⁰. Beide Befehle verwenden `TikZ`.

`\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.

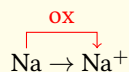
```
1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b){oxidation}
```



³⁰ Dank an Peter Cao, der dieses Feature vorgeschlagen hat.

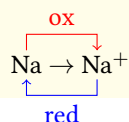
Diese Linie kann mit `TikZ`-Keys in `[<tikz>]` angepasst werden:

```
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}
```

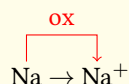


Die Voreinstellung der vertikalen Linien kann mit

`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}
```

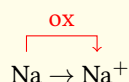


Zusätzlich erlaubt die Option

`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}
```

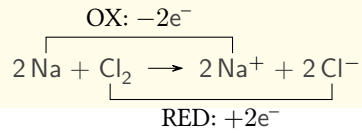


Beispiele:

```

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

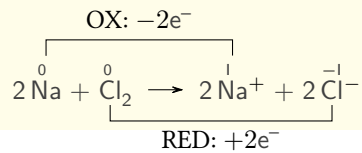
```



```

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

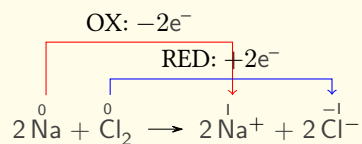
```



```

1 \ch{ 2 "\OX{o1,\ox{0,Na}}" + "\OX{r1,\ox{0,Cl}}" {}2 -> 2 "\OX{o2,\ox{+1,Na}}" \pch
  {} + 2 "\OX{r2,\ox{-1,Cl}}" \mch }
2 \redox(o1,o2)[draw=red,->][3.33]{\small OX: $- 2\el$}
3 \redox(r1,r2)[draw=blue,->]{\small RED: $+ 2\el$}

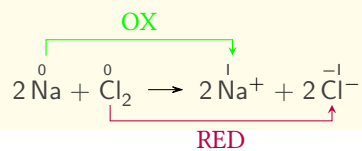
```



```

1 \ch{ 2 "\OX{o1,\ox{0,Na}}" + "\OX{r1,\ox{0,Cl}}" {}2 -> 2 "\OX{o2,\ox{+1,Na}}" \pch
  {} + 2 "\OX{r2,\ox{-1,Cl}}" \mch }
2 \redox(o1,o2)[green,-stealth]{\small OX}
3 \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

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

können neue Größen definiert werden.

```
1 \setnewstate{Helmholtz}{A}{\kilo\joule\per\mole}
2 \setnewstate[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

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

kann man bestehende Größen umdefinieren:

```
1 \renewstate{Enthalpy}{h}{\joule}
2 \Enthalpy(f){12.5}
```

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

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 \setnewstate[exponent=]{enthalpy}{h}{\kilo\joule\per\mole}% molar
2 \renewstate[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 Befehl³¹

```
\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 Argumente³² 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:

³¹ Beachten Sie, dass {<subscript>} ein *optionales* Argument ist. ³² 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 Default-Werte 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, 1H, \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 mhchem³³ bereit. Er erlaubt es, Text unter eine Formel zu schreiben.

³³ 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:

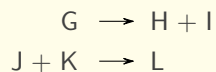


```

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

```

mehrere ausgerichtete Reaktionen ohne Zähler:



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

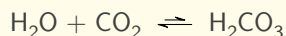
`\renewtagform{<tagname>}[<format>]{<right delim>}{<left delim>}`³⁴.

³⁴ 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

```
\newreaction[<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

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

```
\reaction[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:

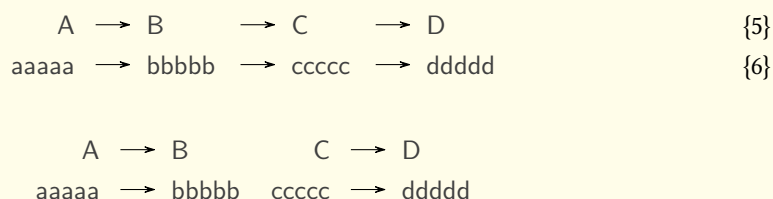
```
1 \newreaction[star,arg]{reactionsat}{alignat}
```

Damit ist die reactionsat-Umgebung definiert.

```

1 \newreaction[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} | 24 |
| Reaktion {2} | 24 |
| Reaktion {3} | 24 |
| Reaktion [4] | 25 |
| Reaktion {5} | 26 |
| Reaktion {6} | 26 |
| Reaktion {7}: Autoprotolyse | 26 |
| Reaktion {8}: Synthese von Alkanen | 50 |

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

Anzeigen der Phase einer Substanz.

`\sld[<anything>]` (f)

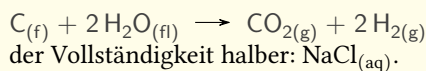
`\lqd[<anything>]` (fl)

`\gas` (g)

`\aq` (aq)

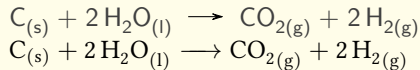
Bitte beachten Sie, dass die Befehle `\solid` und `\liquid` der v1.* nun `\sld` bzw. `\lqd` heißen. Beachten Sie außerdem, dass beide innerhalb von `\ch` *kein* optionales Argument haben!

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



Mit der Paketoption `german = false` (siehe Abschnitt 4) erhält man die englischen Varianten:

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



Offensichtlich ist `\sld[s]` identisch mit `\lqd[s]`.

Man kann auch an andere Einsatzmöglichkeiten denken:

```
1 C\sld[Graphit] C(Graphit)
```

18. Newman-Projektionen

CHEMMACROS stellt den Befehl

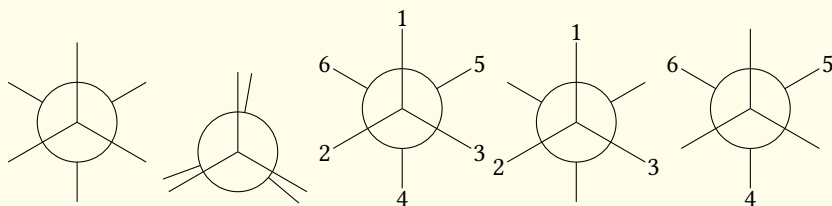
`\newman[<keyval>](<angle>){<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}`

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.

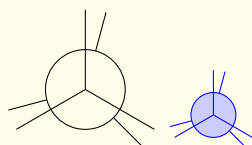
newman **atoms** = <tikz> Aussehen der Knoten, in die die Atome geschrieben werden, mit TikZ-Keys anpassen.

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}]{}

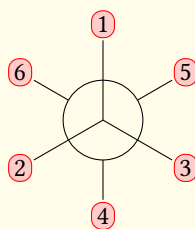
```



```

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).

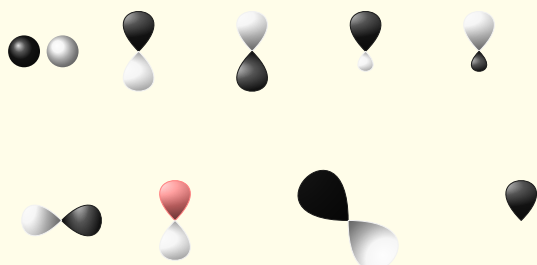
`orbital` `angle` = `<angle>` Rotiert die Orbitale mit einem p-Anteil gegen den Uhrzeigersinn (alle Typen außer s).

`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:

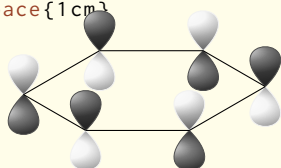
orbital **overlay** = true/false Das Orbital „braucht keinen Platz“; es wird mit dem *TikZ*-Key **overlay** gezeichnet.

