

# Das chemmacros-Bundle

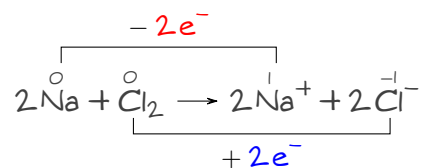
V3.5      2013/01/28

Pakete `chemmacros`, `chemformula` und `ghsystem`

Clemens NIEDERBERGER

<https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/>  
[contact@mychemistry.eu](mailto:contact@mychemistry.eu)

deutsche Dokumentation



|  |   |           |
|--|---|-----------|
| <b>Inhaltsverzeichnis</b>                    | <b>II. chemmacros</b>   | <b>9</b>  |
|  | <b>8. Teilchen, Ionen und Symbole</b>                               | <b>9</b>  |
| <b>I. Bevor es los geht</b>                  | 8.1. Vordefiniert . . . . .   | 9         |
|  | 8.2. Eigene Teilchen definieren . . .                               | 11        |
| <b>1. Lizenz, Voraussetzungen und README</b> | <b>9. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke</b> | <b>12</b> |
|  |   |           |
| <b>2. Motivation und Hintergrund</b>         | 9.1. IUPAC-Namen . . . . .  | 12        |
|  | 9.1.1. Vordefinierte Befehle . .                                    | 13        |
| <b>3. Installation und Laden des Bundles</b> | 9.1.2. Eigene Nomenklatur-Befehle . . . . .                         | 16        |
|  | 9.2. Lateinische Ausdrücke . . . . .                                | 17        |
| <b>4. Paketoptionen</b>                      | <b>10. Einheiten für die Verwendung mit siunitx</b>                 | <b>17</b> |
|  |   |           |
| <b>5. Setup</b>                              | <b>11. Säure/Base</b>   | <b>18</b> |
|  |   |           |
| <b>6. Spracheinstellungen</b>                | <b>12. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen</b>             | <b>19</b> |
| 6.1. Unterstützte Sprachen . . . . .         |   |           |
| 6.2. Besonderheiten . . . . .                | 12.1. Ionenladungen . . . . .                                       | 19        |
| 6.2.1. Deutsch . . . . .                     | 12.2. Oxidationszahlen . . . . .                                    | 20        |
| 6.2.2. Italienisch . . . . .                 | 12.3. Partialladungen und Ähnliches .                               | 21        |
| <b>7. Neues</b>                              | <b>13. Reaktionsmechanismen</b>                                     | <b>22</b> |
| 7.1. Version 3.3 . . . . .                   |   |           |
| 7.2. Version 3.3a . . . . .                  |   |           |
| 7.3. Version 3.3d . . . . .                  |   |           |
| 7.4. Version 3.4 . . . . .                   |   |           |

|  |           |   |           |
|--|-----------|---|-----------|
| <b>14. Redoxreaktionen</b>                 | <b>23</b> | 25.4. Ladungen und andere Hochstel-           |           |
|  |           | lungen . . . . .                              | 49        |
| <b>15. (Standard) Zustand, Thermodyna-</b> | <b>25</b> | 25.5. Bindungen . . . . .                     | 50        |
| <b>mik</b>                                 |           | 25.5.1. Natürliche Bindungen .                | 50        |
| 15.1. Thermodynamische Größen . .          | 25        | 25.5.2. Flexible Bindungen . . .              | 51        |
| 15.1.1. Neue Größen definieren             | 26        | 25.6. Anpassung . . . . .                     | 52        |
| 15.1.2. Größen umdefinieren . .            | 26        | <b>26. Spezielle Input-Typen</b>              | <b>54</b> |
| 15.2. Zustandsgrößen . . . . .             | 27        | 26.1. Single-Token Input . . . . .            | 54        |
| <b>16. Spektroskopie und Messdaten</b>     | <b>27</b> | 26.2. Optionen Input . . . . .                | 55        |
| 16.1. Der \NMR-Befehl . . . . .            | 27        | <b>27. Geschützter Input</b>                  | <b>55</b> |
| 16.2. Abkürzungen . . . . .                | 28        | 27.1. Text . . . . .                          | 55        |
| 16.3. Eine Umgebung, um Messergeb-         | 29        | 27.2. Mathematik . . . . .                    | 56        |
| nisse darzustellen . . . . .               |           | <b>28. Pfeile</b>                             | <b>56</b> |
| 16.4. Anpassung . . . . .                  | 29        | 28.1. Pfeiltypen . . . . .                    | 56        |
| 16.5. Anwendungsbeispiel . . . . .         | 30        | 28.2. Beschriftung . . . . .                  | 57        |
| 16.5.1. Beinahe Standard . . . .           | 31        | 28.3. Anpassung . . . . .                     | 58        |
| 16.5.2. Formatierte Liste . . . .          | 32        | 28.4. Pfeiltypen bearbeiten . . . .           | 59        |
| 16.5.3. Verrückt . . . . .                 | 32        | <b>29. Text unter Formeln</b>                 | <b>60</b> |
| <b>17. Befehle für mhchem</b>              | <b>33</b> | 29.1. Syntax . . . . .                        | 60        |
| <b>18. Reaktionsumgebungen</b>             | <b>34</b> | 29.2. Anpassung . . . . .                     | 61        |
| 18.1. Durch CHEMMACROS definiert . .       | 34        | <b>30. Format und Schrift</b>                 | <b>61</b> |
| 18.2. Eigene Reaktionen . . . . .          | 37        | <b>31. Verwendung in Mathematik-</b>          | <b>63</b> |
| 18.3. Liste der Reaktionen . . . . .       | 38        | <b>Umgebungen</b>                             |           |
| <b>19. Phasen</b>                          | <b>39</b> | <b>32. Weitere Beispiele</b>                  | <b>64</b> |
| 19.1. Grundlagen . . . . .                 | 39        | <b>IV. ghsystem</b>                           | <b>66</b> |
| 19.2. Eigene Phasen definieren . . . .     | 40        | <b>33. Setup</b>                              | <b>66</b> |
| <b>20. Newman-Projektionen</b>             | <b>40</b> | <b>34. Die Gefahren- (H) und Sicherheits-</b> | <b>66</b> |
| <b>21. s, p und Hybrid-Orbitale</b>        | <b>42</b> | <b>sätze (P) aufrufen</b>                     |           |
| <b>III. chemformula</b>                    | <b>45</b> | 34.1. Einfacher Aufruf . . . . .              | 66        |
| <b>22. Setup</b>                           | <b>45</b> | 34.2. Sätze mit Platzhaltern . . . . .        | 67        |
| <b>23. Das Grundprinzip</b>                | <b>45</b> | 34.3. Sätze mit Lücken . . . . .              | 68        |
| <b>24. Stöchiometrische Faktoren</b>       | <b>46</b> | 34.4. Kombinierte Sätze . . . . .             | 69        |
| <b>25. Summenformeln</b>                   | <b>48</b> | <b>35. Piktogramme</b>                        | <b>69</b> |
| 25.1. Addukte . . . . .                    | 48        | 35.1. Die Bilder . . . . .                    | 69        |
| 25.2. Tiefstellungen . . . . .             | 48        | 35.2. Der Bildtyp hängt von der Engi-         | 71        |
| 25.3. Befehle . . . . .                    | 49        | ne ab . . . . .                               |           |

|   |    |                           |    |
|---|----|---------------------------|----|
| 36. Verfügbare Sprachen                                 | 72 | Vorschläge und Bugreports | 84 |
| 37. Liste aller Sätze                                   | 72 | Quellen                   | 85 |
|   |    | Index                     | 86 |
| V. Anhang   | 81 |                           |    |
| Übersicht über die Optionen und Anpassungsmöglichkeiten | 81 |                           |    |

# Teil I.

## Bevor es los geht

### 1. Lizenz, Voraussetzungen und README

Das **CHEMMACROS**-Bundle steht unter der L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X Project Public License (LPPL) Version 1.3 oder später (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>) und hat den Status „maintained“.

Das **CHEMMACROS**-Bundle benötigt aktuelle Versionen der l<sup>3</sup>kernel<sup>1</sup>- und l<sup>3</sup>packages<sup>2</sup>-Bundles. Außerdem werden die Pakete siunitx,<sup>3</sup> mathtools,<sup>4</sup> bm,<sup>5</sup> nicefrac<sup>6</sup> und environ<sup>7</sup> sowie tikz<sup>8</sup> und die Ti $\kern-0.1em$ kZ libraries calc und arrows benötigt.

Die Paketoption **bpchem** (Abschnitt 4) benötigt bpchem,<sup>9</sup> die Paketoption **xspace** benötigt xspace<sup>10</sup> und die Paketoption **method** = mhchem benötigt mhchem.<sup>11</sup>

Mit v3.0 wurde das **CHEMMACROS**-Paket mit den neuen Paketen **CHEMFORMULA** und **GHSYSTEM** gebündelt. **CHEMFORMULA** ist eine Alternative zu mhchem. Das führte zu einigen internen Änderungen bei **CHEMMACROS**. Gleichzeitig wurde die Dokumentation komplett überarbeitet.

Vielleicht erinnern Sie Sich, dass **CHEMMACROS**’ Optionen alle verschiedenen Modulen angehören, siehe Abschnitt 5 für weitere Informationen. Sie werden in den linken Rand geschrieben, wenn die Option das erste Mal erwähnt wird. Abschnitt V listet alle Optionen von **CHEMMACROS** und ihre Module auf. In diesem Dokument werden Optionen **grün** und Module **rot** dargestellt.

Das Paket **GHSYSTEM** benötigt die Pakete **CHEMMACROS**, tabu,<sup>12</sup> longtable,<sup>13</sup> ifpdf<sup>14</sup> und graphicx.<sup>15</sup>

Es gibt einige veraltete Befehle und Optionen, die in dieser Dokumentation nicht mehr beschrieben werden. Um Kompatibilität mit älteren Dokumenten zu gewährleisten, sind sie immer noch definiert. Diese Befehle geben eine Warnung aus. In Zukunft könnten sie nicht mehr definiert sein.

### 2. Motivation und Hintergrund

**CHEMMACROS** entstand vor einigen Jahren als wachsende Liste von Makros, die ich häufig verwendete. Ich kann mich nicht mehr genau erinnern, wann und warum ich entschied, sie als Paket zu

<sup>1</sup> CTAN: l<sup>3</sup>kernel   <sup>2</sup> CTAN: l<sup>3</sup>packages   <sup>3</sup> CTAN: siunitx   <sup>4</sup> CTAN: mathtools   <sup>5</sup> CTAN: bm   <sup>6</sup> CTAN: nicefrac  
<sup>7</sup> CTAN: environ   <sup>8</sup> CTAN: pgf   <sup>9</sup> CTAN: bpchem   <sup>10</sup> CTAN: xspace   <sup>11</sup> CTAN: mhchem   <sup>12</sup> CTAN: tabu   <sup>13</sup> CTAN: longtable   <sup>14</sup> CTAN: ifpdf   <sup>15</sup> CTAN: graphicx

veröffentlichen. Nun – hier ist es und ich hoffe, Sie werden das eine oder andere ebenfalls nützlich finden.

Die Makros und ihre Funktionsweise haben sich im Laufe der Zeit leicht verändert. Es sind außerdem eine ganze Reihe hinzugekommen. Insgesamt hat sich mit der Zeit vieles vereinheitlicht und es sind viele Anpassungsmöglichkeiten hinzugekommen.

Wohl fast jeder Chemiker, der L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X für seine Dokumente verwendet, dürfte das großartige Paket mhchem von Martin Hensel kennen. Es gab immer ein paar Schwierigkeiten, mhchem und CHEMMACROS zur Zusammenarbeit zu bewegen. Ein paar Kleinigkeiten in mhchem haben mich zudem immer gestört, aber sie schienen nicht genug für ein neues Paket. Noch nicht einmal genug, um ein “feature request” an den Autoren von mhchem zu senden. Die Herausforderung und der Spaß, ein neues Paket zu erschaffen, sowie der Wunsch nach größtmöglicher Flexibilität führten so doch noch zu CHEMFORMULA.

CHEMFORMULA funktioniert sehr ähnlich wie mhchem, ist aber strenger was das Eingeben von Verbindungen, stöchiometrischen Faktoren und Pfeilen angeht. Gleichzeitig bietet CHEMFORMULA ein paar Möglichkeiten, den Output anzupassen, die mhchem nicht bietet. Da CHEMFORMULA als Alternative zu mhchem gedacht ist, bietet CHEMMACROS eine Option, mit der Sie zwischen mhchem und CHEMFORMULA wählen können.

Als Chemiker wissen Sie vermutlich, dass die UNITED NATIONS das GLOBALLY HARMONIZED SYSTEM OF CLASSIFICATION AND LABELLING OF CHEMICALS (GHS) als weltweiten Ersatz für die zahlreichen ähnlichen aber doch verschiedenen Systeme der einzelnen Länder entwickelt haben. Obwohl es noch nicht in allen Ländern umgesetzt wurde [Eur12], ist das nur eine Frage der Zeit. Das Paket GHSYSTEM gibt Ihnen nun die Möglichkeit, alle “hazard and precautionary statements” auf einfache Weise einzugeben und aufzurufen. Die Sätze wurden der EU-Verordnung 1272/2008 entnommen [Theo8].

Ich hoffe, folgende vier Punkte in diesem Bundle umgesetzt zu haben:

- intuitive Verwendung, vor allem im Hinblick auf die Syntax der Befehle
- die Befehle sollen nicht nur das Schreiben erleichtern sondern auch den Quelltext besser lesbar machen, indem er semantisch logischer wird (`\ortho`-dichlorobenzene kann man leichter lesen und verstehen als `\textsl{o}`-dichlorobenzene)
- so große Flexibilität und so viele Anpassungsmöglichkeiten wie möglich, damit jeder Anwender die Befehle nach eigenen Bedürfnissen anpassen kann.
- mit INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY (IUPAC) konforme Voreinstellungen

Vor allem der letzte Punkt benötigte zwar einige Schubser von Anwendern,<sup>16</sup> um die richtigen Einstellungen an vielen Stellen zu bekommen. Wenn Ihnen etwas auffällt, das nicht der IUPAC-Empfehlung entspricht,<sup>17</sup> würde ich mich über eine E-Mail sehr freuen!

