

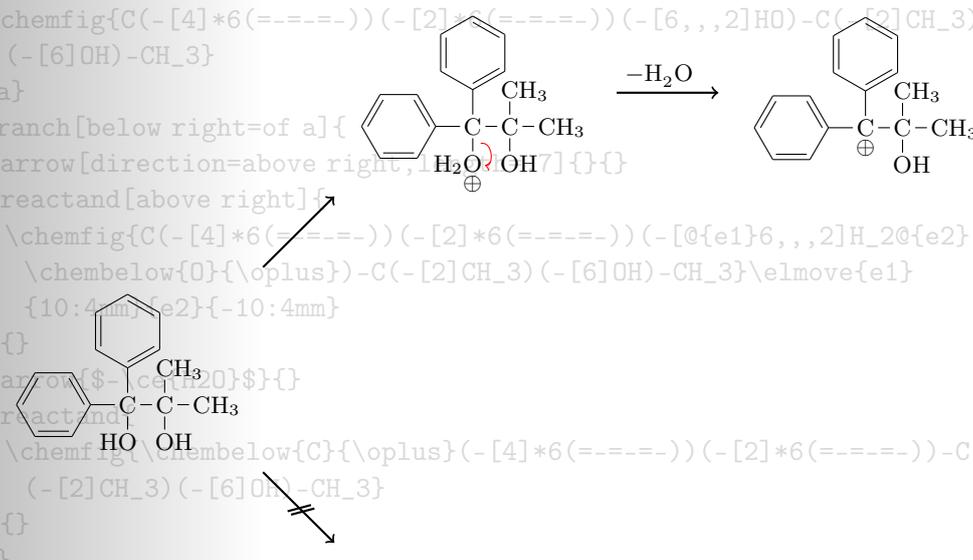
myChemistry

v1.2

20. März 2011
Clemens Niederberger

Reaktionsschemata mit L^AT_EX und ChemFig erstellen

```
\begin{rxn}[scale=.7]
\setatomsep{1.5em}\footnotesize
\reactand{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]HO)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
}{a}
\branch[below right=of a]{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]H_2O)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
\chembelow[0]{\oplus}-C(-[2]CH_3)-[6]OH-CH_3\elmove[e1]
{10:4mm}{e2}{-10:4mm}
}{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]H_2O)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
\chembelow[0]{\oplus}-C(-[2]CH_3)-CH_3}
}{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]HO)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
\chembelow[C]{\oplus}(-[2]CH_3)-CH_3}
}{}
\branch[below right=of a]{
\arrow[type={-|>},direction=below right,len=7]{}
\reactand[below right]{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]HO)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
\chembelow[0]{\oplus}H_2-CH_3\elmove[e3]
{170:4mm}{e4}{-170:4mm}
}{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]HO)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
\chembelow[C]{\oplus}(-[2]CH_3)-CH_3}
}{}
\arrow[{-\ce{H2O}}]{}
\reactand{
\chemfig{C(-[4]*6(==--))(-[2]*6(==--))(-[6,,,2]HO)-C(-[2]CH_3)
(-[6]OH)-CH_3}
\chembelow[C]{\oplus}(-[2]CH_3)-CH_3}
}{}
}{}
\end{rxn}
```



The diagram illustrates the chemical reaction of 2-phenyl-2-methylpropan-1-ol losing a water molecule to form a carbocation. The reactant is shown as a benzene ring attached to a carbon atom, which is also bonded to a methyl group, a hydroxyl group, and another carbon atom bonded to two methyl groups. An arrow labeled $-\text{H}_2\text{O}$ points to the product, which is a carbocation where the hydroxyl group has been removed and a positive charge is now on the central carbon atom. The diagram also includes arrows pointing to the corresponding LaTeX code for each part of the reaction scheme.

Inhaltsverzeichnis

ABSCHNITT 1 Über	3
1.1 Was ist neu?	3
1.2 Lizenz	3
1.3 Voraussetzungen	3
1.4 Die Idee	4
ABSCHNITT 2 Verwendung	5
2.1 Hintergrund	5
2.2 Das Grundprinzip	5
2.3 Wie funktioniert's?	6
<i>Basisbefehle, 6 • Verzweigungen, 7 • Nummerierte Schemata, 9</i>	
2.4 Voreinstellungen	10
2.5 Paket-Optionen	11
ABSCHNITT 3 Fortgeschrittene Anwendung, Verwendung von TikZ	12
ABSCHNITT 4 Alphabetische Befehlsreferenz	13
4.1 arrow	13
4.2 arrowlength	16
4.3 atomsize	16
4.4 bondlength	17
4.5 bondshape	17
4.6 branch	17
<i>Ausrichtungsprobleme, 18</i>	
4.7 dummy	19
4.8 elmove	19
4.9 makeinvisible	20
4.10 makevisible	20
4.11 marrow	21
4.12 merge	21
4.13 mesomeric	23
4.14 reactand	25
4.15 rxn (Umgebung)	26
<i>Optionen, 26</i>	
4.16 rxnscheme (Umgebung)	27
<i>Optionen, 27 • rxnscheme anpassen, 28</i>	
4.17 setrndist	31
4.18 setrxnalign/setschemealign	31

4.19	setschemename	32
4.20	transition	32
<hr/>		
	ABSCHNITT 5 Beispiele	32
5.1	Addition	32
5.2	Mesomerie	35
5.3	Synthese mit <i>TikZ</i>	44
<hr/>		
	ABSCHNITT 6 Nachwort	50

1 Über

1.1 Was ist neu?

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, das 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. Das wurde in der Dokumentation jeweils mit **NEU** gekennzeichnet. Zum Beispiel gibt es nun einige Paketoptionen, um die automatisch eingebundenen Pakete besser zu handhaben (Abschnitt 2.5). Außerdem haben die Pfeile zwei neue Keys bekommen (siehe Abschnitt 4.1).

Auch die Umgebungen haben nun ein paar Möglichkeiten mehr, den persönlichen Vorstellungen angepasst zu werden (siehe Abschnitt 4.15.1, Abschnitt 4.16.1 und Abschnitt 4.17).

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

1.2 Lizenz

myChemistry v1.2 steht unter der LaTeX 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 08.09.2010¹ installiert sein.

Genauer: der Befehl `\pgfpositionnodelater` muss verfügbar sein.

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^AT_EX setzen. Was **ChemFig** gegenüber 'ochem' noch benachteiligt, ist das Erstellen richtiger Reaktionsmechanismen. Hier soll myChemistry Abhilfe schaffen.

myChemistry bindet die Pakete

- **ChemFig**²,
- wenn vorhanden 'mhchem'³ in der Version 3,
- wenn vorhanden 'chemexec'⁴ und
- wenn vorhanden 'chemcompounds'⁵ 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.

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

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

³von Martin Hensel, <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/mhchem/>

⁴von mir, <http://www.niederberger-berlin.net/downloads/?did=1>

⁵von Stephan Schenk, <http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/chemcompounds/>

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. 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. Selbstverständlich bleibt man mit **TikZ** flexibler, aber die Möglichkeit bleibt einem ja immer offen.

2.2 Das Grundprinzip

In dem ‘tikzpicture’, das in den **myChemistry**-Umgebungen erstellt wird, werden Reaktanden und Reaktionspfeile mit einzelnen ‘nodes’¹ auf einer ‘chain’² 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.

¹In 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.

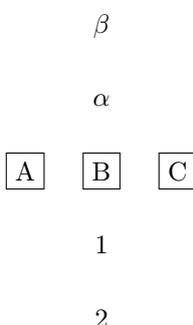
²Dafür ist die tikzlibrary ‘chains’ nötig.

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.

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

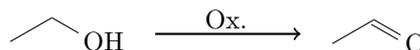
Sehen wir uns zunächst ein Beispiel an:

Beispiel 4

```

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

```



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

`\begin{rxn}[<keys>]` Die erste von zwei Umgebungen. Sie stellt die Reaktionschemata zwischen den Text und zentriert sie (siehe Abschnitt 4.15).

`\reactand[<ausrichtung>]{<formeln>}{<anker>}` setzt eine 'node' auf die 'chain', in die die chemischen Formeln geschrieben werden. Die Standard-Ausrichtung ist nach **right** (siehe Abschnitt 4.14).

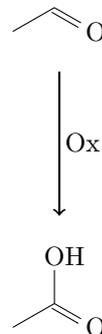
`\arrow[<keys>]{<oben>}{<unten>}` schreibt in der Standardeinstellung einen 5 em langen einfachen Pfeil nach rechts (siehe Abschnitt 4.1).

Beispiel 5

```

1 \begin{rxn}
2 \reactand{ \chemfig
3 {-[::30]=_[::-60]O} }{}
3 \arrow[direction=below]{}{Ox.}
4 \reactand[below]{ \chemfig
5 {-[::30](-[::60]OH)=_[::-60]O}
6 }{}
7 \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 Key-Angabe `direction=below` zeigt der Pfeil nach unten anstatt nach rechts.

2.3.2 Verzweigungen

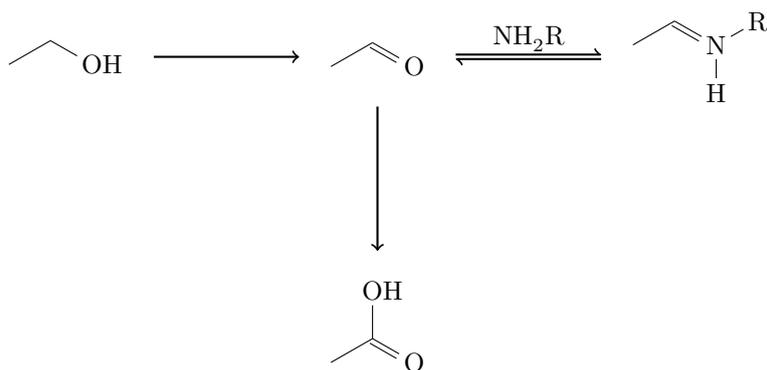
Bislang ist noch nicht recht einsichtig, wieso man `myChemistry` einsetzen sollte. Die waagerechten Reaktionen sind mit `mhchem` und `ChemFig` selbst zu verwirklichen. Und weshalb sollte man eine senkrechte Reaktion benötigen? Was den Einsatz von `myChemistry` aber interessant machen könnte, ist die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

Beispiel 6