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}

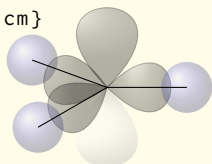
```



```

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

```



20. CHEMFORMULA-Unterstützung

CHEMFORMULA und **CHEMMACROS** arbeiten eng zusammen. Das funktioniert aber noch nicht perfekt. Es gibt sogar Einschränkungen. Wenn Sie die vermeiden wollen, verwenden Sie einfach `method = mhchem` und vergessen diesen Abschnitt und den nächsten Teil.

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}
2 \ch{H+ + OH- <=> H2O}

```

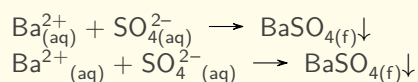
$$\text{H}^{\oplus} + \text{OH}^{\ominus} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$$

Die Befehle `\sld` und `\lqd` haben kein optionales Argument innerhalb von `\ch`.

```

1 \ch{Ba^{2+}\aq{} + SO4^{2-}\aq{} -> BaSO4\sld{} v} \\
2 \ch{Ba^2+ \aq{} + SO4^2- \aq{} -> BaSO4\sld{} v}

```



Die Option `synchronize` erkennt das Format und die Schrifteinstellungen von `CHEMFORMULA` und übernimmt sie für die Teilchen-Makros.

21. 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> | <u>formal</u> /all/none | formal | Seite 5 |
| <code>circletype</code> | <code>option</code> | <u>chem</u> /math | chem | Seite 5 |
| <code>detect-bold</code> | <code>option</code> | <u>true</u> /false | false | Seite 5 |
| <code>EZ</code> | <code>option</code> | <u>chemmacros</u> /cool | chemmacros | 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>method</code> | <code>option</code> | <u>chemformula</u> /formula | formula | Seite 5 |
| <code>Nu</code> | <code>option</code> | <u>chemmacros</u> /mathspec | chemmacros | Seite 5 |
| <code>strict</code> | <code>option</code> | <u>true</u> /false | false | Seite 5 |
| <code>synchronize</code> | <code>option</code> | <u>true</u> /false | false | Seite 6 |
| <code>version</code> | <code>option</code> | 1/2 | 2 | Seite 6 |
| <code>xspace</code> | <code>option</code> | <u>true</u> /false | true | Seite 6 |
| <code>\ba, \Nu:</code> | | | | |
| <code>elpair</code> | <code>particle</code> | <u>dots</u> /dash/false | false | Seite 8 |
| <code>\pch, \mch, \fpch, \fmch:</code> | | | | |
| <code>append</code> | <code>charges</code> | <u>true</u> /false | false | Seite 13 |
| <code>\ox:</code> | | | | |
| <code>parse</code> | <code>ox</code> | <u>true</u> /false | true | Seite 13 |
| <code>roman</code> | <code>ox</code> | <u>true</u> /false | true | Seite 13 |
| <code>pos</code> | <code>ox</code> | top/super/side | top | Seite 13 |
| <code>explicit-sign</code> | <code>ox</code> | <u>true</u> /false | false | Seite 14 |
| <code>decimal-marker</code> | <code>ox</code> | comma/point | point | Seite 14 |
| <code>\OX, \redox:</code> | | | | |
| <code>dist</code> | <code>redox</code> | <dim> | .6em | Seite 17 |
| <code>sep</code> | <code>redox</code> | <dim> | .2em | Seite 17 |
| <code>\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:</code> | | | | |
| <code>exponent</code> | | <anything> | <u>\standardstate</u> | Seite 19 |

| Option | Modul | Werte | Default | |
|--|-----------------------------------|---|-----------------------------|----------|
| <code>delta</code> | | <code><anything>/false</code> | | Seite 19 |
| <code>subscript</code> | | <code>left/right</code> | | Seite 19 |
| <code>unit</code> | | <code><unit></code> | | Seite 19 |
| <code>\setnewstate, \renewstate:</code> | | | | |
| <code>exponent</code> | | <code><anything></code> | <code>\standardstate</code> | Seite 19 |
| <code>delta</code> | | <code><anything>/false</code> | | Seite 19 |
| <code>subscript</code> | | <code><anything></code> | | Seite 19 |
| <code>subscript-left</code> | | <code>true/false</code> | | Seite 20 |
| <code>\State:</code> | | | | |
| <code>exponent</code> | <code>state</code> | <code><anything></code> | <code>\standardstate</code> | Seite 21 |
| <code>delta</code> | <code>state</code> | <code><anything>/false</code> | | Seite 21 |
| <code>subscript-left</code> | <code>state</code> | <code>true/false</code> | | Seite 21 |
| <code>\NMR:</code> | | | | |
| <code>unit</code> | <code>nmr</code> | <code><unit></code> | <code>\mega\hertz</code> | Seite 22 |
| <code>nucleus</code> | <code>nmr</code> | <code>{<num>, <atom symbol>}</code> | <code>{1,H}</code> | Seite 22 |
| <code>\newreaction:</code> | | | | |
| <code>star</code> | | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 25 |
| <code>arg</code> | | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 25 |
| <code>list-name</code> | <code>reaction</code> | <code><anything></code> | List of reactions | Seite 26 |
| <code>list-entry</code> | <code>reaction</code> | <code><anything></code> | Reaction | Seite 26 |
| <code>\mhName:</code> | | | | |
| <code>align</code> | <code>mhName</code> | <code><alignment></code> | <code>\centering</code> | Seite 23 |
| <code>format</code> | <code>mhName</code> | <code><commands></code> | | Seite 23 |
| <code>fontsize</code> | <code>mhName</code> | <code><fontsize></code> | <code>\tiny</code> | Seite 23 |
| <code>width</code> | <code>mhName</code> | <code><dim></code> | | Seite 23 |
| <code>\newman:</code> | | | | |
| <code>angle</code> | <code>newman</code> | <code><angle></code> | <code>0</code> | Seite 28 |
| <code>scale</code> | <code>newman</code> | <code><factor></code> | <code>1</code> | Seite 28 |
| <code>ring</code> | <code>newman</code> | <code><tikz></code> | | Seite 28 |
| <code>atoms</code> | <code>newman</code> | <code><tikz></code> | | Seite 28 |
| <code>back-atoms</code> | <code>newman</code> | <code><tikz></code> | | Seite 28 |
| <code>\orbital <type> = s/p/sp/sp2/sp3:</code> | | | | |
| <code>phase</code> | <code>orbital/<type></code> | <code>+/-</code> | <code>+</code> | Seite 29 |
| <code>scale</code> | <code>orbital/<type></code> | <code><factor></code> | <code>1</code> | Seite 29 |
| <code>color</code> | <code>orbital/<type></code> | <code><color></code> | <code>black</code> | Seite 29 |
| <code>angle</code> | <code>orbital/<type></code> | <code><angle></code> | <code>90</code> | Seite 29 |
| <code>half</code> | <code>orbital/p</code> | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 29 |
| <code>overlay</code> | <code>orbital</code> | <code>true/false</code> | <code>false</code> | Seite 30 |
| <code>opacity</code> | <code>ornital</code> | <code><num></code> | <code>1</code> | Seite 30 |

Teil III.

chemformula

22. Setup

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

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

eingestellt werden.

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

23. Das Grundprinzip

CHEMFORMULA hat einen Hauptbefehl.

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

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

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

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

\ch{type1 type2 type3 type4}

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

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

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

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

| | |
|--|--|
| <pre>1 \ch{2H2O} \\ 2 \ch{2 H2O}</pre> | $_2\text{H}_2\text{O}$ $2\text{H}_2\text{O}$ |
|--|--|

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

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

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

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

24. Stöchiometrische Faktoren

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

| | |
|---|--|
| <pre>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}</pre> | 2 12 3.5 5.75 $\frac{3}{2}$ $1\frac{1}{2}$ |
|---|--|

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

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

Der Output kann mit diesen Optionen angepasst werden:

decimal-marker = <marker> Das Symbol, das als Dezimalzeichen verwendet wird. Default = .

frac-style = math/xfrac/nicefrac Bestimmt, wie Brüche dargestellt werden. Default = math

stoich-space = <dim> Der Leerraum nach einem stöchiometrischen Faktor. Eine \TeX -Länge.
Default = .1667em

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

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

```
1 \ch[frac-style=xfrac]{3/2} \ch[frac-style=xfrac]{1_1/2}
3½ 1½
```

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

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

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

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

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

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

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

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

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

25. Summenformeln

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

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

25.1. Addukte

CHEMFORMULA hat zwei Identifier, die Addukte erzeugen.