Bei einem Paket dieser Größe mit alten und neuen Teilen (die man noch als in der Beta-Phase befindlich betrachten muss) ist es unvermeidbar, dass es Fehler und Bugs gibt. Ich bin sehr daran interessiert, dieses Paket zu korrigieren und verbessern, daher eine Bitte: wenn Ihnen etwas auffällt, das Sie stört, egal wie geringfügig es erscheint, senden Sie mir bitte eine E-Mail und ich

---

<sup>16</sup> Vielen Dank an Dr. Paul King! <sup>17</sup> Das gilt nicht für den `\ox`-Befehl. Die IUPAC-Fassung dazu ist `\ox*`.

werde sehen, was ich tun kann. Besonders interessiert bin ich an Feedback zu **CHEMFORMULA** (siehe Teil III) und **GHSYSTEM** (siehe Teil IV), freue mich aber natürlich auch über Feedback zu jedem anderen Teil des Bundles.

## 3. Installation und Laden des Bundles

Das Bundle enthält drei Style-Dateien,<sup>18</sup> einem Ordner namens `language/`, der die Sprach-Definitions-Dateien für GHS enthält (Endung `def`) und einem Ordner `pictures/`, der `eps`-, `jpg`-, `pdf` und `png`-Dateien enthält (die GHS Piktogramme). Wenn Sie das Bundle von Hand installieren, *bitte achten Sie darauf, die Ordner `language/` und `pictures/` in den gleichen Ordner wie die Style-Dateien zu kopieren.*

Das Laden von **CHEMMACROS** via

```
1 \usepackage{chemmacros} % 'chemmacros', 'chemformula' and 'ghsystem' are loaded
```

wird ebenso **CHEMFORMULA** und **GHSYSTEM** laden. Sie können jedoch **CHEMMACROS** davon abhalten, **GHSYSTEM** zu laden:

```
1 \usepackage[ghsystem=false]{chemmacros} % 'chemmacros' and 'chemformula' are loaded
```

Das Laden von **CHEMFORMULA** kann nicht verhindert werden, da **CHEMMACROS** und **CHEMFORMULA** miteinander interagieren.

Das explizite Laden von **CHEMFORMULA** bzw. **GHSYSTEM** ist möglich und wird **CHEMMACROS** in jedem Fall laden, falls das noch nicht geschehen ist. Dadurch laden sie sich implizit gegenseitig.

```
1 \usepackage{chemformula}
2 or
3 \usepackage{ghsystem}
```

Es wird jedoch empfohlen, lediglich `\usepackage{chemmacros}` zu verwenden und die gewünschten Optionen mit `\chemsetup` vorzunehmen (siehe auch Abschnitt 5).

## 4. Paketoptionen

**CHEMMACROS** hat einige Optionen. Sie alle folgen einen Schlüssel/Wert-Prinzip:

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

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

<sup>18</sup> Die mit der Endung `sty`.

#### 4. Paketoptionen

Sowohl `CHEMFORMULA` als auch `GHSYSTEM` haben keine eigenen Paketoptionen. Wenn Sie sie explizit laden, verpuffen alle als Paketoptionen gegebenen Optionen. Sie können dann nur mit dem Setup-Befehl gesetzt werden.

- option** ▶ `bpchem` = `true|false` → Diese Option lädt `bpchem` und passt das Layout von `\NMR` den `bpchem`-Befehlen `\HNMR` und `\CNMR` an. Default = `false`
- option** ▶ `circled` = `formal|all|none` → `CHEMMACROS` unterscheidet zwischen zwei Typen von Ladungen<sup>19</sup>: reale (+/−) und formale (⊕/⊖) Ladungen. Die Option `formal` unterscheidet zwischen ihnen, `none` stellt alle ohne Umkreisung dar, `all` umkreist alle. Default = `formal`
- option** ▶ `circletype` = `chem|math` → Diese Option schaltet zwischen zwei Darstellungsmöglichkeiten für formale Ladungen hin und her: `\fplus` ⊕ und `\oplus` ⊕. Default = `chem`
- option** ▶ `cmversion` = `1|2|bundle` → Diese Option stellt die Definition einiger Befehle wieder her, so dass Dokumente, die mit `vi.*` gesetzt wurden, Korrekt kompilieren. Default = `bundle`. Eigentlich sind `2` und `bundle` Aliase. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.
- option** ▶ `ghsystem` = `true|false` → Das Paket `GHSYSTEM` abschalten. Die Einstellung `ghs` = `false` wird das Laden von `GHSYSTEM` unterbinden. Default = `true`
- option** ▶ `greek` = `auto|math|textgreek|upgreek` → Diese Option bestimmt, wie die Buchstaben `\Chemalpha` und seine Verwandten dargestellt werden. Siehe Seite 11 für weitere Informationen. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden. Bitte beachten Sie, dass diese Option weder `upgreek`<sup>20</sup> noch `textgreek`<sup>21</sup> lädt! Sie bestimmt lediglich welches verwendet wird, falls es geladen wurde. Wenn Sie beispielsweise `upgreek` wählen, müssen Sie auch das entsprechende Paket laden. Default = `auto`
- option** ▶ `iupac` = `auto|restricted|strict` → Einstellen, wie die Nomenklatur-Befehle definiert werden. Siehe Seite 13. Default = `auto`
- option** ▶ `language` = `american|british|english|french|german|italian|ngerman` → Sprachspezifische Einstellungen laden. `english`, `american` und `british` sind Aliase, ebenso `german` und `ngerman`. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden. Default = `english`
- option** ▶ `method` = `chemformula|mhchem` → Sie können wählen, ob `CHEMMACROS` `mhchem` oder `CHEMFORMULA` für die Reaktionsumgebungen (siehe Abschnitt 18) und die Teilchen (siehe Abschnitt 8) verwendet. Default = `chemformula`. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.
- option** ▶ `Nu` = `chemmacros|mathspec` → Das Paket `mathspec`<sup>22</sup> definiert ebenfalls ein Makro `\Nu`. Diese Option entscheidet, welche Definition gilt, siehe Seite 10. Default = `chemmacros`. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.
- option** ▶ `strict` = `true|false` → Die Einstellung `strict` = `true` wird alle Warnungen in Fehlermeldungen ändern. Default = `false`
- option** ▶ `synchronize` = `true|false` → Mit der Einstellung `true` wird `CHEMMACROS` die Schrifteinstellungen von `CHEMFORMULA` übernehmen, falls `CHEMFORMULA` als Methode gewählt wurde. Default = `false`. Um diese Option zu demonstrieren, wurde dieses Dokument mit `synchronize` = `true` und

<sup>19</sup> Vielen Dank an Christoph Schäfer, der mich darauf aufmerksam machte, dass `vi.1` die Ladungen zu nachlässig behandelte! <sup>20</sup> CTAN: `upgreek` <sup>21</sup> CTAN: `textgreek` <sup>22</sup> CTAN: `mathspec`

## 5. Setup

der `CHEMFORMULA` Einstellung `\chemsetup[chemformula]{font-spec={{Color=darkgray}Latin Modern Sans}}` gesetzt.

**option** ▶ `xspace = true|false` → Mit dieser Option werden die meisten Makros mit einem `\xspace` definiert.  
Default = true

## 5. Setup

Zahlreiche der Befehle von `CHEMMACROS`, `CHEMFORMULA` und `GHSYSTEM` haben Schlüssel/Wert-Paare als Optionen, mit denen sie angepasst werden können. Meistens können sie als (optionales) Argument des entsprechenden Befehls verwendet werden. Meistens können Sie auch mit dem `\chemsetup` Befehl verwendet werden.

▶ `\chemsetup[<module>]{<key> = <value>}` oder

▶ `\chemsetup{<module>/<key> = <value>}`

Die Optionen gehören alle zu einem Modul, das anzeigt, auf welchen Befehl sie sich auswirken. Wenn eine Option vorgestellt wird, wird das dazugehörige Modul in den linken Rand geschrieben. Sie können die Optionen mit `\chemsetup` auf zwei Weisen verwenden, wie oben dargestellt.

Die Paketoptionen können ebenfalls als Optionen betrachtet werden, die zum Modul **option** gehören. Das bedeutet, sie können auch mit `\chemsetup` aufgerufen werden.

```
1 \chemsetup[option]{circled=none}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \\  
2 \chemsetup[option]{circled=formal}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \\  
3 \chemsetup[option]{circletype=math}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt \\  
4 \chemsetup{option/circletype=chem,option/circled=all}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \  
   el\ \prt \\  
5 \chemsetup{option/circletype=math}\mch\ \pch\ \fmch\ \fpch\ \el\ \prt  
  
- + - + e- p+  
- + ⊖ ⊕ e- p+  
- + ⊖ ⊕ e- p+  
⊖ ⊕ ⊖ ⊕ e⊖ p⊕  
⊖ ⊕ ⊖ ⊕ e⊖ p⊕
```

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

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

## 6. Spracheinstellungen

### 6.1. Unterstützte Sprachen

Durch die Wahl der Option

```
1 \chemsetup[option]{language=<language>}
```

kann eine der folgenden Sprachen gewählt werden: `american`, `british`, `english`, `french`, `german`, `italian` und `ngerman`. Die Sprachen `american`, `british`, `english` sind Aliase, ebenso die Sprachen `german` und `ngerman`.

Übersetzt werden

- Die Überschrift der Liste der Reaktionen.
- Die Einträge bei der Liste der Reaktionen.
- Die H- und P-Sätze.

Bitte beachten Sie, dass die GHS-Sätze nicht in allen Sprachen angeboten werden, siehe auch Abschnitt 36.

## 6.2. Besonderheiten

### 6.2.1. Deutsch

Bei der Sprachwahl `german/ngerman` werden zusätzlich die Phasen-Befehle `\sld`, `\lqd` und `\pKa` übersetzt.

### 6.2.2. Italienisch

Bei der Sprachwahl `italian` werden zusätzliche IUPAC-Befehle definiert:

- ▶ `\ter` → *ter*
- ▶ `\sin` → *sin*

## 7. Neues

### 7.1. Version 3.3

- Ab Version 3.3 gibt es die Umgebung `\begin{experimental}` `\end{experimental}`, siehe Abschnitt 16, die mit einigen neuen Befehlen und Optionen verwendet werden kann, um Messdaten konsistent darzustellen.
- Die Umgebung `\begin{reaction}` `\end{reaction}` und ihre Verwandten können nun mit `\label`, `\ref` und `\intertext` umgehen, siehe Abschnitt 18.
- Die Paketoptionen `german` und `ngerman` entfallen, dafür gibt es die neue Option `language`, siehe Seite 6 und Abschnitt 6 ab Seite 7.
- Die Paketoption `upgreek` wurde umbenannt in `greek`.
- Die `\Chem<greekletter>`-Befehle wurden um einige Buchstaben erweitert, siehe Abschnitt 8.



## 7.2. Version 3.3a

- Die IUPAC-Befehle `\hapto` und `\bridge` sind neu.
- Die H- und P-Sätze sind jetzt auch auf italienisch verfügbar.

## 7.3. Version 3.3d

- pdf-Versionen der GHS-Piktogramme.
- Neue Voreinstellungen für Bindungslänge und Bindungs-Offset, siehe Seite 52.
- Neue Option `bond-style`, siehe Seite 52.
- neue Option `cip-kern`, siehe Seite 14

## 7.4. Version 3.4

- `CHEMMACROS` bekam ein italienisches Manual, vielen herzlichen Dank an Jonas Rivetti, der sich nicht nur freiwillig meldete, die H- & P-Sätze zu übersetzen, sondern auch diese Dokumentation!
- der Befehl `\bond`, der es ermöglicht, andere als Einfach-, Doppel- und Dreifachbindungen zu verwenden, siehe Abschnitt 25.5. Dieses Feature wollte ich schon lange einbauen!
- ein paar Änderungen am Aussehen des Radikalpunktes und neue Optionen, um es anzupassen, siehe Abschnitt 25.6.

# Teil II.

# chemmacros

## 8. Teilchen, Ionen und Symbole

### 8.1. Vordefiniert

`CHEMMACROS` definiert einige einfache Makros, um häufig verwendete Teilchen und Symbole darzustellen. Bitte beachten Sie, dass sie unterschiedlich dargestellt werden, je nach dem, welche Paketoptionen Sie verwenden. Diese Befehle können auch im Mathematikmodus eingesetzt werden.

- ▶ `\Hpl` →  $\text{H}^+$  (Proton)
- ▶ `\Hyd` →  $\text{OH}^-$  (Hydroxid)
- ▶ `\HtO` →  $\text{H}_3\text{O}^+$  (Oxoniumion) (**H** three **O**)
- ▶ `\water` →  $\text{H}_2\text{O}$
- ▶ `\el` →  $\text{e}^-$  (Elektron)

## 8. Teilchen, Ionen und Symbole

- ▶ `\prt` →  $p^+$  (Proton)
- ▶ `\ntr` →  $n^0$  (Neutron)
- ▶ `\Nu` →  $Nu^-$  (Nukleophil). Das Paket `mathspec` definiert ebenfalls ein Makro `\Nu`. Wenn Sie die Pake-toption `Nu = mathspec` wählen, definiert `CHEMMACROS` stattdessen `\Nuc`.
- ▶ `\El` →  $E^+$  (Elektrophil)
- ▶ `\ba` →  $ba^-$  (Base)
- ▶ `\fplus` →  $\oplus$
- ▶ `\fminus` →  $\ominus$
- ▶ `\transitionstatesymbol` →  $\ddagger$
- ▶ `\standardstate` →  $\ominus$ . Dieses Symbol wird nur dann von `CHEMMACROS` bereitgestellt, wenn das Paket `chemstyle`<sup>23</sup> nicht geladen wurde. Die Idee ist von dort ausgeliehen.<sup>24</sup>
- ▶ `\Chemalpha` →  $\alpha$
- ▶ `\Chembeta` →  $\beta$
- ▶ `\Chemgamma` →  $\gamma$
- ▶ `\Chemdelta` →  $\delta$
- ▶ `\Chemepsilon` →  $\varepsilon$
- ▶ `\Chemeta` →  $\eta$
- ▶ `\Chemkappa` →  $\kappa$
- ▶ `\Chemmu` →  $\mu$
- ▶ `\Chemnu` →  $\nu$
- ▶ `\Chemrho` →  $\rho$
- ▶ `\Chempi` →  $\pi$
- ▶ `\Chemsigma` →  $\sigma$
- ▶ `\Chemomega` →  $\omega$
- ▶ `\ChemDelta` →  $\Delta$

Der Befehl `\Rad` wird nicht mehr bereitgestellt!