```

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

```



Im letzten Beispiel haben Sie einen weiteren wichtigen Befehl kennengelernt:

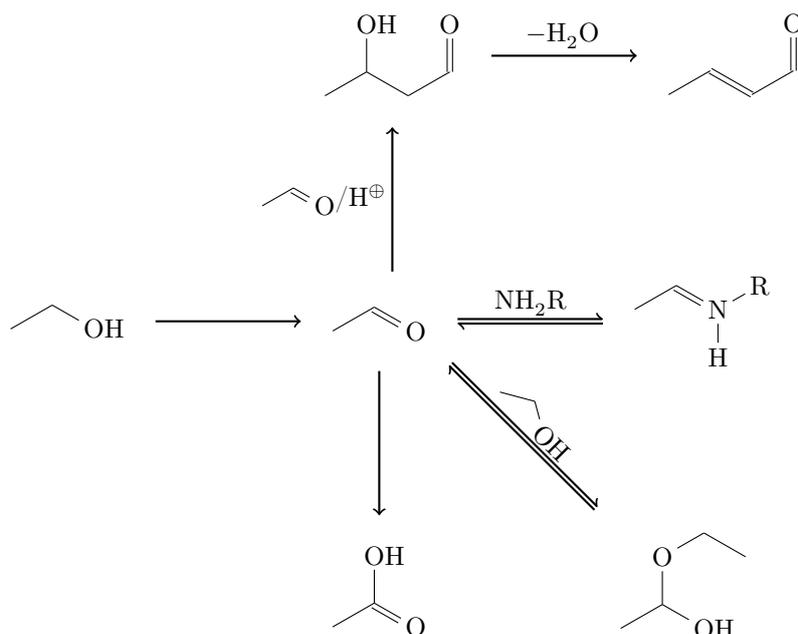
```
\branch[ausrichtung]{zweig}{anker}
```

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 \reactand{ \chemfig{-[::30]-[::-60]OH} }{}
3 \arrow{}{}
4 \reactand{ \chemfig{-[::30]=_[::-60]O} }{carbonyl}
5 \arrow[direction=below]{}{}
6 \reactand[below]{ \chemfig{-[::30](-[::60]OH)=_[::-60]O} }{}
7 \branch[right=of carbonyl]{
8 \arrow[type={<=>}]{\ce{NH2R}}{}
9 \reactand{ \chemfig{-[::30]=_[::-60]N(-[6]H)-[::60]R} }{}
10 }{imin}
11 \branch[below right=of carbonyl]{
12 \arrow[type={<=>},direction=below right]{ \chemfig
13 {[,.75]-[::30]-[::-60]OH} }{}
14 \reactand[below right]{ \chemfig{-[::30](-[::60]O-[::-60]-[::-60])
15 -[::-60]OH} }{}
16 }{halbacetal}
17 \branch[above=of carbonyl,xshift=5.75em]{
18 \arrow[direction=above]{ \chemfig{[,.75]-[::30]=_[::-60]O}/\Hp1 }{}
19 \reactand[above]{ \chemfig{-[::30](-[::60]OH)-[::-60]-[::60]=[::60]O
20 } }{}
21 \arrow[{\$-\ce{H2O}\$]}{}
22 \reactand{ \chemfig{-[::30]=[::-60]-[::60]=[::60]O} }{}
23 }{aldol}
24 \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.

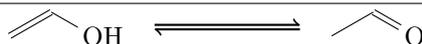
Beispiel 8

```

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

```

Reaktionsschema 1 Keto-Enol-Tautomerie



Hier kommt die Umgebung

```

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

```

zum Einsatz. Wie Sie die Ihren Vorstellungen gemäß anpassen können, lesen Sie in der Befehlsreferenz (Abschnitt 4.16).

2.4 Voreinstellungen

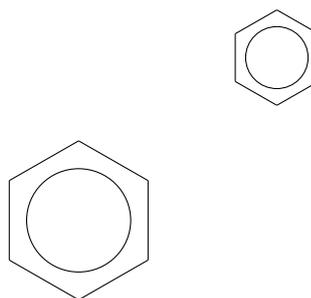
Es gibt einige Voreinstellungen, die zum Teil meinem persönlichen Geschmack geschuldet sind, die Sie aber nach Bedarf ändern können. So gelten für die **ChemFig**-Formeln innerhalb der **myChemistry**-Umgebungen folgende Voreinstellungen:

```
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 \reactand{\chemfig{**6(-----)}}{}
3 \end{rxn}
4 \chemfig{**6(-----)}
```



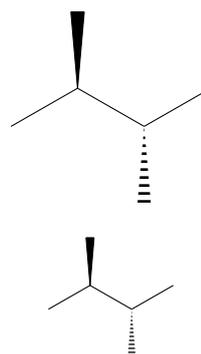
Sie können die Voreinstellungen von **myChemistry** über folgende Befehle ändern:

```
1 \bondlength{<länge>}
2 \bondshape{<basislänge>}{<strichdicke>}{<strichabstand>}
3 \atomsizel{<schriftgröße>}
```

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

Beispiel 10

```
1 \bondlength{2.1em}\bondshape{5pt}
  {1pt}{2pt}\atomsizel{\Large}
2 \begin{rxn}
3 \reactand{\chemfig
  {-[:30](<[:60]
  -[:60](<[:60] -[:60])}{}}
4 \end{rxn}
5 \bondlength{}\bondshape{}{}{}
  \atomsizel{}
6 \begin{rxn}
7 \reactand{\chemfig
  {-[:30](<[:60]
  -[:60](<[:60] -[:60])}{}}
8 \end{rxn}
```



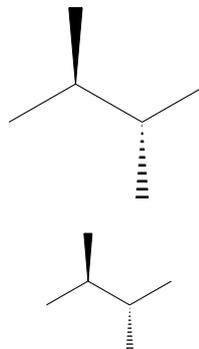
Wollen Sie nur die Parameter einer Umgebung ändern, verwenden Sie *innerhalb der Umgebung* die Befehle von **ChemFig** und die L^AT_EX-Befehle für die Schriftgröße.

Beispiel 11

```

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

```



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

```
1 \arrowlength{<länge>}
```

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

2.5 Paket-Optionen

myChemistry verfügt über einige Paket-Optionen.

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 4.16) in „Reaction scheme“ geändert.

placement=<position> Durch den Aufruf dieser Option kann das Standard-Platzierungsverhalten der **rxnscheme**-Umgebung (siehe Abschnitt 4.16) in <position> geändert werden.

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

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

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

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

- NEU** `nocompounds` Durch diese Option können Sie verhindern, dass `myChemistry` ‘chemcompounds’ lädt.
- NEU** `nomhchem` Durch diese Option können Sie verhindern, dass `myChemistry` ‘mhchem’ lädt, vorausgesetzt, dass ‘chemexec’ auch nicht geladen wird.
- NEU** `chemstyle` Mit dieser Option kann ‘chemstyle’ automatisch geladen werden, ohne dass Konflikte mit `myChemistry` entstehen.
- NEU** `nopackages` Durch diese Option werden (außer `ChemFig`) gar keine Pakete geladen¹.

3 Fortgeschrittene Anwendung, Verwendung von TikZ

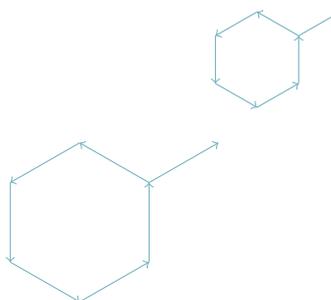
Die meisten der Befehle ermöglichen nach der Ausrichtungsangabe die Angabe weiteren TikZ-Codes. Dadurch lassen sich viele Feinjustierungen vornehmen. Wenn Sie sich mit TikZ einigermaßen auskennen, können Sie sowieso noch weitaus mehr realisieren, als durch `ChemFig` und `myChemistry` vorgegeben (siehe Abschnitt 5.3).

Beispiel 12

```

1 \begin{rxn}
2 \reactand[right,->,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:

¹Außer denen, die `myChemistry` benötigt, um zu funktionieren (TikZ etc.).

Beispiel 13

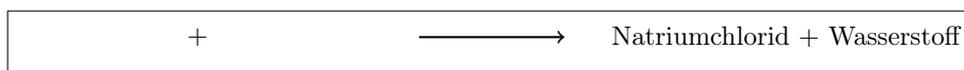
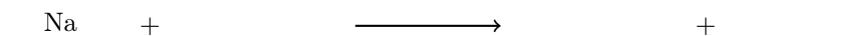
```

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

```

Salzbildung

Fülle die Lücken



4 Alphabetische Befehlsreferenz

Im folgenden Abschnitt werden alle Befehle von **myChemistry** in alphabetischer Reihenfolge vorgestellt. Manchmal werden in den Beispielen der Befehlsreferenz die Nodes (in der **TikZ**-Bedeutung), innerhalb derer Reaktanden, Pfeile oder Branches gesetzt werden, farbig eingerahmt, um zu sehen, welchen Platz sie einnehmen. Das geschieht mithilfe des Befehls `\makevisible`, siehe Abschnitt 4.10.

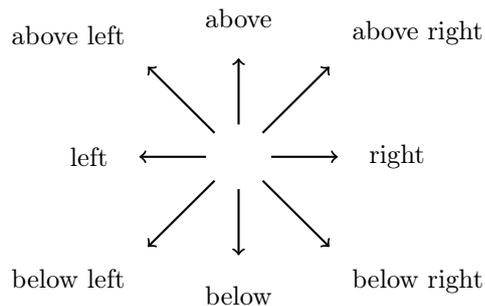
4.1 arrow

Reaktionspfeile werden mit `\arrow` erstellt.

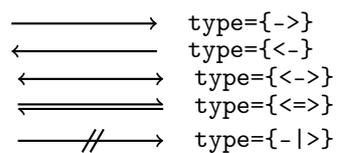
```
1 \arrow[<keys>]{<oben>}{<unten>}
```

Mit mehreren Keys können die Reaktionspfeile angepasst werden. Sie werden nach dem Muster `key=wert` angegeben.

`direction=<richtung>` – mögliche Einstellungen sind:



`type=<typ>` – mögliche Einstellungen sind:



`length=<faktor>` – mit dem Faktoren, den Sie hier angeben, wird die Pfeillänge (5.0 em bei Faktor = 1.0, Standard) multipliziert.

`name=<anker>` – hier können Sie dem Pfeil einen Anker geben, auf den z. B. mit einem Branch referenziert werden kann.

