

# myChemistry

v1.4

15. April 2011

Clemens Niederberger

## Reaktionsschemata mit L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X und ChemFig erstellen

```
\begin{rxn}[,.7]
\setatomsep{1.5em}\footnotesize
\reactant[,a]{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]HO)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
}
\branch[above right=of a]{
\arrow[above right,,.7]{}{}
\reactant[above right]{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]H_2O@{e2}
\chembelow{O}{\oplus})-C(-[2]CH_3)-[6]OH)-CH_3}\elmove{e1}
{10:4mm}{-2}{-10:4mm}
}
\arrow{$-\ce{H2O}$}{}{}
\reactant[below right]{
\chemfig{\chembelow{C}{\oplus}(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))-C
(-[2]CH_3)-[6]OH)-CH_3}
}
}
\branch[below right=of a]{
\arrow[below right,-|>.7]{}{}
\reactant[below right]{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]HO)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
\chembelow{O}{\oplus}H_2)-CH_3}\elmove{e3}
{170:4mm}{e4}{-170:4mm}
}
\arrow{$-\ce{H2O}$}{}{}
\reactant{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]HO)-
\chembelow{C}{\oplus}(-[2]CH_3)-CH_3}
}
}
\end{rxn}
```

# Inhaltsverzeichnis

<b>ABSCHNITT 1 Über</b>	<b>3</b>
1.1 Änderungen . . . . .	3
<i>Version 1.2, 3 • Version 1.3, 4 • Version 1.4, 4</i>	
1.2 Lizenz . . . . .	5
1.3 Voraussetzungen . . . . .	5
1.4 Die Idee . . . . .	5
<b>ABSCHNITT 2 Verwendung</b>	<b>6</b>
2.1 Hintergrund . . . . .	6
2.2 Das Grundprinzip . . . . .	7
2.3 Wie funktioniert's? . . . . .	8
<i>Basisbefehle, 8 • Verzweigungen, 9 • Nummerierte Schemata, 12</i>	
2.4 Voreinstellungen . . . . .	12
2.5 Paket-Optionen . . . . .	14
<b>ABSCHNITT 3 Fortgeschrittene Anwendung, Verwendung von TikZ</b>	<b>15</b>
3.1 Die Ausrichtungsfrage . . . . .	15
3.2 Mit TikZ andere Ziele erreichen . . . . .	19
<b>ABSCHNITT 4 Alphabetische Befehlsreferenz</b>	<b>19</b>
4.1 anywhere . . . . .	20
4.2 arrow . . . . .	21
<i>Optionen, 21 • Ausrichtung, 23 • Aussehen, 23</i>	
4.3 branch . . . . .	23
<i>Ausrichtungsprobleme, 25</i>	
4.4 chemand . . . . .	26
4.5 dummy . . . . .	26
4.6 elmove . . . . .	27
4.7 makeinvisible . . . . .	27
4.8 makevisible . . . . .	27
4.9 marrow . . . . .	28
4.10 mCsetup . . . . .	28
4.11 merge . . . . .	29
4.12 mesomeric . . . . .	33
4.13 reactant . . . . .	35
4.14 rxn (Umgebung) . . . . .	36
<i>Optionen, 36</i>	
4.15 rxnscheme (Umgebung) . . . . .	38

<i>Optionen, 38 • rnscheme anpassen, 40</i>	
4.16 setarrowlength . . . . .	42
4.17 setarrowline . . . . .	43
4.18 setatomsizes . . . . .	43
4.19 setbondlength . . . . .	43
4.20 setbondshape . . . . .	43
4.21 setmergelength . . . . .	44
4.22 setrendist . . . . .	44
4.23 setrxnalign/setschemealign . . . . .	44
4.24 setschemename . . . . .	45
4.25 transition . . . . .	45
<b>ABSCHNITT 5 Beispiele</b>	<b>46</b>
5.1 Addition . . . . .	46
5.2 Mesomerie . . . . .	48
5.3 Hydratisierung . . . . .	57
5.4 Veresterung . . . . .	60
5.5 Umfangreiche Synthese . . . . .	61
<b>ABSCHNITT 6 Nachwort</b>	<b>66</b>
<b>ABSCHNITT 7 Dank</b>	<b>67</b>
<b>STICHWORTVERZEICHNIS</b>	<b>68</b>

# 1 Über

## 1.1 Änderungen

Die neuesten Änderungen sind mit **neu** gekennzeichnet.

### 1.1.1 Version 1.2

Neben einigen Bugfixes gibt es in Version v1.2 ein paar Neuerungen. Insbesondere wurde das fehlerhafte Verhalten bei der Ausrichtung von Branches sowie das seltsame Verhalten von Pfeilbeschriftungen, wenn man die Pfeillänge änderte, korrigiert. **Diese Veränderung hat zur Folge, dass myChemistry nun TikZ oder vielmehr pgf in der Version 2.10 benötigt** (siehe [Abschnitt 1.3](#)).

Während sich diese Neuerungen im Hintergrund abspielen, gibt es auch ein paar Neuerungen für die Bedienung. Zum Beispiel gibt es nun einige Paketoptionen, um die auto-

matisch eingebundenen Pakete besser zu handhaben ([Abschnitt 2.5](#)). Außerdem haben die Pfeile zwei neue Keys bekommen (siehe [Abschnitt 4.2](#)).

Auch die Umgebungen haben nun ein paar Möglichkeiten mehr, den persönlichen Vorstellungen angepasst zu werden (siehe [Abschnitt 4.14.1](#), [Abschnitt 4.15.1](#) und [Abschnitt 4.22](#)).

Nicht zuletzt steht myChemistry ab v1.2 nun unter der LPPL Version 1.3 oder später.

### 1.1.2 Version 1.3

Die Befehle `\branch`, `\mesomeric`, `\reactant` und `\transition` können als optionales Argument neben der Ausrichtung auch TikZ-Keys erhalten. Das zweite Argument ist nun ebenfalls als Option einzusetzen. Damit ist das erste optionale Argument immer noch die Ausrichtung, das zweite der Anker und in das dritte können beliebige TikZ-Keys eingesetzt werden.

```
1 \befehl [<ausrichtung>,<anker>,<tikz>]{}

```

Bis Version 1.2 musste die Ausrichtung explizit angegeben werden, auch wenn die Default-Einstellung verwendet werden sollte, falls man TikZ-Keys verwenden wollte. Das ist seit v1.3 nicht mehr nötig.

```
1 % bisher:
2 \reactant{\ce{Br2}}{\arrow{$h\nu$}}{\reactant[right,
   draw,inner sep=5pt]{\ce{2 \lewis{0.,Br}}}}{}
3 % jetzt:
4 \reactant{\ce{Br2}}{\arrow{$h\nu$}}{\reactant[, ,draw,
   inner sep=5pt]{\ce{2 \lewis{0.,Br}}}}

```

Die Voreinstellungsbefehle wurden umbenannt und der Befehl `\mCsetup` hinzugefügt, mit dem die Voreinstellungen mit einer Schnittstelle gehandhabt werden können. Siehe [Abschnitt 4.16](#), [Abschnitt 4.18](#), [Abschnitt 4.19](#), [Abschnitt 4.20](#) und [Abschnitt 4.10](#).

Es gibt den neuen Befehl `\chemand`, der ein + erzeugt, siehe [Abschnitt 4.4](#).

Wenn man ChemFig v0.4 oder v0.4a verwendet, wird die Datei `bondwidth.tex` eingebunden, die den Befehl `\setbondwidth<dicke>` bereitstellt. Damit kann die Liniendicke der Bindungen von ChemFig-Formeln verändert werden.

Und auch das ist vielleicht ganz angenehm: alle myChemistry-Befehle in den Listings der Dokumentation sind nun anklickbare Hyperlinks, die auf ihre Beschreibung in der Befehlsreferenz verweisen.

### 1.1.3 Version 1.4

NEU

Der Befehl `\merge` wurde neu geschrieben, so dass der Pfeil auch beschriftet werden kann.

Der eigentliche Zweck des Befehls `\dummy` ist obsolet geworden. Der Befehl existiert aber weiterhin.

Bei den beiden Umgebungen `rxn` und `rxnscheme` hat sich die Verwendung der Optionen geändert, siehe [Abschnitt 4.14.1](#) und [Abschnitt 4.15.1](#).

Die Keys von `\arrow` sind in Optionen verändert worden, um die Syntax des Befehls mit den anderen anzugleichen. Zudem gibt es einen neuen Pfeiltypen, siehe [Abschnitt 4.2](#). Neu ist außerdem das Aussehen der Pfeile und eine Möglichkeit, die Liniendicke der Pfeile anzupassen, siehe [Abschnitt 4.17](#).

Es gibt einen weiteren neuen Befehl: `\anywhere` ([Abschnitt 4.1](#)), mit dem Text oder Formeln außerhalb der Chain gesetzt werden können.

## 1.2 Lizenz

myChemistry v1.4 steht unter der L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X Project Public License Version 1.3 oder später. (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>)

## 1.3 Voraussetzungen

Damit myChemistry funktionieren kann, müssen ein paar Pakete installiert sein:

**ChemFig** ohne das ergibt die ganze Sache gar keinen Sinn;

**ifthen** für interne Abfragen;

**calc** für interne Berechnungen;

**xkeyval** Paketoptionen und Befehl-Keys werden damit erstellt;

**float** damit wird die **rxnscheme**-Umgebung definiert;

**pgf/TikZ** pgf ist nicht nur ein Paket sondern eine ganze Reihe von Paketen. Sie stellen die gesamte Basis für TikZ da. Damit myChemistry funktionieren kann, muss mindestens die Version vom 08.09.2010<sup>1</sup> installiert sein.

Genauer: der Befehl `\pgfpositionnodelater` muss verfügbar sein. Noch genauer benötigt der Key `both` des Befehls `\arrow` diese Version. Wenn Sie den Key nicht verwenden, sollte myChemistry auch mit pgf v2.00 problemlos funktionieren. Ältere Versionen wurden nicht getestet.

## 1.4 Die Idee

Seit August 2010 steht mit **ChemFig** eine wirklich flexible Lösung für organische Strukturformeln zur Verfügung. So kann man nun durch das Einbinden von **ChemFig** und 'mhchem' mehr oder weniger alle Struktur- und Summenformeln, die man als Chemiker so benötigt, mit L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X setzen. Was **ChemFig** gegenüber 'ochem' noch benachteiligt, ist das Erstellen richtiger Reaktionsmechanismen. Hier soll myChemistry Abhilfe schaffen.

myChemistry bindet die Pakete

- **ChemFig**<sup>2</sup>,

---

<sup>1</sup><http://sourceforge.net/projects/pgf/files/>

<sup>2</sup>von Christian Tellechea, <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/generic/chemfig/>

- wenn vorhanden ‘mhchem’<sup>1</sup> in der Version 3,
- wenn vorhanden ‘chemexec’<sup>2</sup> und
- wenn vorhanden ‘chemcompounds’<sup>3</sup> ein.

Zur Funktion der Befehle der oben genannten Pakete siehe deren Dokumentation. Wenn Sie die Pakete separat laden wollen, weil Sie ihnen Optionen mitgeben wollen, dann sollten Sie das machen, *bevor* Sie **myChemistry** laden, um Konflikte zu vermeiden. **myChemistry** prüft intern einerseits darauf, ob die Pakete installiert sind und falls ja, ob sie bereits geladen sind. Wenn nicht, werden sie von **myChemistry** aufgerufen.

Befehle, die durch die eingebundenen Pakete zur Verfügung stehen, sind unter anderem

- `\ce{}` (mhchem)
- `\ox{}`, `\om{}`, `\op{}`, `\Hyd`, `\Hpl` (chemexec)
- `\chemfig{}`, `\chemrel{}`, `\chemsign{}`, `\lewis{}` (ChemFig)
- `\declarecompound{}`, `\compound{}` (chemcompounds).

In den Beispielen in diesem Manual wurden Befehle dieser Pakete verwendet *ohne sie speziell als solche zu kennzeichnen*.

Vor allem stellt **myChemistry** Befehle zum Erstellen von Reaktionsschemata zur Verfügung.

## 2 Verwendung

### 2.1 Hintergrund

**myChemistry** stellt zwei Umgebungen zur Verfügung, innerhalb derer die Reaktionsmechanismen erstellt werden. Beide Umgebungen sind letztlich eine **tikzpicture**-Umgebung. Die Frage, die sich aufdrängt, ist natürlich: wozu? **ChemFig** bringt doch schon einiges an Möglichkeiten mit, Reaktionsgleichungen zu erstellen. Und mit **TikZ** hat man wirklich alle Möglichkeiten offen. Zugegeben. Allerdings bin ich faul, also habe einige häufig verwendete **TikZ**-Befehle zu Makros zusammengefasst. Die sind immer mehr geworden und haben immer mehr Feinheiten erhalten, so dass dieses Paket dabei herausgekommen ist.

---

<sup>1</sup> von Martin Hensel, <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/mhchem/>

<sup>2</sup> von mir, <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/chemexec/>

<sup>3</sup> von Stephan Schenk, <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/chemcompounds/>

## 2.2 Das Grundprinzip

In dem `tikzpicture`, das in den myChemistry-Umgebungen erstellt wird, werden Reaktanten und Reaktionspfeile mit einzelnen ‘nodes’<sup>1</sup> auf einer ‘chain’<sup>2</sup> angeordnet.

---

### Beispiel 1

```
1 \begin{tikzpicture}[start chain]
2 \node [on chain] {A};
3 \node [on chain] {B};
4 \node [on chain] {C};
5 \end{tikzpicture}
```

A            B            C

---

Dadurch ergeben sich einige Möglichkeiten, die ‘nodes’ relativ zueinander zu platzieren.

---

### Beispiel 2

```
1 \begin{tikzpicture}[start chain=
   going right, node distance=5mm]
2 \node [draw,on chain] {Hello};
3 \node [draw,on chain] {World};
4 \node [draw,continue chain=going
   below, on chain] {,};
5 \node [draw,on chain] {this};
6 \node [draw,on chain] {is};
7 \end{tikzpicture}
```

Hello

World

,

this

is

---

myChemistry macht vor allem von der Möglichkeit Gebrauch, ‘branches’ zu erstellen.

---

<sup>1</sup>In einem tikzpicture kann man nahezu beliebig sogenannte ‘nodes’ setzen, mit allen möglichen Formen und Inhalten. Das sind „Knotenpunkte“ an bestimmten Koordinaten in einer ‘tikzpicture’-Umgebung.

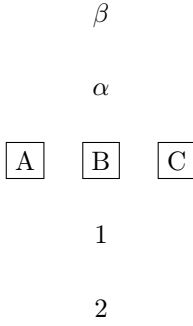
<sup>2</sup>Dafür ist die tikzlibrary ‘chains’ nötig.

**Beispiel 3**

```

1 \begin{tikzpicture}[start chain=
  going right, node distance=5mm]
2 \node [draw,on chain] {A};
3 \node [draw,on chain] {B};
4 { [start branch]
5 \node [on chain=going below]
  {1};
6 \node [on chain=going below]
  {2};
7 }
8 { [start branch]
9 \node [on chain=going above]
  { $\alpha$ };
10 \node [on chain=going above]
  { $\beta$ };
11 }
12 \node [draw,on chain] {C};
13 \end{tikzpicture}

```



Sie müssen das nicht in allen Konsequenzen nachvollziehen, sollten aber die Richtungsangaben des letzten Beispiels in Erinnerung behalten, denn sie werden von **myChemistry** ebenfalls verwendet.

In manchen Beispielen der Dokumentation werden die Nodes farbig eingerahmt (siehe [Abschnitt 4.8](#)), damit man sehen kann, welchen Platz sie einnehmen und welchen Effekt eine Änderung der Ausrichtung hat.

**2.3 Wie funktioniert's?****2.3.1 Basisbefehle**

Sehen wir uns zunächst ein Beispiel an:

**Beispiel 4**

```

1 \begin{rxn}
2 \reactant{ \chemfig
  { -[:30] -[: -60] OH } }
3 \arrow{Ox.}{}
4 \reactant{ \chemfig
  { -[:30] =_[: -60] O } }
5 \end{rxn}

```



Sie sehen hier die wichtigsten Befehle von **myChemistry** im Einsatz:

```
1 \begin{rxn}[<align>,<scale>]
```

Die erste von zwei Umgebungen. Sie stellt die Reaktionschemata zwischen den Text und zentriert sie (siehe [Abschnitt 4.14](#)).



```
1 \reactant[<ausrichtung>,<anker>,<tikz>]{<formeln>}
```

setzt eine node auf die chain, in die die chemischen Formeln geschrieben werden. Die Standard-Ausrichtung ist right (siehe [Abschnitt 4.13](#)).

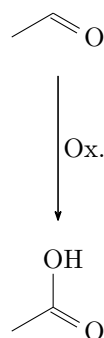
```
1 \arrow[<richtung>,<typ>,<längenfaktor>,<anker>,<both>]{<
  oben>}{<unten>}
```

schreibt in der Standardeinstellung einen 5em langen einfachen Pfeil nach rechts (siehe [Abschnitt 4.2](#)).

---

### Beispiel 5

```
1 \begin{rxn}
2 \reactant{ \chemfig
  {-[:30]=_[:-60]O} }
3 \arrow[below]{0x.}
4 \reactant[below]{ \chemfig
  {-[:30](-[:-60]OH)=_[:-60]O} }
5 \end{rxn}
```



Wie Sie sehen, lässt sich das Reaktionsschema durch optionale Argumente anders ausrichten. Durch die Angabe **below** wird die Carbonsäure unter den Pfeil gesetzt und nicht rechts daneben. Durch die Angabe **below** zeigt der Pfeil nach unten anstatt nach rechts.