Die beiden Teilchen `\Nu` und `\ba` können angepasst werden. Dafür verwenden Sie die Option

`particle` ▶ `elpair = false|dots|dash`

<sup>23</sup> CTAN: `chemstyle`    <sup>24</sup> Vielen Dank an den Paketautoren [Joseph Wright](#).

Sie hat nur dann Auswirkungen, wenn das Paket `chemfig`<sup>25</sup> geladen wurde, da sie dessen Befehl `\Lewis` verwendet.

```

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

```

Die griechischen Buchstaben sind keine neu definierten Zeichen sondern werden abhängig von den Paketen, die sie geladen haben, definiert. Die Default-Version entspricht den entsprechenden kursiven „Mathematik“-Buchstaben. Wenn Sie das Paket `textgreek` geladen haben, werden dessen Buchstaben verwendet. Wenn Sie das Paket `upgreek` geladen haben, werden dessen Buchstaben verwendet. Diese Dokumentation verwendet `upgreek`. Haben Sie sowohl `textgreek` als auch `upgreek` geladen haben, wird `upgreek` verwendet.

Wenn Sie nicht wollen, dass `CHEMMACROS` automatisch wählt, sondern selbst entscheiden wollen, verwenden Sie die Paketoption `greek`. Tabelle 1 zeigt die verschiedenen Varianten einiger Buchstaben.

|                         | math     | upgreek  | textgreek |
|-------------------------|----------|----------|-----------|
| <code>\Chemalpha</code> | $\alpha$ | $\alpha$ | $\alpha$  |
| <code>\Chembeta</code>  | $\beta$  | $\beta$  | $\beta$   |
| <code>\ChemDelta</code> | $\Delta$ | $\Delta$ | $\Delta$  |

Tabelle 1: Die griechischen Buchstaben

Der Grund dafür, dass `CHEMMACROS` diese Makros überhaupt definiert, ist IUPAC-Konformität. IUPAC empfiehlt, aufrechte griechische Buchstaben in der Nomenklatur verwenden.

Greek letters are used in systematic organic, inorganic, macromolecular and biochemical nomenclature. These should be roman (upright), since they are not symbols for physical quantities. *IUPAC Green Book* [*Coh+08*, p. 9]

`CHEMMACROS` verwendet diese Befehle nun, um Nomenklatur-Befehle zu definieren, siehe Seite 13.

## 8.2. Eigene Teilchen definieren

Manchmal kann es sicherlich nützlich sein, andere Teilchen als Makro zur Verfügung zu haben, etwa `\positron` oder `\photon`. Mit diesem Befehl kann das einfach erreicht werden:

- `\DeclareChemParticle{<cmd>}{<definition>}`
- `\RenewChemParticle{<cmd>}{<definition>}`

Abhängig von der `method`, die Sie als Option gewählt haben, wird die `<definition>` entweder mit `mhchem` oder mit `CHEMFORMULA` erfolgen. Das Teilchen verhält sich wie die vordefinierten mit einer Ausnahme: das Teilchen, das auf diese Weise definiert wurde, gehorcht der Option `circled`

<sup>25</sup> CTAN: `chemfig`

nur, wenn Sie `method = chemformula` gewählt haben. Wenn Sie mit `method = mhchem` formale Ladungen wollen, müssen Sie CHEMMACROS' Befehle (siehe Abschnitt 12) explizit einsetzen.

```

1 % uses the 'upgreek' package
2 \DeclareChemParticle{\positron}{$\upbeta^{+}}
3 \DeclareChemParticle{\photon}{$\upgamma}
4 \RenewChemParticle{\el}{$\upbeta^{-}}
5 \positron\ \photon\ \el

```

$$\beta^{+} \gamma \beta^{-}$$

`\DeclareChemParticle` definiert das Teilchen nur dann, wenn `<cmd>` noch nicht existiert. Andernfalls wird CHEMMACROS entweder eine Warnung oder einen Fehler ausgeben, abhängig von der Option `strict`. `\RenewChemParticle` definiert ein Teilchen *nur*, wenn `<cmd>` schon existiert und gibt andernfalls eine Warnung/einen Fehler.

## 9. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke

### 9.1. IUPAC-Namen

Ähnlich wie das Paket `bpchem` stellt CHEMMACROS einen Befehl<sup>26</sup> bereit, um IUPAC-Namen zu setzen. Wieso ist das nützlich? IUPAC-Namen können sehr lang werden. So lang, dass sie auch mal über mehr als zwei Zeilen gehen können, vor allem in zweiseitigen Dokumenten. Das bedeutet, sie müssen sich mehr als einmal umbrechen dürfen. Dabei hilft folgender Befehl:

- `\iupac{<IUPAC name>}` → Innerhalb dieses Befehls werden `\|` und `\-` verwendet, um Umbruchstellen oder einen umbrechenden Bindestrich anzugeben. `\^` kann als Abkürzung für `\textsuperscript` eingesetzt werden.

```

1 \begin{minipage}{.4\linewidth}
2 \iupac{Tetra\|cyclo[2.2.2.1\^{1,4}]\-un\|decane-2\|-dodecyl\|-5\|-(hepta\|decyl\|
   iso\|dodecyl\|thio\|ester)}
3 \end{minipage}

```

Tetracyclo[2.2.2.1<sup>1,4</sup>]-undecane-2-dodecyl-5-(heptadecylisododecylthioester)

Der Befehl `\iupac` ist dennoch mehr ein semantischer Befehl. Meistens kann man (beinahe) dasselbe erreichen, indem man `\-` anstelle von `\|` verwendet, `-` anstelle von `\-` und `\textsuperscript` anstelle von `\^`.

Es gibt subtile Unterschiede: `\-` fügt einen kleinen Leerraum vor dem Bindestrich ein und entfernt etwas Raum danach. Der Befehl `\|` verhindert nicht nur Ligaturen, sondern fügt ebenfalls einen kleinen Leerraum ein.

```

1 \huge\iupac{2,4\|-Di\|chlor\|pentan} \
2 2,4-Dichlorpentan

```

2,4-Dichlorpentan  
2,4-Dichlorpentan

<sup>26</sup> Die Idee und die Umsetzung stammt aus dem Paket `bpchem` von Bjørn Pedersen.

Die eingefügten Leerräume können angepasst werden:

`iupac` ▶ `hyphen-pre-space` = <dim> → Default = .01em

`iupac` ▶ `hyphen-post-space` = <dim> → Default = -.03em

`iupac` ▶ `break-space` = <dim> → Default = .01em

Der Befehl `\iupac` dient noch einem anderen Zweck. Unabhängig von der Paketoption `iupac` sind alle Befehle, die in diesem Abschnitt vorgestellt werden, *innerhalb* von `\iupac` immer definiert. Eine ganze Reihe der Nomenklatur-Befehle haben sehr allgemeine Namen: `\meta`, `\D`, `\E`, `\L`, `\R`, `\S`, `\trans` und so weiter. Das bedeutet, dass sie entweder schon definiert sind (`\L L`) oder leicht von anderen Paketen oder Klassen definiert werden (das Paket `cool`<sup>27</sup> definiert zum Beispiel sowohl `\D` als auch `\E`). Um Ihnen Kontrolle darüber zu geben, welche Befehle wie definiert sind, gibt es die Paketoption `iupac`. Sie hat drei Modi:

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

Tabelle 2 demonstriert die verschiedenen Modi.

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

Tabelle 2: Demonstration der verschiedenen `iupac`-Modi.

### 9.1.1. Vordefinierte Befehle

**Griechische Buchstaben** Griechische Buchstaben in Verbindungsnamen werden aufrecht geschrieben. Dafür gibt es die Pakete `upgreek` und `textgreek`. Wenn Sie eines davon geladen haben, werden die folgenden Buchstaben aufrecht geschrieben:

▶ `\a` → α

▶ `\b` → β

▶ `\g` → γ

<sup>27</sup> CTAN: `cool`

- `\d` →  $\delta$
- `\k` →  $\kappa$
- `\m` →  $\mu$
- `\n` →  $\eta$
- `\w` →  $\omega$

```
1 \iupac{5\alpha\androstano-3\beta\ol} \
2 \iupac{\alpha-(tri\chloromethyl)\-\omega\chloropoly(1,4\phenylenemethylene)}
```

5 $\alpha$ -androstano-3 $\beta$ -ol  
 $\alpha$ -(trichloromethyl)- $\omega$ -chloropoly(1,4-phenylenemethylene)

**Heteroatome und addierter Wasserstoff** Bindungen an Heteroatome und addierter Wasserstoff werden durch kursive Buchstaben dargestellt [[Coh+08](#)]. **CHEMMACROS** definiert ein paar Abkürzungen dafür:

- `\H` → *H*
- `\O` → *O*
- `\N` → *N*
- `\Sf` → *S*
- `\P` → *P*

|   |   |                               |
|---|---|-------------------------------|
| 1 | <code>\iupac{\N\methyl\benz\amide}</code>   | <i>N</i> -methylbenzamide     |
| 2 | <code>\iupac{3\H\pyrrole}</code>            | 3 <i>H</i> -pyrrole           |
| 3 | <code>\iupac{\O\ethyl hexanethioate}</code> | <i>O</i> -ethyl hexanethioate |

### Cahn-Ingold-Prelog

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

Da der Befehl `\S` schon eine andere Bedeutung hat (§), ist er in der Voreinstellung nur innerhalb `\iupac` verfügbar.

Sowohl diese Befehle als auch die entgegen/zusammen-Deskriptoren erhalten etwas Kerning nach der schließenden Klammer. Der Betrag kann durch folgende Option geändert werden:

`iupac` ► `cip-kern` = `<dim>` → Betrag des Kernings nach der schließenden Klammer. Default = .075em

## Fischer

► `\D` → *D*

► `\L` → *L*

Da der Befehl `\L` schon eine andere Bedeutung hat (Ł), ist er in der Voreinstellung nur innerhalb `\iupac` verfügbar.

## cis/trans, zusammen/entgegen, syn/anti & tert

► `\cis` → *cis*

► `\trans` → *trans*

► `\Z` → (*Z*)

► `\E` → (*E*)

► `\syn` → *syn*

► `\anti` → *anti*

► `\tert` → *tert*

Das Paket cool beispielsweise definiert die Befehle `\E` und `\D` ebenfalls. Wenn Sie es laden, ist die `CHEMMACROS`-Version in der Voreinstellung nur innerhalb von `\iupac` verfügbar.

## ortho/meta/para

► `\ortho` → *o*

► `\meta` → *m*

► `\para` → *p*

## Absolute Konfiguration (verwendet TikZ)

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

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

Beispiele:

```
1 \iupac{\D\Wein\|s"aure} =
2 \iupac{\cip{2S,3S}\Wein\|s"aure} \
3 \iupac{\D\-(\$-\$)\Threose} =
4 \iupac{\cip{2S,3R}\-(\$-\$)\-2,3,4-Tri\|hydroxy\|butanal} \
5 \iupac{\cis\2\Buten} =
6 \iupac{\Z\2\Buten}, \
7 \iupac{\cip{2E,4Z}\Hexa\|dien} \
8 \iupac{\meta\Xylol} =
9 \iupac{1,3-Di\methyl\|benzol}
```

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

**Koordinations-Chemie** `CHEMMACROS` stellt zwei Befehle bereit, die in der Koordinationschemie nützlich sein können:

► `\bridge{<num>}` →  $\mu_3$ -

► `\hapto{<num>}` →  $\eta^5$ -

```
1 Ferrocene = \iupac{bis(\hapto{5}cyclo\penta\dienyl)iron} \\  
2 \iupac{tetra\-\bridge{3}iodido\-\tetrakis[tri\methyl\platinum(IV)]}  
  
Ferrocene = bis( $\eta^5$ -cyclopentadienyl)iron  
tetra- $\mu_3$ -iodido-tetrakis[trimethylplatinum(IV)]
```

Zwei Optionen stehen zur Anpassung zur Verfügung:

`iupac` ► `bridge-number` = `sub`|`super` → hängt die Nummer als Tiefstellung oder als Hochstellung an. IUPAC empfiehlt die Tiefstellung [`Con+05`]. Default = `sub`

`iupac` ► `coord-use-hyphen` = `true`|`false` → hängt einen Bindestrich an `\hapto` und `\bridge` an wenn `true`. Default = `true`

### 9.1.2. Eigene Nomenklatur-Befehle

Wenn Ihnen Befehle fehlen sollten, können Sie neue definieren.