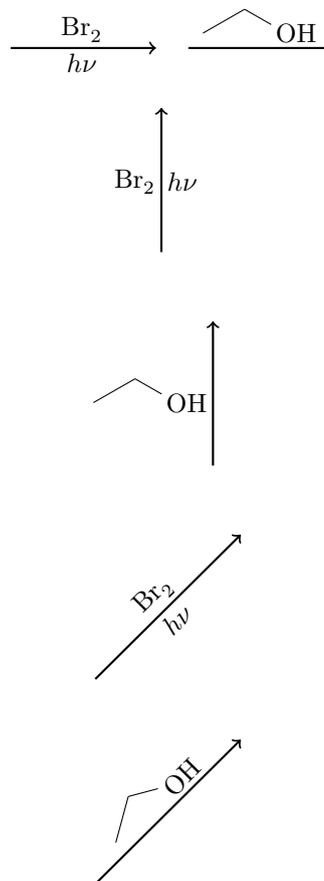
NEU `both` – durch diesen Key haben die beiden Nodes, in die die Beschriftungen geschrieben werden, die gleichen Maße.

Beispiel 14

```

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

```



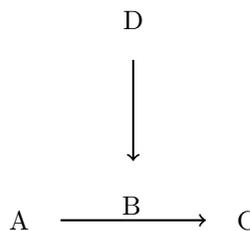
Einmal die meisten Keys im Einsatz:

Beispiel 15

```

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

```



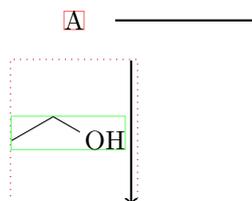
Liegt der Pfeil in einem Branch (siehe Abschnitt 4.6), dann wird die Ausrichtung des Branch bestimmt durch die Größe der Nodes, mit denen die Pfeilbeschriftung platziert wird. Hat der Pfeil nun nur eine oder zwei unterschiedlich große Beschriftungen, dann ist die Ausrichtung falsch.

Beispiel 16

```

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

```



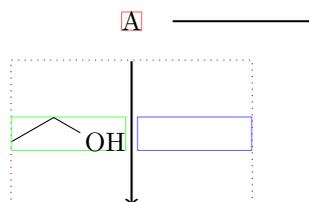
Durch die Verwendung des Keys `both` bekommen die Nodes beider Pfeilbeschriftungen die gleichen Maße, wodurch die Ausrichtung korrigiert werden kann.

Beispiel 17

```

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

```



Mehr zu dem Problem der Ausrichtung lesen Sie in Abschnitt 4.6.1.

4.2 arrowlength

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

```
1 \arrowlength{<länge>}
```

auf `<länge>` bzw. `<länge> · √2` ändern. Beachten Sie, dass Sie eine Längeneinheit verwenden müssen.

4.3 atomsize

Mit

```
1 \atomsizesize{<größe>}
```

lässt sich die Schriftgröße der Atomgruppen verändern. Standard ist `\small`.

4.4 bondlength

Mit

```
1 \bondlength{<länge>}
```

lässt sich `\setatomsep{<länge>}` für die `ChemFig`-Formeln *innerhalb* der `myChemistry`-Umgebungen einstellen. Standard ist 1.8 em.

4.5 bondshape

Mit

```
1 \bondshape{<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, .5 pt und 1 pt.

4.6 branch

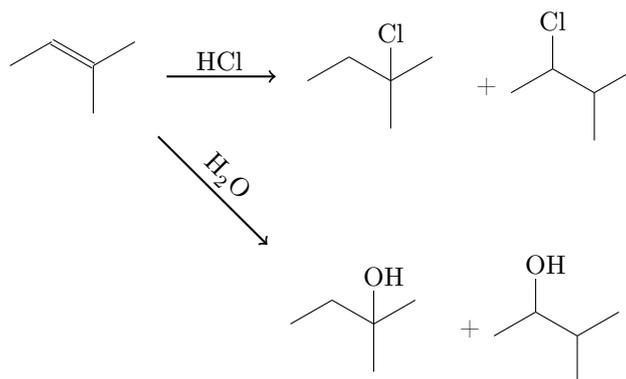
Der Befehl `\branch` wird verwendet, um eine Verzweigung der Reaktion zu realisieren.

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

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

Beispiel 18

```
1 \begin{rxn}
2 \reactand{\chemfig{-[:30]=[:-60](-[:-60]) -[:60]}}{start}
3 \arrow[length=.75]{\ce{HCl}}{}
4 \reactand{\chemfig{-[:30]-[:-60](-[:120]Cl) (-[:-60]) -[:60]}}{}
5 \reactand{\chemsign+\chemfig{-[:30](-[:60]Cl) -[:-60](-[:-60])
-[:60]}}{}
6 \branch[below right=of start]{
7 \arrow[direction=below right,length=.75]{\ce{H2O}}{}
8 \reactand[below right]{\chemfig{-[:30]-[:-60](-[:120]OH)
(-[:-60]) -[:60]}}{}
9 \reactand{\chemsign+\chemfig{-[:30](-[:60]OH) -[:-60](-[:-60])
-[:60]}}{}
10 }{}
11 \end{rxn}
```



In diesem Beispiel hat der erste Reaktand den Anker `start` bekommen (Zeile 2, siehe auch Abschnitt 4.14).

```
2 \reactand{ ... }{start}
```

`\branch` bezieht sich nun in seiner Ausrichtung darauf (Zeile 6):

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

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

Beispiel 19

```
1 \begin{rxn}
2 \reactand{ \chemfig{CH_2=CH-OH}
  }{ }
3 \arrow[type=<=>, length
  =.5]{}{}
4 \branch{ \reactand{ \chemfig{CH
  _3-CH=O} }{} }{}
5 \end{rxn}
```

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

4.6.1 Ausrichtungsprobleme

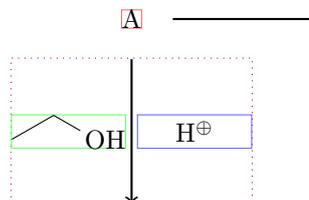
Wenn ein Pfeil zwei verschieden große Beschriftungen hat und in einem Branch liegt, wird der Branch nicht mehr richtig ausgerichtet. Der `\arrow`-Key `both` ist nicht wirklich eine Lösung, weil die kleinere Beschriftung dann nicht mehr am Pfeil liegt, sondern wegrutscht.

Beispiel 20

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactand{A}{a}
4 \arrow{}{}
5 \branch[below=of a]{
6 \arrow[direction=below,both]{\
chemfig{-[::30]-[::-60]OH}}{\Hp1
}
7 }{}
8 \end{rxn}
9 \makeinvisible

```



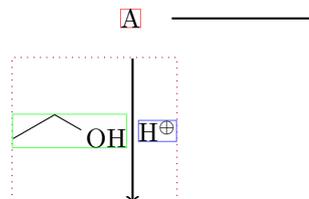
In diesem Fall können Sie den Branch mit den `TikZ`-Keys `xshift` und `yshift` verschieben.

Beispiel 21

```

1 \makevisible
2 \begin{rxn}
3 \reactand{A}{a}
4 \arrow{}{}
5 \branch[below=of a,xshift=-1.35
em]{
6 \arrow[direction=below]{\
chemfig{-[::30]-[::-60]OH}}{\Hp1
}
7 }{}
8 \end{rxn}
9 \makeinvisible

```

**4.7 dummy**

Mit `\dummy` zeichnet man eine leere Node. Die Pfeile, die mit `\arrow` erzeugt werden, müssen einer Node nachfolgen. `\arrow` ruft intern `\tikzchainprevious` auf. Ist *vor* einem Pfeil noch *keine* Node auf die Chain geschrieben worden, erzeugt das eine Fehlermeldung. Durch setzen des `\dummy` kann ein Schema dennoch mit einem Pfeil beginnen.

Beispiel 22

```

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

```

**4.8 elmove**

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

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

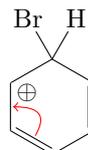
Das schreibt den Befehl

```
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 23

```
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}
```



4.9 makeinvisible

NEU Dieser Befehl hebt die Änderungen von `\makevisible` (siehe Abschnitt 4.10) auf und stellt das normale Verhalten von **myChemistry** wieder her. `\makeinvisible` wirkt sich nur auf nachfolgende Reaktanden aus.

4.10 makevisible

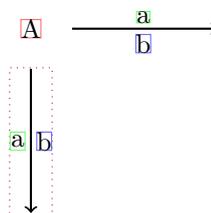
NEU Mit `\makevisible` können Sie die Nodes, innerhalb derer sich die Reaktanden befinden, farblich hervorheben. Das kann z. B. bei der Positionierung und Feinjustierung von Branches ganz nützlich sein. Ein Beispiel dafür sehen Sie in Abschnitt 4.1. Je nach Art der Node ist die Markierung eine andere:

`\reactand{}{}`, `\arrow{above}{}`, `\arrow{}{below}` und `\branch{}{}`. Siehe auch Abschnitt 4.9.

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

Beispiel 24

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



4.11 marrow

Der Befehl `\marrow` zeichnet einen Mesomeriepfeil.

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

Die Ausrichtung funktioniert analog zu `\reactand` (Abschnitt 4.14), siehe auch Abschnitt 4.13.

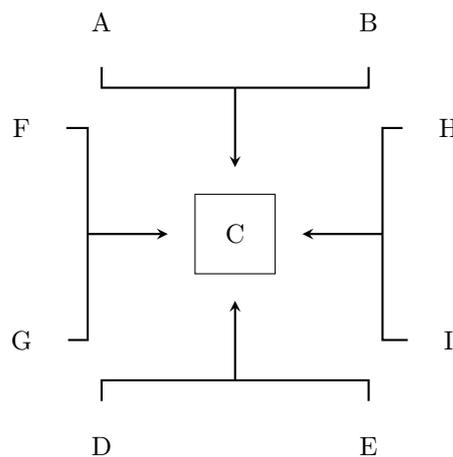
4.12 merge

Der `merge`-Befehl sind nicht nur für den direkten Einsatz in den `myChemistry`-Umgebungen gedacht, sondern können flexibler in einem `tikzpicture` eingesetzt werden. Mit diesem Befehl können verschiedene Reaktionsstränge zu einem vereint werden. Dafür müssen die einzelnen zu vereinigenden Reaktanden als `nodes` mit Namen gekennzeichnet sein.