### 2.3.2 Verzweigungen

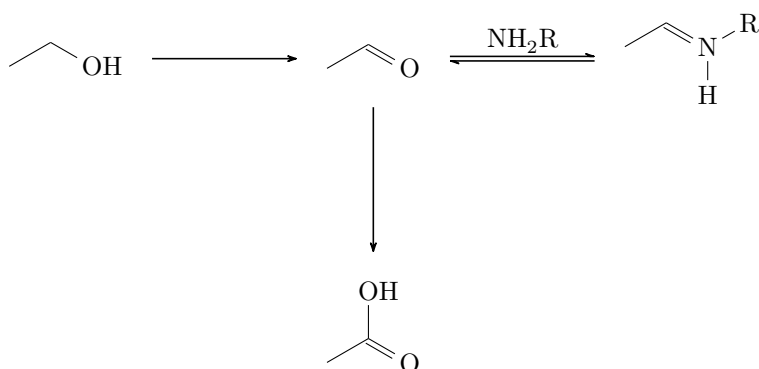
Bislang ist noch nicht recht einsichtig, wieso man **myChemistry** einsetzen sollte. Die waagerechten Reaktionen sind mit 'mhchem' und **ChemFig** selbst zu verwirklichen. Und weshalb sollte man eine senkrechte Reaktion benötigen? Was den Einsatz von **myChemistry** aber interessant machen könnte, ist die Möglichkeit, verzweigte Reaktionsschemata zu erstellen.

**Beispiel 6**

```

1 \begin{rxn}
2 \reactant{ \chemfig{-[:30]-[:60]OH} }
3 \arrow{}{}
4 \reactant[,carbonyl]{ \chemfig{-[:30]=_[:60]O} }
5 \arrow[below]{}{}
6 \reactant[below]{ \chemfig{-[:30](-[:60]OH)=_[:60]O} }
7 \branch[right=of carbonyl]{
8   \arrow[,<=>]{\ce{NH2R}}{}
9   \reactant{ \chemfig{-[:30]=_[:60]N(-[6]H)-[:60]R} }
10 }
11 \end{rxn}

```



Im letzten Beispiel haben Sie einen weiteren wichtigen Befehl kennengelernt (siehe [Abschnitt 4.3](#)):

```

1 \vitem=\branch[<ausrichtung>,<anker>,<tikz>]{<zweig>}

```

Der Zweig wurde mit `right=of carbonyl` rechts neben den ersten Reaktanden mit dem Anker `carbonyl` angesetzt. Innerhalb des Zweigs wurde beim Pfeil der Key `type={<=>}` verwendet, wodurch der Gleichgewichtspfeil dargestellt wurde. Andere `type`-Möglichkeiten wären `->` (Voreinstellung), `<-` oder `<->`.

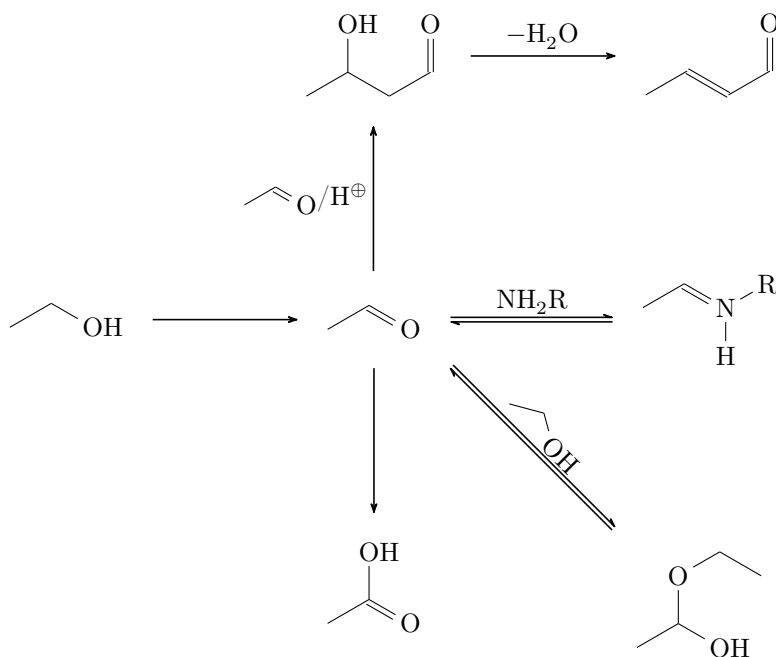
Durch mehrfaches Verwenden von `\branch` können so umfangreichere Reaktionsschemata entstehen:

## Beispiel 7

```

1 \begin{rxn}
2 \reactant{ \chemfig{-[:30]-[:60]OH} }
3 \arrow{}{}
4 \reactant[,carbonyl]{ \chemfig{-[:30]=_[:60]O} }
5 \arrow[below]{}{}
6 \reactant[below]{ \chemfig{-[:30](-[:60]OH)=_[:60]O} }
7 \branch[right=of carbonyl,imin]{
8 \arrow[,<=>,1.12]{\ce{NH2R}}{}
9 \reactant{ \chemfig{-[:30]=_[:60]N(-[6]H)-[:60]R} }
10 }
11 \branch[below right=of carbonyl,halbacetal,yshift=-2pt,xshift=3pt]{
12 \arrow[below right,<=>,1.12]{ \chemfig{[,75]-[:30]-[:60]OH} }{}
13 \reactant[below right]{ \chemfig{-[:30](-[:60]O-[:60]-[:60])
-[:60]OH} }
14 }
15 \branch[above=of carbonyl,aldol,xshift=5.2em]{
16 \arrow[above]{ \chemfig{[,75]-[:30]=_[:60]O}/\Hpl }{}
17 \reactant[above]{ \chemfig{-[:30](-[:60]OH)-[:60]-[:60]=[:60]O
} }
18 \arrow{$-\ce{H2O}$}{}
19 \reactant{ \chemfig{-[:30]=[:60]-[:60]=[:60]O} }
20 }
21 \end{rxn}

```



### 2.3.3 Nummerierte Schemata

Die zweite Umgebung von **myChemistry** funktioniert genau wie die erste, setzt das Reaktionsschema allerdings in eine nummerierte Gleitumgebung mit Überschrift.

---

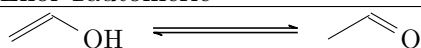
#### Beispiel 8

```
1 \begin{rxnscheme}{Keto-Enol-Tautomerie}
2 \reactant{\chemfig{=[:30]-[: -60]OH} }
3 \arrow[,<=>]{}{}
4 \reactant{\chemfig{-[:30]=[: -60]O} }
5 \end{rxnscheme}
```

---

#### Reaktionsschema 1 Keto-Enol-Tautomerie

---



Hier kommt die Umgebung

```
1 \begin{rxnscheme}[<label>,<placement>,<align>,<scale>,<
   name>]{<caption>}
2 ...
3 \end{rxnscheme}
```

zum Einsatz. Wie Sie die Ihren Vorstellungen gemäß anpassen können, lesen Sie in der Befehlsreferenz ([Abschnitt 4.15](#)).

## 2.4 Voreinstellungen

Es gibt einige Voreinstellungen, die zum Teil meinem persönlichen Geschmack geschuldet sind, die Sie aber nach Bedarf ändern können. So gelten für die **ChemFig**-Formeln innerhalb der **myChemistry**-Umgebungen folgende Voreinstellungen:

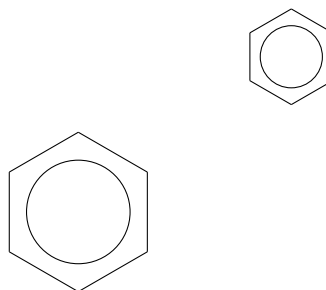
```
1 \setatomsep{1.8em}
2 \setcrambond{3pt}{0.5pt}{1pt}
```

Außerhalb der Umgebungen gelten weiterhin die Voreinstellungen von **ChemFig**.

---

#### Beispiel 9

```
1 \begin{rxn}
2 \reactant{\chemfig{**6(-----)}}
3 \end{rxn}
4 \chemfig{**6(-----)}
```



Sie können die Voreinstellungen von **myChemistry** über folgende Befehle ändern:

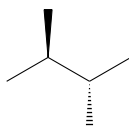
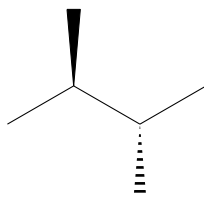
```
1 \setbondlength{<länge>}
2 \setbondshape{<basislänge>}{<strichdicke>}{<strichabstand>}
3 \setatomsizes{<schriftgröße>}
```

Damit werden die Einstellungen nachfolgend *für alle weiteren myChemistry-Umgebungen* geändert. Lassen Sie die Argumente leer, werden die Voreinstellungen wiederhergestellt. `\setatomsizes` hat die Voreinstellung `\small`.

---

### Beispiel 10

```
1 \setbondlength{2.1em}\setbondshape{5pt}{1pt}{2pt}\setatomsizes{\Large}
2 \begin{rxn}
3 \reactant{\chemfig{-[:30](<[:60])-[: -60](<[: -60])-[:60]}}
4 \end{rxn}
5 \setbondlength{}\setbondshape{}{}{}\setatomsizes{}
6 \begin{rxn}
7 \reactant{\chemfig{-[:30](<[:60])-[: -60](<[: -60])-[:60]}}
8 \end{rxn}
```

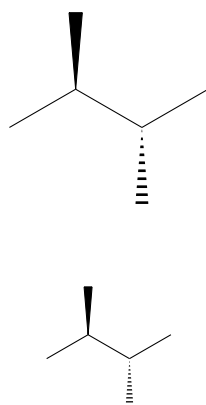


Wollen Sie nur die Parameter einer Umgebung ändern, verwenden Sie *innerhalb der Umgebung* die Befehle von **ChemFig** und die L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X-Befehle für die Schriftgröße.

---

### Beispiel 11

```
1 \begin{rxn}
2 \setatomsep{2.1em}\setcrambond{5pt}{1pt}{2pt}\Large
3 \reactant{\chemfig{-[:30](<[:60])-[: -60](<[: -60])-[:60]}}
4 \end{rxn}
5 \begin{rxn}
6 \reactant{\chemfig{-[:30](<[:60])-[: -60](<[: -60])-[:60]}}
7 \end{rxn}
```



Reaktionspfeile haben als Standardwert die Länge 5em oder  $5\sqrt{2}$ em im Fall der schrägen Pfeile. Die Voreinstellung lässt sich mit

```
1 \setarrowlength{<länge>}
```

auf <länge> bzw.  $\text{<länge>} \cdot \sqrt{2}$  ändern.

## 2.5 Paket-Optionen

**myChemistry** verfügt über einige Paket-Optionen.

**chemstyle** Mit dieser Option kann ‘chemstyle’ automatisch geladen werden, ohne dass Konflikte mit **myChemistry** entstehen.

**color=<farbe>** Mit dieser Option wird die entsprechende Farbe an ‘chemexec’ weitergereicht und dessen Option **shade=true** aufgerufen.

**english** Wird diese Option aufgerufen, dann lädt **myChemistry** ‘chemexec’ in der englischen Version, falls das Paket nicht vorher aufgerufen wurde. Außerdem wird der Name der **rxnscheme**-Umgebung (siehe [Abschnitt 4.15](#)) in „Reaction scheme“ geändert.

**nochemexec** Durch diese Option können Sie verhindern, dass **myChemistry** ‘chemexec’ lädt.

**nocolor** Mit dieser Option wird ‘chemexec’ ohne Farbe und mit der Option **shade=false** geladen (Default-Verhalten von **myChemistry**).

**nocompounds** Durch diese Option können Sie verhindern, dass **myChemistry** ‘chemcompounds’ lädt.

**nomhchem** Durch diese Option können Sie verhindern, dass **myChemistry** ‘mhchem’ lädt, vorausgesetzt, dass ‘chemexec’ auch nicht geladen wird.

**nopackages** Durch diese Option werden (außer **ChemFig**) gar keine Pakete geladen<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Außer denen, die **myChemistry** benötigt, um zu funktionieren (TikZ etc.).

`placement=<position>` Durch den Aufruf dieser Option kann das Standard-Platzierungsverhalten der `rxnscheme`-Umgebung (siehe [Abschnitt 4.15](#)) in `<position>` geändert werden.

`shade` Mit dieser Option wird ‘chemexec’ mit der Option `shade=true` geladen.

### 3 Fortgeschrittene Anwendung, Verwendung von TikZ

Das größte Problem bei der Verwendung von `myChemistry` ist in der Regel die korrekte Positionierung der einzelnen Reaktanden und Pfeile. Der [Abschnitt 3.1](#) geht etwas näher darauf ein.

Einige der Befehle ermöglichen als drittes optionales Argument die Angabe weiteren TikZ-Codes. Genauer gesagt können Sie dort im wesentlichen diejenigen TikZ-Keys einsetzen, die Sie in einem `tikzpicture` bei einer `\node` einsetzen können. Wenn die Syntax einer Node also `\node[<tikz>](<platzierung>){<irgendwas>};` ist, dann entspricht `<tikz>` dem entsprechenden Argument von z. B. `\reactant[,,<tikz>]{}`. Dadurch lassen sich viele Feinjustierungen vornehmen. Wenn Sie sich mit TikZ einigermaßen auskennen, können Sie sowieso noch weitaus mehr realisieren, als durch `ChemFig` und `myChemistry` vorgegeben.

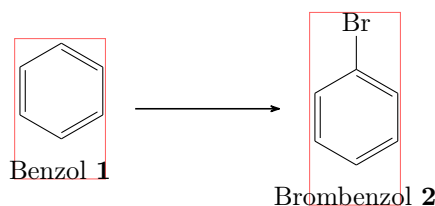
#### 3.1 Die Ausrichtungsfrage

Da Reaktanden, Pfeile und Zweige mittig zu dem Objekt, auf das sie sich beziehen, ausgerichtet werden, erzeugt die Default-Ausrichtung nicht immer schöne Ergebnisse.

---

##### Beispiel 12

```
1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3   \reactant{ \chemname{\chemfig{*6(-----)}}{Benzol} \compound{benzol}} }
4   \arrow{}{}
5   \reactant{ \chemname{\chemfig{*6(-----(-Br)-)}}{Brombenzol} \compound{
      brombenzol}} }
6 \end{rxn}
```




---

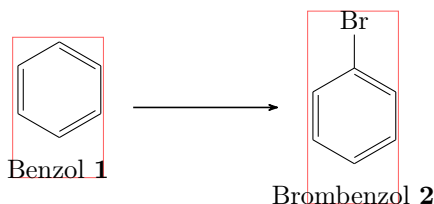
Wie Sie sehen können, sind die beiden Reaktanden aus Sicht der Benzolringe nicht gleich zu dem Pfeil ausgerichtet. Der erste Reaktand scheint nach oben geschoben zu sein. Der Versuch, das mit TikZ-Code wie `xshift` und `yshift` zu korrigieren, versagt.

**Beispiel 13**

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactant[, , yshift=-1em]{ \chemname{\chemfig{*6(==--==)}}{Benzol \
  compound{benzol}}} }
4 \arrow{}{}
5 \reactant{ \chemname{\chemfig{*6(==--(-Br)--)}}{Brombenzol \compound{
  brombenzol}}} }
6 \end{rxn}

```



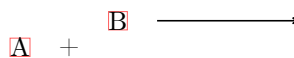
Das kommt daher, da der erste Reaktand relativ zu dem Objekt verschoben wird, auf das er sich bezieht. Da er das erste Objekt auf der Chain ist, wird er gar nicht verschoben. Der nachfolgende Pfeil richtet sich in Bezug auf den ersten Reaktanden aus.

**Beispiel 14**

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactant{A}
4 \chemand
5 \reactant[, , yshift=1em]{B}
6 \arrow{}{}
7 \end{rxn}

```



Da es (noch) keine Möglichkeit gibt, die Ausrichtung des Pfeils selbst zu ändern, könnte man ihn stattdessen in einen Zweig stecken.