`\ch{A.B}`

`\ch{A*B}`

```
1 \ch{CaSO4.H2O} \\ CaSO4·H2O
2 \ch{CaSO4*H2O} CaSO4·H2O
```

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

```
1 \ch{Na3PO4*12H2O} \\ Na3PO4·12H2O
2 \ch{Na3PO4* 12 H2O} \\ Na3PO4·12H2O
3 \ch{Na3PO4 * 12 H2O} Na3PO4·12H2O
```

25.2. Tiefstellungen

Alle Ziffern in einer Substanz werden als Tiefstellung behandelt.

```
1 \ch{H2SO4} H2SO4
```

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

```
1 \ch{A_nB_m} AnBm
```

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

```
1 \ch{A_{\$n\$}B_{\$m\$}} \\  
2 \ch{NaCl_{(aq)}} NaCl(aq)
```

25.3. Befehle

Befehle sind in einer Summenformel erlaubt:

```
1 \ch{\textbf{A2}B3} \ch{A2\color{red}B3} A2B3 A2B3
```

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 [27.1](#) für einen Ausweg.

25.4. Ladungen und andere Hochstellungen

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

```
1 \ch{A+B} \ch{AB+} \\  
2 \ch{A-B} \ch{AB-} A≡B 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.

| | | |
|---|---------------------------------|------------------|
| 1 | <code>\ch{A^{x-}} \\\</code> | A^{x-} |
| 2 | <code>\ch{A^x-} \\\</code> | A^{x-} |
| 3 | <code>\ch{A^{x}-} \\\</code> | A^{x-} |
| 4 | <code>\ch{A^{x-\$}} \\\</code> | A^{x-} |
| 5 | <code>\ch{RNO2^{-.}} \\\</code> | $RNO_2^{\cdot-}$ |
| 6 | <code>\ch{^31H} \\\</code> | 3_1H |
| 7 | <code>\ch{^{14}6C} \\\</code> | $^{14}_6C$ |
| 8 | <code>\ch{^{58}_{26}Fe}</code> | $^{58}_{26}Fe$ |

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

| | | |
|---|--|------------------------------|
| 1 | <code>\ch{SO4^2-} \ch{Ca^2+ SO4^2-}</code> | $SO_4^{2-} Ca^{2+}SO_4^{2-}$ |
|---|--|------------------------------|

25.5. Bindungen

CHEMFORMULA kennt drei Sorten Bindungen:

| | | |
|---|--|-------------------------|
| 1 | einfach: <code>\ch{CH3-CH3} \\\</code> | einfach: CH_3-CH_3 |
| 2 | doppel: <code>\ch{CH2=CH2} \\\</code> | doppel: $CH_2=CH_2$ |
| 3 | dreifach: <code>\ch{CH+CH}</code> | dreifach: $CH\equiv CH$ |

25.6. Anpassung

Diese Optionen ermöglichen Ihnen, den Output anzupassen:

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

subscript-style = text/math Stil, der für die Tiefstellungen verwendet wird. Default = text

charge-hshift = <dim> Verschiebung von Hochstellungen, wenn sie einer Tiefstellung folgen.
Default = .3ex

charge-style = text/math Stil, der für Hochstellungen verwendet wird. Default = text

adduct-space = <dim> Leerraum links und rechts des Addukt-Punktes. Default = .1333em

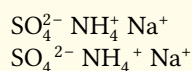
bond-length = <dim> Die Länge der Bindungen. Als Default-Länge wird die Länge eines Halbgeviertstrichs verwendet, wie sie mit `\settowidth{<len>}{\textendash}` bestimmt wird.

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

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

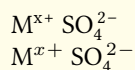
Sie werden verschoben, wenn sie einer Tiefstellung *folgen*. Den Betrag der Verschiebung kann man mit der Option `charge-hshift` festlegen.

```
1 \chemsetup[chemformula]{charge-hshift=0pt}
2 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\
3 \chemsetup[chemformula]{charge-hshift=1ex}
4 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}
```



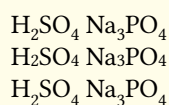
Wenn Sie nicht wollen, dass die Ladungen im Textmodus gesetzt werden, können Sie zum Mathematikmodus schalten:

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



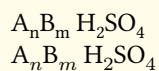
Die Option `subscript-vshift` kann verwendet werden, um die vertikale Verschiebung der Tiefstellungen anzupassen.

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



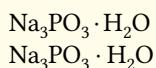
Sie können außerdem wählen, in welchem Modus die Tiefstellungen gesetzt werden:

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



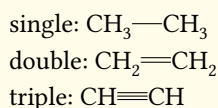
Mit der Option `adduct-space` kann der Leerraum links und rechts des Addukt-Zeichens festgesetzt werden.

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



Die Länge der Bindungen ändern:

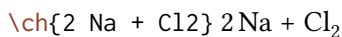
```
1 \chemsetup[chemformula]{bond-length=4mm}%
2 single: \ch{CH3-CH3} \\
3 double: \ch{CH2=CH2} \\
4 triple: \ch{CH+CH}
```



26. 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{ v }` ↓ Zeichen für eine Fällung/Niederschlag: `\ch{BaSO4 v}` $\text{BaSO}_4\downarrow$

`\ch{ ^ }` ↑ Zeichen für entweichendes Gas: `\ch{H2 ^}` $\text{H}_2\uparrow$

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

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

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

$$A + B$$

$$A + B$$

27. Geschützter Input

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

27.1. Text

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

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

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

```
1 \ch{"\ox{2,Ca}" 0} \\
2 \ch{"\ldots\," Na + "\ldots\," Cl2 -> "\ldots\," NaCl} \\
3 \ch{'A~->~B'}
```

$$\overset{\text{II}}{\text{CaO}}$$

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

$$\text{A} \rightarrow \text{B}$$

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

27.2. Mathematik

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

`\ch{ $<escaped math>$ }`

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

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

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

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

$$2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$$

$$2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$$

$$A \rightarrow B$$

28. Pfeile

28.1. Pfeiltypen

Pfeile werden auf die gleiche intuitive Weise eingegeben wie bei mhchem. Es gibt sechs verschiedene Typen:

`\ch{ -> }` → Standardpfeil nach rechts

`\ch{ <- }` ← Standardpfeil nach links

`\ch{ <-> }` ↔ Mesomerie-Pfeil

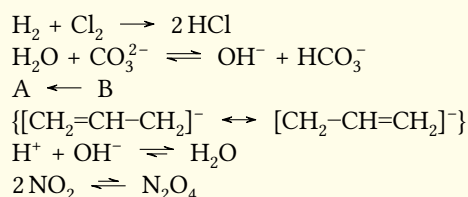
`\ch{ <=> }` ⇌ Gleichgewichts-Pfeil

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

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

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{H+ + OH- <=>> H2O} \\
6 \ch{2 NO2 <<=> N2O4}
```

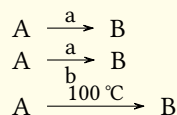


28.2. Beschriftung

Die Pfeile haben zwei optionale Argumente für Beschriftungen.