```
1 \merge[<key>]{<ziel>}{<start a>}{<start b>}
```

Beispiel 25

```
1 \begin{center}
2 \begin{tikzpicture}
3 \node(a) at (0,0) {A};
4 \node(b) at (10em,0) {B};
5 \node[draw,minimum size=3em](c)
  at (5em,-8em) {C};
6 \merge{c}{a}{b}
7 \node(d) at (0,-16em) {D};
8 \node(e) at (10em,-16em) {E};
9 \merge[direction=above]{c}{d}{e}
10 \node(f) at (-3em,-4em) {F};
11 \node(g) at (-3em,-12em) {G};
12 \merge[direction=right]{c}{f}{g}
13 \node(h) at (13em,-4em) {H};
14 \node(i) at (13em,-12em) {I};
15 \merge[direction=left]{c}{h}{i}
16 \end{tikzpicture}
17 \end{center}
```



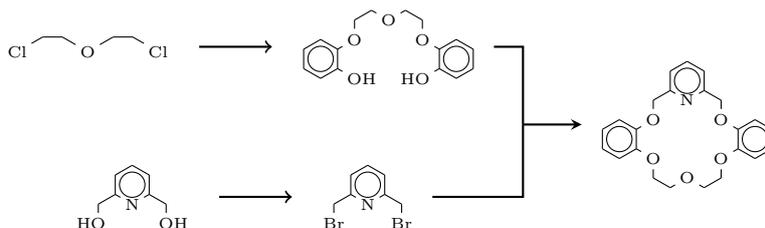
Gibt man den Start- und dem Zielreaktanden Anker, funktioniert `\merge` natürlich auch in den `myChemistry`-Umgebungen.

Beispiel 26

```

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

```



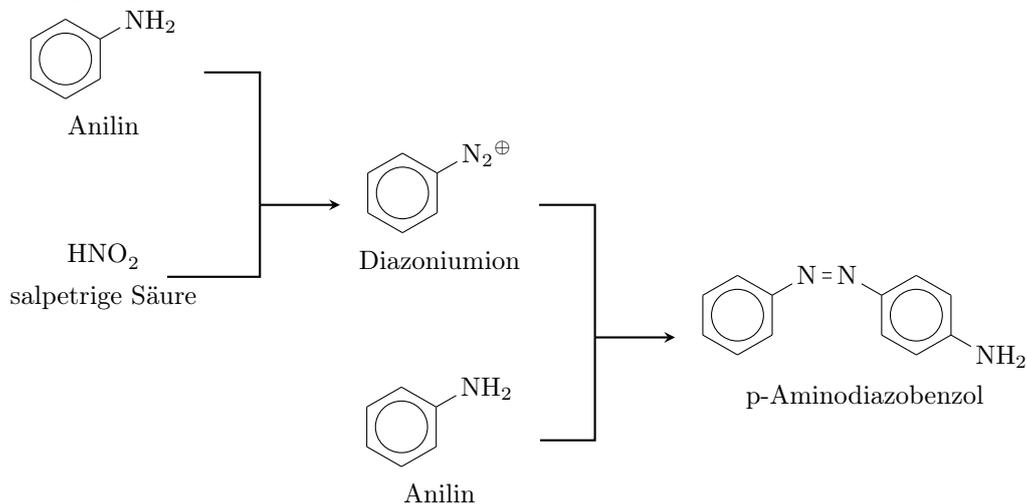
Beachten Sie, dass für die ‘nodes’ in der Regel Branches verwendet werden sollten, wenn Sie `\merge` in den **myChemistry**-Umgebungen verwenden. Die Verwendung von `\merge` erfordert unter Umständen einige Spielerei mit Branches, `xshift` und `yshift`, bis man das gewünschte Ergebnis erhält.

Beispiel 27

```

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

```

**4.13 mesomeric**

Der `\mesomeric`-Befehl funktioniert wie `\reactand` (Abschnitt 4.14). Sein Zweck ist es, eckige Klammern zu setzen.

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

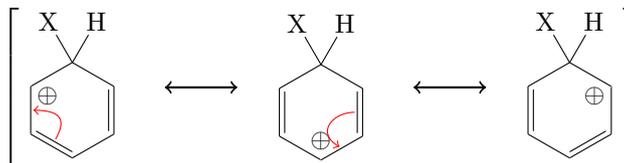
In `<formel(n)>` werden die mesomeren Grenzstrukturen geschrieben. Mit `\marrow` (Abschnitt 4.11) werden die Mesomeriepfeile gesetzt. Man kann `\mesomeric` falls nötig mit einem Anker (`<anker>`) versehen (Abschnitt 4.6). Die Ausrichtung funktioniert analog `\reactand`.

Beispiel 28

```

1 \begin{rxn}
2 \mesomeric{
3 \reactand{
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 \reactand{
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 \reactand{
14 \chemfig{*6(-=-(-[:150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]X)(-[:60]H)-=)}
15 }{}
16 }{}
17 \end{rxn}

```



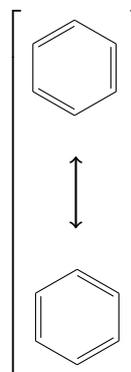
Oder auch von oben nach unten:

Beispiel 29

```

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

```



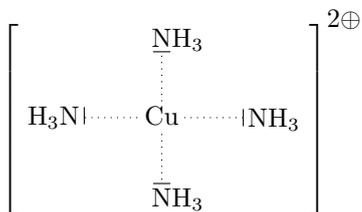
Vielleicht auch einen Komplex?

Beispiel 30

```

1 \begin{rxn}
2 \setatomsep{3em}
3 \mesomeric{
4 \reactand{ \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}
}{a}
5 }{a}
6 \node[above right=of a,yshift
=-1em] {$2\oplus$};
7 \end{rxn}

```

**4.14 reactand**

Der Befehl `\reactand` ist so etwas wie der Basisbefehl.

```
1 \reactand[<ausrichtung>]{<formel (n)>}{<anker>}
```

In diesen Befehl werden die Formeln (<formel>) geschrieben und können, falls nötig, mit einem Anker (<anker>) versehen werden. Das optionale Argument kann die 8 Werte (a) `right`, (b) `above right`, (c) `above`, (d) `above left`, (e) `left`, (f) `below left`, (g) `below`, (h) `below right` 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 31

<pre> 1 untereinander: 2 \begin{rxn} 3 \reactand{\ce{Br2}}{} 4 \reactand[below]{\ce{Cl2}}{} 5 \end{rxn} 6 7 Beispiel mit mehreren Reaktanden 8 : 9 \begin{rxn} 10 \reactand{\ce{Br2}}{} 11 \reactand[below]{\ce{I2}}{} 12 \reactand{\ce{Cl2}}{} 13 \end{rxn} 14 Reaktion von oben nach unten: 15 \begin{rxn} 16 \reactand{\ce{Br-Br}}{} 17 \arrow[length=.5,direction= 18 below]{\h\nu}{} 19 \reactand[below]{\ce{2 ~\lewis 20 {0.,Br}}}{}}{} 21 \end{rxn} </pre>	<pre> untereinander: Br2 Cl2 Beispiel mit mehreren Reaktanden: Br2 I2 Cl2 Reaktion von oben nach unten: Br-Br hv 2 Br• </pre>
---	---

4.15 rxn (Umgebung)

Die Umgebung rxn ist eine unnummerierte nicht gleitende Umgebung für Reaktionsschemata. Die Reaktionsschemata werden zentriert. Die Voreinstellungen `\bondlength`, `\bondshape`, `\arrowlength` und `\atomsizes` gelten hier ebenso wie bei rxnscheme.

```

1 \begin{rxn}[<keys>]
2   ...
3 \end{rxn}

```

4.15.1 Optionen

NEU rxn hat zwei Keys:

`align=<ausrichtung>` das Ausrichtungsverhalten der rxn-Umgebung, Default: center

`scale=<factor>` Skalierung der rxn-Umgebung, Default: 1.0

Beispiel 32

```

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

```

center → zentriert

right → rechts

left → links

4.16 rxnscheme (Umgebung)

Die Umgebung `\rxnscheme` ist eine Gleitumgebung für Reaktionsschemata.

```

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

```

4.16.1 Optionen

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

```

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

```

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

`scale=<scalefactor>` Mit diesem Key kann das Reaktionsschema skaliert werden. Beachten Sie, dass er sich nicht auf die Schriftgröße und die Größe der **ChemFig**-Formeln auswirkt.

```

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

```

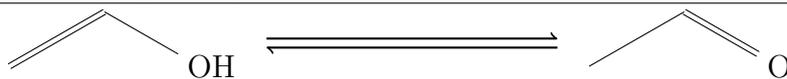
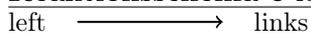
NEU `align=<ausrichtung>` Mit diesem Key kann man auswählen, ob das Schema links, rechts oder mittig ausgerichtet wird.

Beispiel 33

```

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

```

Reaktionsschema 2 Großes Schema**Reaktionsschema 3** Kleines Schema**Reaktionsschema 4** center**Reaktionsschema 5** right**Reaktionsschema 6** left**4.16.2 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 34

```

1 \begin{rxnscheme}{ruled}
2 \reactand{Standard-Stil}{}
3 \end{rxnscheme}
4 \floatstyle{boxed}
5 \restylefloat{rxnfloat}
6 \begin{rxnscheme}{boxed}
7 \reactand{mit Rahmen}{}
8 \end{rxnscheme}
9 \floatstyle{plain}
10 \restylefloat{rxnfloat}
11 \begin{rxnscheme}{plain}
12 \reactand{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 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 eines Keys ändern.

```
1 \begin{rxnscheme}[placement=<position>]{<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 35

Reaktionsschemata

1	Keto-Enol-Tautomerie	9
2	Großes Schema	28
3	Kleines Schema	28
4	center	28
5	right	28
6	left	28
7	ruled	29
8	boxed	29
9	plain	29
10	Additionsreaktion	32
11	Elektrophile Substitution	35
12	Synthese von Chrysanthemum- säure	45

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

4.17 setrcndist

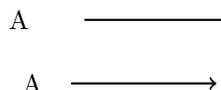
NEU Die einzelnen Nodes, in denen die Reaktanden und Pfeile geschrieben werden, haben in den **myChemistry**-Umgebungen einen bestimmten Abstand voneinander. Per Default ist das 1 em. Wenn Sie das ändern wollen, können Sie das mit