► `\DeclareChemIUPAC{<cmd>}{<declaration>}`

► `\RenewChemIUPAC{<cmd>}{<declaration>}`

Ein Befehl, der in dieser Weise definiert wurde, gehorcht der Option `iupac`. Das bedeutet, dass bestehende Befehle nur überschrieben werden, wenn Sie die Paketoption `iupac = strict` verwenden. `\DeclareChemIUPAC` wird jedoch die Definition eines bestehenden Nomenklatur-Befehls *nicht* überschreiben, sondern eine Warnung/einen Fehler melden (abhängig von der Paketoption `strict`).

```
1 \DeclareChemIUPAC\endo{\textit{endo}}  
2 \RenewChemIUPAC\anti{\textit{anti}}  
3 \iupac{(2\-\endo,7\-\anti)\-2\-\bromo\-\7\-\fluoro\|bicyclo[2.2.1]heptane}  
  
(2-endo,7-anti)-2-bromo-7-fluorobicyclo[2.2.1]heptane
```

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



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

## 9.2. Lateinische Ausdrücke

Das Paket chemstyle stellt den Befehl `\latin` bereit, um gebräuchliche lateinische Ausdrücke konsistent darzustellen. `CHEMMACROS` definiert ein ähnliches `\latin`, aber nur, wenn chemstyle *nicht* geladen wurde, und stellt zusätzlich diese Befehle bereit:

- ▶ `\insitu` → *in situ*
- ▶ `\abinitio` → *ab initio*
- ▶ `\invacuo` → *in vacuo*

Falls das Paket chemstyle geladen wurde, wurden sie mit chemstyle's Befehl `\latin` definiert. Das bedeutet, dass ihr Erscheinungsbild von der chemstyle Option `abbremp` abhängen.

Die Makros wurden mit folgendem Befehl definiert:

- ▶ `\DeclareChemLatin{<cmd>}{<phrase>}`
- ▶ `\RenewChemLatin{<cmd>}{<phrase>}`

|   |  |                   |
|---|--|-------------------|
| 1 | <code>\DeclareChemLatin\ltn{latin text}</code> | <i>latin text</i> |
| 2 | <code>\ltn</code>                              |                   |

Wenn Sie chemstyle *nicht* geladen haben, können Sie das Erscheinungsbild mit dieser Option anpassen:

`latin` ▶ `format` = <definition> → Default = `\itshape`

## 10. Einheiten für die Verwendung mit siunitx

In der Chemie sind einige nicht-SI-Einheiten sehr verbreitet. Das Paket siunitx stellt den Befehl `\DeclareSIUnit{<command>}{<unit>}` zur Verfügung, um beliebige Einheiten zu definieren. `CHEMMACROS` verwendet diesen Befehl, um die unten gelisteten Einheiten zu definieren. Wie alle siunitx-Einheiten sind sie nur innerhalb von `\SI{<num>}{<unit>}` und `\si{<unit>}` gültig.

- ▶ `\atmosphere` → atm
- ▶ `\atm` → atm
- ▶ `\calory` → cal
- ▶ `\cal` → cal
- ▶ `\cmc` → cm<sup>3</sup> Die Einheiten `\cmc`, `\molar` und `\Molar` werden durch das Paket chemstyle ebenfalls definiert. `CHEMMACROS` definiert sie nur, wenn chemstyle nicht geladen wurde.

- ▶ `\molar` → mol dm<sup>-3</sup>
- ▶ `\moLar` → mol L<sup>-1</sup>
- ▶ `\Molar` → M
- ▶ `\MolMass` → g mol<sup>-1</sup>
- ▶ `\normal` → N
- ▶ `\torr` → torr

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

## 11. Säure/Base

Einfache Darstellung von pH, p*K*<sub>S</sub> ... (der Befehl `\pKa` hängt von der Paketoption `language` ab).

- ▶ `\pH` → pH
- ▶ `\pOH` → pOH
- ▶ `\Ka` → *K*<sub>S</sub>
- ▶ `\Kb` → *K*<sub>B</sub>
- ▶ `\Kw` → *K*<sub>W</sub>
- ▶ `\pKa[<num>]` → `\pKa`: p*K*<sub>S</sub>, `\pKa[1]`: p*K*<sub>S1</sub>
- ▶ `\pKb[<num>]` → `\pKb`: p*K*<sub>B</sub>, `\pKb[1]`: p*K*<sub>B1</sub>
- ▶ `\p{<anything>}` → z. B.: `\p{\Kw}` p*K*<sub>W</sub>

|  |   |
|--|---|
| <code>\Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]</code> | <i>K</i> <sub>S</sub> <i>K</i> <sub>B</sub> p <i>K</i> <sub>S</sub> p <i>K</i> <sub>S1</sub> p <i>K</i> <sub>B</sub> p <i>K</i> <sub>B1</sub> |
|--|---|

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

The operator p [...] shall be printed in Roman type. *IUPAC Green Book [Coh+08, p. 103]*

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

`acid-base` ▶ `p-style` = `italics|slanted|upright` → Default = upright

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

pH, pK<sub>S</sub>  
 pH, pK<sub>S</sub>  
 pH, pK<sub>S</sub>

## 12. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen

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

### 12.1. Ionenladungen

Einfache Verwendung von (realen) Ladungen:

- `\pch[<number>]` → positive Ladung (**p**lus + **ch**arge)
- `\mch[<number>]` → negative Ladung (**m**inus + **ch**arge)

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

Das gleiche für formale Ladungen:

- `\fpch[<number>]` → positive Ladung
- `\fmch[<number>]` → negative Ladung

|  |                                   |
|--|-----------------------------------|
| <pre>1 \fpch\ \fmch\ \fpch[3] \fmch[3]</pre> | $\oplus \ominus 3\oplus 3\ominus$ |
|--|-----------------------------------|

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

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

Das hat folgende Auswirkungen:

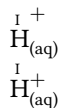
|   |  |
|---|--|
| <pre>1 % uses package 'mhchem' 2 \chemsetup{charges/append=false,phases/pos=sub} 3 \ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch} 4 5 \chemsetup{charges}{append=true} 6 \ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}</pre> | $\text{H}_{(\text{aq})}^+ \text{H}_{(\text{aq})}^+$<br>$\text{H}_{(\text{aq})}^+ \text{H}_{(\text{aq})}^+$ |
|---|--|

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

```

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

```



## 12.2. Oxidationszahlen

Eingabe von Oxidationszahlen:

- `\ox[<options>]{<number>,<atom>}` → setzt <number> über <atom>; <number> muss eine (rationale) Zahl sein!

```

1 \ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ox{-1,F}

```

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

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

- ox** ► `parse = true|false` → Wenn false, dann kann ein beliebiger Eintrag für <number> gemacht werden. Default = true
- ox** ► `roman = true|false` → schaltet von römischen auf arabische Ziffern um. Default = true
- ox** ► `pos = top|super|side` →; top setzt <number> über <atom>, super rechts oben als Hochstellung und side rechts daneben in Klammern. Default = top
- ox** ► `explicit-sign = true|false` → gibt + für positive Zahlen und ± für die 0 aus. Default = false
- ox** ► `decimal-marker = comma|point` → Wahl des Dezimalzeichens für Oxidationszahlen wie  $\overset{1.2}{\text{X}}$ . Default = point
- ox** ► `align = center|right` → Die Oxidationszahl über dem Atom zentrieren oder es mit diesem rechts ausrichten. Default = center

```

1 \ox[roman=false]{2,Ca} \ox{2,Ca} \
2 \ox[pos=super]{3,Fe}-Oxid \
3 \ox[pos=side]{3,Fe}-Oxid \
4 \ox[parse=false]{?,Mn} \
5 \ox[align=right]{2,Ca}

```

$$\overset{2}{\text{Ca}} \overset{\text{II}}{\text{Ca}}$$

$$\text{Fe}^{\text{III}}\text{-Oxid}$$

$$\text{Fe(III)-Oxid}$$

$$\overset{?}{\text{Mn}}$$

$$\overset{\text{II}}{\text{Ca}}$$

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

```

1 \ox{3,Fe} \ox*{3,Fe}

```

$$\overset{\text{III}}{\text{Fe}} \text{ Fe}^{\text{III}}$$

## 12. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen

Die Verwenden von **explicit-sign** wird immer das Vorzeichen der Oxidationszahl zeigen:

```
1 \chemsetup[ox]{explicit-sign = true}
2 \ox{+1,Na}, \ox{2,Ca}, \ox{-2,S}, \ch{"\ox{0,F}" {}2}
```

$\overset{+I}{\text{Na}}, \overset{+II}{\text{Ca}}, \overset{-II\pm 0}{\text{S}}, \text{F}_2$

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

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

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

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

$\overset{0.5}{\text{Br}_2} \overset{1/3}{\text{I}}_3^+$

Der Bruch verwendet den **\sfrac**-Befehl des xfrac<sup>28</sup>-Pakets. Zu diesem Zweck wurde die Instanz chemmacros-ox-fraction definiert.

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

Natürlich können Sie sie nach Ihren Vorstellungen umdefinieren.

### 12.3. Partialladungen und Ähnliches

Vielleicht selten genutzt, manchmal aber praktisch:

- **\delp** →  $\delta+$  (**d**elta + **p**lus)
- **\delm** →  $\delta-$  (**d**elta + **m**inus)
- **\fdelp** →  $\delta\oplus$
- **\fdelm** →  $\delta\ominus$

Ein Beispiel mit dem Befehl **\ox** oder mit dem Paket chemfig:

---

<sup>28</sup> CTAN: xfrac

```

1 \chemsetup{
2   option/circled = all,
3   ox/parse      = false
4 }
5 \ce{\ox{\del p,H}-\ox{\del m,Cl}} \hspace*{1cm}
6 \chemfig{\chemabove[3pt]{\Lewis{246,Br}}{\del m}-\chemabove[3pt]{H}{\del p}}


$$\begin{array}{ccc} \delta\oplus & \delta\ominus & \delta\ominus & \delta\oplus \\ \text{H}-\text{Cl} & & |\text{Br}-\text{H} \end{array}$$


```

Auch diese Makros lassen sich gut mit chemfig einsetzen.

- `\scrip` → + (scriptstyle + plus)
- `\scrm` → − (scriptstyle + minus)
- `\fscrp` → ⊕
- `\fscrm` → ⊖
- `\fsscrp` → ⊕ (verwendet `\scriptscriptstyle`)
- `\fsscrm` → ⊖

```

1 \setatomsep{1.8em}\chemfig{CH_3-\chemabove{C}{\scrip}(-[6]C|H_3)-\vphantom{H_3}CH
   _3}
2
3 \chemfig{\fmch{0}\chemabove{N}{\fscrm}(-[1]O|\fmch)-[7]O|\fmch)}


$$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\overset{+}{\text{C}}-\text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \ominus\text{O}-\text{N}^+-\text{O} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \end{array}$$


```

## 13. Reaktionsmechanismen

Mit dem Befehl

- `\mech[<type>]`

kann man die verbreitetsten Reaktionsmechanismen spezifizieren. <type> kann einen der folgenden Werte annehmen:

- `\mech` → (leer, kein opt. Argument) nukleophile Substitution  $S_N$
- `\mech[1]` → unimolekulare nukleophile Substitution  $S_{N1}$
- `\mech[2]` → bimolekulare nukleophile Substitution  $S_{N2}$
- `\mech[se]` → elektrophile Substitution  $S_E$

- ▶ `\mech[1e]` → unimolekulare elektrophile Substitution  $S_E1$
- ▶ `\mech[2e]` → bimolekulare elektrophile Substitution  $S_E2$
- ▶ `\mech[ar]` → elektrophile aromatische Substitution  $Ar-S_E$
- ▶ `\mech[e]` → Eliminierung E
- ▶ `\mech[e1]` → unimolekulare Eliminierung  $E1$
- ▶ `\mech[e2]` → bimolekulare Eliminierung  $E2$
- ▶ `\mech[cb]` → unimolekulare Eliminierung “conjugated base”, d. h. via Carbanion  $E1_{cb}$

## 14. Redoxreaktionen

`CHEMMACROS` stellt zwei Befehle zur Verfügung, mit denen die Übertragung von Elektronen in Redoxreaktionen angezeigt werden kann.<sup>29</sup> Beide Befehle verwenden `TikZ`.

- ▶ `\OX{<name>,<atom>}`
- ▶ `\redox(<name1>,<name2>)[<tikz>][<num>]{<text>}` → Lediglich das erste Argument (`<name1>,<name2>`) wird benötigt, die anderen sind optional.

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

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

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

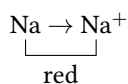
```
1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}
ox
┌───┐
Na → Na+
```

Mit dem Argument `[<num>]` kann die Länge der vertikalen Linien angepasst werden. Die Voreinstellung beträgt `.6em`. Diese Länge wird mit `<num>` multipliziert. Ein negativer Wert wird die Linie *unter* den Text setzen.

```
1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch
2 \redox(a,b)[->,red]{ox}
3 \redox(a,b)[->,blue][-1]{red}
4 \vspace{7mm}
```

<sup>29</sup> Dank an [Peter Cao](#), der dieses Feature vorgeschlagen hat.