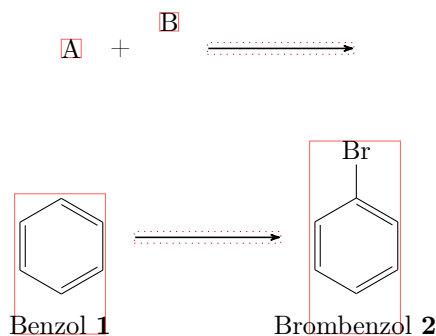
**Beispiel 15**

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactant{A}
4 \chemand
5 \reactant[, , yshift=1em]{B}
6 \branch[, , yshift=-1em]{\arrow{}{}}
7 \end{rxn}
8 \begin{rxn}
9 \reactant{ \chemname{\chemfig{*6(==--==)}}{Benzol \compound{benzol}}} }
10 \branch[, , yshift=1em]{\arrow{}{}}
11 \reactant{ \chemname{\chemfig{*6(==--(-Br)--)}}{Brombenzol \compound{
  brombenzol}}} }
12 \end{rxn}

```





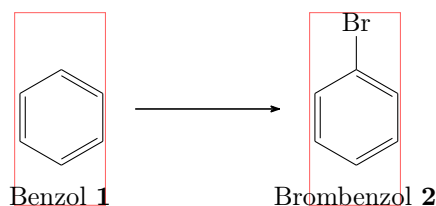
Das ist für das letzte Beispiel aber nicht die beste Lösung, da die exakte Ausrichtung auf diese Weise immer eine ganze Reihe von Versuchen benötigt, bis man das gewünschte Ergebnis erzielt. Es gibt eine andere Lösung: ein unsichtbares Brom am ersten Benzol.

#### Beispiel 16

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactant{ \chemname{\chemfig{*6(==(-[,,,draw=none]\phantom{Br})-)} }{Benzol \compound{benzol}} }
4 \arrow{ }{ }
5 \reactant{ \chemname{\chemfig{*6(==(-Br)-)} }{Brombenzol \compound{
    brombenzol}} }
6 \end{rxn}

```



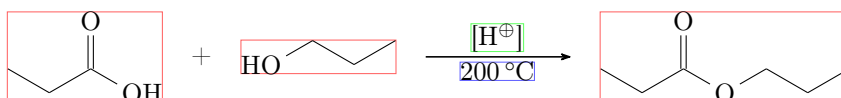
Auch in anderen Fällen ist der unsichtbare Substituent die bessere und einfachere Lösung gegenüber TikZ-Code:

## Beispiel 17

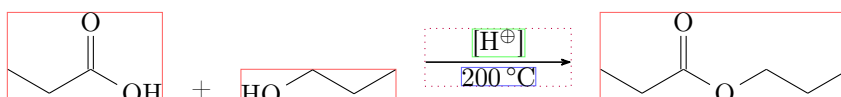
```

1 \makevisible
2 default:
3 \begin{rxn}
4 \reactant{\chemfig{-[: -30] -[:30] (= [2] O) -[: -30] OH}}
5 \chemand
6 \reactant{\chemfig{HO -[:30] -[: -30] -[:30]}}
7 \arrow{[\Hpl]}{\SI{200}{\celsius}}
8 \reactant{\chemfig{-[: -30] -[:30] (= [2] O) -[: -30] O -[:30] -[: -30] -[:30]}}
9 \end{rxn}
10 Hydroxy-Gruppen auf gleicher H\ohe mit Tikz:
11 \begin{rxn}
12 \reactant{\chemfig{-[: -30] -[:30] (= [2] O) -[: -30] OH}}
13 \chemand[, , yshift=-1.2em]
14 \reactant[, , yshift=.12em]{\chemfig{HO -[:30] -[: -30] -[:30]}}
15 \branch[, , yshift=1.08em]{\arrow{[\Hpl]}{\SI{200}{\celsius}}}
16 \reactant{\chemfig{-[: -30] -[:30] (= [2] O) -[: -30] O -[:30] -[: -30] -[:30]}}
17 \end{rxn}
18 Hydroxy-Gruppen auf gleicher H\ohe durch unsichtbaren Substituenten:
19 \begin{rxn}
20 \reactant{\chemfig{-[: -30] -[:30] (= [2] O) -[: -30] OH}}
21 \chemand
22 \reactant{\chemfig{HO -[:30] (= [2, , , draw=none] \phantom{O})
23 -[: -30] -[:30]}}
24 \arrow{[\Hpl]}{\SI{200}{\celsius}}
25 \reactant{\chemfig{-[: -30] -[:30] (= [2] O) -[: -30] O -[:30] -[: -30] -[:30]}}
26 \end{rxn}
default:

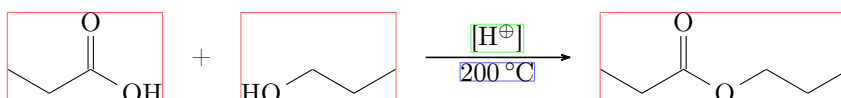
```



Hydroxy-Gruppen auf gleicher Höhe mit Tikz:



Hydroxy-Gruppen auf gleicher Höhe durch unsichtbaren Substituenten:



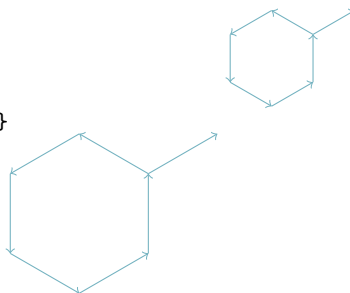
Ich fürchte aber, in vielen Fällen müssen Sie mit `xshift` und `yshift` spielen, bis das Schema aussieht, wie Sie Sich das vorstellen. Vielleicht wird eine zukünftige Version von **myChemistry** eine benutzerfreundlichere Ausrichtungsmöglichkeit bieten.

### 3.2 Mit TikZ andere Ziele erreichen

Man könnte natürlich, nur zum Spaß?, das Aussehen von Molekülen mit *TikZ* ändern.

#### Beispiel 18

```
1 \begin{rxn}
2 \reactant[,,->,green!45!blue
   !55]{\chemfig{*6(---(-)---)}}
3 \end{rxn}
4 \chemfig[->,green!45!blue
   !55]{*6(---(-)---)}
```



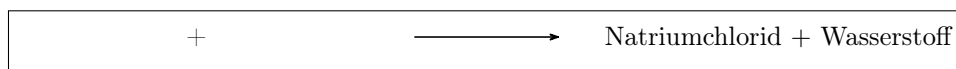
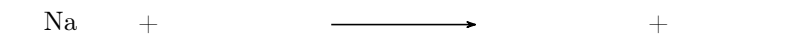
Das Beispiel ist natürlich kein gutes, da mit *ChemFig* dasselbe Ergebnis erzielt werden kann. Vielfache andere Anwendungen sind aber denkbar:

#### Beispiel 19

```
1 \newcommand{\leer}{\reactant[,minimum width=5em]{\rule[-1em]{1em}{.5pt}
   \rule[-1em]{3em}{.5pt}}\rule[-1em]{3em}{.5pt}}
2 \newcommand{\stoich}{\rule[-3pt]{1em}{.5pt}}
3 \begin{rxn}
4 \reactant{\bf\Large Salzbildung (I)}
5 \reactant[below,a,yshift=1em]{F\"ulle die L\"ucken}
6 \branch[below=of a,b]{\reactant[,minimum width=5em]{\stoich\ Na }\chemand \leer \arrow{}{} \leer \chemand \leer }
7 \branch[below=of b,,draw,inner sep=3pt]{\reactant[,minimum width=5em]{\chemand\reactant[,minimum width=5em]{\arrow{}{} \reactant[,minimum width=5em]{Natriumchlorid $+$ Wasserstoff}}
8 \end{rxn}}
```

### Salzbildung (I)

Fülle die Lücken



## 4 Alphabetische Befehlsreferenz

Im folgenden Abschnitt werden alle Befehle von *myChemistry* in alphabetischer Reihenfolge vorgestellt.

## 4.1 anywhere

**NEU** Manchmal ist es nützlich, wenn man einen Reaktanden außerhalb der Chain platzieren kann, siehe z. B. [Schema 12](#).

```
1 \anywhere[<anker>]{<tikz>}{<formel>}
```

Für diesen Fall gibt es den Befehl `\anywhere`. Er wird über `<tikz>` auf ähnliche Weise wie `\branch` platziert.

### Beispiel 20

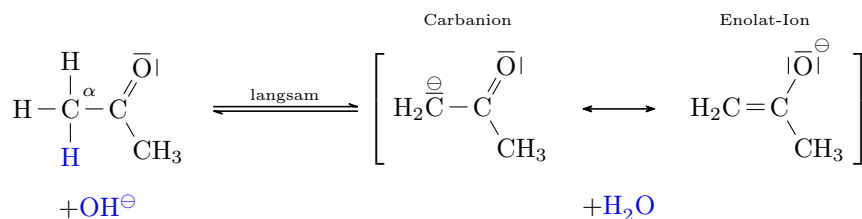
```
1 \begin{rxn}
2 \reactant[,carbonyl_A]{\chemfig
  {R_2C=O}}
3 \anywhere{above=of carbonyl_A
  }{\chemfig{H-[:30]O-[:30]H}};
4 \end{rxn}
```

$$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{R}_2\text{C}=\text{O} \end{array}$$

Der Befehl kann gut zum Beschriften von Reaktionspartnern eingesetzt werden.

### Beispiel 21

```
1 \begin{rxn}
2 \reactant[,keton]{\chemfig{H-\chemabove{C}{\hspace*{5mm}\scriptstyle\alpha}(-[2]H)(-[6,,,2]{\textcolor{blue}H})-C(=[:60]\lewis{02,0})-[:60]C|H_3}}
3 \anywhere{below=of keton}{\color{blue}\Hyd}
4 \arrow[,<=>]{\tiny langsam}{}
5 \mesomeric[,mesomer]{
6 \reactant[,carbanion]{\chemfig{H_2|\chemabove[3pt]{\lewis{2,C}}{\scriptstyle\ominus}-C(=[:60]\lewis{02,0})-[:60]C|H_3}}
7 \marrow
8 \reactant[,enolat]{\chemfig{H_2C=C(-[:60]\chemabove{\lewis{024,0}}{\scriptstyle\ominus})-[:60]C|H_3}}
9 }
10 \anywhere{above=of enolat}{\tiny Enolat-Ion}
11 \anywhere{above=of carbanion}{\tiny Carbanion}
12 \anywhere{below=of mesomer}{\color{blue}\ce{H2O}}
13 \end{rxn}
```



## 4.2 arrow

Reaktionspfeile werden mit `\arrow` erstellt.

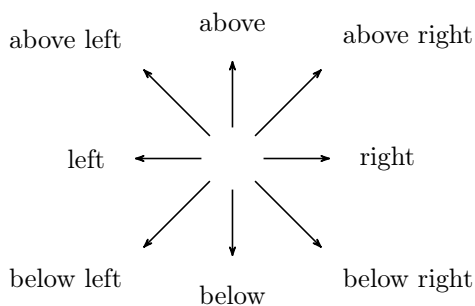
```
1 \arrow[<richtung>,<typ>,<längenfaktor>,<anker>,<both>]{<
    oben>}{<unten>}
```

### 4.2.1 Optionen

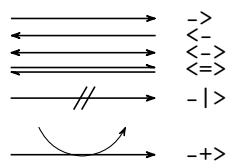
**NEU**

Mit mehreren Optionen können die Reaktionspfeile angepasst werden. Die Optionen müssen an entsprechender Stelle, durch Kommas separiert, angegeben werden.

1. `<richtung>` – mögliche Einstellungen sind:

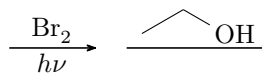


2. `<typ>` – mögliche Einstellungen sind:



3. `<längenfaktor>` – mit dem Faktoren, den Sie hier angeben, wird die Pfeillänge (5.0em bei Faktor = 1.0, Standard) multipliziert.
4. `<anker>` – hier können Sie dem Pfeil einen Anker geben, auf den z. B. mit einem Branch referenziert werden kann.
5. `<both>` – durch diese Option haben die beiden Nodes, in die die Beschriftungen geschrieben werden, die gleichen Maße.

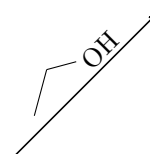
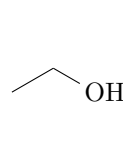
## Beispiel 22



```

1 \begin{rxn}
2   \arrow[,,,6]{\ce{Br2}}{\$h\nu\$}
3   \arrow{\chemfig{-[:30]-[: -60]OH}}{}}
4 \end{rxn}
5 \begin{rxn}
6   \arrow[above,,,6]{\ce{Br2}}{\$h\nu\$}
7 \end{rxn}
8 \begin{rxn}
9   \arrow[above]{\chemfig{-[:30]-[: -60]OH}}{}}
10 \end{rxn}
11 \begin{rxn}
12   \arrow[above right,,,5]{\ce{Br2}}{\$h\nu\$}
13 \end{rxn}
14 \begin{rxn}
15   \arrow[above right]{\chemfig{-[:30]-[: -60]OH}}{}}
16 \end{rxn}

```



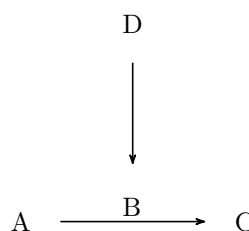
Einmal die meisten Optionen im Einsatz:

## Beispiel 23

```

1 \begin{rxn}
2   \reactant{A}
3   \arrow[,,,pfeil]{B}{}
4   \branch[above=of pfeil,,,yshift=1em]{
5     \arrow[above,<-, .7]{}{}
6     \reactant[above]{D}
7   }
8   \reactant{C}
9 \end{rxn}

```

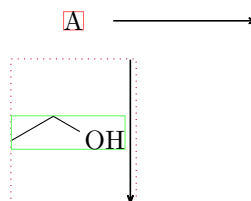


### 4.2.2 Ausrichtung

Liegt der Pfeil in einem Branch (siehe [Abschnitt 4.3](#)), dann wird die Ausrichtung des Branch bestimmt durch die Größe der Nodes, mit denen die Pfeilbeschriftung platziert wird. Hat der Pfeil nun nur eine oder zwei unterschiedlich große Beschriftungen, dann ist die Ausrichtung falsch.

#### Beispiel 24

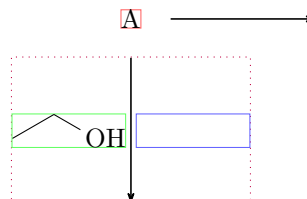
```
1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactant[,a]{A}
4 \arrow{}{}
5 \branch[below=of a]{
6   \arrow[below]{\chemfig
7     {-[:30]-[: -60]OH}}{}
8 }
9 \end{rxn}
10 \makeinvisible
```



Durch die Verwendung der Option `both` bekommen die Nodes beider Pfeilbeschriftungen die gleichen Maße, wodurch die Ausrichtung korrigiert werden kann.

#### Beispiel 25

```
1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactant[,a]{A}s Keys
4 \arrow{}{}
5 \branch[below=of a]{
6   \arrow[below,,,both]{\chemfig
7     {-[:30]-[: -60]OH}}{}
8 }
9 \end{rxn}
10 \makeinvisible
```



Mehr zu dem Problem der Ausrichtung lesen Sie in [Abschnitt 4.3.1](#).

### 4.2.3 Aussehen

Mit den Befehlen `\setarrowlength` ([Abschnitt 4.16](#)) und `\setarrowline` ([Abschnitt 4.17](#)) lässt sich das prinzipielle Erscheinungsbild der Pfeile verändern.

## 4.3 branch

Der Befehl `\branch` wird verwendet, um eine Verzweigung der Reaktion zu realisieren. Wenn Sie ältere Versionen von **myChemistry** eingesetzt haben, beachten Sie, dass sich die Befehl-Syntax mit v1.3 verändert hat.

```
1 \branch[<ausrichtung>,<anker>,<tikz>]{<formel(n)>}
```

Für den `\branch` wird die Ausrichtung und der Anker wichtig. Sehen wir uns ein Beispiel an.

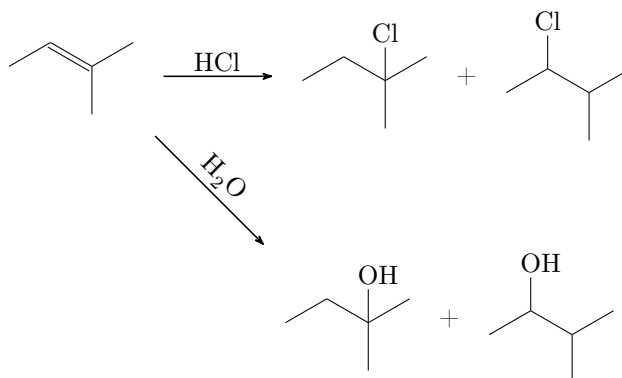
---

**Beispiel 26**

```

1 \begin{rxn}
2 \reactant[,start]{\chemfig{-[:30]=_[:60](-[:60])-[:60]}}
3 \arrow[,,.75]{\ce{HCl}}{}
4 \reactant{\chemfig{-[:30]-[:60](-[:120]Cl)(-[:60])-[:60]}}
5 \chemand
6 \reactant{\chemfig{-[:30](-[:60]Cl)-[:60](-[:60])-[:60]}}
7 \branch[below right=of start]{
8   \arrow[below right, ,.75]{\ce{H2O}}{}
9   \reactant[below right]{\chemfig{-[:30]-[:60](-[:120]OH)
10    (-[:60])-[:60]}}
11   \chemand
12   \reactant{\chemfig{-[:30](-[:60]OH)-[:60](-[:60])-[:60]}}
13 }
14 \end{rxn}

```



In diesem Beispiel hat der erste Reaktand den Anker `start` bekommen (Zeile 2, siehe auch [Abschnitt 4.13](#)).

```
2 \reactant[,start]{ ... }
```

`\branch` bezieht sich nun in seiner Ausrichtung darauf (Zeile 7):

```
7 \branch[below right=of start]{ ... }
```

Gibt man die Ausrichtung nicht in Bezug auf einen Anker an, bezieht sie sich immer auf den letzten `reactant` oder `\arrow`. Lässt man das optionale Argument leer, dann platziert sich der Branch automatisch rechts.



**Beispiel 27**

```

1 \begin{rxn}
2 \reactant{ \chemfig{CH_2=CH-OH}
3 \arrow{, <=>, .5]}{}
4 \branch{ \reactant{ \chemfig{CH
5 \end{rxn}

```

$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3-\text{CH}=\text{O}$

Zur Ausrichtung haben Sie mehrere Möglichkeiten: Sie können den Branch entweder selbst auf die `chain` setzen oder ihn relativ zu einem Objekt platzieren.

**chain** In diesem Fall geben Sie als Ausrichtung folgendes an: `on chain=going <wert>`.

**relativ** In diesem Fall geben Sie folgendes an: `<wert>=of <anker>`.

Als `<wert>` können Sie die gleichen Werte einsetzen wie bei `\reactant`, siehe [Abschnitt 4.13](#). Die Voreinstellung ist `on chain=going right`.

**4.3.1 Ausrichtungsprobleme**

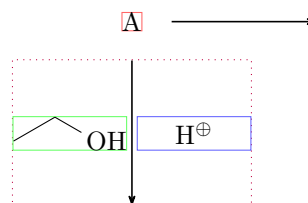
Wenn ein Pfeil zwei verschieden große Beschriftungen hat und in einem Branch liegt, wird der Branch nicht mehr richtig ausgerichtet. Der `\arrow-Key both` ist nicht wirklich eine Lösung, weil die kleinere Beschriftung dann nicht mehr am Pfeil liegt, sondern wegrutscht.

**Beispiel 28**

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactant[,a]{A}
4 \arrow{}{}
5 \branch[below=of a]{
6 \arrow[below,,,both]{\chemfig
7 }
8 \end{rxn}
9 \makeinvisible

```



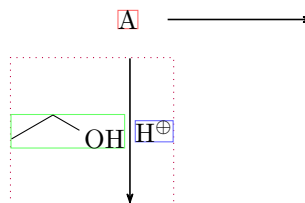
In diesem Fall können Sie den Branch mit den `TikZ`-Keys `xshift` und `yshift` verschieben.

**Beispiel 29**

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactant[,a]{A}
4 \arrow{}{}
5 \branch[below=of a,,xshift
  =-1.35em]{
6 \arrow[below]{\chemfig
  {-[:30]-[:60]OH}}{\Hpl}
7 }
8 \end{rxn}
9 \makeinvisible

```

**4.4 chemand**

Der Befehl

```
1 \chemand[<ausrichtung>,<anker>,<tikz>]
```

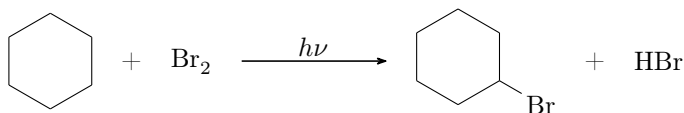
erzeugt und platziert ein + auf die gleiche Weise, wie `\reactant` beliebigen Text platziert.