```
1 \setrcndist{<länge>}
```

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

Beispiel 36

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



4.18 setrxnalign/setschemealign

NEU Mit den Befehlen

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

lässt sich das Default-Ausrichtungsverhalten (siehe Abschnitt 4.15.1 & Abschnitt 4.16.1) der Umgebungen festlegen. Es gibt die Einstellungsmöglichkeiten **left**, **center** oder **right**.

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

Beispiel 37

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



4.19 setschemename

Siehe Abschnitt 4.16.2.

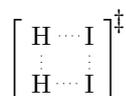
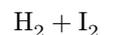
4.20 transition

\transition funktioniert genau wie \mesomeric.

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

Beispiel 38

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

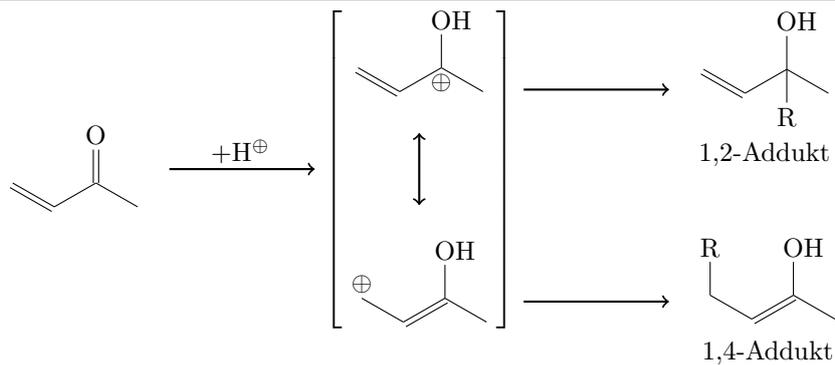


5 Beispiele

5.1 Addition

Ein einfaches Reaktionsschema mit zwei unterschiedlichen Produkten.

Reaktionsschema 10 Additionsreaktion

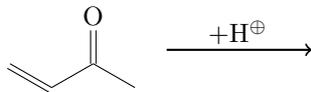


Schritt für Schritt. Zunächst das Edukt und der erste Reaktionspfeil.

```

1 \reactand{ \chemfig{=_{::-30}-[::60](=[::60]O)-[::-60]} }{}
2 \arrow{ $+ \Hp1$ }{}

```

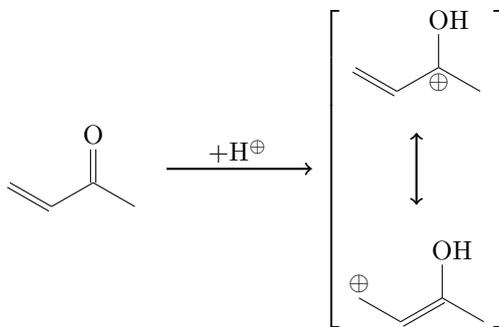


Anschließend die mesomeren Grenzformeln:

```

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

```

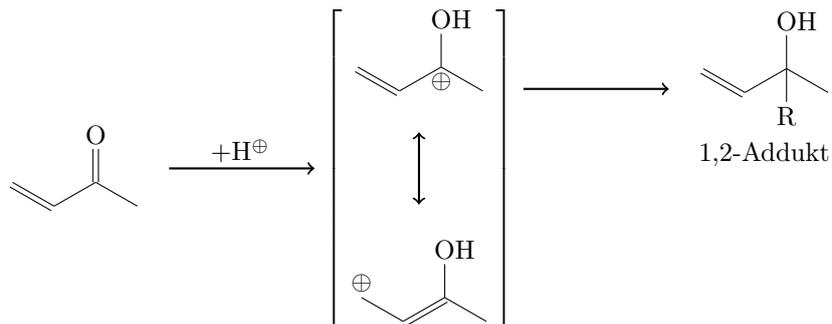


Nun den Branch zum 1,2-Addukt, mit yshift nach oben verschoben:

```

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

```

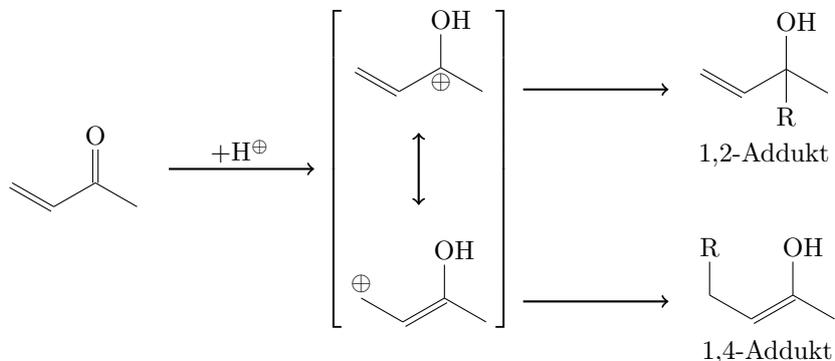


Zuletzt den Branch zum 1,4-Addukt, mit yshift nach unten verschoben:

```

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

```



Der komplette Code ist also der folgende:

```

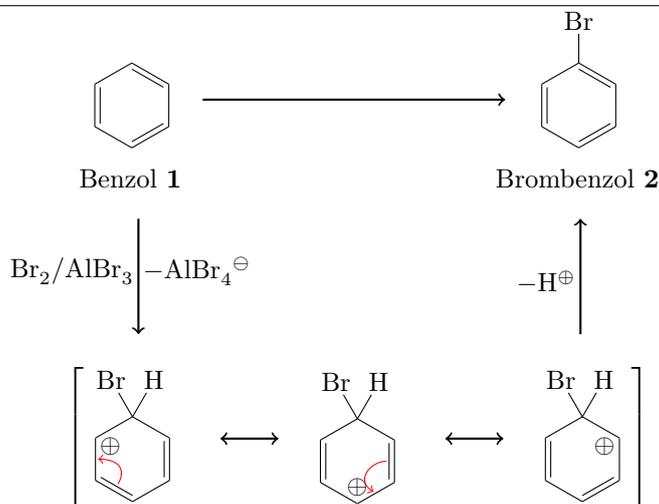
1 \begin{rxnscheme}{Additionsreaktion}
2 \reactand{ \chemfig{=_[: -30] -[::60] (=[::60]O) -[::-60] }{}}
3 \arrow{ $+ \Hpl$ }{}
4 \mesomeric{
5   \reactand{ \chemfig{=_[: -30] -[::60] (-[::60]OH) (-[::-120],.3,,white
]\oplus) -[::-60] }{}}
6   \marrow[below]
7   \reactand[below]{ \chemfig{\oplus -[6,.3,,white
]-[: -30]=_[::60] (-[::60]OH) -[::-60] }{}}
8   }{gf}
9   \branch[right=of gf,yshift=3em]{
10    \arrow{}{}
11    \reactand{ \chemname{\chemfig{=_[: -30] -[::60] (-[::60]OH) (-[::-120]
R) -[::-60]}}{1,2-Addukt} }{}
12   }{}
13   \branch[right=of gf,yshift=-5em]{
14    \arrow{}{}
15    \reactand{ \chemname{\chemfig{R-[6]-[: -30]=_[::60] (-[::60]OH)
-[::-60]}}{1,4-Addukt} }{}
16   }{}
17 \end{rxnscheme}

```

5.2 Mesomerie

Folgendes Reaktionsschema soll verwirklicht werden.

Reaktionsschema 11 Elektrophile Substitution

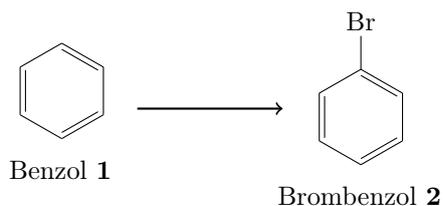


Zunächst erstellen wir die Hauptreaktion. Dafür setzen wir die Befehle `\reactand`, `\arrow` und die Umgebung `\begin{rxn} ... \end{rxn}` ein.

```

1 \begin{rxn}
2 \reactand{
3 \chemname{\chemfig{*6(====)}}{Benzol \compound{benzol}}
4 {}
5 \arrow{}{}
6 \reactand{
7 \chemname{\chemfig{*6(==(-Br)-)}}{Brombenzol \compound{
brombenzol}}
8 {}
9 \end{rxn}

```



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

```

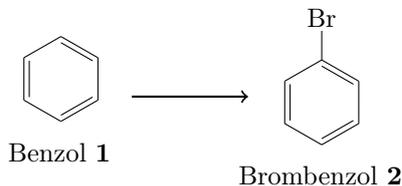
1 \begin{rxn}[scale=.8]
2 \setatomsep{1.6em}
3 \reactand{
4 \chemname{\chemfig{*6(====)}}{Benzol \compound{benzol}}
5 {}
6 \arrow{}{}

```

```

7 \reactand{
8   \chemname{\chemfig{*6(---(-Br)-)}}{Brombenzol \compound{
  brombenzol}}
9   }{}
10 \end{rxn}

```



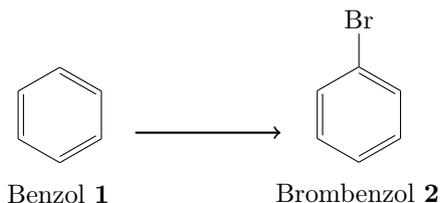
Damit die beiden Benzol-Ringe auf gleicher Höhe erscheinen, haben wir zwei Möglichkeiten. Entweder, wir verschieben den zweiten mit `TikZ`-Code nach oben:

```

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

```

Beachten Sie, dass Sie, um den `TikZ`-Code angeben zu können, die **Ausrichtung explizit schreiben müssen**. Diese Lösung ist nicht optimal, da dann der Reaktionspfeil nicht mittig sondern etwas zu tief erscheint.

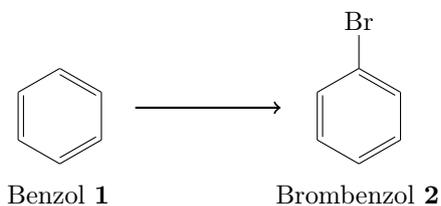


Die zweite Variante wäre, den ersten Ring nach unten zu verschieben. Das können wir nicht mit `TikZ`-Code verwirklichen, da der Pfeil und der zweite Ring jeweils relativ zum vorhergehenden gesetzt werden. Durch ein unsichtbares Brom erreichen wir aber den gewünschten Effekt:

```

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

```



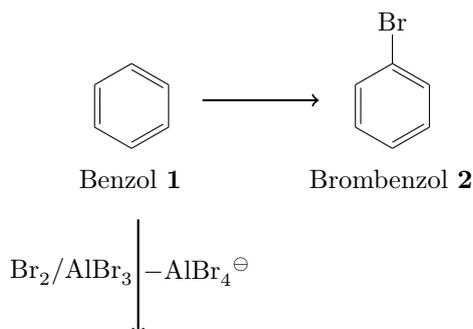
Damit wir nun unterhalb dieser Reaktion einen Reaktionszweig erstellen können, benötigen wir den Befehl `\branch` und wir müssen der ersten Formel einen Namen als Anker geben.