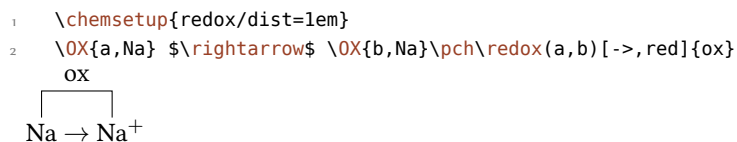
## 14. Redoxreaktionen



Die Voreinstellung der vertikalen Linien kann mit

**redox** ► **dist** = <dim> → Default = .6em

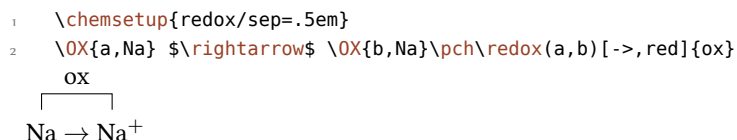
angepasst werden:



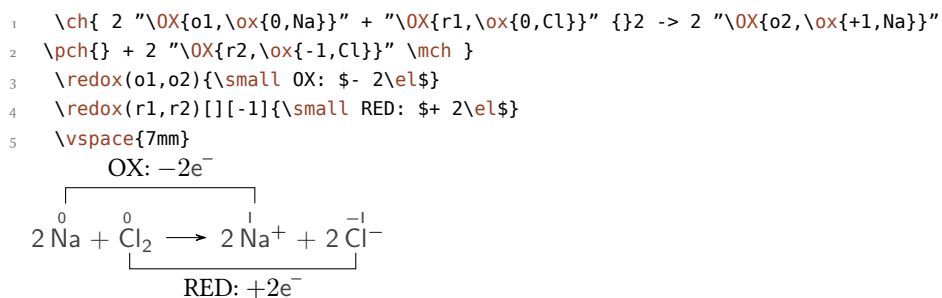
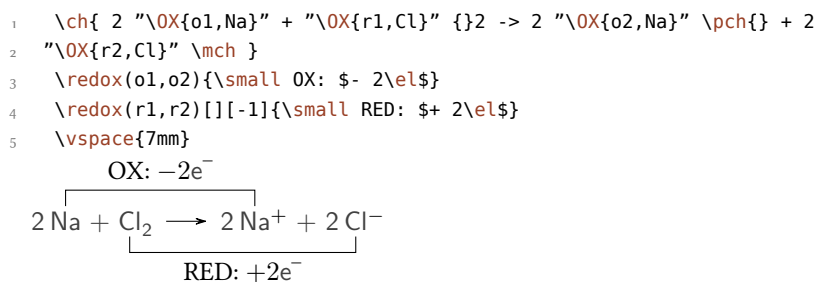
Zusätzlich erlaubt die Option

**redox** ► **sep** = <dim> → Default = .2em

den Abstand zwischen Atom und Anfang der Linie zu verändern.

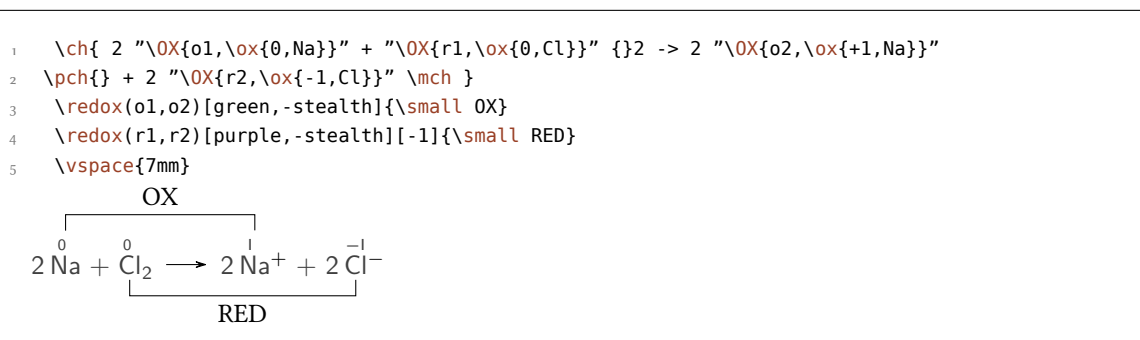
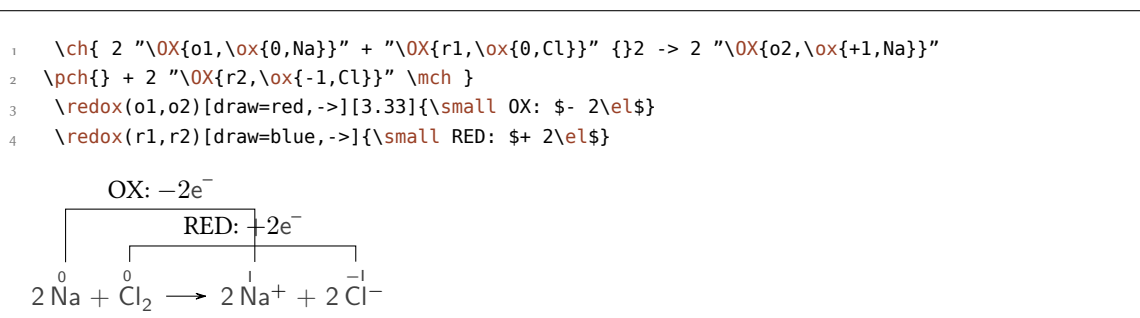


Beispiele:





## 15. (Standard) Zustand, Thermodynamik



## 15. (Standard) Zustand, Thermodynamik

### 15.1. Thermodynamische Größen

Die folgenden Befehle verwenden siunitx:

- `\Enthalpy[<options>](<subscript>){<value>}`
- `\Entropy[<options>](<subscript>){<value>}`
- `\Gibbs[<options>](<subscript>){<value>}`

Ihre Verwendung ist ziemlich selbsterklärend:



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

Die Befehle können mit mehreren Optionen angepasst werden:

- none- ► `exponent` = <anything>
- none- ► `delta` = <anything>|false
- none- ► `subscript` = left|right
- none- ► `unit` = <unit>

Die Voreinstellung hängt vom jeweiligen Befehl ab:

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

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

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

### 15.1.1. Neue Größen definieren

Mit dem Befehl

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

können neue Größen definiert werden.

|   |   |  |
|---|---|--|
| 1 | <code>\DeclareChemState{Helmholtz}{A}{\kilo\joule\per\mole}</code>                  |  |
| 2 | <code>\DeclareChemState[subscript-left=false,exponent=]{ELPot}{E}{\volt}</code>     |  |
| 3 | <code>\Helmholtz{123.4} \\\</code>  |  |
| 4 | <code>\ELPot{-1.1} \\\</code>   |  |
| 5 | <code>\ELPot[exponent=0](\$\ch{Sn}  \ch{Sn^2+}  \ch{Pb^2+}  \ch{Pb})\{0.01\}</code> |  |
|   |   | $\Delta A^\ominus = 123.4 \text{ kJ mol}^{-1}$                                     |
|   |   | $\Delta E = -1.1 \text{ V}$  |
|   |   | $\Delta E_{\text{Sn} \text{Sn}^{2+}  \text{Pb}^{2+} \text{Pb}}^0 = 0.01 \text{ V}$ |

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

► `exponent` = <anything>

► `delta` = <anything>|false

~~–none–~~ ► `subscript-left` = true|false

► `subscript` = <anything>

### 15.1.2. Größen umdefinieren

Mit

► `\RenewChemState[<options>]{<name>}{<symbol>}{<unit>}`

kann man bestehende Größen umdefinieren:

```
1 \RenewChemState{Enthalpy}{h}{\joule}
2 \Enthalpy{f}{12.5}
```

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

Der Befehl ist analog zu `\DeclareChemState`, d. h. er hat dieselben Optionen.

Man könnte also – um thermodynamischen Konventionen zu folgen – eine molare und eine absolute Größe definieren:

```
1 \DeclareChemState[exponent=]{enthalpy}{h}{\kilojoule\per\mole}% molar
2 \RenewChemState[exponent=]{Enthalpy}{H}{\kilojoule}% absolute
3 \enthalpy{-12.3} \Enthalpy{-12.3}
```

$$\Delta h = -12.3 \text{ kJ mol}^{-1} \quad \Delta H = -12.3 \text{ kJ}$$

## 15.2. Zustandsgrößen

Die Befehle, die in Abschnitt 15.1 vorgestellt wurden, verwenden intern den Befehl<sup>30</sup>

► `\State[<options>]{<symbol>}{<subscript>}`

Er kann verwendet werden, um die Größen ohne Wert und Einheit zu schreiben.

Beispiele:

```
1 \State{A}, \State{G}{f}, \State[subscript-left=false]{E}{\ch{Na}},
2 \State[exponent=\SI{1000}]{\celsius}{H}
```

$$\Delta A^\ominus, \Delta_f G^\ominus, \Delta E_{\text{Na}}^\ominus, \Delta H^{1000^\circ \text{C}}$$

Wieder hat er (fast) die gleichen Optionen:

`state` ► `exponent` = <anything>

`state` ► `subscript-left` = true|false

`state` ► `delta` = <anything>|false

## 16. Spektroskopie und Messdaten

### 16.1. Der `\NMR`-Befehl

Wenn Substanzen darauf untersucht werden, ob sie sind, was sie sein sollen, wird oft die NMR Spektroskopie eingesetzt. Die Messergebnisse werden dann etwa so aufgeschrieben:

$^1\text{H}$ -NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta = 1.59$

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

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

<sup>30</sup> Beachten Sie, dass `{<subscript>}` ein *optionales* Argument ist.

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

Alle Argumente sind optional! Ohne Argumente<sup>31</sup> erhalten wir:

|   |                     |                           |
|---|---------------------|---------------------------|
| 1 | <code>\NMR \</code> | $^1\text{H-NMR: } \delta$ |
| 2 | <code>\NMR*</code>  | $^1\text{H-NMR}$          |

Das erste Argument spezifiziert die Art der NMR:

|   |                         |                              |
|---|-------------------------|------------------------------|
| 1 | <code>\NMR{13,C}</code> | $^{13}\text{C-NMR: } \delta$ |
|---|-------------------------|------------------------------|

Mit dem zweiten Argument kann die verwendete Frequenz (in MHz) angegeben werden:

|   |                        |                                     |
|---|------------------------|-------------------------------------|
| 1 | <code>\NMR(400)</code> | $^1\text{H-NMR (400 MHz): } \delta$ |
|---|------------------------|-------------------------------------|

Auch mit Einheit:

|   |                               |  |
|---|-------------------------------|--|
| 1 | <code>\NMR(4e8,\hertz)</code> | $^1\text{H-NMR (4} \times 10^8 \text{ Hz): } \delta$ |
|---|-------------------------------|--|

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

|   |   |   |
|---|---|---|
| 1 | <code>\sisetup{exponent-product=\cdot}\NMR(4e8,\hertz)</code> |   |
|   |   | $^1\text{H-NMR (4} \cdot 10^8 \text{ Hz): } \delta$ |

Mit dem dritten Befehl schließlich kann das Lösungsmittel angegeben werden:

|   |                          |   |
|---|--------------------------|---|
| 1 | <code>\NMR[CDCl3]</code> | $^1\text{H-NMR (CDCl}_3\text{): } \delta$ |
|---|--------------------------|---|

## 16.2. Abkürzungen

Da man verschiedene Kerne in einem Dokument eventuell häufiger benötigt, bietet `CHEMMACROS` eine Möglichkeit, Abkürzungen zu definieren.

► `\DeclareChemNMR{<csname>}{<num>,<atom>}`

► `\RenewChemNMR{<csname>}{<num>,<atom>}`

Das definiert einen Befehl mit denselben Argumenten wie `\NMR`, außer `{<num>,<atom>}`.

|   |  |                               |
|---|--|-------------------------------|
| 1 | <code>\DeclareChemNMR\HNMR{1,H}%</code>  |                               |
| 2 | <code>\DeclareChemNMR\CNMR{13,C}%</code> | $^{13}\text{C-NMR (100 MHz)}$ |
| 3 | <code>\CNMR*(100) \</code>               | $^1\text{H-NMR (400 MHz)}$    |
| 4 | <code>\HNMR*(400)</code>                 |                               |

<sup>31</sup> Alle Argumente können beliebig kombiniert werden. Der Befehl kann auch im Mathematik-Modus eingesetzt werden.

### 16.3. Eine Umgebung, um Messergebnisse darzustellen

Um ein bequemes Eingeben von Messergebnissen zu ermöglichen, bietet CHEMMACROS eine Umgebung.

- ▶ `\begin{experimental}` Daten `\end{experimental}` → Umgebung für die Ausgabe von Experimental-Daten. Innerhalb dieser Umgebung sind die folgenden Befehle definiert.
- ▶ `\data{<Typ>}[<Spezifikation>]` → Typ der Daten, z. B. IR, MS... In das optionale Argument können weitere Spezifikationen eingegeben werden, die in runden Klammern ausgegeben werden.
- ▶ `\data*{<Typ>}[<Spezifikation>]` → Wie `\data`, gibt aber anstelle des = ein : mit aus, wenn `use-equal = true` eingestellt ist.
- ▶ `\NMR{<num>,<elem>[<coupling core>]}(<num>,<unit>)[<solvent>]` → der Befehl bekommt ein weiteres Argument: `\NMR{13,C[^1H]}`  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR:  $\delta$
- ▶ `\J(<bonds>;<nuclei>)[<unit>]{<list of nums>}` → Kopplungskonstante, Werte werden mit ; getrennt eingegeben. Für NMR. Das Argument (`<bonds>;<nuclei>`) ist optional und ermöglicht die Angabe von genaueren Spezifikationen der Kopplung.
- ▶ `\#{<num>}` → Anzahl der Kerne. Für NMR.
- ▶ `\pos{<num>}` → Position/Nummer des Kerns. Für NMR.
- ▶ `\val{<num>}` → Zahlenwert, ein Alias für siunitx' `\num{<num>}`
- ▶ `\val{<num1>- -<num2>}` → Ein Alias für siunitx' `\numrange{<num1>}{<num2>}`

```

1 \begin{experimental}
2 \data{Typ1} Daten.
3 \data{Typ2}[Spezifikationen] noch mehr Daten.
4 \data*{Typ3} weitere Daten.
5 \end{experimental}

```

Typ1 Daten. Typ2 (Spezifikationen) noch mehr Daten. Typ3 weitere Daten.

### 16.4. Anpassung

Die Ausgabe der Umgebung und der NMR-Befehle kann mir einer Reihe Optionen angepasst werden. Aus historischen Gründen gehören sie dem Modul `nmr` an.