**Beispiel 30**

```

1 \begin{rxn}
2 \reactant{\chemfig{*6(-----)}}
3 \chemand
4 \reactant{\ce{Br2}}
5 \arrow{$h\nu$}{}
6 \reactant{\chemfig{*6(--(-Br)----)}}
7 \chemand
8 \reactant{\ce{HBr}}
9 \end{rxn}

```



Die optionalen Argumente von `\chemand` und `\reactant` sind die gleichen, siehe [Abschnitt 4.13](#) für eine Beschreibung.

**4.5 dummy**

**NEU**

Mit `\dummy` zeichnet man eine leere Node. Bis Version 1.3 mussten die Pfeile, die mit `\arrow` erzeugt werden, einer Node nachfolgen. `\arrow` ruft intern `\tikzchainprevious` auf. Ist *vor* einem Pfeil noch *keine* Node auf die Chain geschrieben worden, erzeugte das eine Fehlermeldung. Ähnliches galt für `\branch`. Durch Setzen des `\dummy` konnte ein Schema dennoch mit einem Pfeil beginnen.

```

1 \begin{rxn}
2   \dummy\arrow{}{}
3 \end{rxn}

```

Das ist nun *nicht* mehr nötig. Dennoch kann unter Umständen eine leere Node am Anfang als Anker zur Ausrichtung anderer Objekte ganz nützlich sein, weshalb der Befehl weiter zur Verfügung steht.

## 4.6 elmove

`\elmove` ist lediglich ein Abkürzungsmakro für den `ChemFig`-Befehl `\chemmove`.

```

1 \elmove [<tikz>]{<start>}{<startrichtung>}{<ende>}{<
   endrichtung>}

```

Das schreibt den Befehl

```

1 \chemmove{\draw [<tikz>](<start>).. controls +(<
   startrichtung>) and +(<endrichtung>)..(<ende>);}

```

mit `[->,red,shorten <=3pt,shorten >=1pt]` als Voreinstellung für `<tikz>`.

Wie `\chemmove` funktioniert, können Sie im Manual zu `ChemFig` nachlesen.

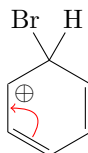
---

### Beispiel 31

```

1 \begin{center}
2 \setatomsep{1.8em}
3 \chemfig{*6(=[@{e1}]--(-[:120]Br)(-[:60]H)-(-[: -30, .4, , ,white]\oplus)
   -[@{e2}] )}
4 \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
5 \end{center}

```




---

## 4.7 makeinvisible

Dieser Befehl hebt die Änderungen von `\makevisible` (siehe [Abschnitt 4.8](#)) auf und stellt das normale Verhalten von `myChemistry` wieder her. `\makeinvisible` wirkt sich nur auf nachfolgende Reaktanden aus.

## 4.8 makevisible

Mit `\makevisible` können Sie die Nodes, innerhalb derer sich die Reaktanden befinden, farbig hervorheben. Das kann z. B. bei der Positionierung und Feinjustierung von Branches ganz nützlich sein. Ein Beispiel dafür sehen Sie in [Abschnitt 4.2](#). Je nach Art der Node ist die Markierung eine andere:

`\reactant{}`, `\arrow{above}{}`, `\arrow{}{below}` und `\branch{}`. Siehe auch Abschnitt 4.7.

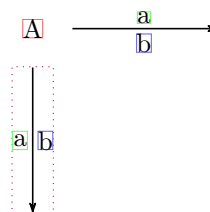
`\makevisible` wirkt sich nur auf nachfolgende Reaktanden aus.

### Beispiel 32

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3   \reactant[,a]{A}
4   \arrow{a}{b}
5   \branch[below=of a]{
6     \arrow[below,,,both]{a}{b}
7   }
8 \end{rxn}
9 \makeinvisible

```



## 4.9 marrow

Der Befehl `\marrow` zeichnet einen Mesomeriepfeil.

```
1 \marrow[<ausrichtung>]
```

Er ist eine Abkürzung für `\arrow[<richtung>,<->,.5]{}{}`.

## 4.10 mCsetup

Der Befehl

```
1 \mCsetup{<keys>}
```

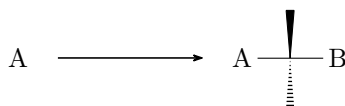
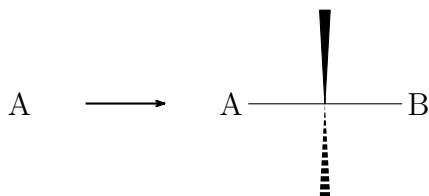
kann verwendet werden, um alle Voreinstellungen zu verändern. Für jeden der `\set<command>`-Befehle von **myChemistry** mit Ausnahme von `\setbondshape` gibt es einen Key `<command>=<value>`. Zusätzlich gibt es den Key `align=<value>`, mit dem das Ausrichtungsverhalten von `rxn` und `rxnscheme` gleichzeitig geändert werden kann und den Key `reset`, durch den alle Voreinstellungen wiederhergestellt werden.

**Beispiel 33**

```

1 \mCsetup{
2   align=left,
3   arrowlength=3em,
4   arrowline=thick,
5   atomsize=\large,
6   bondlength=3em,
7   mergelength=4em,
8   rcndist=2em
9   %rxnalign=right,
10  %schemealign=left,
11 }
12 \setbondshape{4pt}{2pt}{1pt}
13 \begin{rxn}
14  \reactant{A}\arrow{}{}\reactant{\chemfig{A-(<[2])(<:[6])-B}}
15 \end{rxn}
16 \mCsetup{reset}
17 \begin{rxn}
18  \reactant{A}\arrow{}{}\reactant{\chemfig{A-(<[2])(<:[6])-B}}
19 \end{rxn}

```

**4.11 merge****NEU**

Mit dem `merge`-Befehl können verschiedene Reaktionsstränge zu einem vereint werden. Dafür müssen die einzelnen zu vereinenden Reaktanden mit einem Anker (`\reactant[,<anker>]{}{}`, entsprechend bei Branches, siehe [Abschnitt 4.13](#) bzw. [Abschnitt 4.3](#)) gekennzeichnet sein und *vor* `\merge` gesetzt werden.

```

1  \merge[<beschriftung>,<richtung>,<länge>]{<ziel>}{<start
    a>}{<start b>}

```

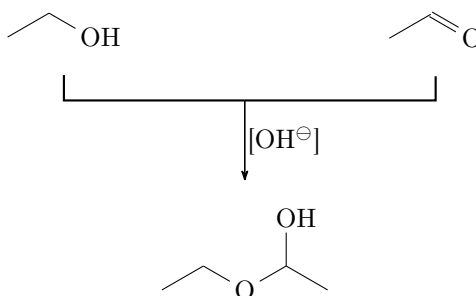
`\merge` kann drei optionale Argumente bekommen und benötigt als Argumente die Anker-Namen der zu verbindenden Reaktanden.

**Beispiel 34**

```

1 \begin{rxn}
2 \branch[,oben]{
3 \reactant[,start_a]{\chemfig{-[:30]-[: -30]OH}}
4 \reactant[,start_b,xshift=9em]{\chemfig{-[:30]=[: -30]O}}
5 }
6 \branch[below=of oben,ziel,yshift=-5em]{
7 \reactant{\chemfig{-[:30]-[: -30]O-[:30](-[2]OH)-[: -30]}}
8 }
9 \merge[\ce{[\Hyd]}]{ziel}{start_a}{start_b}
10 \end{rxn}

```



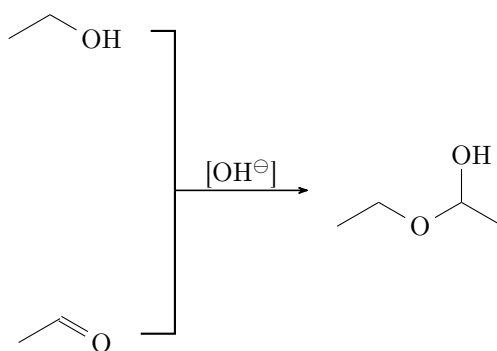
Die Standard-**<richtung>** ist **below**, andere mögliche Werte sind **right**, **left** und **above**. Mit **<länge>** kann die Länge des Pfeils *ab der Zusammenführung* angegeben werden. Standard sind 3 em. Die Standardlänge kann über **\setmergelenlength** oder **\mCsetup** auch geändert werden.

**Beispiel 35**

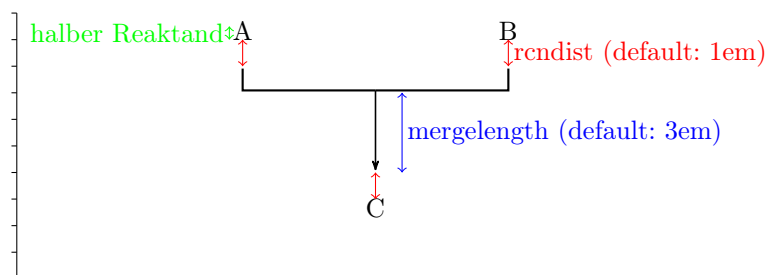
```

1 \begin{rxn}
2 \reactant[,start_a]{\chemfig{-[:30]-[: -30]OH}}
3 \branch[below=of start_a,start_b,yshift=-9em]{
4 \reactant{\chemfig{-[:30]=[: -30]O}}
5 }
6 \branch[right=of start_a,ziel,xshift=7em,yshift=-6em]{
7 \reactant{\chemfig{-[:30]-[: -30]O-[:30](-[2]OH)-[: -30]}}
8 }
9 \merge[\ce{[\Hyd]}],right,5em]{ziel}{start_a}{start_b}
10 \end{rxn}

```



Da man die Reaktanden vorher platzieren muss, ist es bestimmt hilfreich, die benötigten Abstände etwas im Auge zu behalten. Drei Werte bestimmen den benötigten Platz. Zum einen die **Ausdehnung** der beteiligten Reaktanden, der Abstand der „reaction-nodes“ **rcndist** (siehe [Abschnitt 4.22](#)) voneinander und die Länge des **\merge**-Pfeils **mergelength** (siehe auch [Abschnitt 4.21](#)).



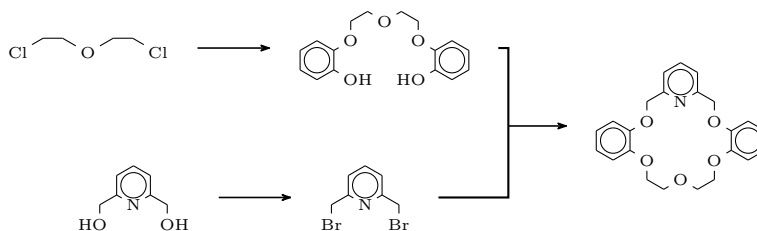
Noch ein letztes Beispiel, bei dem zwei Stränge vereint werden.

**Beispiel 36**

```

1 \begin{rxn}
2 \setatomsep{1em}\tiny
3 % Strang 1
4 \reactant[,oben]{ \chemfig{Cl-[:30,1.5]--[: -30,1.5]O
  -[:30,1.5]--[: -30,1.5]Cl}{ } }
5 \arrow[,,.5]{ }
6 \reactant[,start_oben]{ \chemfig{O(-[: -150]**6(-----(-OH)-))
  -[:90]-[:30]-[: -30]O-[:30]-[: -30]-[: -90]O-[: -30]**6(-(-HO)-----)} }
7 % Strang 2
8 \branch[below=of oben,start_unten,xshift=8em,yshift=-4em]{
9 \reactant{ \chemfig{**6((--[6,,2]HO)-N-([6]OH)----)} }
10 \arrow[,,.5]{ }
11 \reactant{ \chemfig{**6((--[6]Br)-N-([6]Br)----)} }
12 }
13 % Ziel
14 \branch[right=of start_oben,ziel,xshift=5em,yshift=-4em]{
15 \reactant[,c]{ \chemfig{O(-[: -150]**6(-----(-O?) -)) -[:90]-[:30]**6(-N
  -([ -90]O-[: -30]**6(-(-O-[6]-[: -150]-[:150]O-[: -150]-[:150]? )-----))
  ----)} }
16 }
17 % Zusammenfuehren:
18 \merge[,right]{ziel}{start_oben}{start_unten}
19 \end{rxn}

```



Die Verwendung von `\merge` erfordert unter Umständen einige Spielerei mit Branches, `xshift` und `yshift`, bis man das gewünschte Ergebnis erhält.

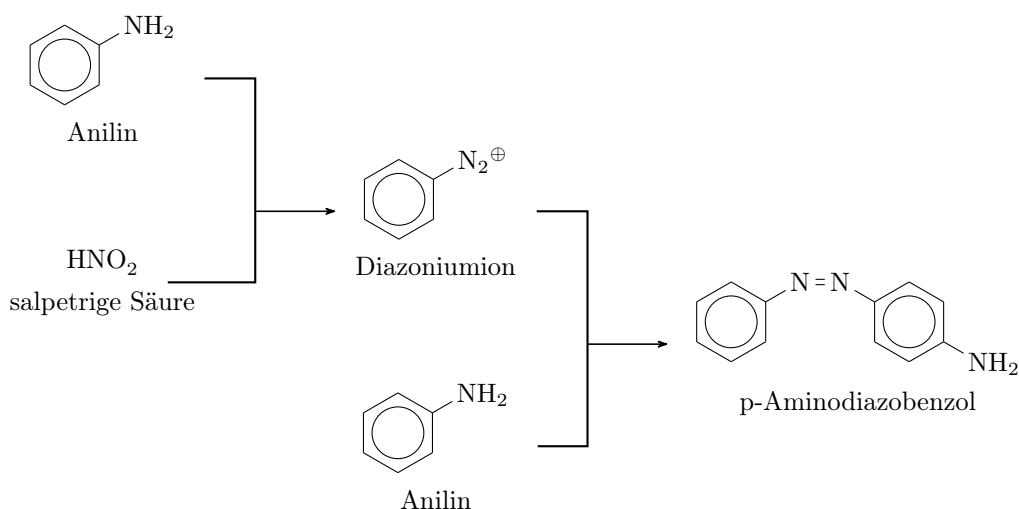


**Beispiel 37**

```

1 \begin{rxn}
2 \setatomsep{1.5em}
3 \reactant[,start_aa]{ \chemname{\chemfig{**6(---(-NH_2)---)}}{Anilin}
4 \reactant[below,start_ab,yshift=-3em]{ \chemname{\ce{HNO2}}{salpetrige
  S"aure} }
5 \branch[right=of start_aa,ziel_a,xshift=6em,yshift=-5em]{
6 \reactant{ \chemname{\chemfig{**6(---(-N|_2\op)---)}}{Diazoniumion}
7 }% = start_ba
8 \branch[below=of ziel_a,start_bb,yshift=-3em]{
9 \reactant{ \chemname{\chemfig{**6(---(-NH_2)---)}}{Anilin} }
10 }
11 \branch[right=of ziel_a,ziel_b,xshift=6em,yshift=-5em]{
12 \reactant{ \chemname{\chemfig{N(-[: -150]**6(-----))=N
  -[: -30]**6(---(-NH_2)---)}}{p-Aminodiazobenzol} }
13 }
14 \merge[,right]{ziel_a}{start_aa}{start_ab}
15 \merge[,right]{ziel_b}{ziel_a}{start_bb}
16 \end{rxn}

```

**4.12 mesomeric**

Der `\mesomeric`-Befehl funktioniert wie ähnlich wie `\branch` (Abschnitt 4.3). Sein Zweck ist es, eckige Klammern zu setzen. Wenn Sie ältere Versionen von myChemistry eingesetzt haben, beachten Sie, dass sich die Befehl-Syntax mit v1.3 verändert hat.

```

1 \mesomeric [<ausrichtung>,<anker>,<tikz>]{<formel(n)>}

```

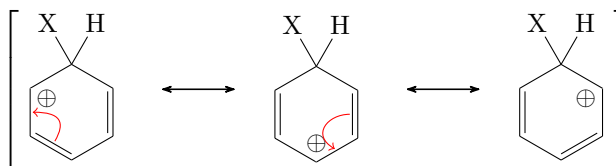
In `<formel(n)>` werden die mesomeren Grenzstrukturen geschrieben. Mit `\marrow` (Abschnitt 4.9) werden die Mesomeriepfeile gesetzt. Man kann `\mesomeric` falls nötig mit einem Anker (`<anker>`) versehen (Abschnitt 4.3). Die Ausrichtung funktioniert analog `\reactant`.

### Beispiel 38

```

1 \begin{rxn}
2 \mesomeric{
3 \reactant{
4 \chemfig{*6(=[@{e1}]--(-[:120]X)(-[:60]H)-(-[:30],.4,,white)\
oplus)-[@{e2}]})}
5 \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
6 }
7 \marrow
8 \reactant{
9 \chemfig{*6(-(-[:90],.4,,white)\oplus)-[@{e4}]=[@{e3}](-[:120]X)
(-[:60]H)-=)}
10 \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
11 }
12 \marrow
13 \reactant{
14 \chemfig{*6(-=-(-[:150],.4,,white)\oplus)-(-[:120]X)(-[:60]H)-=)}
15 }
16 }
17 \end{rxn}

```



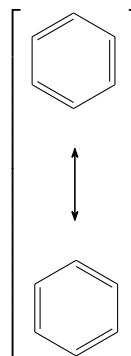
Oder auch von oben nach unten:

### Beispiel 39

```

1 \begin{rxn}
2 \mesomeric{
3 \reactant{ \chemfig
{*6(==--==)} }
4 \marrow[below]
5 \reactant[below]{ \chemfig
{*6(==--==)} }
6 }
7 \end{rxn}

```



Vielleicht auch einen Komplex?

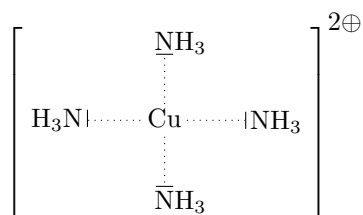
---

**Beispiel 40**

```

1 \begin{rxn}
2 \setatomsep{3em}
3 \mesomeric[,a]{
4   \reactant{ \chemfig{H_3\lewis{0,N}-[,1.35,,,dotted]{Cu}(-[2,,,,,
      dotted]\lewis{6,N}H_3)(-[6,,,,dotted]\lewis{2,N}H_3)-[,1.2,,,dotted]\
      lewis{4,N}H_3} }
5 }
6 \node[above right=of a,yshift=-1em] {$2\oplus$};
7 \end{rxn}

```



### 4.13 reactant

**NEU** Der Befehl `\reactant1` ist so etwas wie der Basisbefehl. Wenn Sie ältere Versionen von **myChemistry** eingesetzt haben, beachten Sie, dass sich die Befehl-Syntax mit v1.3 verändert hat.