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

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

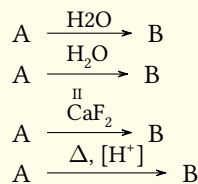


Der Beschriftungstext kann unabhängig vom Pfeil verarbeitet werden. Das Rezept ist einfach: verwenden Sie Leerzeichen.

```

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

```

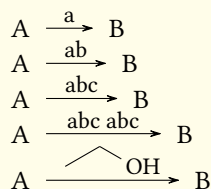


Mit den Leerzeichen verarbeitet **CHEMFORMULA** den Teil zwischen den Klammern als normalen Input. Die Pfeile lesen ihre Argumente erst *nach* der Verarbeitung. Wie Sie sehen können „wachsen“ die Pfeile mit der Länge der Beschriftungen. Konstant bleibt der überstehende Teil.

```

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}

```



28.3. Anpassung

Mit folgenden Optionen können Sie das Erscheinungsbild der Pfeile anpassen:

arrow-offset = <dim> Die Länge, die ein Pfeil links und rechts über die Beschriftung hinausragt. Die Länge eines leeren Pfeils beträgt zwei mal arrow-offset. Eine $\text{T}_\text{E}\text{X}$ -Länge. Default = 1.5ex

arrow-yshift = <dim> Verschiebt einen Pfeil nach oben (positiver Wert) oder nach unten (negativer Wert). Eine $\text{T}_\text{E}\text{X}$ -Länge. Default = 0pt

arrow-ratio = <factor> Das Verhältnis der Pfeillängen der ver unbalancierten Gleichgewichtspfeile. .4 würde bedeuten, dass der kürzere Pfeil 0.4 mal so lang ist, wie der längere Pfeil. Default = .6

arrow-tips = <type> Bestimmt die Pfeilspitzen. Im Prinzip könnten alle von **TikZ** Pfeilen verwendet werden. Die Option verlangt jedoch, dass erstens <type> selbst eine Pfeilspitze sein muss *und* dass zweitens die Spitzen left <type> und right <type> definiert sein müssen. Wenn Sie also nicht selbst Pfeilspitzen definieren, können Sie nur zwischen cf und to wählen. Default = cf

arrow-style = <tikz> **TikZ**-Keys zur freien Gestaltung der Pfeile.

`compound-sep` = <dim> Der Leerraum zwischen Formeln und Pfeilen. Eine \TeX -Länge. Default = 1ex

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

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

Der folgende Code zeigt die Effekte der verschiedenen Optionen auf den \Leftrightarrow Pfeil:

```

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

```

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

Wenn Sie Ihren eigenen `pgfarrows` oder passende Aliase so definieren³⁵, dass Sie die Spitzen `<type>`, `left <type>` und `right <type>` verfügbar haben, können Sie sie mit `arrow-tips` verwenden:

```

1 % 'left hook' and 'right hook' are already defined in the tikzlibrary 'arrows'
2 \pgfarrowsdeclarealias{hook}{hook}{hooks}{hooks}%
3 % 'left hook reversed' and 'right hook reversed' are already defined in the
   tikzlibrary 'arrows'
4 \pgfarrowsdeclarealias{hook reversed}{hook reversed}{hooks reversed}{hooks reversed}%
5 \ch[arrow-tips=hook]{A -> B <=> C} \\
6 \ch[arrow-tips=hook reversed]{A -> B <=> C}

```

$A \rightarrow B \rightleftharpoons C$
 $A \rightarrow B \leftrightharpoons C$

³⁵ Lesen Sie das PGFMANUAL zu Details.

29. Text unter Formeln

29.1. Syntax

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

$$\backslash\text{ch}\{ \text{!}(\text{<name>})(\text{<formula> }) \}$$

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, goilt auch hier: wenn Sie Leerzeichen lassen, werden die verschiedenen Teile entsprechend ihres Typs verarbeitet, bevor der Text unter die Formel gschrieben 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 ₂ O | H ₂ O | H ₂ O | H ₂ O | H ₃ O ⁺ |
| water | water | 2n - 1 | H ₂ O | oxonium |

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

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

29.2. Anpassung

CHEMFORMULA stellt zwei Optionen bereit, um den Text anzupassen:

name-format = <commands> Das Ausgabeformat des Textes. Das kann beliebiger Input sein. Default = `\scriptsize\centering`

name-width = <dim>/auto Die Breite der Box, in die der Text geschrieben wird. auto erkennt die Breite der Bschriftung 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

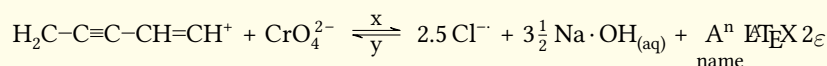
30. Format und Schrift

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

```

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

```

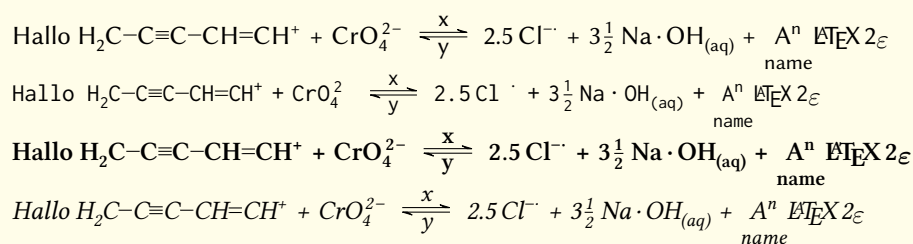


Nun ändern wir verschiedene Aspekte der Schrift und sehen, was passiert:

```

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

```



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

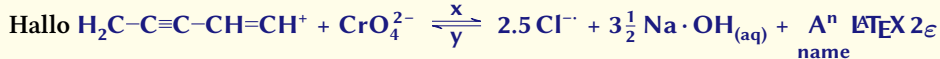
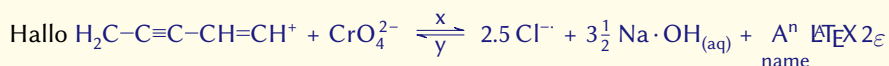
Wenn Sie dieses Default-Verhalten oder das Default-Format ändern wollen, können Sie diese Option verwenden:

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

```

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

```



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

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

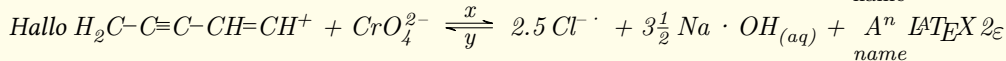
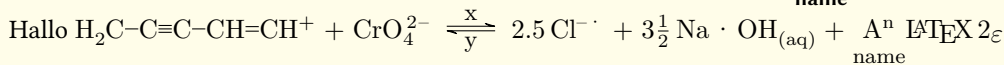
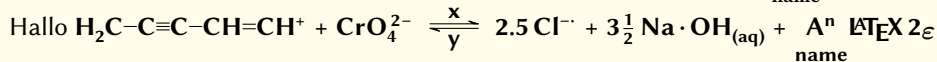
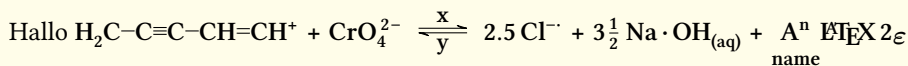
font-series = <series> Ändert die Schriftserie des Output mit: `\fontseries{<series>}\selectfont`

font-shape = <shape> Ändert die Schriftform des Output mit: `\fontshape{<shape>}\selectfont`

```

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