`nmr` ▶ `unit = <unit>` → Default = `\mega\hertz`

`nmr` ▶ `nucleus = {<num>,<atom>}` → Default = `{1,H}`

`nmr` ▶ `format = <commands>` → zum Beispiel `\bfseries`

`nmr` ▶ `pos-number = side|sub` → Position der Zahl neben dem Atom. Default = `side`

`nmr` ▶ `coupling-unit = <unit>` → Eine siunitx Einheit. Default = `\hertz`

**nmr** ▶ **parse** = `true|false` → Das Lösungsmittel als mhchem/CHEMFORMULA-Formel behandeln oder nicht.  
Default = `true`

**nmr** ▶ **delta** = `<tokens>` → Die `<tokens>` werden nach  $\delta$  eingefügt.

**nmr** ▶ **list** = `true|false` → Die Umgebung `\begin{nmr}[<optionen>] \end{nmr}` wird als Liste formatiert. Default = `false`

**nmr** ▶ **list-setup** = `<setup>` → Setup der Liste. Default = siehe unten.

**nmr** ▶ **use-equal** = `true|false` → Istgleich-Zeichen nach `\NMR` und `\data` einsetzen. Default = `false`

Das Default-Setup der Liste:

```
1 \topsep\z@skip \partopsep\z@skip
2 \itemsep\z@ \parsep\z@ \itemindent\z@
3 \leftmargin\z@
```

```
1 \begin{experimental}[format=\bfseries]
2 \data{Typ1} Daten.
3 \data{Typ2}[Spezifikationen] noch mehr Daten.
4 \data*{Typ3} weitere Daten.
5 \end{experimental}
```

**Typ1** Daten. **Typ2 (Spezifikationen)** noch mehr Daten. **Typ3** weitere Daten.

Der Befehl `\NMR` und alle mit `\DeclareChemNMR` definierten Befehle können anstelle von `\data` für NMR-Daten eingesetzt werden.

```
1 \begin{experimental}[format=\bfseries,use-equal]
2 \data{Typ1} Daten.
3 \data{Typ2}[Spezifikationen] noch mehr Daten.
4 \NMR weitere Daten.
5 \end{experimental}
```

**Typ1** = Daten. **Typ2 (Spezifikationen)** = noch mehr Daten. **<sup>1</sup>H-NMR:  $\delta$**  = weitere Daten.

### 16.5. Anwendungsbeispiel

Der folgende Code in verschiedenen Ausgaben abhängig von der Auswahl der `<optionen>`. Die Optionen können selbstverständlich auch mit `\chemsetup` global gesetzt werden.

```
1 \sisetup{separate-uncertainty,per-mode=symbol,detect-all,range-phrase=-}
2 \begin{experimental}[<optionen>]
3 \data*{Ausbeute} \SI{17}{\milli\gram} gelbe Nadeln (\SI{0.04}{\milli\mole},
4 \SI{13}{\percent}).
5 %
6 \data{Smp.} \SI{277}{\celsius} (DSC).
7 %
```

```

7  \NMR(600)[CDCl3] \val{2.01} (s, \#{24}, \pos{5}), \val{2.31} (s, \#{12}, \
pos{1}), \val{6.72--6.74} (m, \#{2}, \pos{11}), \val{6.82} (s, \#{8}, \pos
{3}), \val{7.05--7.07} (m, \#{2}, \pos{12}), \val{7.39--7.41} (m, \#{4}, \
pos{9}), \val{7.48--7.49} (m, \#{4}, \pos{8}).
8  %
9  \NMR{13,C}(150)[CDCl3] \val{21.2} ($+$, \#{4}, \pos{1}), \val{23.4} ($+$,
\#{8}, \pos{5}), \val{126.0} ($+$, \#{4}, \pos{9}), \val{128.2} ($+$,
\#{8}, \pos{3}), \val{130.8} ($+$, \#{2}, \pos{12}), \val{133.6} ($+$,
\#{2}, \pos{11}), \val{137.0} ($+$, \#{4}, \pos{8}), \val{138.6} (q,
\#{4}, \pos{2}), \val{140.6} (q, \#{2}, \pos{10}), \val{140.8} (q, \#{8},
\pos{4}), \val{141.8} (q, \#{4}, \pos{6}), \val{145.6} (q, \#{2}, \pos{7})
.
10 %
11 \data{MS}[DCP, EI, \SI{60}{\electronvolt}] \val{703} (2, \ch{M+}), \val
{582} (1), \val{462} (1), \val{249} (13), \val{120} (41), \val{105} (100).
12 %
13 \data{MS}[\ch{MeOH + H2O + KI}, ESI, \SI{10}{\electronvolt}] \val{720}
(100, \ch{M+ + OH-}), \val{368} (\ch{M+ + 2 OH-}).
14 %
15 \data{IR}[KBr] \val{3443} (w), \val{3061} (w), \val{2957} (m), \val{2918} (
m), \val{2856} (w), \val{2729} (w), \val{1725} (w), \val{1606} (s), \val
{1592} (s), \val{1545} (w), \val{1446} (m), \val{1421} (m), \val{1402} (m)
, \val{1357} (w), \val{1278} (w), \val{1238} (s), \val{1214} (s), \val
{1172} (s), \val{1154} (m), \val{1101} (w), \val{1030} (w), \val{979} (m),
\val{874} (m), \val{846} (s), \val{818} (w), \val{798} (m), \val{744} (w)
, \val{724} (m), \val{663} (w), \val{586} (w), \val{562} (w), \val{515} (w)
).
16 %
17 \data*{UV-Vis} \SI{386}{\nano\metre} ($\varepsilon = \val{65984}$), \SI
{406}{\nano\metre} ($\varepsilon = \val{65378}$).
18 %
19 \data*{Quantenausbeute} $\Phi = \val{0.74+-0.1}$, .
20 \end{experimental}

```

### 16.5.1. Beinahe Standard

Ausgabe für <optionen>: delta=(ppm), pos-number=sub, use-equal:

Ausbeute: 17 mg gelbe Nadeln (0.04 mmol, 13 %). Smp. = 277 °C (DSC). <sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ (ppm) = 2.01 (s, 24 H, H<sub>5</sub>), 2.31 (s, 12 H, H<sub>1</sub>), 6.72–6.74 (m, 2 H, H<sub>11</sub>), 6.82 (s, 8 H, H<sub>3</sub>), 7.05–7.07 (m, 2 H, H<sub>12</sub>), 7.39–7.41 (m, 4 H, H<sub>9</sub>), 7.48–7.49 (m, 4 H, H<sub>8</sub>). <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ (ppm) = 21.2 (+, 4 C, C<sub>1</sub>), 23.4 (+, 8 C, C<sub>5</sub>), 126.0 (+, 4 C, C<sub>9</sub>), 128.2 (+, 8 C, C<sub>3</sub>), 130.8 (+, 2 C, C<sub>12</sub>), 133.6 (+, 2 C, C<sub>11</sub>), 137.0 (+, 4 C, C<sub>8</sub>), 138.6 (q, 4 C, C<sub>2</sub>), 140.6 (q, 2 C, C<sub>10</sub>), 140.8 (q, 8 C, C<sub>4</sub>), 141.8 (q, 4 C, C<sub>6</sub>), 145.6 (q, 2 C, C<sub>7</sub>). MS (DCP, EI, 60 eV) = 703 (2, M<sup>+</sup>), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100). MS (MeOH + H<sub>2</sub>O + KI, ESI, 10 eV) = 720 (100, M<sup>+</sup> + OH<sup>-</sup>), 368 (M<sup>+</sup> + 2 OH<sup>-</sup>). IR (KBr) = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m), 1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m), 1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w). UV-Vis: 386 nm (ε = 65 984), 406 nm (ε = 65 378). Quantenausbeute: Φ = 0.74 ± 0.10.

## 16.5.2. Formatierte Liste

Ausgabe für <optionen>: `format=\bfseries,delta=(ppm),list=true,use-equal:`

**Ausbeute:** 17 mg gelbe Nadeln (0.04 mmol, 13 %).

**Smp.** = 277 °C (DSC).

**<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>):**  $\delta$  (ppm) = 2.01 (s, 24 H, H-5), 2.31 (s, 12 H, H-1), 6.72–6.74 (m, 2 H, H-11), 6.82 (s, 8 H, H-3), 7.05–7.07 (m, 2 H, H-12), 7.39–7.41 (m, 4 H, H-9), 7.48–7.49 (m, 4 H, H-8).

**<sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CDCl<sub>3</sub>):**  $\delta$  (ppm) = 21.2 (+, 4 C, C-1), 23.4 (+, 8 C, C-5), 126.0 (+, 4 C, C-9), 128.2 (+, 8 C, C-3), 130.8 (+, 2 C, C-12), 133.6 (+, 2 C, C-11), 137.0 (+, 4 C, C-8), 138.6 (q, 4 C, C-2), 140.6 (q, 2 C, C-10), 140.8 (q, 8 C, C-4), 141.8 (q, 4 C, C-6), 145.6 (q, 2 C, C-7).

**MS (DCP, EI, 60 eV)** = 703 (2, M<sup>+</sup>), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

**MS (MeOH + H<sub>2</sub>O + KI, ESI, 10 eV)** = 720 (100, M<sup>+</sup> + OH<sup>-</sup>), 368 (M<sup>+</sup> + 2 OH<sup>-</sup>).

**IR (KBr)** = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m), 1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m), 1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w).

**UV-Vis:** 386 nm ( $\epsilon$  = 65 984), 406 nm ( $\epsilon$  = 65 378).

**Quantenausbeute:**  $\Phi$  = 0.74 ± 0.10.

## 16.5.3. Verrückt

Ausgabe für <optionen>:

```
1  format=\color{red}\itshape,
2  list=true,
3  delta=\textcolor{green}{\ch{M+ + H2O}},
4  pos-number=side,
5  coupling-unit=\mega\gram\per\square\second,
6  list-setup=,
7  use-equal
```

**Ausbeute:** 17 mg gelbe Nadeln (0.04 mmol, 13 %).

**Smp.** = 277 °C (DSC).

**<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>):**  $\delta$  M<sup>+</sup> + H<sub>2</sub>O = 2.01 (s, 24 H, H-5), 2.31 (s, 12 H, H-1), 6.72–6.74 (m, 2 H, H-11), 6.82 (s, 8 H, H-3), 7.05–7.07 (m, 2 H, H-12), 7.39–7.41 (m, 4 H, H-9), 7.48–7.49 (m, 4 H, H-8).

**<sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CDCl<sub>3</sub>):**  $\delta$  M<sup>+</sup> + H<sub>2</sub>O = 21.2 (+, 4 C, C-1), 23.4 (+, 8 C, C-5), 126.0 (+, 4 C, C-9), 128.2 (+, 8 C, C-3), 130.8 (+, 2 C, C-12), 133.6 (+, 2 C, C-11), 137.0 (+, 4 C, C-8), 138.6 (q, 4 C, C-2), 140.6 (q, 2 C, C-10), 140.8 (q, 8 C, C-4), 141.8 (q, 4 C, C-6), 145.6 (q, 2 C, C-7).

**MS (DCP, EI, 60 eV)** = 703 (2, M<sup>+</sup>), 582 (1), 462 (1), 249 (13), 120 (41), 105 (100).

**MS (MeOH + H<sub>2</sub>O + KI, ESI, 10 eV)** = 720 (100, M<sup>+</sup> + OH<sup>-</sup>), 368 (M<sup>+</sup> + 2 OH<sup>-</sup>).

**IR (KBr)** = 3443 (w), 3061 (w), 2957 (m), 2918 (m), 2856 (w), 2729 (w), 1725 (w), 1606 (s), 1592 (s), 1545 (w), 1446 (m), 1421 (m), 1402 (m), 1357 (w), 1278 (w), 1238 (s), 1214 (s), 1172 (s), 1154 (m),



1101 (w), 1030 (w), 979 (m), 874 (m), 846 (s), 818 (w), 798 (m), 744 (w), 724 (m), 663 (w), 586 (w), 562 (w), 515 (w).

**UV-Vis:** 386 nm ( $\varepsilon = 65\,984$ ), 406 nm ( $\varepsilon = 65\,378$ ).

**Quantenausbeute:**  $\Phi = 0.74 \pm 0.10$ .

## 17. Befehle für mhchem

mhchem wird nicht mehr automatisch geladen, sondern nur noch, wenn Sie die Option `method = mhchem` in der Präambel verwenden. Als Voreinstellung verwendet `CHEMMACROS` stattdessen `CHEMFORMULA`.

`CHEMMACROS` stellt nur einen Befehl speziell für mhchem<sup>32</sup> bereit. Er erlaubt es, Text unter eine Formel zu schreiben.

► `\mhName[<options>]{<formula>}{<text>}`

Zum Beispiel:

```
1 \ce{4 C2H5Cl + Pb / Na -> \mhName{Pb(C2H5)4}{former antiknock additive} + NaCl}
```

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

former  
antiknock  
additive

Mit den folgenden Optionen kann `\mhName` angepasst werden:

**mhName** ► **align** = <alignment command> → Die Ausrichtung des Textes innerhalb der Box, in die er geschrieben wird. Default = `\centering`

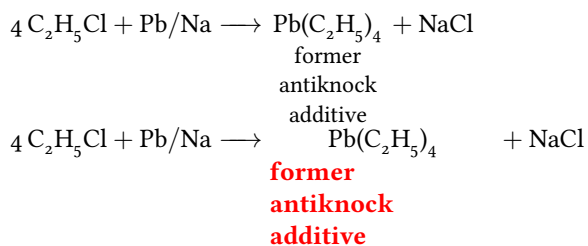
**mhName** ► **format** = <anything> → Das Format des Textes.

**mhName** ► **fontsize** = <font size command> → Die Schriftgröße des Textes. Default = `\tiny`

**mhName** ► **width** = <dim>|auto → Die Breite der Box, in die der Text geschrieben wird. Default = auto

```
1 \ce{4 C2H5Cl + Pb / Na -> \mhName[fontsize=\footnotesize]{Pb(C2H5)4}{former antiknock additive} + NaCl}\\
2 \chemsetup[mhName]{align=\raggedright, fontsize=\small, format=\bfseries\color{red}, width=3cm}
3 \ce{4 C2H5Cl + Pb / Na -> \mhName{Pb(C2H5)4}{former antiknock additive} + NaCl}
```

<sup>32</sup> `CHEMFORMULA` hat seine eigene Möglichkeit.