```

1 \reactant[<ausrichtung>,<anker>,<tikz>]{<formel(n)>}

```

In diesen Befehl werden die Formeln (<formel>) geschrieben und können, falls nötig, mit einem Anker (<anker>) versehen werden. Die Ausrichtung kann die 8 Werte

- a) right,
- b) above right,
- c) above,
- d) above left,
- e) left,
- f) below left,
- g) below,
- h) below right

---

<sup>1</sup>In älteren Versionen hieß der Befehl `\reactand`. Dieser Befehl ist noch immer verfügbar.

annehmen, Voreinstellung ist (`right`). Dieses Argument wird verwendet, wenn die Reaktionsgleichung nicht von links nach rechts, sondern z. B. von oben nach unten verlaufen soll.

---

**Beispiel 41**

1 <code>untereinander:</code>	
2 <code>\begin{rxn}</code>	untereinander:
3 <code>\reactant{\ce{Br2}}</code>	$\text{Br}_2$
4 <code>\reactant[below]{\ce{Cl2}}</code>	$\text{Cl}_2$
5 <code>\end{rxn}</code>	
6	
7 Beispiel mit mehreren Reaktanden	Beispiel mit mehreren Reaktanden:
8 <code>:</code>	
9 <code>\begin{rxn}</code>	$\text{Br}_2$
10 <code>\reactant{\ce{Br2}}</code>	
11 <code>\reactant[below]{\ce{I2}}</code>	$\text{I}_2$
12 <code>\reactant{\ce{Cl2}}</code>	$\text{Cl}_2$
13 <code>\end{rxn}</code>	
14 Reaktion von oben nach unten:	Reaktion von oben nach unten:
15 <code>\begin{rxn}</code>	$\text{Br}-\text{Br}$
16 <code>\reactant{\ce{Br-Br}}</code>	
17 <code>\arrow[below, .5]{\h\nu}</code>	$h\nu$
18 <code>\reactant[below]{\ce{2 ~\lewis{0.,Br}}}</code>	$\downarrow$
19 <code>\end{rxn}</code>	$2 \text{ Br}\cdot$

---

#### 4.14 rxn (Umgebung)

Die Umgebung `rxn` ist eine unnummerierte nicht gleitende Umgebung für Reaktionsschemata. Die Reaktionsschemata werden per Default zentriert. Die Voreinstellungen `\setbondlength`, `\setbondshape`, `\setarrowlength` und `\setatomsizes` gelten hier ebenso wie bei `rxnscheme`.

```

1 \begin{rxn}[<align>,<scalefactor>]
2 ...
3 \end{rxn}
```

##### 4.14.1 Optionen

**NEU** `rxn` hat zwei Optionen, die in der angegebenen Reihenfolge, durch Komma separiert, einzusetzen sind:

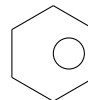
1. `<align>` das Ausrichtungsverhalten der `rxn`-Umgebung, Default: center
2. `<scalefactor>` Skalierung der `rxn`-Umgebung, Default: 1.0

Wenn Sie die `<scalefactor>`-Option verwenden, können Sie auf seltsame Effekte bei **ChemFig**-Formeln stoßen.

---

**Beispiel 42**

```
1 \begin{rxn}[,.5]
2 \reactant{\chemfig{**6(-----)}}
3 \end{rxn}
```

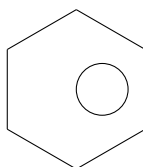


Die Skalierung hat keinen Einfluss auf die Größe der **ChemFig**-Formeln, skaliert aber den Aromatizitäts-Ring von Benzol und ähnlichen Molekülen. Die Ursache liegt in einem möglichen Bug von **ChemFig**.

---

**Beispiel 43**

```
1 \chemfig[scale=.5]{**6(-----)}
```

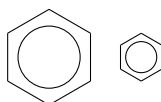


Sie können das lösen, indem Sie entweder mit dem *ersten* optionalen Argument von `\chemfig` den Ring wieder vergrößern, oder mit dem *zweiten* Argument den Rest auch verkleinern.

---

**Beispiel 44**

```
1 \begin{rxn}[,.5]
2 \reactant{\chemfig[scale=2]{**6(-----)}}
3 \reactant{\chemfig[][scale=.5]{**6(-----)}}
4 \end{rxn}
5 \chemfig[scale=.5][scale=.5]{**6(-----)}
```



Beispiele zur Ausrichtung:

**Beispiel 45**

```

1 \begin{rxn}[center]
2 \reactant{center}\arrow{}\{}\reactant{zentriert}
3 \end{rxn}
4 \begin{rxn}[right]
5 \reactant{right}\arrow{}\{}\reactant{rechts}
6 \end{rxn}
7 \begin{rxn}[left]
8 \reactant{left}\arrow{}\{}\reactant{links}
9 \end{rxn}

```

center       $\longrightarrow$       zentriert

right       $\longrightarrow$       rechts

left       $\longrightarrow$       links

**4.15 rxnscheme (Umgebung)**

Die Umgebung `rxnscheme` ist eine Gleitumgebung für Reaktionsschemata.

```

1 \begin{rxnscheme}[<label>,<placement>,<align>,<
   scalefactor>,<name>]{<caption>}
2 ...
3 \end{rxnscheme}

```

**4.15.1 Optionen**

**NEU** `rxnscheme` hat fünf Optionen, die in der angegebenen Reihenfolge, durch Komma separiert, einzusetzen sind:

1. `<label>` Wie jede Gleitumgebung kann auch `rxnscheme` mit einem Label versehen werden. Setzen Sie z. B.

```

1 \begin{rxnscheme}[rs:schema]{<caption>}
2 ...
3 \end{rxnscheme}

```

ein, können Sie mit `\ref{rs:schema}` wie gewohnt referenzieren.

2. `<placement>` Hier können sie Platzierungsangaben wie `htp` angeben. Default ist `H` (genau hier). Ein Beispiel dafür ist [Schema 13](#) in [Abschnitt 5.5](#).

3. `<align>` Mit dieser Option kann man auswählen, ob das Schema links, rechts oder mittig ausgerichtet wird.
4. `<scalefactor>` Mit dieser Option kann das Reaktionsschema skaliert werden. Beachten Sie, dass sie sich nicht auf die Schriftgröße und die Größe der `ChemFig`-Formeln auswirkt. Sie können allerdings seltsame Auswirkungen auf `ChemFig`-Formeln beobachten, wenn Sie diese Option verwenden. Lesen Sie [Abschnitt 4.14.1](#) für weitere Informationen.

```

1 \begin{rxnscheme}[,,, <scalefactor>]{<caption>}
2   ...
3 \end{rxnscheme}

```

5. `<name>` Mit dieser Option lässt sich der Name des konkreten Schemas von „Reaktionsschema“ (oder „Reaction scheme“) in `<name>` ändern.

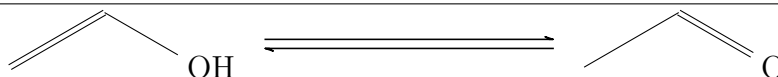
---

#### Beispiel 46

```

1 \begin{rxnscheme}[,,,2]{Großes Schema}
2 \large\setatomsep{3.5em}
3 \reactant{ \chemfig{=[::30]-[::-60]OH} }
4 \arrow{, <=>}{}{}
5 \reactant{ \chemfig{-[::30]=[::-60]O} }
6 \end{rxnscheme}
7 \begin{rxnscheme}[,,,5]{Kleines Schema}
8 \tiny\setatomsep{1em}
9 \reactant{ \chemfig{=[::30]-[::-60]OH} }
10 \arrow{, <=>}{}{}
11 \reactant{ \chemfig{-[::30]=[::-60]O} }
12 \end{rxnscheme}
13 \begin{rxnscheme}{center}
14 \reactant{center}\arrow{}{}\reactant{zentriert}
15 \end{rxnscheme}
16 \begin{rxnscheme}[,,,right]{right}
17 \reactant{right}\arrow{}{}\reactant{rechts}
18 \end{rxnscheme}
19 \begin{rxnscheme}[,,,left]{left}
20 \reactant{left}\arrow{}{}\reactant{links}
21 \end{rxnscheme}

```

**Reaktionsschema 2** Großes Schema**Reaktionsschema 3** Kleines Schema**Reaktionsschema 4** center

center  $\longrightarrow$  zentriert

**Reaktionsschema 5** right

right  $\longrightarrow$  rechts

**Reaktionsschema 6** left

left  $\longrightarrow$  links

**4.15.2 rxnscheme anpassen**

**Stil** Wenn Ihnen der Stil nicht gefällt, können Sie diesen mit

```
1 \floatstyle{<neuer Stil>}
2 \restylefloat{rxnfloat}
```

ändern. Als Stile stehen durch das ‘float’-Paket

**plain** Ohne spezielle Formatierungen, Legende erscheint unter dem Objekt

**plaintop** Wie **plain**, aber Legende oberhalb des Objekts

**boxed** Objekt ist gerahmt, Legende unterhalb

**ruled** Legende erscheint von Linien umgeben oberhalb des Objekts, Objekt wird unterhalb von einer weiteren Linie begrenzt; Voreinstellung für **rxnscheme**

zur Verfügung.



**Beispiel 47**

```

1 \begin{rxnscheme}{ruled}
2   \reactant{Standard-Stil}
3 \end{rxnscheme}
4 \floatstyle{boxed}
5 \restylefloat{rxnfloat}
6 \begin{rxnscheme}{boxed}
7   \reactant{mit Rahmen}
8 \end{rxnscheme}
9 \floatstyle{plain}
10 \restylefloat{rxnfloat}
11 \begin{rxnscheme}{plain}
12   \reactant{ohne Schnickschnack}
13 \end{rxnscheme}

```

**Reaktionsschema 7 ruled**

Standard-Stil

mit Rahmen

**Reaktionsschema 8: boxed**

ohne Schnickschnack

**Reaktionsschema 9: plain**

**Platzierung** Auch das Platzierungsverhalten, das in der Voreinstellung H (genau hier) ist, können Sie entsprechend ändern.

```
1 \floatplacement{rxnfloat}{<position>}
```

Einfacher ist allerdings der Aufruf von **myChemistry** mit entsprechender Option.

```
1 \usepackage[placement=<position>]{mychemistry}
```

Sie können auch das Verhalten einer einzigen Umgebung durch Angabe der entsprechenden Option ändern.

```

1 \begin{rxnscheme}[,<placement>]{<caption>}
2   ...
3 \end{rxnscheme}

```

**Benennung** Wollen Sie den Namen der Beschriftung ändern, können Sie das mit

```
1 \setschemename{<neuer name>}
```

machen. Voreinstellung ist „Reaktionschema“ bzw „Reaction scheme“ bei der Paketoption ‘english’.

**Zähler** Um den Zähler zu ändern, gehen Sie wie üblich vor. Durch

```
1 \makeatletter
2 \@addtoreset{rxnfloat}{section}
3 \makeatother
4 \renewcommand{\therxnfloat}{\arabic{section}.\arabic{
  rxnfloat}}
```

wird der Zähler der Schemata z. B. mit jeder neuen **section** zurückgesetzt und die Nummer nach den Muster **section.rxnfloat** ausgegeben. Beachten Sie, dass Sie wegen des @ den Aufruf mit **\makeatletter** und **\makeatother** begrenzen müssen.

**Verzeichnis** Mit

```
1 \listof{rxnfloat}{<titel>}
```

können Sie eine Liste aller Reaktionsschemata erzeugen:

---

#### Beispiel 48

#### Reaktionsschemata

1	Keto-Enol-Tautomerie . . . . .	12
2	Großes Schema . . . . .	40
3	Kleines Schema . . . . .	40
4	center . . . . .	40
5	right . . . . .	40
6	left . . . . .	40
7	ruled . . . . .	41
8	boxed . . . . .	41
9	plain . . . . .	41
10	Additionsreaktion . . . . .	46
11	Elektrophile Substitution . . .	48
12	Hydratisierung . . . . .	58
13	Synthese von Chrysanthemum- säure . . . . .	62

---

```
1 \listof{rxnfloat}{
  Reaktionsschemata}
```

#### 4.16 setarrowlength

Reaktionspfeile haben als Standardwert die Länge 5.0em oder  $5.0 \cdot \sqrt{2}$ em im Fall der schrägen Pfeile. Die Voreinstellung lässt sich mit

```
1 \setarrowlength{<länge>}
```

auf <länge> bzw.  $\langle \text{länge} \rangle \cdot \sqrt{2}$  ändern. Beachten Sie, dass Sie eine Längeneinheit verwenden müssen. Lassen Sie das Argument leer, wird die Voreinstellung wiederhergestellt.

**Dieser Befehl ersetzt \arrowlength, der bis Version 1.2 noch verfügbar war.**

### 4.17 setarrowline

**NEU** Mit dem Befehl

```
1 \setarrowline{<value>}
```

lässt sich die Dicke der Pfeillinien einstellen. Mögliche Werte sind

```
——— ultra thin
——— very thin
——— thin
——— semithick (default)
——— thick
——— very thick
——— ultra thick
```

Die Werte `very thick` und `ultra thick` sind nicht zu empfehlen.

Die Einstellung gilt auch für `\merge`.

### 4.18 setatomsizes

Mit

```
1 \setatomsizes{<größe>}
```

lässt sich die Schriftgröße der Atomgruppen verändern. Standard ist `\small`. Lassen Sie das Argument leer, wird die Voreinstellung wiederhergestellt.

**Dieser Befehl ersetzt `\atomsizes`, der bis Version 1.2 noch verfügbar war.**

### 4.19 setbondlength

Mit

```
1 \setbondlength{<länge>}
```

lässt sich `\setatomsep{<länge>}` für die **ChemFig**-Formeln *innerhalb* der **myChemistry**-Umgebungen einstellen. Standard ist 1.8em. Lassen Sie das Argument leer, wird die Voreinstellung wiederhergestellt.

**Dieser Befehl ersetzt `\bondlength`, der bis Version 1.2 noch verfügbar war.**

### 4.20 setbondshape

Mit

```
1 \setbondshape{<basislänge>}{<strichdicke>}{<strichabstand>}
>}
```

lässt sich `\setcrambond{<basislänge>}{<strichdicke>}{<strichabstand>}` für die **ChemFig**-Formeln *innerhalb* der **myChemistry**-Umgebungen einstellen. Standard sind in dieser Reihenfolge 3 pt, 0.5 pt und 1 pt. Lassen Sie die Argumente leer, wird die jeweilige Voreinstellung wiederhergestellt.

**Dieser Befehl ersetzt `\bondshape`, der bis Version 1.2 noch verfügbar war.**

## 4.21 setmergelength

NEU

Mit

```
1 \setmergelength{<länge>}
```

kann die Länge des Pfeils beim `\merge`-Befehl geändert werden. Genauer ist damit die Länge ab Zusammenführung bis zur Pfeilspitze gemeint (siehe [Abschnitt 4.11](#)). Lässt man das Argument leer, wird die Voreinstellung (3em) wiederhergestellt.

## 4.22 setrcndist

Die einzelnen Nodes, in denen die Reaktanden und Pfeile geschrieben werden, haben in den **myChemistry**-Umgebungen einen bestimmten Abstand voneinander. Per Default ist das 1em. Wenn Sie das ändern wollen, können Sie das mit

```
1 \setrcndist{<länge>}
```

machen. Lassen Sie das Argument leer, wird der Abstand wieder auf 1em zurückgesetzt.

---

### Beispiel 49

```
1 \setrcndist{2em}
2 \begin{rxn}
3 \reactant{A}\arrow{}{}
4 \end{rxn}
5 \setrcndist{}
6 \begin{rxn}
7 \reactant{A}\arrow{}{}
8 \end{rxn}
```

A  $\longrightarrow$

A  $\longrightarrow$

---

## 4.23 setrxnalign/setschemealign

Mit den Befehlen

```
1 \setrxnalign{<alignment>}
2 \setschemealign{<alignment>}
```

lässt sich das Default-Ausrichtungsverhalten (siehe [Abschnitt 4.14.1](#) & [Abschnitt 4.15.1](#)) der Umgebungen festlegen. Es gibt die Einstellungsmöglichkeiten `left`, `center` oder `right`.

Lassen Sie das Argument leer, wird die Defaulteinstellung von **myChemistry** (`center`) wiederhergestellt.

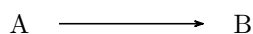
---

Beispiel 50

```

1 \setrxnalign{right}
2 \begin{rxn}
3 \reactant{A}\arrow{}{}\reactant{B}
4 \end{rxn}
5 \setrxnalign{}
6 \begin{rxn}
7 \reactant{A}\arrow{}{}\reactant{B}
8 \end{rxn}

```



## 4.24 setschemename

Siehe [Abschnitt 4.15.2](#).

## 4.25 transition

`\transition` funktioniert genau wie `\reactant` (siehe [Abschnitt 4.13](#)). Wenn Sie ältere Versionen von **myChemistry** eingesetzt haben, beachten Sie, dass sich die Befehl-Syntax mit v1.3 verändert hat.