```



Wenn Sie Xe_{La}TeX oder Lua_{La}TeX verwenden und das Paket fontspec³⁶ geladen haben, können Sie die Schrift von CHEMFORMULA auch damit ändern:

font-spec = {} oder mit Optionen

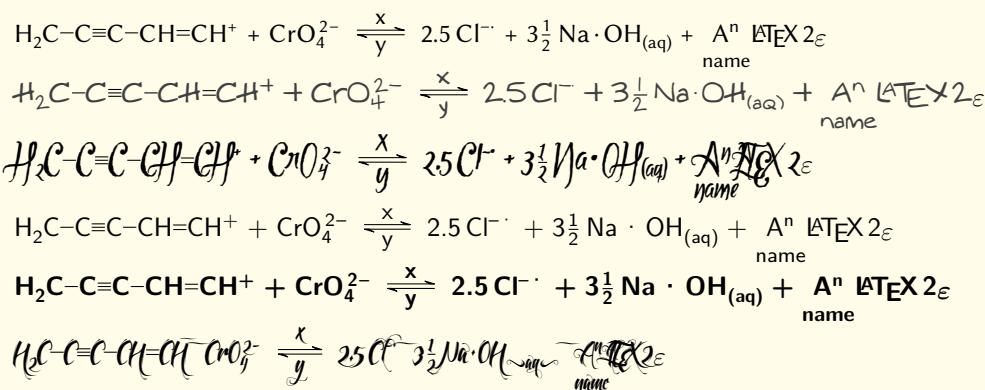
font-spec = {[<options>]}

³⁶ CTAN: fontspec


```

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

```



31. Verwendung in Mathematik-Umgebungen

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

```

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

```

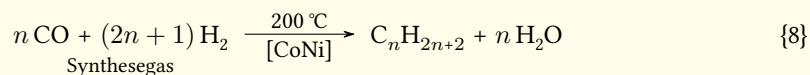
32. Weitere Beispiele

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

```

1 \begin{reaction}[Synthese von Alkanen]
2 !(\Synthesegas)( $n$ CO + $(2n+1)$ H2 ) ->[\SI{200}{\celsius}][ [ CoNi ] ] C_{n$}H
_{2n+2$} + $n$ H2O
3 \end{reaction}

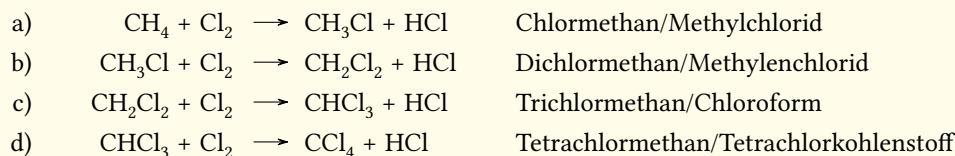
```



```

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

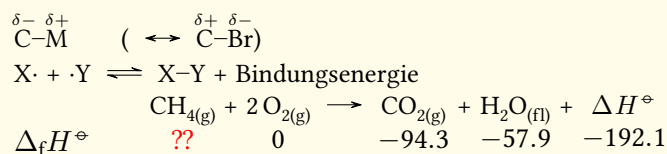
```



```

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

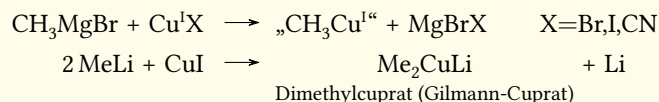
```



```

1 \begin{reactions*}
2 CH3MgBr + "\ox*{1,Cu}" X &-> "\glqq" CH3 "\ox*{1,Cu}\grqq" + MgBrX "\quad X\sim\$=\$~Br \\
&\text{, I, CN}" \\
3 2 MeLi + CuI &\longrightarrow !(\text{Dimethylcuprat}\sim(\text{Gilman-Cuprat}))(\text{Me}_2\text{CuLi}) + \text{Li}
4 \end{reactions*}

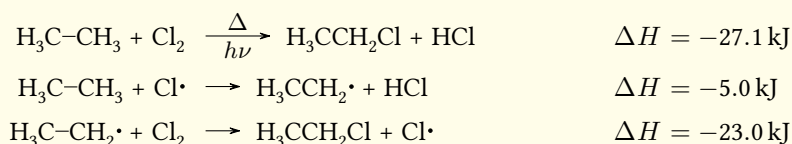
```



```

1 % needs 'chemfig'
2 \begin{reactions*}
3   H3C-CH3 + Cl2 &->[\Delta][h\nu] H3CCH2Cl + HCl
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

33. 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.

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

34.1. Einfacher Aufruf

Der prinzipielle Aufruf ist einfach:

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

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

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

```

1 \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

34.2. Sätze mit Platzhaltern

Einige Sätze verwenden Platzhalter. Es gibt vier Stück:

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

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

`fill-in = true/false` 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.

34.3. Sätze mit Lücken

Manche Sätze haben Lücken:

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

P301: BEI VERSCHLUCKEN:

P401: ... aufbewahren.

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

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

Mit den folgenden Optionen können diese Lücken gefüllt werden:

text = <text> Füllt „unsichtbare Lücke“, die einem Doppelpunkt folgt.

`dots` = <text> Füllt Lücke, die durch „...“ angezeigt wird.

`C-temperature` = <num> Füllt Celsius-Temperatur.

`F-temperature` = <num> Füllt Fahrenheit-temperatur.

`kg-mass` = <num> Füllt Kilogramm-Masse.

`lbs-mass` = <num> Füllt Pfund-Masse.

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

P301: BEI VERSCHLUCKEN:

P401: ... aufbewahren.

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

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

34.4. Kombinierte Sätze

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

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

P235 + P410: Kühl halten. Vor Sonnenbestrahlung schützen.

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

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

35. Piktogramme

35.1. Die Bilder

Das GHS beinhaltet einige Piktogramme:



Der Befehl

`\ghspic[<options>]{<name>}`

lädt sie. [Tabelle 2](#) zeigt alle Piktogramme und ihre Dateinamen. Genauer: sie zeigt die Namen, die beim Befehl `\ghspic` verwendet werden müssen. Tatsächlich heißen sie `ghsystem_<name>.<filetype>`, wobei `<filetype>` entweder `eps`, `jpg` oder `png` ist, siehe auch [Abschnitt 35.2](#).

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



Wenn Ihnen die Defaultgröße nicht gefällt, können Sie die Option

`scale = <factor>` 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 2: Alle verfügbaren GHS Piktogramme.

| Name | Piktogramm | Name | Piktogramm |
|----------|------------|----------|------------|
| explos | | explos-1 | |
| explos-2 | | explos-3 | |

| Name | Piktogramm | Name | Piktogramm |
|-----------------|------------|-----------------|------------|
| explos-4 | | explos-5 | |
| explos-6 | | | |
| flame | | flame-2-white | |
| flame-2-black | | flame-3-white | |
| flame-3-black | | flame-4-1 | |
| flame-4-2 | | flame-4-3-white | |
| flame-4-3-black | | flame-5-2-white | |
| flame-5-2-black | | | |
| flame-0 | | flame-0-5-1 | |
| bottle | | bottle-2-black | |
| bottle-2-white | | | |
| acid | | acid-8 | |
| skull | | skull-2 | |
| skull-6 | | | |

| Name | Piktogramm | Name | Piktogramm |
|--------|---|------|------------|
| exclam |  | | |
| health |  | | |
| aqpol |  | | |

35.2. Der Bildtyp hängt von der Engine ab

Sie wissen vermutlich, dass Sie nicht jeden Bildtyp mit jeder Compiler-engine verwenden können. PDF_{TEX} im DVI-Modus verlangt eps-Dateien, während PDF_{TEX} im PDF-Modus, X_{TEX} und Lua_{TEX} eps-Dateien in pdf-Dateien konvertieren, vorausgesetzt, der Anwender hat Schreibrechte in dem Verzeichnis, in dem die Bilder gespeichert sind.

Die letztgenannte können jedoch jpg- und png-Dateien ohne Schwierigkeiten einbinden, während PDF_{TEX} im DVI-Modus das nicht kann.

Um das Problem zu lösen, testet `GHSYSTEM`, welche Engine verwendet wird und falls es PDF_{TEX} ist, in welchem Modus es verwendet wird. Dann wird entweder das eps- oder das png-Bild für die Piktogramme verwendet. Sie können den Bildtyp über die Option

```
pic-type = eps/jpg/png
```

jedoch frei wählen.