```

1 \begin{rxn}[scale=.8]
2 \setatomsep{1.6em}
3 \reactand{
4 \chemname{\chemfig{*6(---(-[,,,,white]\phantom{Br})-)}}{Benzol \
compound{benzol}}
5 }{start}
6
7 \branch[below=of start]{
8 \arrow[direction=below]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\ce{AlBr4\om}}$ }
9 }{}
10
11 \arrow{}{}
12 \reactand{
13 \chemname{\chemfig{*6(---(-Br)-)}}{Brombenzol \compound{
brombenzol}}
14 }{}
15 \end{rxn}

```

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` den Key `direction=below`. Damit erhalten wir folgendes Bild:



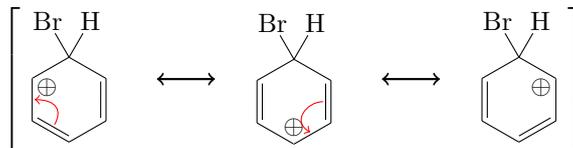
Als nächstes erstellen wir die mesomeren Grenzformeln des Wheland-Komplexes. Hier setzen wir drei weitere Befehle ein: `\mesomeric`, `\marrow` und `\elmove`.

```

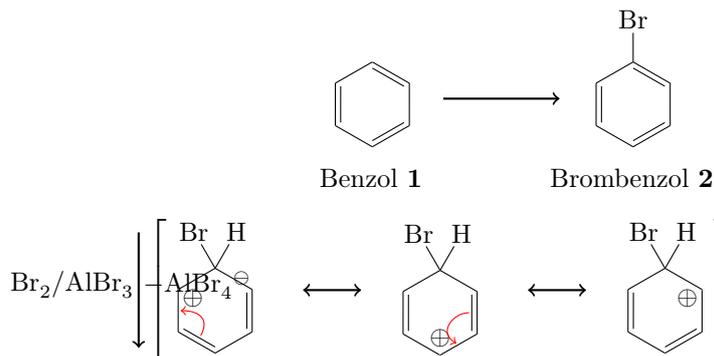
1 \mesomeric{
2 \reactand{
3 \chemfig{*6(=[@{e1}]---(-[:120]Br)(-[:60]H)-(-[: -30,.4,,,white]\
oplus)-[@{e2}]})}
4 \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
5 }{}
6 \marrow
7 \reactand{
8 \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e3}](-[:120]Br
)(-[:60]H)-)}}
9 \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
10 }{}
11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

```

14 }{}
15 }{}



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

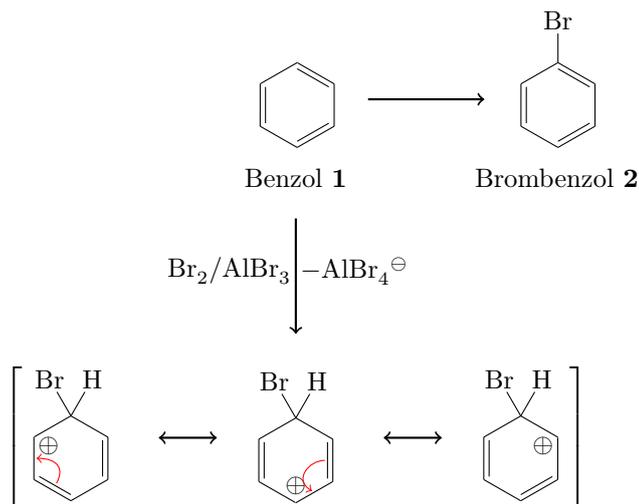
```

```

23     {}
24     {}
25
26     \arrow{}{}
27     \reactand{
28         \chemname{\chemfig{*6(---(-Br)-)}}{Brombenzol \compound{
brombenzol}}
29     }{}
30     \end{rxn}

```

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.

```

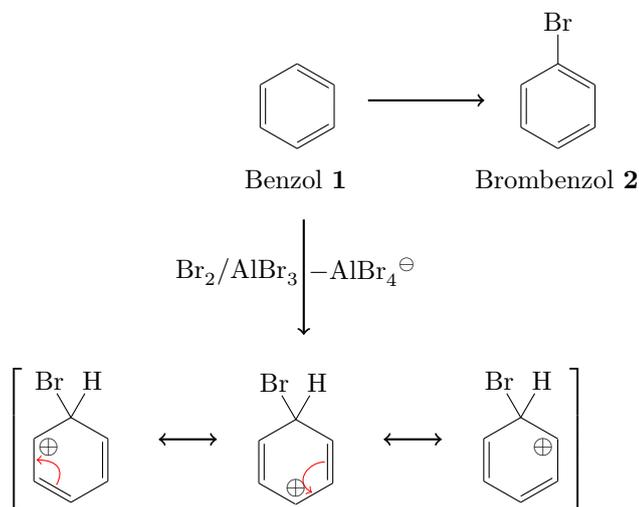
6     ...
7     \branch[below=of start]{
8         \arrow[direction=below,name=pfeil_a]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\$-\ce{AlBr4\
om}}{\$}
9     }{}
10    \branch[below=of pfeil_a]{
11        \mesomeric{
12            \reactand{
13                \chemfig{*6(=[@{e1}]---(-[:120]Br)(-[:60]H)-(-[: -30,.4,,white
]\oplus)-[@{e2}])}
14                \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
15            }{}
16            \marrow
17            \reactand{
18                \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e3}]-(-[:120]
Br)(-[:60]H)-=)}
19                \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
20            }{}
21            \marrow

```

```

22     \reactand{
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.

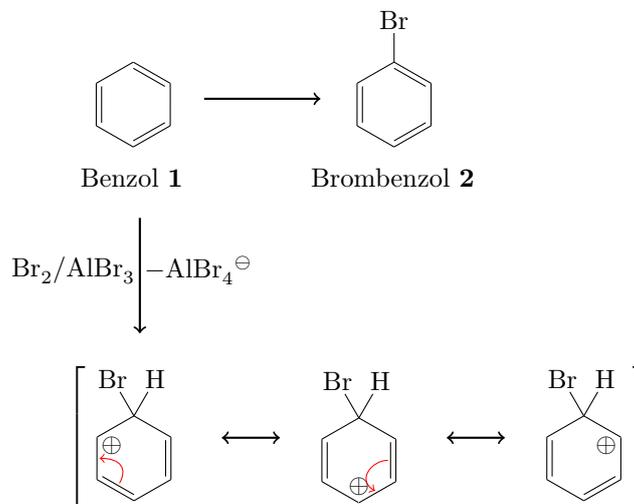
```

6 ...
7 \branch[below=of start]{
8   \arrow[direction=below,name=pfeil_a]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\$-\ce{AlBr4}
om}\$}
9 }{}
10 \branch[below=of pfeil_a,xshift=8.5em]{
11   \mesomeric{
12     \reactand{
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     \reactand{
18       \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e3}]-(-[:120]
Br)-(-[:60]H)-=)}
19       \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
20     }{}
21     \marrow
22     \reactand{
23       \chemfig{*6(---(-[: -150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]Br)-(-[:60]H)
--=)}
24     }{}
25   }{}

```

26 }{}

27 ...

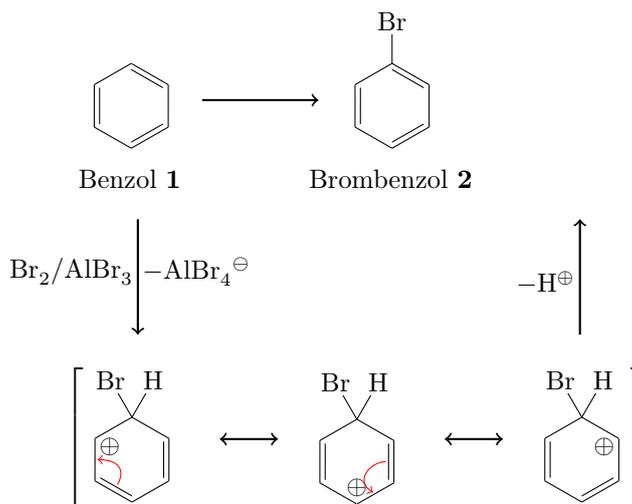


Damit wir mit dem Pfeil zurück nicht wieder das Problem mit der Zentrierung haben, bekommt er ebenfalls seinen eigenen `\branch`.

```

6 ...
7 \branch[below=of start]{
8   \arrow[direction=below,name=pfeil_a]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\ce{-\ce{AlBr4\
om}}}}
9 }{}
10 \branch[below=of pfeil_a,xshift=8.5em]{
11   \mesomeric{
12     \reactand{
13       \chemfig{*6(=[@{e1}]--(-[:120]Br)(-[:60]H)-(-[: -30,.4,,,white
14 ]\oplus)-[@{e2}])}
15       \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
16     }{}
17     \marrow
18     \reactand{
19       \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e3}]-(-[:120]
20 Br)(-[:60]H)-=)}
21       \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
22     }{}
23     \marrow
24     \reactand{
25       \chemfig{*6(--(-[: -150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]Br)(-[:60]H)
26 --=)}
27     }{}
28   }{}
29 }{}
30 ...

```



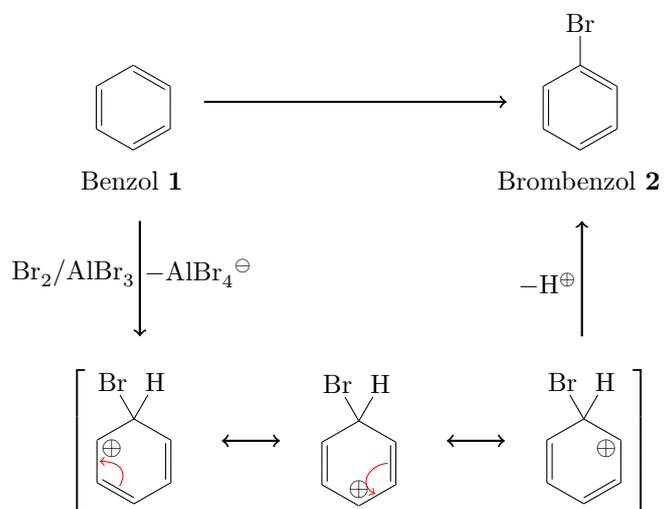
Nun sind wir fast am Ziel. Der Hauptreaktion ist noch zu kurz.