```

1 \transition[<ausrichtung>,<anker>,<tikz>]{<formel>}

```

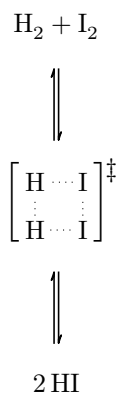
---

Beispiel 51

```

1 \begin{rxn}
2 \reactant{ \ce{H2 + I2} }
3 \arrow[below,<=>,.5]{}{}
4 \transition[below]{ \chemfig[
   dotted][H?-I-[2]I-[4]H?] }
5 \arrow[below,<=>,.5]{}{}
6 \reactant[below]{ \ce{2 HI} }
7 \end{rxn}

```



## 5 Beispiele

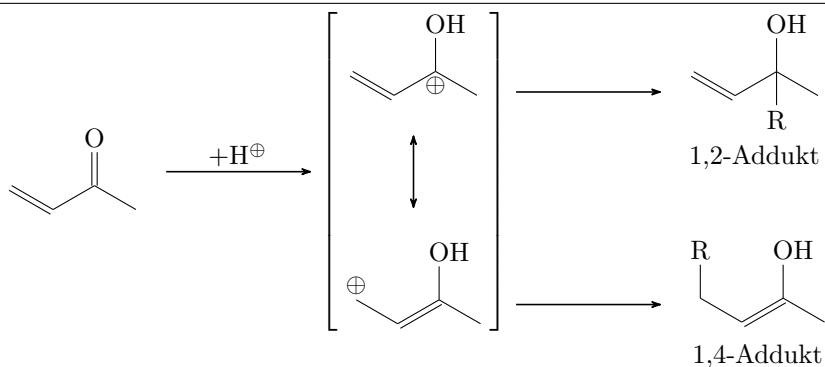
### 5.1 Addition

Ein einfaches Reaktionsschema mit zwei unterschiedlichen Produkten.

---

#### Reaktionsschema 10 Additionsreaktion

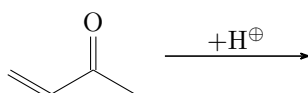
---



Schritt für Schritt. Zunächst das Edukt und der erste Reaktionspfeil.

```

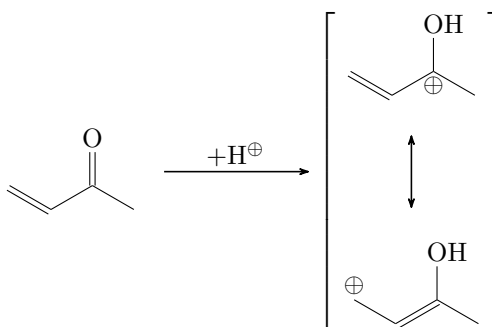
1 \reactant{ \chemfig{=_{[: -30] -[:60] (=[:60] O) -[: -60]} }
2 \arrow{ $+ \Hpl$ }{}
```



Anschließend die mesomeren Grenzformeln:

```

3 \mesomeric[,gf]{
4   \reactant{ \chemfig{=_{[: -30] -[:60] (-[:60] OH)
5     (-[: -120, .3, , , white]\oplus) -[: -60]} }
6   \marrow[below]
7   \reactant[below]{ \chemfig{\oplus -[6, .3, , , white
8     ] -[: -30] =_{[:60] (-[:60] OH) -[: -60]} }
9 }
```

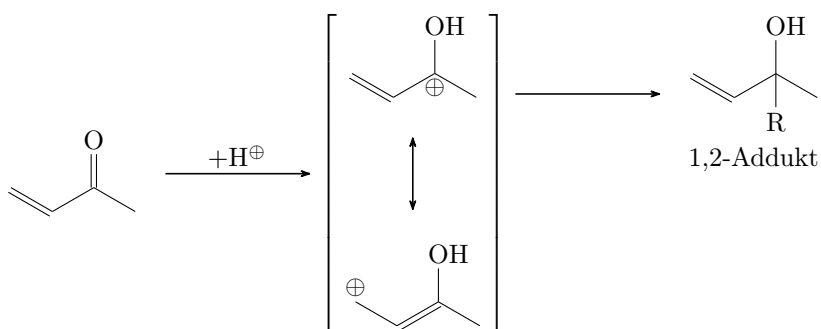


Nun den Branch zum 1,2-Addukt, mit yshift nach oben verschoben:

```

8   \branch[right=of gf,,yshift=3em]{
9     \arrow{}}{}
10    \reactant{ \chemname{\chemfig{=[:-30]-[:60](-[:60]OH
11      )(-[:120]R)-[:60]}}{1,2-Addukt} }

```

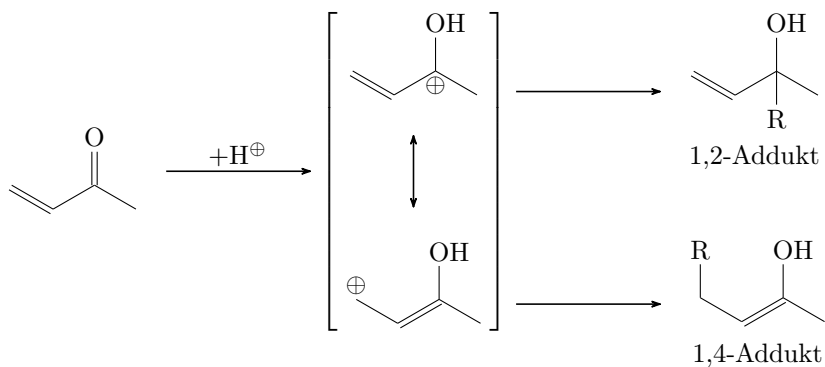


Zuletzt den Branch zum 1,4-Addukt, mit yshift nach unten verschoben:

```

12  \branch[right=of gf,,yshift=-5em]{
13    \arrow{}}{}
14    \reactant{ \chemname{\chemfig{R
15      -[6]-[:-30]=[:-60](-[:60]OH)-[:60]}}{1,4-Addukt}
16    }

```



Der komplette Code ist also der folgende:

```

1   \begin{rxnscheme}{Additionsreaktion}
2   \reactant{ \chemfig{=[:-30]-[:60](=[:60]O)-[:60]}
3     }
4   \arrow{ $+ \text{Hpl} $ }{}

```

```

4 \mesomeric[,gf]{
5   \reactant{ \chemfig{=[:-30]-[:60](-[:60]OH)
6     (-[::-120,.3,,,white]\oplus)-[::-60]} }
7   \marrow[below]
8   \reactant[below]{ \chemfig{\oplus-[6,.3,,,white
9     ]-[:-30]=[:-60](-[:60]OH)-[::-60]} }
10 }
11 \branch[right=of gf,,yshift=3em]{
12   \arrow{}{}
13   \reactant{ \chemname{\chemfig{=[:-30]-[:60](-[:60]
14     OH)-[::-120]R)-[::-60]}}{1,2-Addukt} }
15 }
16 \branch[right=of gf,,yshift=-5em]{
17   \arrow{}{}
18   \reactant{ \chemname{\chemfig{R
19     -[6]-[:-30]=[:-60](-[:60]OH)-[::-60]}}{1,4-Addukt}
20 } }
21 }
22 \end{rxnscheme}

```

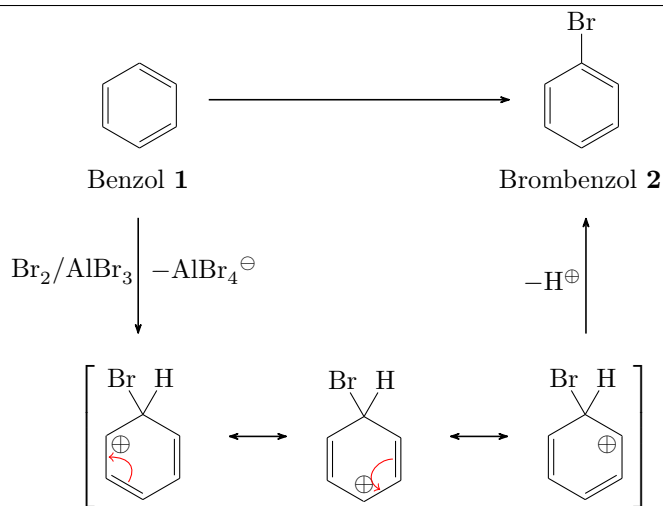
## 5.2 Mesomerie

Folgendes Reaktionsschema soll verwirklicht werden.

---

### Reaktionsschema 11 Elektrophile Substitution

---



Zunächst erstellen wir die Hauptreaktion. Dafür setzen wir die Befehle `\reactant`, `\arrow` und die Umgebung `\begin{rxnscheme}` ... `\end{rxnscheme}` ein.

```

1 \begin{rxnscheme}{Elektrophile Substitution}

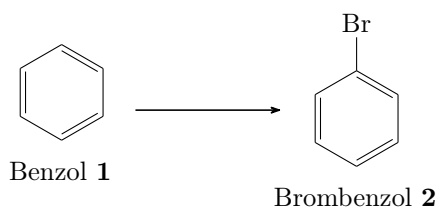
```



```

2   \reactant{
3     \chemname{\chemfig{*6(-----)}}{Benzol} \compound{benzol}
4   }
5   \arrow{}{}
6   \reactant{
7     \chemname{\chemfig{*6(-----(-Br)-)}}{Brombenzol} \
8       compound{brombenzol}}
9   \end{rxnscheme}

```

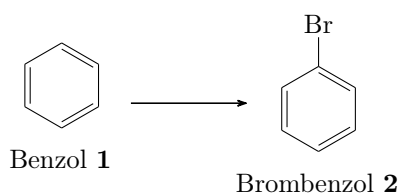


Nun wollen wir das ganze etwas verkleinern, damit wir nicht soviel Platz verbrauchen.

```

1   \begin{rxnscheme}[,,, .8]{Elektrophile Substitution}
2     \setatomsep{1.6em}
3     \reactant{
4       \chemname{\chemfig{*6(-----)}}{Benzol} \compound{benzol}
5     }
6     \arrow{}{}
7     \reactant{
8       \chemname{\chemfig{*6(-----(-Br)-)}}{Brombenzol} \
9         compound{brombenzol}}
10    \end{rxnscheme}

```



Damit die beiden Benzol-Ringe auf gleicher Höhe erscheinen, haben wir zwei Möglichkeiten. Entweder, wir verschieben den zweiten mit *TikZ*-Code nach oben:

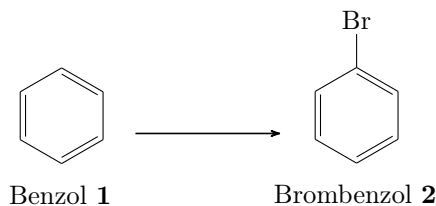
```

7   \reactant[,,, yshift=1em]{
8     \chemname{\chemfig{*6(-----(-Br)-)}}{Brombenzol} \
9       compound{brombenzol}}

```

9 }

Diese Lösung ist nicht optimal, da dann der Reaktionspfeil nicht mittig sondern etwas zu tief erscheint.

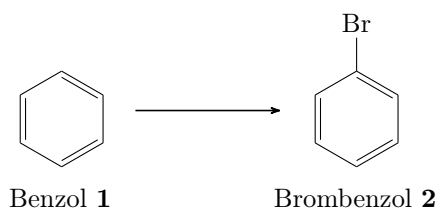


Die zweite Variante wäre, den ersten Ring nach unten zu verschieben. Das können wir nicht mit `TikZ`-Code verwirklichen, da der Pfeil und der zweite Ring jeweils relativ zum vorhergehenden gesetzt werden. Durch ein unsichtbares Brom erreichen wir aber den gewünschten Effekt:

```

3 \reactant{
4   \chemname{\chemfig{*6(==(-[,,,white]\phantom{Br})=)}{Benzol \compound{benzol}}}
5 }

```



Damit wir nun unterhalb dieser Reaktion einen Reaktionszweig erstellen können, benötigen wir den Befehl `\branch` und wir müssen der ersten Formel einen Namen als Anker geben.

```

1 \begin{rxnscheme}[,,,8]{Elektrophile Substitution}
2   \setatomsep{1.6em}
3   \reactant[,start]{
4     \chemname{\chemfig{*6(==(-[,,,white]\phantom{Br})=)}{Benzol \compound{benzol}}}
5   }
6
7   \branch[below=of start]{
8     \arrow[below,,,both]{ \ce{Br2 / AlBr3} }{ $-\ce{AlBr}
9       4\om}$ }
10
11   \arrow{}{}
12   \reactant{

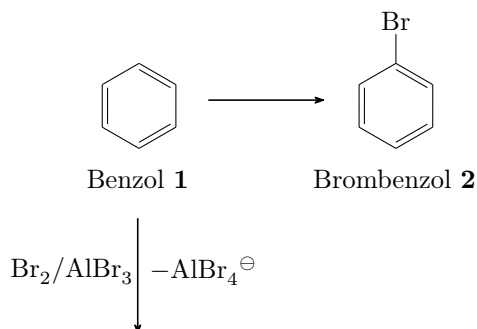
```

```

13      \chemname{\chemfig{*6(==(-Br)-)}}{Brombenzol \
      compound{brombenzol}}
14    }
15    \end{rxnscheme}

```

Wir nennen also die erste Substanz **start** und sagen `\branch` mit `below=of start`, dass die Verzweigung unterhalb beginnen soll. Damit der anschließende Reaktionspfeil nach unten zeigt, bekommt `\arrow` die Option `below`. Damit erhalten wir folgendes Bild:

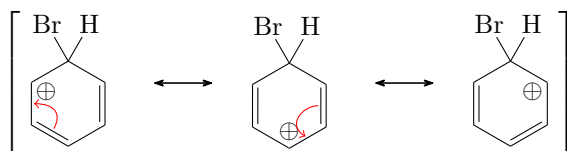


Als nächstes erstellen wir die mesomeren Grenzformeln des Wheland-Komplexes. Hier setzen wir drei weitere Befehle ein: `\mesomeric`, `\marrow` und `\elmove`.

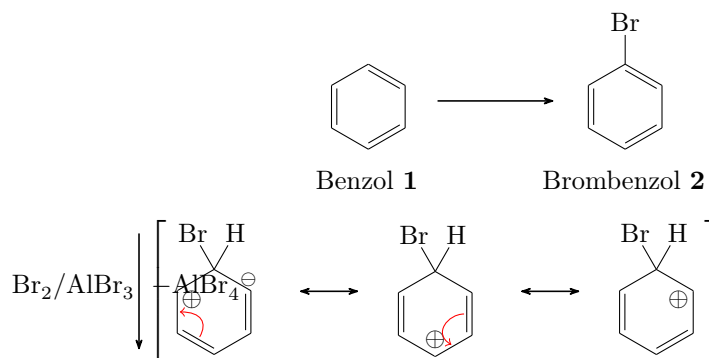
```

1    \mesomeric{
2      \reactant{
3        \chemfig{*6(=[@{e1}]--(-[:120]Br)(-[:60]H)
4          -(-[:30,.4,,,white]\oplus)-[@{e2}])}
5        \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
6      }
7      \marrow
8      \reactant{
9        \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e
10          3}]-(-[:120]Br)(-[:60]H)-=)}
11        \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
12      }
13      \marrow
14      \reactant{
15        \chemfig{*6(==(-[:150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]Br
16          )(-[:60]H)-=)}
17      }
18    }

```



Setzen wir den Code *in den* `\branch` nach dem Pfeil, ergibt sich folgendes Gesamtbild:



Die Ausrichtung der mesomeren Formeln stimmt offensichtlich nicht und der Pfeil ist nicht mehr, wo er sein soll. Wir könnten folgendes versuchen:

```

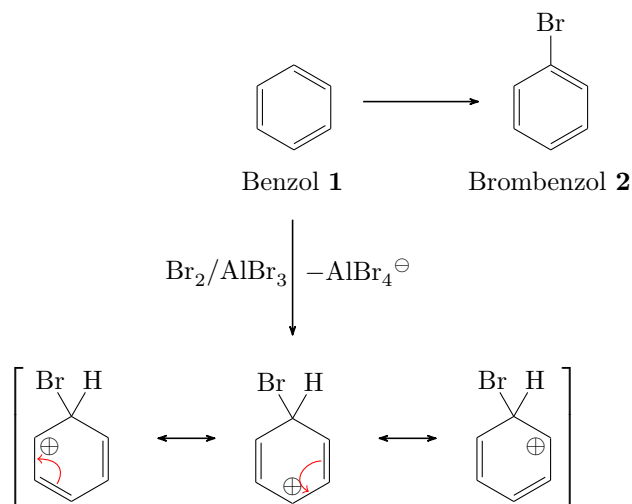
1  \begin{rxnscheme}[,,,8]{Elektrophile Substitution}
2  \setatomsep{1.6em}
3  \reactant[,start]{
4    \chemname{\chemfig{*6(==(-[,,,,white]\phantom{Br})
      ==)}}{Benzol \compound{benzol}}
5  }
6
7  \branch[below=of start]{
8    \arrow[below,,,,both]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\$-\ce{AlBr4\om
      }\$}
9    \mesomeric[below]{
10     \reactant{
11       \chemfig{*6(=[@{e1}]==(-[:120]Br)(-[:60]H)
12         -(-[:30,.4,,,white]\oplus)-[@{e2}]})}
13       \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
14     }
15     \marrow
16     \reactant{
17       \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{
18         e3}]-(-[:120]Br)(-[:60]H)-=)}
19       \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
20     }
21     \marrow
22     \reactant{
23       \chemfig{*6(==(-[:150,.4,,,white]\oplus)
24         -(-[:120]Br)(-[:60]H)-=)}
25     }
26   }
27 }
```

```

24   }
25
26   \arrow{}{}
27   \reactant{
28     \chemname{\chemfig{*6(==(-Br)-=)}}{Brombenzol \
      compound{brombenzol}}
29   }
30   \end{rxnscheme}

```

Das Ergebnis ist schon besser:



Es ist allerdings für unser Beispiel unbefriedigend, dass die Platzierung zwar unterhalb, aber zentriert erscheint. Um das zu umgehen, werden wir dem Pfeil darüber einen Namen als Anker geben und die mesomeren Formeln als eigenen `\branch` setzen.