36. Verfügbare Sprachen

Bis jetzt sind die H- und P-Sätze nur auf deutsch und englisch verfügbar. Das Paket reagiert auf die `CHEMMACROS` Option `german`, erkennt aber die Spracheinstellung von `babel`³⁷ oder `polyglossia`³⁸ (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 mich³⁹ gerne. Ich stelle Ihnen dann eine Template-Datei, ein pdf mit den offiziellen Übersetzungen sowie jede weitere Hilfe, die sie benötigen.

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

37. Liste aller Sätze

Wenn Sie gerne alle Sätze auflisten wollen, können Sie

```
\ghslistall[<options>]
```

verwenden.

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

`table-head-number` = <text> Default = Nummer

`table-head-text` = <text> Default = Satz

`table-next-page` = <text> Default = weiter auf der nächsten Seite

`table-caption` = <text><text> in \caption{<text>}. Default = All H, EUH, and P Statements.

`table-caption-short` = <text> <short> in \caption[<short>]{<text>}.

`table-label` = <text> Das Label, mit dem man auf die Tabelle \ref und ähnlichen Befehlen verweisen kann. Default = tab:ghs-hp-statements

`table-row-sep` = <dim> Abstand zwischen den Zeilen. Eine TeX-Länge. Default = 3pt

`table-rules` = default/booktabs/none Der Stil der horizontalen Linien in der Tabelle. default verwendet \hline, booktabs verwendet \toprule, \midrule und \bottomrule. Dieser Wert benötigt das booktabs⁴⁰ Paket, dass Sie dann einbinden müssen. Default = default

`table-top-head-rule` = default/booktabs/none Explizites Ändern der Linie. Default = default

`table-head-rule` = default/booktabs/none Explizites Ändern der Linie. Default = default

`table-foot-rule` = default/booktabs/none Explizites Ändern der Linie. Default = default

`table-last-foot-rule` = default/booktabs/none Explizites Ändern der Linie. Default = default

Der folgende Code zeigt, wie [Tabelle 3](#) erzeugt wurde:

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

Tabelle 3: Alle H, EUH und P Sätze.

| Nummer | Satz |
|--------|---------------------------------------|
| H200 | Instabil, explosiv |
| H201 | Explosiv, Gefahr der Massenexplosion. |

⁴⁰ CTAN: booktabs

weiter auf der nächsten Seite

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

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|--------|---|
| 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> |
| 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>. <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i> |

weiter auf der nächsten Seite

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

weiter auf der nächsten Seite

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

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|--------|---|
| 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 | Explosionssgeschützte elektrische Betriebsmittel/Lüftungsanlagen/Beleuchtung/... verwenden. |
| P242 | Nur funkenfreies Werkzeug verwenden. |
| P243 | Maßnahmen gegen elektrostatische Aufladungen treffen. |
| P244 | Druckminderer frei von Fett und Öl halten. |
| P250 | Nicht schleifen/stoßen/.../reiben. |
| P251 | Behälter steht unter Druck: Nicht durchstechen oder verbrennen, auch nicht nach der Verwendung. |
| P260 | Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen. |
| P261 | Einatmen von Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol vermeiden. |
| P262 | Nicht in die Augen, auf die Haut oder auf die Kleidung gelangen lassen. |
| P263 | Kontakt während der Schwangerschaft und der Stillzeit vermeiden. |
| P264 | Nach Gebrauch ... gründlich waschen. |
| P270 | Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen. |
| 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. |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|-------------|--|
| P282 | Schutzhandschuhe/Gesichtsschild/Augenschutz mit Kälteisolierung tragen. |
| P283 | Schwer entflammbare/flammhemmende Kleidung tragen. |
| P284 | Atenschutz tragen. |
| P285 | Bei unzureichender Belüftung Atenschutz tragen. |
| P231 + P232 | Unter inertem Gas handhaben. Vor Feuchtigkeit schützen. |
| P235 + P410 | Kühl halten. Vor Sonnenbestrahlung schützen. |
| P301 | BEI VERSCHLUCKEN: |
| P302 | BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: |
| P303 | BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT (oder dem Haar): |
| P304 | BEI EINATMEN: |
| P305 | BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: |
| P306 | BEI KONTAMINierter KLEIDUNG: |
| P307 | BEI Exposition: |
| P308 | BEI Exposition oder falls betroffen: |
| P309 | BEI Exposition oder Unwohlsein: |
| P310 | Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen. |
| P311 | GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen. |
| P312 | Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen. |
| P313 | Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen. |
| P314 | Bei Unwohlsein ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen. |
| P315 | Sofort ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen. |
| P320 | Besondere Behandlung dringend erforderlich (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett). |
| P321 | Besondere Behandlung (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett). |
| P322 | Gezielte Maßnahmen (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett). |
| P330 | Mund ausspülen. |
| 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: |

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|-------------|--|
| P338 | Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter ausspülen. |
| P340 | Die betroffene Person an die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert. |
| P341 | Bei Atembeschwerden an die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert. |
| P342 | Bei Symptomen der Atemwege: |
| P350 | Behutsam mit viel Wasser und Seife waschen. |
| P351 | Einige Minuten lang behutsam mit Wasser ausspülen. |
| P352 | Mit viel Wasser und Seife waschen. |
| P353 | Haut mit Wasser abwaschen/duschen. |
| P360 | Kontaminierte Kleidung und Haut sofort mit viel Wasser abwaschen und danach Kleidung ausziehen. |
| P361 | Alle kontaminierten Kleidungsstücke sofort ausziehen. |
| P362 | Kontaminierte Kleidung ausziehen und vor erneutem Tragen waschen. |
| P363 | Kontaminierte Kleidung vor erneutem Tragen waschen. |
| P370 | Bei Brand: |
| P371 | Bei Großbrand und großen Mengen: |
| P372 | Explosionsgefahr bei Brand. |
| P373 | KEINE Brandbekämpfung, wenn das Feuer explosive Stoffe/Gemische/Erzeugnisse erreicht. |
| P374 | Brandbekämpfung mit üblichen Vorsichtsmaßnahmen aus angemessener Entfernung. |
| P375 | Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen. |
| P376 | Undichtigkeit beseitigen, wenn gefahrlos möglich. |
| P377 | Brand von ausströmendem Gas:Nicht löschen, bis Undichtigkeit gefahrlos beseitigt werden kann. |
| P378 | ... zum Löschen verwenden. |
| P380 | Umgebung räumen. |
| 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. |

weiter auf der nächsten Seite

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

weiter auf der nächsten Seite

| Nummer | Satz |
|--------------------|--|
| P370 + P380 + P375 | Bei Brand: Umgebung räumen. Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen. |
| P371 + P380 + P375 | Bei Großbrand und großen Mengen: Umgebung räumen. Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen. |
| P401 | ... aufbewahren. |
| P402 | An einem trockenen Ort aufbewahren. |
| P403 | An einem gut belüfteten Ort aufbewahren. |
| P404 | In einem geschlossenen Behälter aufbewahren. |
| P405 | Unter Verschluss aufbewahren. |
| P406 | In korrosionsbeständigem/... Behälter mit korrosionsbeständiger Auskleidung aufbewahren. |
| P407 | Luftspalt zwischen Stapeln/Paletten lassen. |
| P410 | Vor Sonnenbestrahlung schützen. |
| P411 | Bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren. |
| P412 | Nicht Temperaturen von mehr als 50 °C aussetzen. |
| P413 | Schüttgut in Mengen von mehr als kg bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren. |
| P420 | Von anderen Materialien entfernt aufbewahren. |
| P422 | Inhalt in/unter ... aufbewahren. |
| P402 + P404 | In einem geschlossenen Behälter an einem trockenen Ort aufbewahren. |
| P403 + P233 | Behälter dicht verschlossen an einem gut belüfteten Ort aufbewahren. |
| P403 + P235 | Kühl an einem gut belüfteten Ort aufbewahren. |
| P410 + P403 | Vor Sonnenbestrahlung geschützt an einem gut belüfteten Ort aufbewahren. |
| P410 + P412 | Vor Sonnenbestrahlung schützen und nicht Temperaturen von mehr als 50 °C aussetzen. |
| P411 + P235 | Kühl und bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren. |
| P501 | Inhalt/Behälter ... zuführen. |

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-Mail⁴¹ dankbar.