```

1 \begin{rxn}[scale=.8]
2 \setatomsep{1.6em}
3 \reactand{\chemname{\chemfig{*6(---(-[,,,white]\phantom{Br})-)}}}{
Benzol \compound{benzol}} }{start}
4
5 \branch[below=of start]{
6 \arrow[direction=below,name=pfeil_a]{\ce{Br2 / AlBr3}}{\$-\ce{AlBr4\
om}}\$}
7 }{}
8 \branch[below=of pfeil_a,xshift=8.5em]{
9 \mesomeric{
10 \reactand{
11 \chemfig{*6(=[@{e1}]---(-[:120]Br)(-[:60]H)-(-[:-30,.4,,,white
]\oplus)-[@{e2}]})}
12 \elmove{e1}{60:4mm}{e2}{0:4mm}
13 }{}
14 \marrow
15 \reactand{
16 \chemfig{*6(-(-[:90,.4,,,white]\oplus)-[@{e4}]=[@{e3}]-(-[:120]
Br)(-[:60]H)-=)}
17 \elmove{e3}{180:4mm}{e4}{150:4mm}
18 }{}
19 \marrow
20 \reactand{
21 \chemfig{*6(---(-[:-150,.4,,,white]\oplus)-(-[:120]Br)(-[:60]H)
--=)}
22 }{}
23 }{}
24 }{mesomerie}
25 \branch[above=of mesomerie,xshift=7.25em]{
26 \arrow[direction=above]{\$-\text{Hpl}}\$}{}
27 }{}
28
29 \arrow[length=2.6]{}{}

```

```
30 \reactand{ \chemname{\chemfig{*6(---(-Br)-)}}{Brombenzol} \compound{
  brombenzol}} }{}
31 \end{rxn}
```



5.3 TikZ, myChemistry und ChemFig für eine umfangreichere Synthese

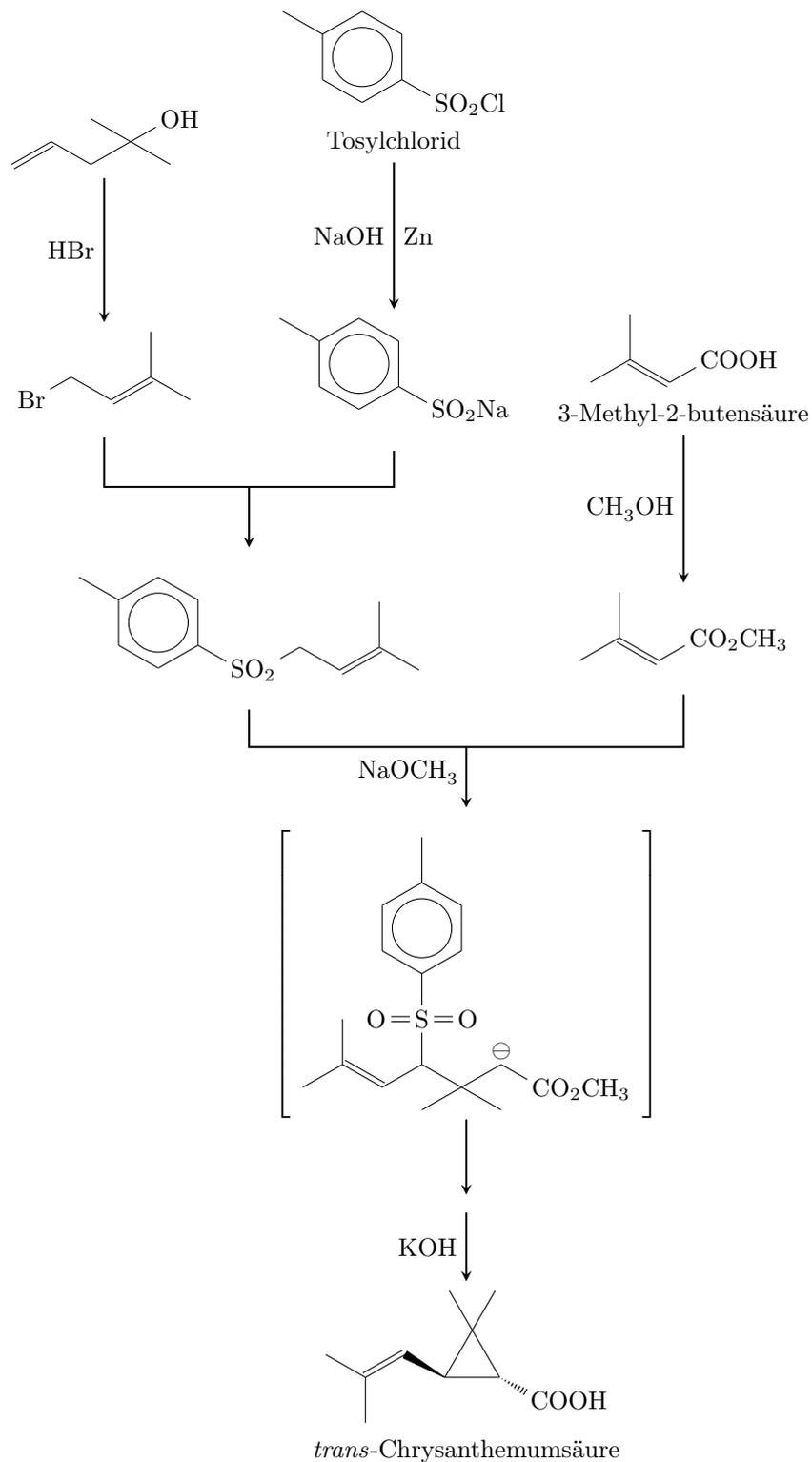
Da die ChemFig-Befehle innerhalb einer tikzpicture-Umgebung problemlos funktionieren, lassen sich mit dem \merge-Befehl von myChemistry auch größere Synthesen realisieren. Die anderen myChemistry-Befehle funktionieren nicht ohne weiteres, da sie alle auf einer chain angeordnet werden. Solange Sie myChemistry eingebunden haben, müssen Sie allerdings kaum eine tikzlibrary zusätzlich einbinden. Im Beispiel wurde direkt auf die Gleitumgebung rxnfloat von myChemistry zugegriffen.

```

1
2 \begin{rxnfloat}
3 \setatomsep{1.8em}\setcrambond{3pt}{.5pt}{1pt}
4 \centering
5 \begin{tikzpicture}[scale=.8]
6 \small
7 \node(a) at (0,0) {\chemfig{=_{[:30]-[:60]-[:60](-[:60])
(-[:120])-[:0]OH}}};
8 \node(b) at (0,-4) {\chemfig{Br-[:30]-[:60]=_{[:60](-[:60])
-[:60]}}};
9 \draw[-stealth,thick] (a.south) -- node[left]{HBr} (b.north);
10 \node(c) at (5,1) {\chemname{\chemfig{**6(--(-SO_2Cl)---(-)-)}}{
Tosylchlorid}};
11 \node(d) at (5,-4) {\chemfig{**6(--(-SO_2Na)---(-)-)}};
12 \draw[-stealth,thick] (c.south) -- node[left]{NaOH} node[right]{Zn}
(d.north);
13 \node(e) at (2.5,-8.5) {\chemfig{**6(--(-SO
_2-[:30]-[:60]=_{[:60](-[:60])---(-)-)}}};
14 \node(f) at (10,-4) {\chemname{\chemfig{-[:30](-[:60])
=_{[:60]-[:60]COOH}}{3-Methyl-2-butensäure}}};
15 \node(g) at (10,-8.5) {\chemfig{-[:30](-[:60])=_{[:60]-[:60]CO_2
CH_3}}};
16 \draw[-stealth,thick] (f.south) -- node[left]{\ce{CH3OH}} (g.north);
17 \merge{e}{b}{d}
18 \node[left delimiter={},right delimiter={}](h) at (6.25,-14.5) {\
chemfig{-[:30](-[:60])=^[:60]-[:60](-[:60])S(=[:90]O)(=[:90]O)
-[:0]**6(---(-)---)-[:60](-[:0])(-[:120])-[:60](-[:60],.5,,
white)\ominus)-[:60]CO_2CH_3}};
19 \node at (5.25,-11) {\ce{NaOCH3}};
20 \merge{h}{e}{g}
21 \node(i) at (6.25,-18.5) {};
22 \node(j) at (6.25,-21.5) {\chemname{\chemfig{-[:30](-[:60])
=^[:60]>[:60](-[:90,1.2])-[:30,1.2](-[:120,1.2](-[:60])-[:0])
<[:30]COOH}}{\emph{trans}-Chrysanthemumsäure}}};
23 \draw[-stealth,thick] (h.south) -- (i.north);
24 \draw[-stealth,thick] (i.south) -- node[left]{KOH} (j.north);
25 \end{tikzpicture}
26 \caption{Synthese von Chrysanthemumsäure}
27 \end{rxnfloat}
28

```

Reaktionsschema 12 Synthese von Chrysanthemumsäure



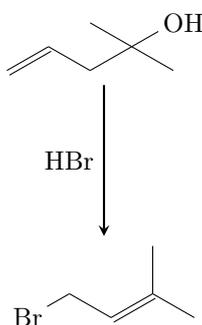
Gehen wir den Code Stück für Stück durch.