```

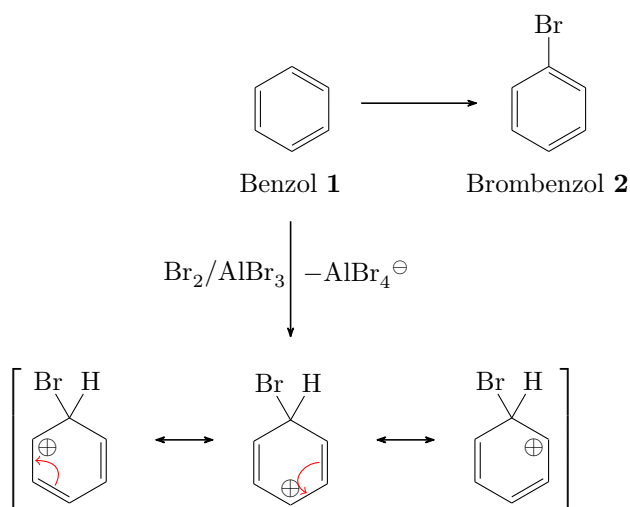
6   ...
7   \branch[below=of start]{
8     \arrow[below,,,pfeil_a,both]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\$-\ce{
      AlBr4\om}}\$}
9   }
10  \branch[below=of pfeil_a]{
11    \mesomeric{
12      \reactant{
13        \chemfig{*6(=[@{e1}]--(-[:120]Br)(-[:60]H)
          -(-[: -30,.4,,,white]\oplus)-[@{e2}]})}
14        \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
15      }
16      \marrow
17      \reactant{
18        \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e
          3}]-(-[:120]Br)(-[:60]H)-=)}

```

```

19      \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
20    }
21    \marrow
22    \reactant{
23      \chemfig{*6(==(-[:150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]
        Br)(-[:60]H)-=)}
24    }
25  }
26 }
27 ...

```



Das scheint auf den ersten Blick keine Verbesserung zu sein. Allerdings können wir den `\branch` mit den `TikZ`-Keys `xshift` und `yshift` noch beliebig verschieben.

```

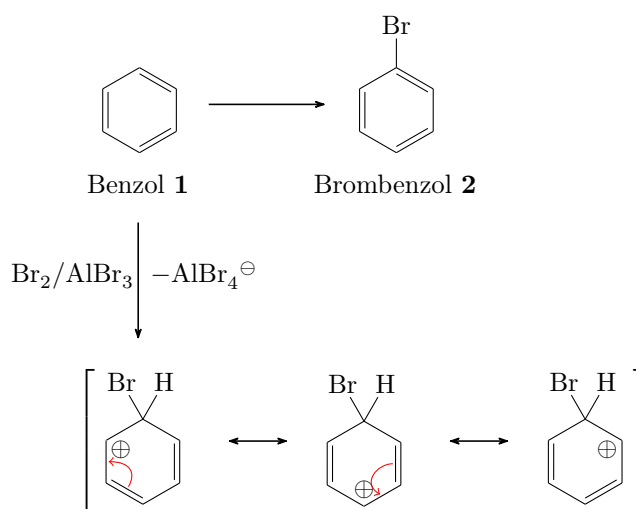
6    ...
7    \branch[below=of start]{
8      \arrow[below,,,pfeil_a,both]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\$-\ce{
        AlBr4\om}}\$}
9    }
10   \branch[below=of pfeil_a,mesomerie,xshift=8.5em]{
11     \mesomeric{
12       \reactant{
13         \chemfig{*6(=[@{e1}]-=-(-[:120]Br)(-[:60]H)
          -(-[:30,.4,,,white]\oplus)-[@{e2}])}
14         \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
15       }
16       \marrow
17       \reactant{

```

```

18      \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e
19      3}]-(-[:120]Br)-[:60]H)-=)}
20      \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
21    }
22    \marrow
23    \reactant{
24      \chemfig{*6(==(-[:150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]
25      Br)-[:60]H)-=)}
26    }
27    ...

```



Damit wir mit dem Pfeil zurück nicht wieder das Problem mit der Zentrierung haben, bekommt er ebenfalls seinen eigenen `\branch`.

```

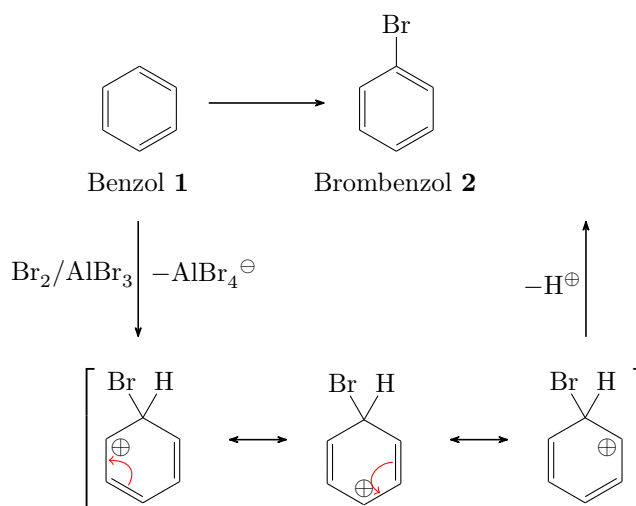
6    ...
7    \branch[below=of start]{
8      \arrow[below,,,pfeil_a,both]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\$-\ce{
9      AlBr4\om}}\$}
10   }
11   \branch[below=of pfeil_a,mesomerie,xshift=8.5em]{
12     \mesomeric{
13       \reactant{
14         \chemfig{*6(=[@{e1}]==(-[:120]Br)-[:60]H)
15         -(-[:30,.4,,,white]\oplus)-[@{e2}])}
16         \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
17       }
18     }
19     \marrow

```

```

17     \reactant{
18         \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e
19             3}]-(-[:120]Br)(-[:60]H)-=)}
20     }
21     \marrow
22     \reactant{
23         \chemfig{*6(==(-[:150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]
24             Br)(-[:60]H)-=)}
25     }
26 }
27 \branch[above=of mesomerie,,xshift=7.25em]{
28     \arrow[above]{\$-\Hpl\$}{\}
29 }
30 ...

```



Nun sind wir fast am Ziel. Der Hauptreaktion ist noch zu kurz. Der fertige Code:

```

1  \begin{rxnscheme}[,,,8]{Elektrophile Substitution}
2  \setatomsep{1.6em}
3  \reactant[,start]{\chemname{\chemfig{*6(==(-[:150,.4,,,white
4      ]\phantom{Br})-)=}}{Benzol \compound{benzol}} }
5  \branch[below=of start]{
6      \arrow[below,,,pfeil_a,both]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\$-\ce{
7          AlBr4\om}}\$}
8  }
9  \branch[below=of pfeil_a,mesomerie,xshift=8.5em]{

```



```

9      \mesomeric{
10      \reactant{
11      \chemfig{*6(=[@{e1}]--(-[:120]Br)(-[:60]H)
12      -(-[: -30,.4,,,white]\oplus)-[@{e2}])}
13      \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
14      }
15      \marrow
16      \reactant{
17      \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e
18      3}]-(-[:120]Br)(-[:60]H)-=)}
19      \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
20      }
21      \marrow
22      \reactant{
23      \chemfig{*6(--(-[: -150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]
24      Br)(-[:60]H)-=)}
25      }
26      \branch[above=of mesomerie,,xshift=7.25em]{
27      \arrow[above]{$-\text{Hpl}$}{}
28      }
29      \arrow[, ,2.6]{}{}
30      \reactant{ \chemname{\chemfig{*6(--=(-Br)-=)}}{
31      Brombenzol \compound{brombenzol}} }
32      \end{rxnscheme}

```

### 5.3 Hydratisierung

Ein Schema mit Übergangszuständen.

Für dieses Beispiel wurde zunächst ein Stil für die delokalisierten Doppelbindungen erstellt:

```

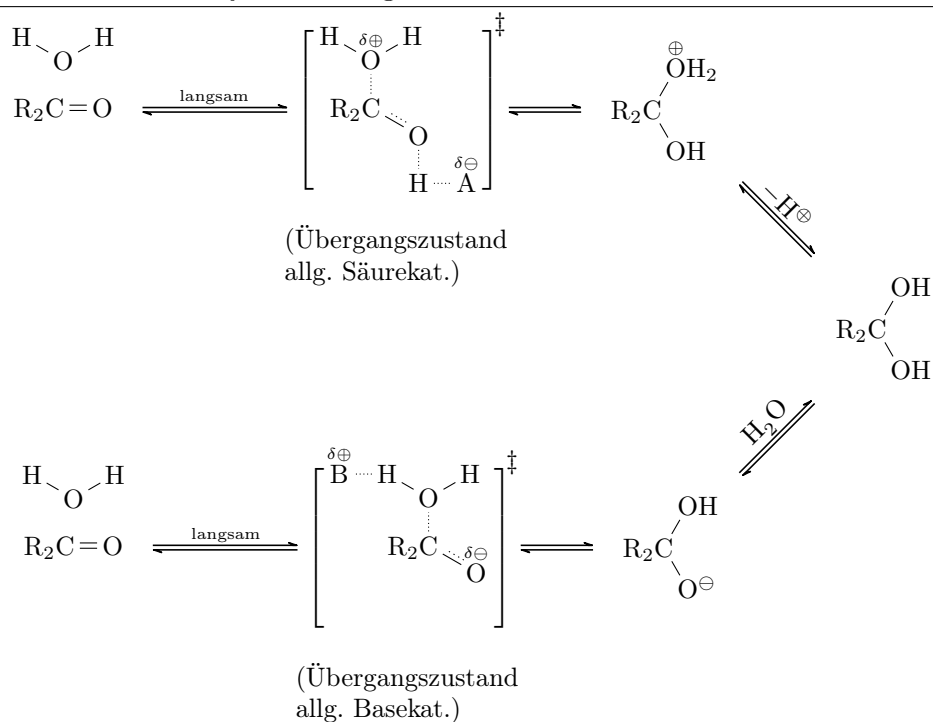
1  \pgfdeclaredecoration{ddbond}{initial}{%
2  \state{initial}[width=2pt]{%
3  \pgfpathlineto{\pgfpoint{2pt}{0pt}}%
4  \pgfpathmoveto{\pgfpoint{1.5pt}{2pt}}%
5  \pgfpathlineto{\pgfpoint{2pt}{2pt}}%
6  \pgfpathmoveto{\pgfpoint{2pt}{0pt}}%
7  }%
8  \state{final}{%
9  \pgfpathlineto{\pgfpointdecoratedpathlast}%
10 }%

```

---

**Reaktionsschema 12** Hydratisierung
 

---



```

11 }%
12 \tikzset{lddbond/.style={decorate,decoration=ddbond}}%
13 \tikzset{rddbnd/.style={decorate,decoration={ddbond,
    mirror}}}%

```

Damit kann nun die Doppelbindung über die <tikz>-Option von **ChemFig** verwendet werden (Siehe auch die **ChemFig**-Dokumentation).

---

**Beispiel 52**

```

1 \chemfig{-[,,,,lddbond]-[,,,,
  rddbnd]}

```

---

Anschließend wurden die beiden Befehle

```

1 \newcommand*\delm{\ensuremath{\text{\tiny$\delta\ominus$}}}
2 \newcommand*\delp{\ensuremath{\text{\tiny$\delta\oplus$}}}

```

definiert, um die Partialladungen ohne Aufwand einsetzen zu können.

Dann sieht der Code folgendermaßen aus:

```

1 \begin{rxnscheme}[rs:hydratisierung,htp]{Hydratisierung}

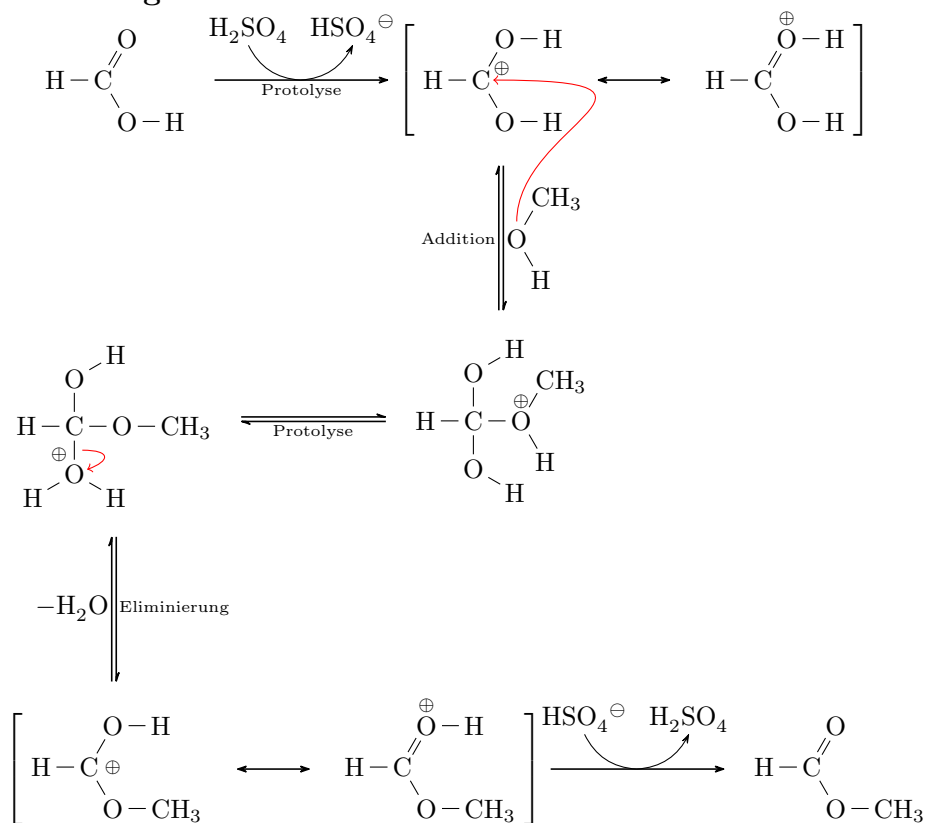
```

```

2 \reactant[,carbonyl_A]{\chemfig{R_2C=O}}
3 \anywhere{above=of carbonyl_A}{\chemfig{H-[: -30]O-[:30]H
  }}
4 \arrow[,<=>]{\tiny langsam}{}
5 \transition[,transition_A]{\chemfig{R_2C(-[2,,2,,densely
  dotted]\chemabove{O}{\del p}(-[:150]H)-[:30]H)
  -[: -30,1.15,,,lddbond]O-[6,,,densely dotted]H-[,,,
  densely dotted]\chemabove{A}{\del m}}}}
6 \anywhere{below=of transition_A,text width=3cm}{(\
  Übergangszustand allg. S\"aurekat.)}
7 \arrow[,<=>,.5]{}{}
8 \reactant{\chemfig{R_2C(-[:60]\chemabove{O}{\scriptstyle
  \oplus}H_2)-[: -60]OH}}
9 \arrow[below right,<=>,.5]{\$-\text{Hpl}\$}{}
10 \reactant[below right]{\chemfig{R_2C(-[:60]OH)-[: -60]OH
  }}
11 \arrow[below left,<=>,.5]{\ce{H2O}}{}
12 \reactant[below left,zw]{\chemfig{R_2C(-[:60]OH)-[: -60]O
  |\text{om}}}
13 \arrow[left,<=>,.5]{}{}
14 \transition[left,transition_B]{\chemfig{R_2C(-[2,,2,,
  densely dotted]O(-[:150]H-[4,,,densely dotted]\
  chemabove{B}{\del p})-[:30]H)-[: -30,1.15,,,lddbond]\
  chemabove{O}{\del m}-[6,,,draw=none]\phantom{H}}}}
15 \anywhere{below=of transition_B,text width=3cm}{(\
  Übergangszustand allg. Basekat.)}
16 \arrow[left,<=>]{\tiny langsam}{}
17 \reactant[left,carbonyl_B]{\chemfig{R_2C=O}}
18 \anywhere{above=of carbonyl_B}{\chemfig{H-[: -30]O-[:30]H
  }}
19 \end{rxnscheme}

```

## 5.4 Veresterung



```

1 \begin{rxn}
2   \reactant{\chemfig{H-C(=[:60]O)-[: -60]O-H}}
3   \arrow[, -+>, 1.2, protolyse]{\ce{H2SO4}}{\ce{HSO4\om}}
4   \anywhere{below=of protolyse, yshift=1em}{\tiny Protolyse}
5   \mesomeric{
6     \reactant{\chemfig{H-@{a2}C(-[:60]O-H)(-[:30,.5,,,draw
7       =none]{\scriptstyle\oplus})-[: -60]O-H}}
8     \marrow
9     \reactant{\chemfig{H-C(=[:60]\chemabove{O}{\scriptstyle\oplus}-H)-[: -60]O-H}}
10    }
11    \branch[on chain=going below,,xshift=-5em]{
12      \arrow[below, <=>]{\tiny Addition}{\chemfig{H-[:120]@{a
13        1}O-[:60]CH_3}}
14      \reactant[below, addukt]{\chemfig{H-C(-[2]O-[:30]H)(-\chemabove{O}{\scriptstyle\oplus})(-[:60]CH_3)-[: -60]
15        H)-[6]O-[: -30]H}}
16    }

```

```

14 \elmove{a1}{90:1.5cm}{a2}{0:3cm}
15 \branch[on chain=going left,,yshift=-3.5em]{
16   \arrow[left,<=>]{}{\tiny Protolyse}
17 }
18 \reactant[left]{\chemfig{H-C(-[2]O-[:30]H)(-O-CH_3)-[@{b
    1}6]@{a3}\chemabove{O}{\hspace*{-4mm}\scriptstyle\
    oplus}(-[: -150]H)-[: -30]H}}
19 \elmove{b1}{0:5mm}{a3}{20:5mm}
20 \arrow[below,<=>]{\ce{- H2O}}{\tiny Eliminierung}
21 \mesomeric[below,,xshift=6em]{
22   \reactant{\chemfig{H-C(-[:60]O-H)(-[,.5,,,draw=none]{\
    scriptstyle\oplus})-[: -60]O-CH_3}}
23   \marrow
24   \reactant{\chemfig{H-C(=[:60]\chemabove{O}{\
    scriptstyle\oplus})-H)-[: -60]O-CH_3}}
25 }
26 \arrow[, ->,1.2]{\ce{HSO4\om}}{\ce{H2SO4}}
27 \reactant{\chemfig{H-C(=[:60]O)-[: -60]O-CH_3}}
28 \end{rxn}

```

### 5.5 myChemistry und ChemFig für eine umfangreichere Synthese

Als letztes Beispiel erstellen wir eine umfangreichere Synthese.