## 18. Reaktionsumgebungen

### 18.1. Durch CHEMMACROS definiert

Es stehen folgende Umgebungen für nummerierte...

- `\begin{reaction} <formula or mhchem code> \end{reaction}`
- `\begin{reactions} <formula or mhchem code> \end{reactions}`

...und ihre gesternten Versionen für unnummerierte Reaktionen zur Verfügung.

- `\begin{reaction*} <formula or mhchem code> \end{reaction*}`
- `\begin{reactions*} <formula or mhchem code> \end{reactions*}`

Damit können Sie (un-) nummerierte Reaktionsgleichungen erstellen ähnlich den mathematischen Gleichungen.

Die Umgebungen `reaction/reaction*` verwenden intern `equation/equation*` Umgebungen und die Umgebungen `reactions/reactions*` verwenden die `align/align*` Umgebungen, um die Reaktionen darzustellen.

|   |                               |                       |     |
|---|-------------------------------|-----------------------|-----|
| 1 | Reaktion mit Zähler:          | Reaktion mit Zähler:  |     |
| 2 | <code>\begin{reaction}</code> |                       |     |
| 3 | <code>A -&gt; B</code>        | $A \longrightarrow B$ |     |
| 4 | <code>\end{reaction}</code>   |                       | {1} |

|   |                                |                       |  |
|---|--------------------------------|-----------------------|--|
| 1 | Reaktion ohne Zähler:          | Reaktion ohne Zähler: |  |
| 2 | <code>\begin{reaction*}</code> |                       |  |
| 3 | <code>C -&gt; D</code>         | $C \longrightarrow D$ |  |
| 4 | <code>\end{reaction*}</code>   |                       |  |

|   |  |
|---|--|
| 1 | mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler: |
| 2 | <code>\begin{reactions}</code>               |
| 3 | <code>A &amp;-&gt; B + C \\\</code>          |
| 4 | <code>D + E &amp;-&gt; F</code>              |
| 5 | <code>\end{reactions}</code>                 |

## 18. Reaktionsumgebungen

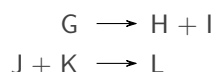
mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler:



1 mehrere ausgerichtete Reaktionen ohne Zähler:

```
2 \begin{reactions*}
3   G      &-> H + I \\
4   J + K &-> L
5 \end{reactions*}
```

mehrere ausgerichtete Reaktionen ohne Zähler:



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

► `\renewtagform{<tagname>}{<format>}{<right delim>}{<left delim>}`.<sup>33</sup>

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

$$\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO}_3 \quad [\text{R } 4]$$

Seit Version 3.3 funktionieren Querverweise und  $\mathcal{M}$ Smaths `\intertext` wie erwartet:

```
1 \begin{reactions}
2   A + 2 B &-> 3 C + D \label{rxn:test}
3   \intertext{Etwas Text zwischen ausgerichteten Reaktionen.}
4   3 E + F &<=> G + 1/2 H
5 \end{reactions}
6 Siehe Reaktion \ref{rxn:test}.
```



Etwas Text zwischen ausgerichteten Reaktionen.



Siehe Reaktion 5.

In der Standardeinstellung, d. h. mit `method = chemformula`, sollten Sie `\mch` und die verwandten Befehle innerhalb der `reaction` Umgebungen nicht verwenden. Sie bringen in den meisten Fällen die korrekte Ausrichtung durcheinander. In der Standardeinstellung erkennen

<sup>33</sup> Durch das `mathtools` Paket zur Verfügung gestellt.

## 18. Reaktionsumgebungen

Ladungen in den Umgebungen die Einstellung der Option `circled` automatisch, so dass die Befehle auch nicht benötigt werden.

## 18.2. Eigene Reaktionen

Sie können mit dem Befehl

► `\DeclareChemReaction[<options>]{<name>}{<math name>}`

weitere Reaktionsumgebungen erstellen.

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

Der Befehl hat zwei Optionen.

-none- ► `star = true|false`

-none- ► `arg = true|false`

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

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

Die vordefinierten Umgebungen wurden durch

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

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

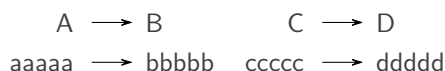
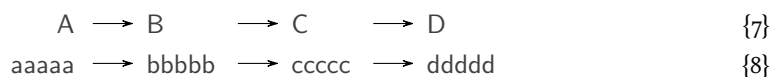
definiert.

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

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

Damit ist die `reactionsat`-Umgebung definiert.

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



### 18.3. Liste der Reaktionen

**CHEMMACROS** stellt ebenso einen Befehl zur Verfügung, mit dem man eine Liste der Reaktionen ausgeben kann, die mit den Reaktionsumgebungen eingegeben wurden.

► `\listofreactions`

|                                 |   |    |
|---------------------------------|---|----|
| 1                               | <code>\listofreactions</code>                 |    |
| <br><b>Reaktionsverzeichnis</b> |   |    |
|                                 | Reaktion {1} . . . . .                        | 34 |
|                                 | Reaktion {2} . . . . .                        | 35 |
|                                 | Reaktion {3} . . . . .                        | 35 |
|                                 | Reaktion [R 4] . . . . .                      | 35 |
|                                 | Reaktion {5} . . . . .                        | 35 |
|                                 | Reaktion {6} . . . . .                        | 35 |
|                                 | Reaktion {7} . . . . .                        | 38 |
|                                 | Reaktion {8} . . . . .                        | 38 |
|                                 | Reaktion {9}: Autoprotolyse . . . . .         | 38 |
|                                 | Reaktion {10}: first step of chain . . . . .  | 39 |
|                                 | Reaktion {11}: second step of chain . . . . . | 39 |
|                                 | Reaktion {12}: Synthese von Alkanen . . . . . | 64 |

Der Output kann mit den folgenden Optionen angepasst werden:

**reaction** ► **list-name** = <name of the list> → Setzen der Listenüberschrift. Default = Reaktionsverzeichnis

**reaction** ► **list-entry** = <prefix to each entry> → Präfix zu jedem Eintrag. Default = Reaktion

**option** Beide Default-Werte reagieren auf die Option **german**.

Statt die Option **list-name** zu verwenden, könnten Sie auch `\reactionlistname` undefinieren.

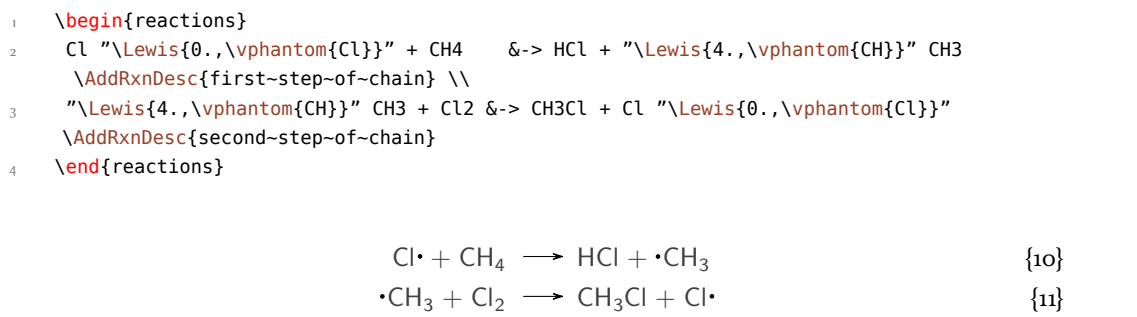
Im Verzeichnis werden alle Reaktionen mit Zählen gelistet und alle anderen nicht aufgenommen. Alle Reaktionsumgebungen ohne Stern haben ein optionales Argument, mit dem man eine Beschreibung für die Liste hinzufügen kann.

|   |  |  |
|---|--|--|
| 1 | <code>\begin{reaction}[Autoprotolyse]</code> |  |
| 2 | <code>2 H2O &lt;=&gt; H3O+ + OH-</code>      | $2 \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$ {9} |
| 3 | <code>\end{reaction}</code>                  |  |

Wenn Sie die reactions Umgebung verwenden, wird das allerdings nicht funktionieren. In diesem Fall können Sie

► `\AddRxnDesc{<description>}`

verwenden.



Nebenbei: Sie müssen die Phantom-Befehle nicht verwenden, wenn Sie das Format der Atome nicht geändert haben, siehe Abschnitt 30 an Seite 61.

## 19. Phasen

### 19.1. Grundlagen

Diese Befehle sollen helfen, die Phase einer Substanz anzuzeigen.

► `\sld` → (f)

► `\lqd` → (fl)

► `\gas` → (g)

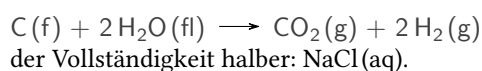
► `\aq` → (aq)

Das Default-Verhalten der Phasen-Befehle hat sich geändert, um der IUPAC-Empfehlung zu folgen. Sowohl `\sld` als auch `\lqd` haben kein optionales Argument mehr.

```

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

```



Mit der Paketoption `language = english` (siehe Abschnitt 4) erhalten Sie die englischen Versionen.

Die IUPAC-Empfehlung<sup>34</sup> um einen Aggregatzustand anzuzeigen ist es, sie in Klammern nach der Formel zu schreiben [Coh+08]. Es ist jedoch ebenfalls verbreitet, sie als Tiefstellung zu setzen.

<sup>34</sup> Vielen Dank an Paul King für den Hinweis.

The [...] symbols are used to represent the states of aggregation of chemical species. The letters are appended to the formula in parentheses and should be printed in Roman (upright) type without a full stop (period).  
*IUPAC Green Book [Coh+08, p. 54]*

Es gibt zwei Optionen, um den Output anzupassen:

**phases** ▶ **pos** = side|sub → Umschalten der Position des Phasen-Anzeigers. Default = side

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

```
1 \chemsetup[phases]{pos=sub}
2 \ch{C\sld} + 2 H2O\lqd{} -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{}\\
3 der Vollständigkeit halber: NaCl\aq.

C(f) + 2 H2O(fl) → CO2(g) + 2 H2(g)
der Vollständigkeit halber: NaCl(aq).
```

## 19.2. Eigene Phasen definieren

Abhängig vom Thema ihres Dokuments müssen Sie unter Umständen andere Aggregatzustände anzeigen. Sie können Sie einfach definieren.

▶ **\DeclareChemPhase**{<cmd>}[<german>]{<english>}

▶ **\RenewChemPhase**{<cmd>}[<german>]{<english>}

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

**\DeclareChemPhase** definiert die Phase nur dann, wenn <cmd> noch nicht existiert. Andernfalls wird **CHEMMACROS** entweder eine Warnung oder einen Fehler ausgeben, abhängig von der Option **strict**. **\RenewChemPhase** definiert eine Phase *nur*, wenn <cmd> schon existiert und gibt andernfalls eine Warnung/einen Fehler.

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

NaOH(aq,∞) H2O (cd) U(cr) A(lc)
NaOH(aq,∞) H2O(cd) U(cr) A(lc)
```

## 20. Newman-Projektionen

**CHEMMACROS** stellt den Befehl

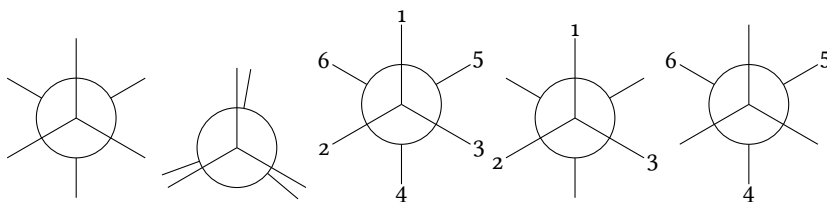
▶ **\newman**[<options>](<angle>){<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}



## 20. Newman-Projektionen

zur Verfügung, der Ihnen erlaubt, Newman-Projektionen zu erstellen (verwendet **TikZ**). Das Argument (`<angle>`) dreht die hinteren Atome gegen den Uhrzeigersinn bezüglich der vorderen Atome.