```

1
2 \begin{rxnfloat}
3 \setatomsep{1.8em}\setcrambond{3pt}{.5pt}{1pt}
4 \centering
5 \begin{tikzpicture}[scale=.8]
6 \small
7 \node(a) at (0,0) {\chemfig{=_{[:30]-[: -60]-[:60](-[: -60])
  (-[:120])-[:0]OH}}};
8 \node(b) at (0,-4) {\chemfig{Br-[:30]-[: -60]=_{[:60](-[: -60])
  -[:60]}}};
9 \draw[-stealth,thick] (a.south) -- node[left]{HBr} (b.north);

```

In den Zeilen 1 – 6 wird die Umgebung begonnen und die Voreinstellungen vorgenommen, damit die Formeln nicht zu groß werden. In den Zeilen 7 – 9 werden die beiden ersten Formeln erstellt (Zeilen 7 und 8) und mit Reaktionspfeil (Zeile 9) verbunden.

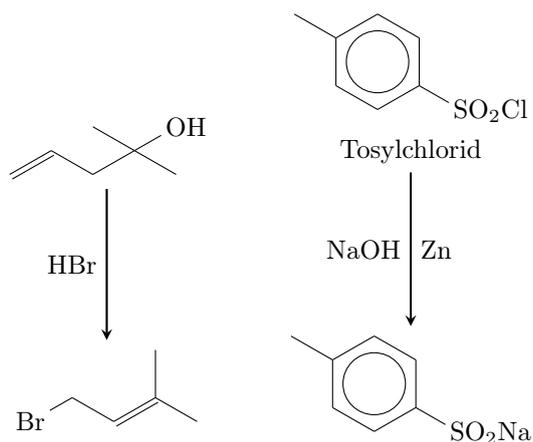


```

10 \node(c) at (5,1) {\chemname{\chemfig{**6(--(-SO_2Cl)---(-)-)}}{
  Tosylchlorid}};
11 \node(d) at (5,-4) {\chemfig{**6(--(-SO_2Na)---(-)-)}};
12 \draw[-stealth,thick] (c.south) -- node[left]{NaOH} node[right]{Zn}
  (d.north);

```

In den drei folgenden Zeilen 10 – 12 wird der zweite Syntheseast erstellt und mit Reaktionspfeil verbunden.

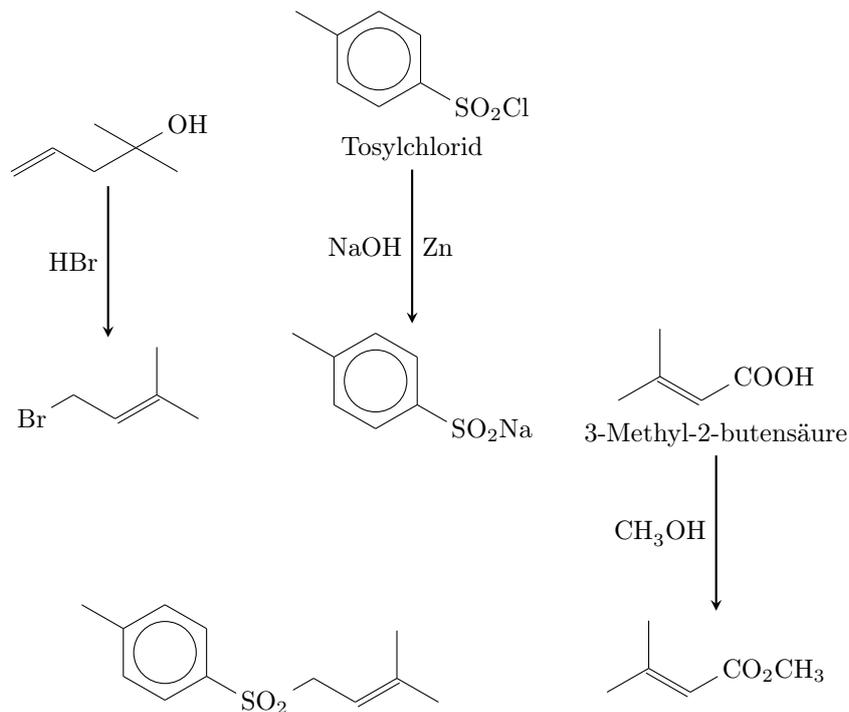


```

13 \node(e) at (2.5,-8.5) {\chemfig{**6(--(-SO
   _2-[:30]-[::-60]=_[::60](-[::60])-[::-60])---(-)-)}};
14 \node(f) at (10,-4) {\chemname{\chemfig{-[::30](-[::60])
   =_[::-60]-[::60]COOH}}{3-Methyl-2-butensäure}};
15 \node(g) at (10,-8.5) {\chemfig{-[::30](-[::60])=_[::-60]-[::60]CO_2
   CH_3}};
16 \draw[-stealth,thick] (f.south) -- node[left]{\ce{CH3OH}} (g.north);

```

In den Zeilen 13 – 16 wird der dritte Ast sowie das Ergebnis der ersten beiden Äste erstellt.

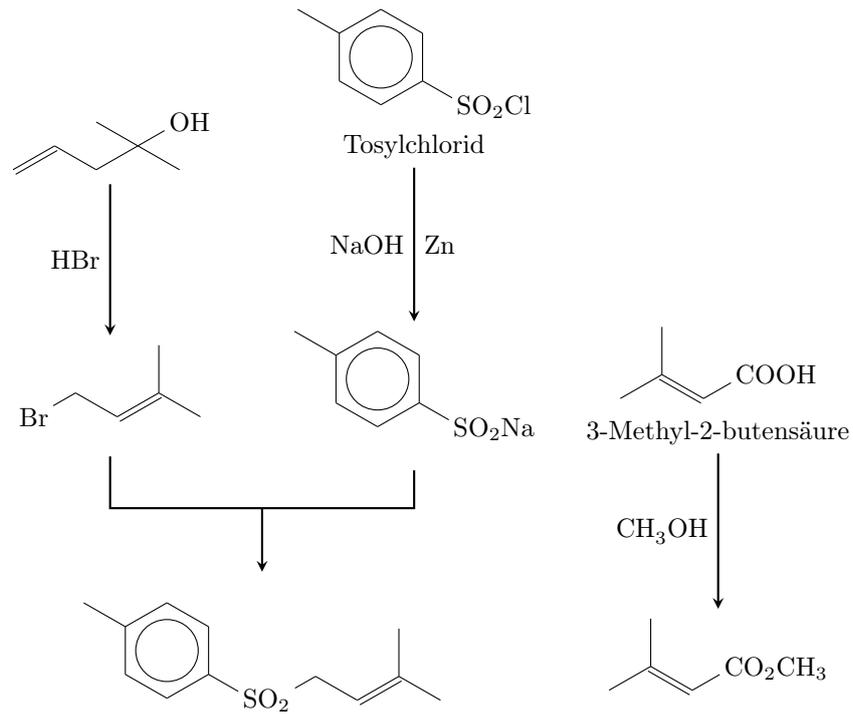


```

17 \merge{e}{b}{d}

```

In Zeile 17 werden nun die beiden ersten Äste zusammengeführt.

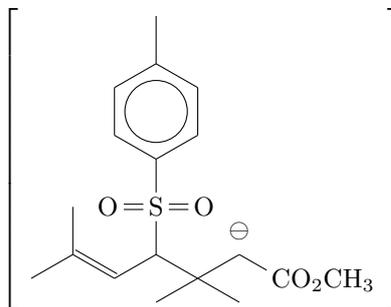
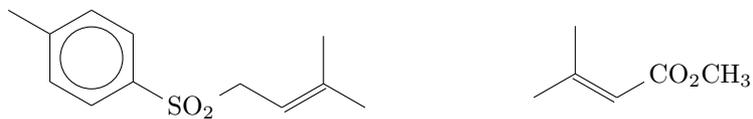


```

18 \node[left delimiter={},right delimiter={}] (h) at (6.25,-14.5) {\
chemfig{-[:30](-[:60])=^[: -60] -[:60] (-[:60]S(=[:90]O)(=[: -90]O)
-[:0]**6(---(-)---)) -[: -60] (-[:0]) (-[: -120]) -[:60] (-[:60],.5,,
white)\ominus) -[: -60]CO_2CH_3}};

```

In Zeile 18 erstellen wir den Übergangszustand.

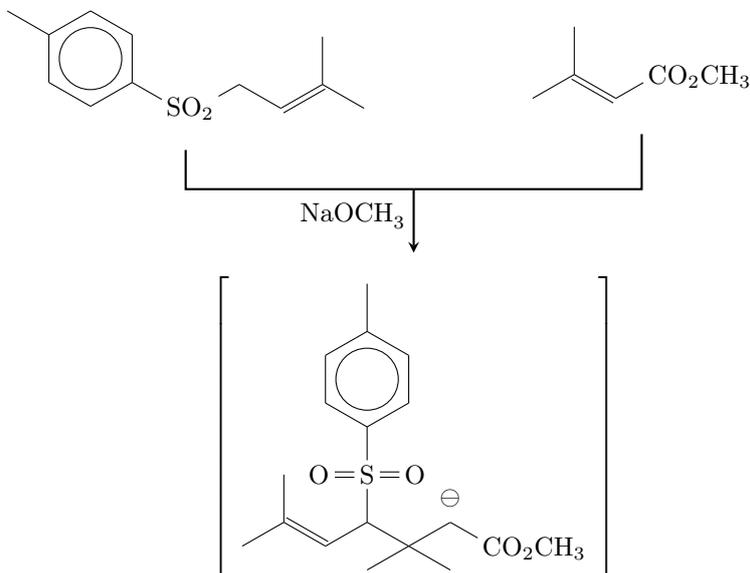


```

19 \node at (5.25,-11) {\ce{NaOCH3}};
20 \merge{h}{e}{g}

```

In den Zeilen 19 und 20 werden die Äste zusammengeführt und der Pfeil beschriftet.

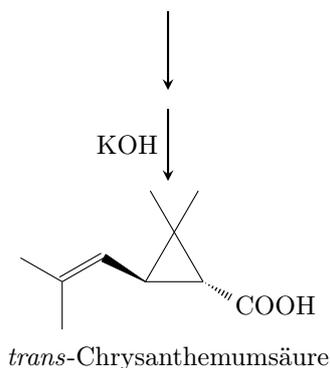


```

21 \node(i) at (6.25,-18.5) {};
22 \node(j) at (6.25,-21.5) {\chemname{\chemfig{-[: -30](-[: -60])
=^[: :60]>[: -60](-[: :90,1.2]) -[: :30,1.2](-[: :120,1.2](-[: -60]) -[: :0])
<[: -30]COOH)}}{\emph{trans}-Chrysanthemumsäure}};
23 \draw[-stealth,thick] (h.south) -- (i.north);
24 \draw[-stealth,thick] (i.south) -- node[left]{KOH} (j.north);
25 \end{tikzpicture}
26 \caption{Synthese von Chrysanthemumsäure}
27 \end{rxnfloat}
28

```

In den abschließenden Zeilen 21 – 28 wird zunächst eine leere node erstellt (Zeile 21), dann das Produkt (Zeile 22). In den Zeilen 23 und 24 werden die beiden letzten Reaktionspfeile erstellt, in den letzten vier Zeilen die Umgebung dann beendet.



6 Nachwort

myChemistry steckt noch in den Kinderschuhen. Das bedeutet, das 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, 20. März 2011