```

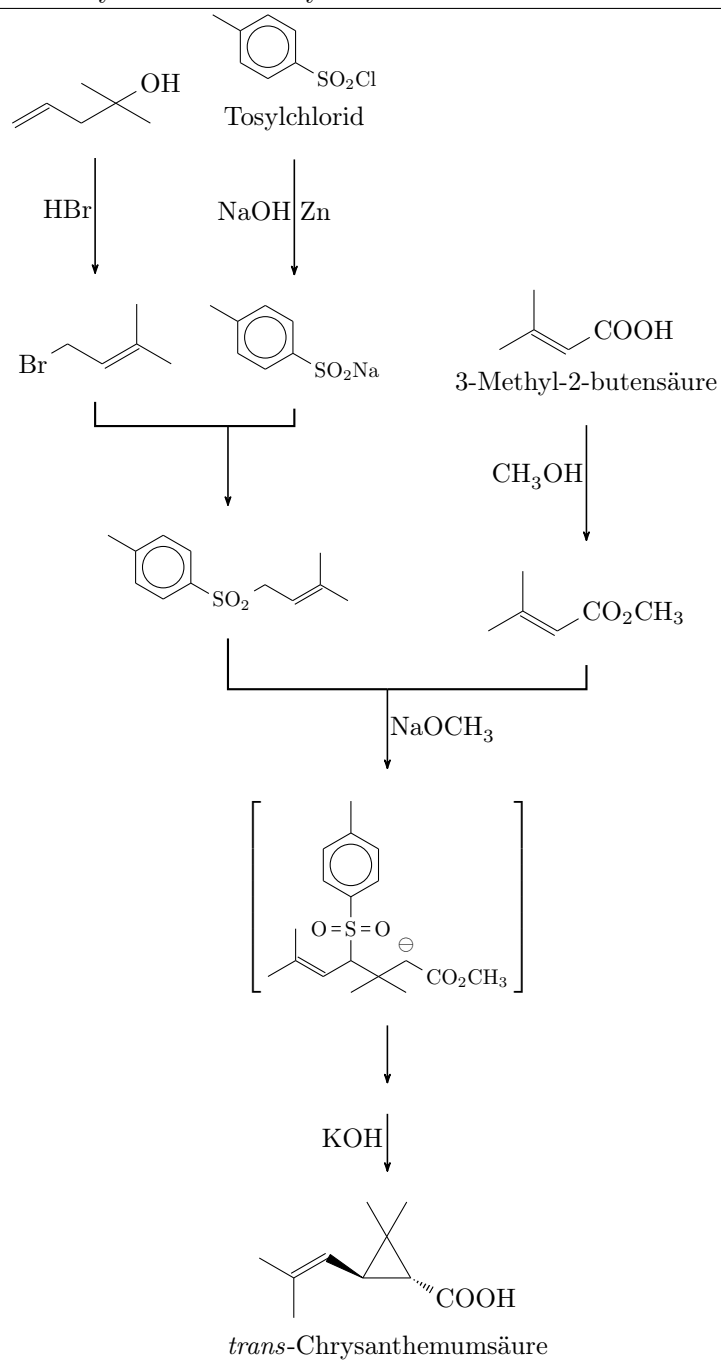
1 \begin{rxnscheme}[,htp,,.8]{Synthese von Chrysanthemums\"
   aure}
2 \setatomsep{1.5em}
3 \branch[,start_links]{
4   \reactant{\chemfig{=_[::30]-[: -60]-[:60](-[: -60])
    (-[:120])-[:0]OH}}
5   \arrow[below]{\ce{HBr}}{}
6   \reactant[below]{\chemfig{Br
    -[:30]-[: -60]=[:60](-[: -60])-[:60]}}
7 }
8 \branch[right=of start_links,start_mitte,yshift=1em]{
9   \reactant{\chemname{\chemfig{[scale=.8]**6(--(-SO_2
    Cl)---(-)-)}}}{Tosylchlorid}}
10  \arrow[below]{\ce{NaOH}}{\ce{Zn}}
11  \reactant[below]{\chemfig{[scale=.8]**6(--(-SO_2Na)
    ---(-)-)}}
12 }
13 \branch[right=of start_mitte,start_right,xshift=3em,
    yshift=-10em]{

```

---

**Reaktionsschema 13** Synthese von Chrysanthemumsäure
 

---



```

14 \reactant{\chemname{\chemfig{-[:30](-[:60])
    =_[: -60] -[:60] COOH}}}{3-Methyl-2-butens\"aure}}
15 \arrow[below]{\ce{CH3OH}}{}
16 \reactant[below]{\chemfig{-[:30](-[:60])
    =_[: -60] -[:60] CO_2CH_3}}
17 }
18 \branch[below=of start_links,ziel_eins,xshift=5em,yshift
    =-5em]{
19 \reactant{\chemfig[] [scale=.8]{**6(--(-S0
    _2-[:30] -[: -60] =_[:60] (-[:60]) -[: -60]) ---(-) -)
    }}
20 }
21 \branch[below=of ziel_eins,target_two,xshift=6em,yshift
    =-6em]{
22 \mesomeric{\chemfig[] [scale=.8]{-[:30](-[:60])
    =^[: -60] -[:60] (-[:60] S(=[:90] O) (=[: -90] O)
    -[:0]**6(---(-) ---) -[: -60] (-[:0]) (-[: -120])
    -[:60] (-[:60],.5,,white)\ominus) -[: -60] CO_2CH
    _3}}
23 \arrow[below,,.5]{}{}
24 \arrow[below,,.5]{\ce{KOH}}{}
25 \reactant[below]{\chemname{\chemfig{-[: -30](-[: -60])
    =^[:60] >[: -60] (-[:90],1.2))
    -[:30,1.2](-[:120,1.2](-[: -60]) -[:0]) <[: -30]
    COOH}}}{\emph{trans}-Chrysanthemums\"aure}}
26 }
27 \merge{ziel_eins}{start_links}{start_mitte}
28 \merge[\ce{NaOCH3}]{target_two}{ziel_eins}{start_right}
29 \end{rxnscheme}

```

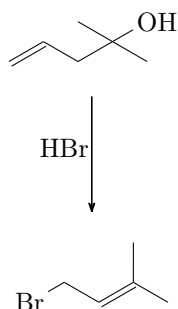
Gehen wir Schritt für Schritt durch den Code.

```

1 \begin{rxnscheme}[,htp,,.8]{Synthesis von Chrysanthemums
  \"aure}
2 \setatomsep{1.5em}
3 \branch[,start_links]{
4 \reactant{\chemfig{=_[:30] -[: -60] -[:60] (-[: -60])
  (-[:120]) -[:0] OH}}
5 \arrow[below]{\ce{HBr}}{}
6 \reactant[below]{\chemfig{Br
  -[:30] -[: -60] =_[:60] (-[: -60]) -[:60]}}
7 }

```

In den Zeilen 1 und 2 beginnen wir die Umgebung und sorgen dafür, dass das Schema nicht zu groß wird. In den Zeilen 3 – 7 schreiben wir den ersten Reaktionszweig.

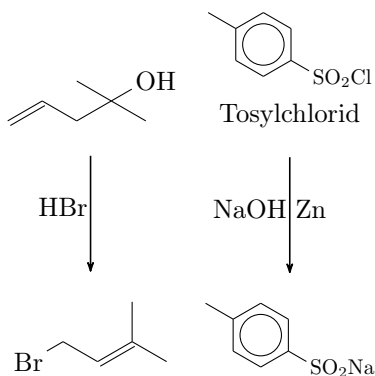


```

8   \branch[right=of start_links,start_mitte,yshift=1em]{
9     \reactant{\chemname{\chemfig{[scale=.8]**6(-(-SO_2
      Cl)---(-)-)}}{Tosylchlorid}}
10    \arrow[below]{\ce{NaOH}}{\ce{Zn}}
11    \reactant[below]{\chemfig{[scale=.8]**6(-(-SO_2Na
      ---(-)-)}}}
12  }

```

In den Zeilen 8 – 12 schreiben wir den zweiten Zweig der Synthese.



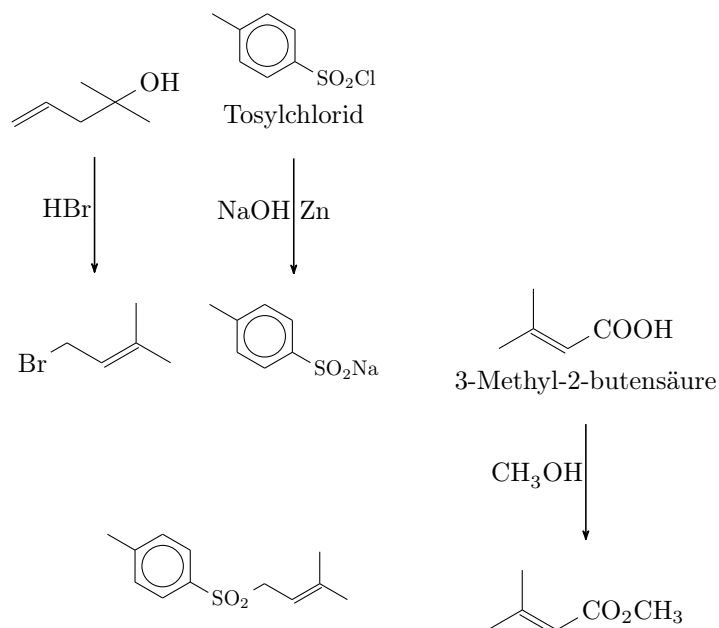
```

13   \branch[right=of start_mitte,start_right,xshift=3em,
      yshift=-10em]{
14     \reactant{\chemname{\chemfig{-[:30](-[:60])
      =_[: -60] -[:60] COOH}}}{3-Methyl-2-butens\"aure}}
15     \arrow[below]{\ce{CH3OH}}{}
16     \reactant[below]{\chemfig{-[:30](-[:60])
      =_[: -60] -[:60] CO_2CH_3}}
17   }
18   \branch[below=of start_links,ziel_eins,xshift=5em,yshift
      =-5em]{
19     \reactant{\chemfig{[scale=.8]**6(-(-SO
      _2-[:30] -[: -60]=_[:60](-[:60]) -[: -60])---(-)-)}}
20   }

```



In den Zeilen 13 – 20 schreiben wir nun den dritten Zweig und das Produkt der ersten beiden Zweige.

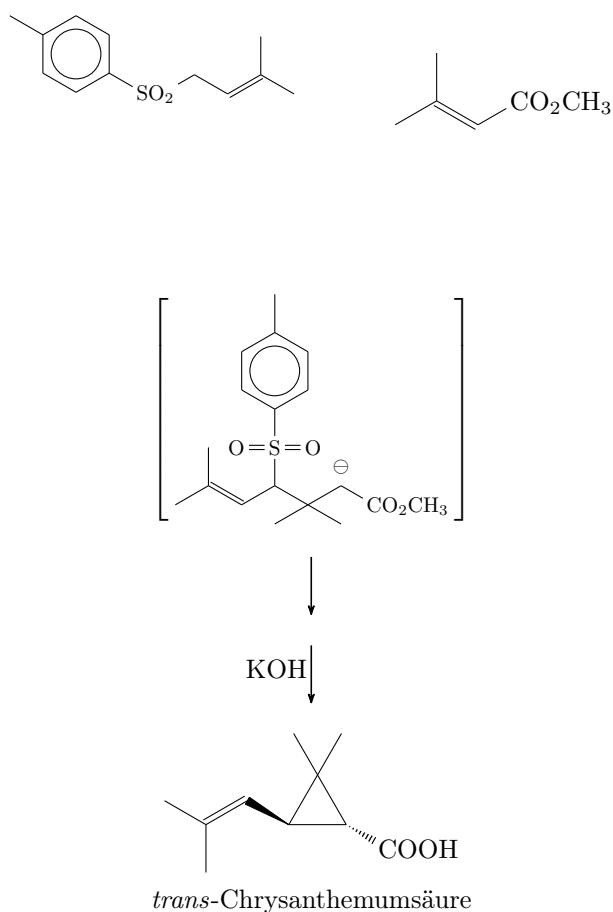


```

21 \branch[below=of ziel_eins,ziel_zwei,xshift=6em,yshift=-6
    em]{
22 \mesomeric{\chemfig{[scale=.8]{-[:30](-[:60])
    =^[: -60] -[:60](-[:60]S(=[:90]O)(=[: -90]O)
    -[:0]**6(---(-)---)) -[: -60](-[:0])(-[: -120])
    -[:60](-[:60,.5,,,white]\ominus) -[: -60]CO_2CH_3}}
23 \arrow[below,,.5]{}}
24 \arrow[below,,.5]{\ce{KOH}}{}}
25 \reactant[below]{\chemname{\chemfig{-[: -30](-[: -60])
    =^[:60]>[: -60](-[:90,1.2])
    -[:30,1.2](-[:120,1.2](-[: -60]) -[:0])<[: -30]
    COOH}}{\emph{trans}-Chrysanthemums"aure}}
26 }

```

In den Zeilen 21 – 26 schreiben wir den letzten Zweig, den Stamm sozusagen.



Schließlich werden die verschiedenen Zweige zusammengeführt, der zweite Merging-Pfeil erhält eine Beschriftung und die Umgebung wird beendet.

```

27   \merge{ziel_eins}{start_links}{start_mitte}
28   \merge[\ce{NaOCH3}]{target_two}{ziel_eins}{start_right}
29   \end{rxnscheme}

```

## 6 Nachwort

myChemistry steckt noch in den Kinderschuhen. Das bedeutet, dass vermutlich noch eine ganze Reihe von Bugs enthalten sind. Bestimmt fehlt auch noch das eine oder andere Feature, das nützlich wäre. Da ich das Paket nur in meiner Freizeit testen und verbessern kann, bin ich über *jede* Art von Feedback sehr froh. Wenn Ihnen myChemistry gefällt, dann helfen Sie doch, es zu verbessern, indem Sie mir Ihre Erfahrungen mitteilen.

Auch wenn ich mich bemüht habe, sinnvolle chemische Reaktionen einzusetzen, habe ich nicht extra überprüft, ob jedes Beispiel chemisch sinnvoll ist. Vertrauen Sie den Beispielen diesbezüglich nicht, sondern sehen Sie in einem Lehrbuch der Chemie nach.

Viel Spaß mit **myChemistry**!

Clemens Niederberger, Berlin, 15. April 2011

## **7 Dank**

Ich schulde Dank für Bugreports und Vorschläge:

F. Chervet, Ferghun, V. Garibal.

## Stichwortverzeichnis

### A

anywhere .....	19, 57
arrow .....	8, 20 ff., 47, 50
Ausrichtung .....	22
Aussehen .....	22
Optionen .....	20 f.
anker .....	20
both .....	20, 22
direction .....	20
length .....	20
type .....	20
Ausrichtung .....	14 - 17

### B

Befehle	
anywhere .....	19
arrow .....	20
branch .....	22
chemand .....	25
dummy .....	25
elmove .....	26
makeinvisible .....	26
makevisible .....	26
marrow .....	27
mCsetup .....	27
merge .....	28
mesomeric .....	32
reactant .....	34
rxn .....	<i>siehe rxn</i>
rxnscheme .....	<i>siehe rxnscheme</i>
setarrowlength .....	41
setarrowline .....	42
setatomsizes .....	42
setbondlength .....	42
setbondshape .....	42
setmergelength .....	43
setrcndist .....	43
setrxnalign .....	43
setschemealign .....	43
setschemename .....	44

transition .....	44
branch .....	9, 22 - 25, 46, 49 - 54
Ausrichtung .....	24 f.

### C

chemand .....	25
chemcompounds .....	6
chemexec .....	6
ChemFig .....	5 f.

### D

dummy .....	25 f.
-------------	-------

### E

elmove .....	26, 50
--------------	--------

### M

makeinvisible .....	26
makevisible .....	26 f.
marrow .....	27, 50
mCsetup .....	27 ff.
align .....	27
arrowlength .....	27
atomsizes .....	27
bondlength .....	27
mergelength .....	27
rcndist .....	27
reset .....	27
rxnalign .....	27
schemealign .....	27
merge .....	28 - 32, 42, 60, 65
mesomeric .....	32 ff., 45, 50
mhchem .....	5 f.

### O

Optionen .....	13 f.
chemstyle .....	13
color .....	13
english .....	13

nochemexec .....	13	transition .....	44
nocolor .....	13	<b>U</b>	
nocompounds .....	13	Umgebung	
nomhchem .....	13	rxn .....	<i>siehe rxn</i>
nopackages .....	13	rxnscheme .....	<i>siehe rxnscheme</i>
placement .....	14	<b>V</b>	
shade .....	14	Voraussetzungen .....	5
<b>R</b>		calc .....	5
reactant .....	8, 34 f., 47	ChemFig .....	5
tikz .....	14	float .....	5
rxn .....	8, 35 ff.	ifthen .....	5
Optionen .....	35 ff.	pgf .....	5
align .....	35	Ti <b>k</b> Z .....	5
scale .....	35	xkeyval .....	5
rxnscheme .....	11, 37 - 41, 47	Voreinstellungen .....	11 ff.
anpassen .....	39 ff.	<b>X</b>	
Benennung .....	40	xshift .....	14, 17, 24, 31, 53
Platzierung .....	40	<b>Y</b>	
Stil .....	39	yshift .....	14, 17, 24, 31, 46, 53
Verzeichnis .....	41		
Zähler .....	41		
Optionen .....	37 ff.		
align .....	38		
label .....	37		
name .....	38		
placement .....	37		
scale .....	38		
<b>S</b>			
setarrowlength .....	13, 41		
setarrowline .....	42		
setatomsizes .....	12, 42		
setbondlength .....	12, 42		
setbondshape .....	12, 42		
setmergelength .....	29, 43		
setrcndist .....	43		
setrxnalign .....	43 f.		
setschemealign .....	43 f.		
setschemename .....	44		
<b>T</b>			
Ti <b>k</b> Z .....	48 f., 53		