Wenn Sie einen Bug finden, wäre es am besten, Sie schickten 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!

⁴¹ 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> | 9 |
| <code>\ </code> | 9 |

A

| | |
|---------------------------|--------|
| <code>\abinitio</code> | 10 |
| Absolute Konfiguration | 10 |
| <code>adduct-space</code> | 39, 41 |
| <code>align</code> | 23 |
| <code>angle</code> | 28 f. |
| ANHANG | 68 |
| <code>\anti</code> | 10 |
| <code>append</code> | 13 |
| <code>\aq</code> | 27 |
| <code>arg</code> | 25 |
| <code>arrow-offset</code> | 44 |
| <code>arrow-ratio</code> | 44 |
| <code>arrow-style</code> | 44 |
| <code>arrow-tips</code> | 44 f. |
| <code>arrow-yshift</code> | 44 |
| <code>\atm</code> | 11 |
| <code>\atmosphere</code> | 11 |
| <code>atoms</code> | 28 |

B

| | |
|---------------------------------|------------|
| <code>\ba</code> | 7, 32 |
| <code>babel</code> | 57 |
| <code>back-atoms</code> | 28 |
| Befehle für <code>mhchem</code> | 22 f. |
| BEVOR ES LOS GEHT | 3–6 |
| <code>bm</code> | 3 |
| <code>bond-length</code> | 39 |
| <code>booktabs</code> | 58 |
| <code>bpchem</code> | 3, 5 |
| <code>bpchem</code> | 3, 5, 8 f. |

C

| | |
|----------------------------|----|
| <code>C-temperature</code> | 54 |
| Cahn-Ingold-Prelog | 9 |

| | |
|----------------------------|--------------------------------------|
| <code>\cal</code> | 11 |
| <code>\calory</code> | 11 |
| <code>\centering</code> | 33 |
| <code>\ch</code> | 27, 31, 34 f., 37, 41 ff., 46 f., 49 |
| <code>charge-hshift</code> | 39 f. |
| <code>charge-style</code> | 39 |
| <code>charges</code> | |
| <code>append</code> | 13 |
| <code>chemfig</code> | 8, 15 |
| CHEMFORMULA | 34–51 |
| CHEMMACROS | 7–33 |
| <code>\chemsetup</code> | 6, 32, 35 |
| <code>chemstyle</code> | 7, 11 |
| <code>\cip</code> | 9 |
| <code>circled</code> | 5, 8 |
| <code>circletype</code> | 5 |
| <code>\cis</code> | 9 |
| <code>cis/trans</code> | 9 |
| <code>\cmc</code> | 11 |
| <code>color</code> | 29 |
| <code>compound-sep</code> | 45 |
| <code>cool</code> | 5, 9 |

D

| | |
|-------------------------------|--------|
| <code>decimal-marker</code> | 14, 36 |
| <code>\DeclareParticle</code> | 8 |
| <code>\delm</code> | 15 |
| <code>\delp</code> | 15 |
| <code>delta</code> | 19 ff. |
| <code>detect-bold</code> | 5 |
| <code>\Dfi</code> | 9 |
| <code>dist</code> | 17 |
| <code>dots</code> | 54 |

E

| | |
|------------------------|--------|
| <code>\E</code> | 5, 9 |
| <code>effect</code> | 53 |
| Einheiten | 11 |
| <code>\El</code> | 7 |
| <code>\el</code> | 7 |
| <code>elpair</code> | 8 |
| <code>\Ent</code> | 9 |
| <code>\Enthalpy</code> | 19, 32 |

| | |
|---------------------------------------|------------------|
| <code>\Entropy</code> | 19, 32 |
| <code>environ</code> | 3 |
| <code>expl3</code> | 3 |
| <code>explicit-sign</code> | 14 |
| <code>exponent</code> | 19 ff. |
| <code>exposure</code> | 53 |
| <code>EZ</code> | 5, 9 |
| F | |
| <code>F-temperature</code> | 54 |
| <code>\fdelm</code> | 15 |
| <code>\fdelp</code> | 15 |
| <code>fill-in</code> | 52 |
| Fischer | 9 |
| <code>\fmch</code> | 12, 32 |
| <code>\fminus</code> | 7 |
| <code>font-family</code> | 48 |
| <code>font-series</code> | 48 |
| <code>font-shape</code> | 48 |
| <code>font-spec</code> | 48 |
| <code>fontsize</code> | 23 |
| <code>fontspec</code> | 48 |
| <code>format</code> | 23, 47 |
| Format und Schrift | 47 ff. |
| <code>\fpch</code> | 12, 32 |
| <code>\fplus</code> | 5, 7 |
| <code>frac-style</code> | 36 f. |
| <code>\fscrm</code> | 15 |
| <code>\fscrp</code> | 15 |
| <code>\fsscrm</code> | 15 |
| <code>\fsscrp</code> | 15 |
| G | |
| <code>\gas</code> | 27 |
| Gefahren- und Sicherheitssätze | 51–54 |
| <code>german</code> | 5, 12, 26 f., 57 |
| Geschützter Input | 41 f. |
| <code>math</code> | 42 |
| <code>text</code> | 42 |
| <code>\ghs</code> | 51 |
| <code>ghs</code> | 5 |
| <code>\ghs*</code> | 51 |
| <code>\ghslistall</code> | 58 |
| <code>\ghspic</code> | 54 f. |
| GHSYSTEM | 51–67 |
| Aufruf | 51 |

| | |
|------------------------------|--------|
| kombinierte Sätze | 54 |
| Platzhalter | 52 |
| Sätze mit Lücken | 53 |
| <code>\Gibbs</code> | 19, 32 |
| <code>graphicx</code> | 3 |
| H | |
| <code>half</code> | 29 |
| <code>\hertz</code> | 33 |
| <code>hide</code> | 52 |
| <code>\Hpl</code> | 7 |
| <code>\HtO</code> | 7 |
| <code>\Hyd</code> | 7 |
| I | |
| <code>ifpdf</code> | 3 |
| <code>includegraphics</code> | 55 |
| <code>\insitu</code> | 10 |
| Installation | 4 |
| Ionenladungen | 12 f. |
| <code>\iupac</code> | 9 |
| IUPAC-Namen | 8 ff. |
| Cahn-Ingold-Prelog | 9 |
| cis/trans | 9 |
| Fischer | 9 |
| ortho/meta/para | 10 |
| tert | 9 |
| zusammen/entgegen | 9 |
| IUPAC Names | |
| syn/anti | 9 |
| K | |
| <code>\Ka</code> | 12 |
| <code>\Kb</code> | 12 |
| <code>kg-mass</code> | 54 |
| <code>\Kw</code> | 12 |
| L | |
| <code>l3kernel</code> | 3 |
| <code>l3keys2e</code> | 3 |
| <code>l3packages</code> | 3 |
| <code>label-offset</code> | 45 |
| <code>label-style</code> | 45 |
| Laden des Bundles | 4 |
| <code>language</code> | 57 |
| Lateinische Ausdrücke | 10 f. |
| <code>lbs-mass</code> | 54 |

| | |
|-------------------------------|--------------------------|
| <code>\Lfi</code> | 9 |
| <code>\liquid</code> | 27 |
| <code>list-entry</code> | 26 |
| <code>list-name</code> | 26 |
| Liste aller Sätze | 58–67 |
| <code>\listofreactions</code> | 26 |
| <code>longtable</code> | 3, 58 |
| <code>\lqd</code> | 5, 27, 31 |
| M | |
| <code>math-space</code> | 42 |
| Mathematik-Umgebungen | 49 |
| <code>mathspec</code> | 5, 7 |
| <code>mathtools</code> | 3, 24 |
| <code>\mch</code> | 12, 32 |
| <code>\mech</code> | 16 |
| <code>\mega</code> | 33 |
| <code>\meta</code> | 10 |
| <code>method</code> | 3, 5, 8, 22, 31 |
| <code>mhchem</code> | 3 ff., 8, 22, 25, 34, 43 |
| <code>\mhName</code> | 23, 33 |
| mhName | |
| <code>align</code> | 23 |
| <code>fontsize</code> | 23 |
| <code>format</code> | 23 |
| <code>width</code> | 23 |
| <code>\Molar</code> | 11 |
| <code>\moLar</code> | 11 |
| <code>\molar</code> | 11 |
| <code>\MolMass</code> | 11 |
| N | |
| <code>name-format</code> | 46 |
| <code>name-width</code> | 46 |
| <code>\newman</code> | 27, 33 |
| newman | |
| <code>angle</code> | 28 |
| <code>atoms</code> | 28 |
| <code>back-atoms</code> | 28 |
| <code>ring</code> | 28 |
| <code>scale</code> | 28 |
| Newman-Projektionen | 27 ff. |
| <code>\newreaction</code> | 25, 33 |
| <code>ngerman</code> | 5 |
| <code>nicefrac</code> | 3, 37 |
| <code>\NMR</code> | 5, 21, 33 |
| nmr | |
| <code>nucleus</code> | 22 |
| <code>unit</code> | 22 |
| <code>\NMR*</code> | 21 |
| <code>\normal</code> | 11 |
| <code>\ntr</code> | 7 |
| <code>\Nu</code> | 5, 7, 32 |
| <code>Nu</code> | 5, 7 |
| <code>\Nuc</code> | 7 |
| <code>nucleus</code> | 22 |
| O | |
| <code>opacity</code> | 30 |
| option | |
| <code>bpchem</code> | 5 |
| <code>circled</code> | 5 |
| <code>circletype</code> | 5 |
| <code>detect-bold</code> | 5 |
| <code>EZ</code> | 5 |
| <code>german</code> | 5, 12, 26 f., 57 |
| <code>ghs</code> | 5 |
| <code>method</code> | 5, 22, 31 |
| <code>ngerman</code> | 5 |
| <code>Nu</code> | 5, 7 |
| <code>strict</code> | 5 |
| <code>synchronize</code> | 6, 32 |
| <code>version</code> | 6 |
| <code>xspace</code> | 6 |
| <code>\orbital</code> | 29, 33 |
| orbital | |
| <code>angle</code> | 29 |
| <code>color</code> | 29 |
| <code>half</code> | 29 |
| <code>opacity</code> | 30 |
| <code>overlay</code> | 30 |
| <code>phase</code> | 29 |
| <code>scale</code> | 29 |
| Orbitale | 29 ff. |
| <code>organs</code> | 53 |
| <code>\ortho</code> | 10 |
| <code>ortho/meta/para</code> | 10 |
| <code>overlay</code> | 30 |
| <code>\OX</code> | 16, 32 |
| <code>\ox</code> | 13, 15, 32 |
| ox | |
| <code>decimal-marker</code> | 14 |

| | |
|-------------------------------|--------|
| explicit-sign | 14 |
| parse | 13 |
| pos | 13 f. |
| roman | 13 |
| \ox* | 14 |
| Oxidationszahlen | 13 f. |
| P | |
| \p | 12 |
| Paketooptionen | 5 f. |
| \para | 10 |
| parse | 13 |
| Partialladungen | 15 |
| particle | |
| elpair | 8 |
| \pch | 12, 32 |
| Pfeile | 43 ff. |
| Anpassung | 44 |
| Beschriftung | 43 |
| Typen | 43 |
| \pH | 12 |
| phase | 29 |
| Phasen | 27 |
| pic-type | 57 |
| Piktogramme | 54–57 |
| \pKa | 5, 12 |
| \pKb | 12 |
| plus-space | 41 |
| \pOH | 12 |
| polyglossia | 57 |
| pos | 13 f. |
| \prt | 7 |
| R | |
| \R | 7 |
| \Rcip | 9 |
| \Rconf | 10 |
| \reaction | 25 |
| reaction | |
| list-entry | 26 |
| list-name | 26 |
| reaction (env.) | 23 |
| reaction* (env.) | 23 |
| \reactionlistname | 26 |
| reactions (env.) | 23 |
| reactions* (env.) | 23 |

| | |
|--|------------------|
| Reaktionsmechanismen | 16 |
| Reaktionsumgebungen | 23–26 |
| \redox | 16, 32 |
| redox | |
| dist | 17 |
| sep | 17 |
| Redoxreaktionen | 16 ff. |
| \renewstate | 20, 33 |
| \renewtagform | 24 |
| ring | 28 |
| roman | 13 |
| S | |
| Säure/Base | 12 |
| scale | 28 f., 55 |
| \Scip | 9 |
| \Sconf | 10 |
| \scrm | 15 |
| \scrp | 15 |
| sep | 17 |
| \setnewstate | 20, 33 |
| Setup | 6 |
| siunitx | 3, 11, 19, 21 f. |
| \slld | 5, 27, 31 |
| \solid | 27 |
| space | 52 |
| Spektroskopie | 21 f. |
| Spezielle Input-Typen | 41 |
| \standardstate | 7, 32 f. |
| star | 25 |
| \State | 21, 33 |
| state | |
| delta | 21 |
| exponent | 21 |
| subscript-left | 21 |
| Stereodeskriptoren und Nomenklatur .. | 9 f. |
| Stöchiometrische Faktoren | 35 ff. |
| nicefrac | 37 |
| space | 37 |
| xfrac | 36 |
| stoich-space | 36 f. |
| strict | 5, 8 |
| subscript | 19 f. |
| subscript-left | 20 f. |
| subscript-style | 39 |
| subscript-vshift | 39 f. |

| | | | |
|-----------------------------------|-----------------------------------|--|-----------|
| substance | 53 | U | |
| Summenformeln | 37–41 | Übersicht über die Optionen (chemmacros) | |
| Addukte | 37 | 32 f. | |
| Anpassung | 39 | unit | 19, 22 |
| Befehle | 38 | V | |
| Bindungen | 39 | version | 6 |
| Länge | 41 | W | |
| Hochstellungen | 38 | \water | 7 |
| Ladungen | 38 | width | 23 |
| Verschiebung | 39 | X | |
| Tiefstellungen | 38 | xfrac | 3, 14, 36 |
| Verschiebung | 40 | xparse | 3 |
| \syn | 9 | xspace | 3, 6 |
| synchronize | 6, 32 | xspace | 3 |
| T | | Z | |
| table-caption | 58 | \Z | 9 |
| table-caption-short | 58 | \Zus | 9 |
| table-foot-rule | 58 | zusammen/entgegen | 9 |
| table-head-number | 58 | | |
| table-head-rule | 58 | | |
| table-head-text | 58 | | |
| table-label | 58 | | |
| table-last-foot-rule | 58 | | |
| table-next-page | 58 | | |
| table-row-sep | 58 | | |
| table-rules | 58 | | |
| table-top-head-rule | 58 | | |
| tabu | 3 | | |
| Teilchen, Ionen und Symbole | 7 f. | | |
| eigene | 8 | | |
| vordefiniert | 7 | | |
| tert | 9 | | |
| \tert | 10 | | |
| text | 53 | | |
| Text unter Formeln | 46 f. | | |
| Anpassung | 46 | | |
| syntax | 46 | | |
| Thermodynamik | 19 ff. | | |
| TikZ | 3, 7, 10, 16 f., 27 f., 30, 43 f. | | |
| tikz | 3 | | |
| \tiny | 33 | | |
| \torr | 11 | | |
| \trans | 9 | | |
| \transitionstatesymbol | 7 | | |