```
1 \newman{} \newman(170){}  
2 \newman{1,2,3,4,5,6} \newman{1,2,3} \newman{,,,4,5,6}
```



Es gibt einige Optionen, um den Befehl anzupassen:

**newman** ► **angle** = `<angle>` → Voreingestellter Winkel. Default = 0

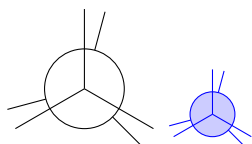
**newman** ► **scale** = `<factor>` → Skaliert die ganze Projektion. Default = 1

**newman** ► **ring** = `<tikz>` → Aussehen des Rings mit **TikZ**-Keys anpassen.

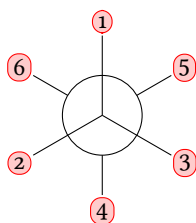
**newman** ► **atoms** = `<tikz>` → Aussehen der Knoten, in die die Atome geschrieben werden, mit **TikZ**-Keys anpassen.

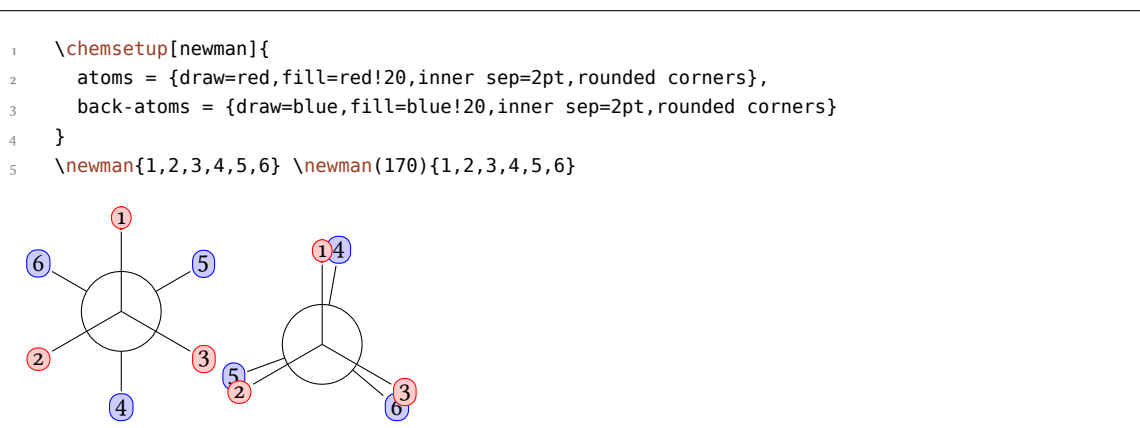
**newman** ► **back-atoms** = `<tikz>` → Nur die hinteren Atome anpassen.

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



```
1 \chemsetup[newman]{atoms={draw=red,fill=red!20,inner sep=2pt,rounded corners}}  
2 \newman{1,2,3,4,5,6}
```





## 21. s, p und Hybrid-Orbitale

CHEMMACROS stellt einen Befehl bereit, mit dem Orbitale visualisiert werden können:

► `\orbital[<options>]{<type>}`

Dabei stehen folgende Typen für {<type>} zur Verfügung:

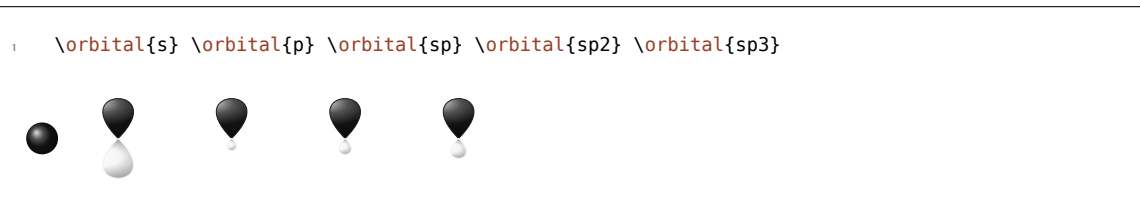
s

p

sp

sp<sup>2</sup>

sp<sup>3</sup>



Abhängig vom Typ stehen verschiedene Optionen zur Modifikation zur Auswahl:

`orbital` ► `phase = ±| -` → Ändern der Phase des Orbitals (alle Typen).

`orbital` ► `scale = <factor>` → Ändern der Größe des Orbitals (alle Typen).

`orbital` ► `color = <color>` → Ändern der Farbe des Orbitale (alle Typen).

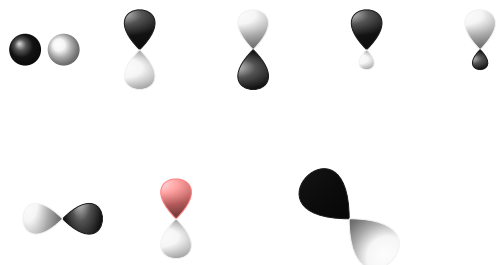
`orbital` ► `angle = <angle>` → Rotiert die Orbitale mit einem p-Anteil gegen den Uhrzeigersinn (alle Typen außer s).

`orbital` ► `half = true|false` → stellt nur ein halbes Orbital dar (nur p).

```

1 \orbital{s} \orbital[phase=-]{s}
2 \orbital{p} \orbital[phase=-]{p}
3 \orbital{sp3} \orbital[phase=-]{sp3}
4
5 \orbital[angle=0]{p} \orbital[color=red!50]{p} \orbital[angle=135,scale=1.5]{p}
  \orbital[half]{p}

```



Zusätzlich gibt es zwei Optionen, mit denen das *TikZ*-Verhalten beeinflusst werden kann:

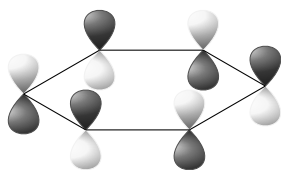
**orbital** ► **overlay** = true | false → Das Orbital „braucht keinen Platz“; es wird mit dem *TikZ*-Key **overlay** gezeichnet.

**orbital** ► **opacity** = <num> → Das Orbital wird durchsichtig; <value> kann Werte zwischen 1 (undurchsichtig) bis 0 (unsichtbar) annehmen.

```

1 \hspace{1cm}
2 \chemsetup[orbital]{
3   overlay,
4   p/color = black!70
5 }
6 \setbondoffset{0pt}
7 \chemfig{?\orbital{p}-[,1.3]{\orbital[phase=-]{p}}-[:30,1.1]\orbital{p}
8   }-[:150,.9]{\orbital[phase=-]{p}}-[4,1.3]\orbital{p}-[: -150,1.1]{\orbital[phase
   =-]{p}}??}
9 \vspace{7mm}

```

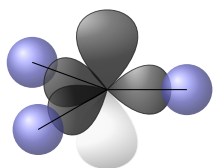


## 21. s, p und Hybrid-Orbitale

```

1 \hspace{2cm}
2 \setbondoffset{0pt}
3 \chemsetup[orbital]{
4   overlay ,
5   opacity = .75 ,
6   p/scale = 1.6 ,
7   s/color = blue!50 ,
8   s/scale = 1.6
9 }
10 \chemfig{\orbital{s}-[: -20]{\orbital[scale=2]{p}}{\orbital[half,angle=0]{p}}{\orbital[half,angle=170]{p}}{\orbital[half,angle=-150]{p}}(-[: -150]\orbital{s})
    -\orbital{s}}
11 \vspace{1cm}

```



# Teil III.

## chemformula

### 22. Setup

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

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

eingestellt werden.

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

### 23. Das Grundprinzip

**CHEMFORMULA** hat einen Hauptbefehl.

► **\ch[<options>]{<input>}**

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

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

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

► **\ch{type1 type2 type3 type4}**

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

## 24. Stöchiometrische Faktoren

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

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

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

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

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

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

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

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

## 24. Stöchiometrische Faktoren

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

|    |                           |                |
|----|---------------------------|----------------|
| 1  | <code>\ch{2} \\\</code>   | 2              |
| 2  | <code>\ch{12}</code>      | 12             |
| 3  |                           | 12             |
| 4  | <code>% decimals:</code>  | 3.5            |
| 5  | <code>\ch{3.5} \\\</code> | 5.75           |
| 6  | <code>\ch{5,75}</code>    | $\frac{3}{2}$  |
| 7  |                           | $1\frac{1}{2}$ |
| 8  | <code>% fractions:</code> |                |
| 9  | <code>\ch{3/2} \\\</code> |                |
| 10 | <code>\ch{1_1/2}</code>   |                |

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

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

Wenn die stöchiometrischen Faktoren in Klammern geschrieben werden, werden die Brüche nicht umgewandelt. Was in den Klammern steht, wird genauso geschrieben.

```
1 \ch{(1/2) H2O} \ch{1/2 H2O} \ch{0.5 H2O} (1/2)H2O  $\frac{1}{2}$  H2O 0.5 H2O
```

Viele Beispiele wie das folgende für die Verwendung von Klammern um stöchiometrische Faktoren finden Sie z. B. im „IUPAC Green Book“ [Coh+08]:



Der Output kann mit diesen Optionen angepasst werden:

- **decimal-marker** = <marker> → Das Symbol, das als Dezimalzeichen verwendet wird. Default = .
- **frac-style** = math|xfrac|nicefrac → Bestimmt, wie Brüche dargestellt werden. Default = math
- **stoich-space** = <skip> → Der Leerraum nach einem stöchiometrischen Faktor. Eine elastische Länge. Default = .1667em plus .0333em minus .0117em

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

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

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

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

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

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

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

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

## 25. Summenformeln

|   |  |
|---|--|
| 1 | <code>\ch[frac-style=nicefrac]{3/2} \ch[frac-style=nicefrac]{1_1/2}</code> |
|   | $\frac{3}{2}$ $1\frac{1}{2}$   |

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

|   |  |                        |
|---|--|------------------------|
| 1 | <code>\ch{2 H2O} \\\</code>                | $2 \text{H}_2\text{O}$ |
| 2 | <code>\ch[stoich-space=.3em]{2 H2O}</code> | $2 \text{H}_2\text{O}$ |

## 25. Summenformeln

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

|   |                                 |                                   |
|---|---------------------------------|-----------------------------------|
| 1 | <code>\ch{H2SO4} \\\</code>     | $\text{H}_2\text{SO}_4$           |
| 2 | <code>\ch{[Cu(NH3)4]^2+}</code> | $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ |

### 25.1. Addukte

**CHEMFORMULA** hat zwei Identifier, die Addukte erzeugen.

► `\ch{A.B} → A·B`

► `\ch{A*B} → A·B`

|   |                                 |  |
|---|---------------------------------|--|
| 1 | <code>\ch{CaSO4.H2O} \\\</code> | $\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ |
| 2 | <code>\ch{CaSO4*H2O}</code>     | $\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ |

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

|   |                                      |  |
|---|--------------------------------------|--|
| 1 | <code>\ch{Na3PO4*12H2O} \\\</code>   | $\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot {}_{12}\text{H}_2\text{O}$ |
| 2 | <code>\ch{Na3PO4* 12 H2O} \\\</code> | $\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$     |
| 3 | <code>\ch{Na3PO4 * 12 H2O}</code>    | $\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$     |

### 25.2. Tiefstellungen

Alle Ziffern in einer Substanz werden als Tiefstellung behandelt.

|   |                         |                         |
|---|-------------------------|-------------------------|
| 1 | <code>\ch{H2SO4}</code> | $\text{H}_2\text{SO}_4$ |
|---|-------------------------|-------------------------|

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



## 25. Summenformeln

|   |                          |          |
|---|--------------------------|----------|
| 1 | <code>\ch{A_nB_m}</code> | $A_nB_m$ |
|---|--------------------------|----------|

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

|   |                                      |                             |
|---|--------------------------------------|-----------------------------|
| 1 | <code>\ch{A_{n\$}B_{m\$}} \\\</code> | $A_nB_m$                    |
| 2 | <code>\ch{NaCl_{(aq)}}</code>        | $\text{NaCl}_{(\text{aq})}$ |

### 25.3. Befehle

Befehle sind in einer Summenformel erlaubt:

|   |  |                       |
|---|--|-----------------------|
| 1 | <code>\ch{\textbf{A2}B3} \ch{A2\color{red}B3}</code> | $A_2B_3 \quad A_2B_3$ |
|---|--|-----------------------|

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

|   |  |
|---|--|
| 1 | <code>\ch{A\hspace{2mm}B}</code> wird einen Fehler geben, da <code>\hspace</code> in etwa so etwas sieht: <code>\hspace{\$_2\$mm}</code> . |
|---|--|

Siehe Abschnitt 27.1 für einen Ausweg.

### 25.4. Ladungen und andere Hochstellungen

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

|   |                                    |                         |
|---|------------------------------------|-------------------------|
| 1 | <code>\ch{A+B} \ch{AB+} \\\</code> | $A \equiv B \quad AB^+$ |
| 2 | <code>\ch{A-B} \ch{AB-}</code>     | $A - B \quad AB^-$      |

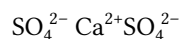
Für längere Ladungsgruppen oder andere Hochstellungen können Sie die Mathematik-Syntax verwenden. Sie beachtet Gruppen und erlaubt Mathematik in ihnen. Innerhalb dieser Gruppen werden weder + noch - als Bindungen interpretiert. Wenn sich ein Punkt . in einer Hochstellung befindet, zeigt er kein Addukt an sondern ein Radikal. Ein \* gibt den angeregten Zustand.

|   |                                    |                       |
|---|------------------------------------|-----------------------|
| 1 | <code>\ch{A^{x-}} \\\</code>       | $A^{x-}$              |
| 2 | <code>\ch{A^x-} \\\</code>         | $A^{x-}$              |
| 3 | <code>\ch{A^{x}-} \\\</code>       | $A^{x-}$              |
| 4 | <code>\ch{A^{x-\$}} \\\</code>     | $A^{x-}$              |
| 5 | <code>\ch{RNO2^{-.}} \\\</code>    | $\text{RNO}_2^{-}$    |
| 6 | <code>\ch{^31H} \\\</code>         | $^3_1\text{H}$        |
| 7 | <code>\ch{^{14}6C} \\\</code>      | $^{14}_6\text{C}$     |
| 8 | <code>\ch{^{58}_{26}Fe} \\\</code> | $^{58}_{26}\text{Fe}$ |
| 9 | <code>\ch{NO^*}</code>             | $\text{NO}^*$         |

## 25. Summenformeln

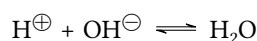
Ionen und Ionenverbindungen mit mehr als einer Ladung werden genauso eingegeben:

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



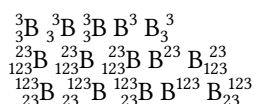
**Ladungsbefehle** Man benötigt kein `\mch` und ähnliche Befehle innerhalb von `\ch`. Tatsächlich sollte man sie vermeiden, da sie die Ausrichtung der Hoch- und Tiefstellungen durcheinander bringen können. Die `CHEMMACROS`-Option `circled` wird von `\ch` beachtet.

```
1 \chemsetup[option]{circled=all}
2 \ch{H+ + OH- <=> H2O}
```



**Verhalten** Die Hochstellungen verhalten sich unterschiedlich abhängig von ihrer Position in einer Summenformel, falls Hoch- und Tiefstellung direkt aufeinander folgen.

```
1 \ch{^33B} \ch{{}^33B} \ch{3^3B} \ch{B^3} \ch{B3^3} \
2 \ch{^23}_{123}B \ch{{}^23}_{123}B \ch{{}_123}^23B \ch{B^23} \ch{B
_{123}^23} \
3 \ch{{}^123}_{23}B \ch{{}_123}^23B \ch{{}_23}^123B \ch{B^123} \ch{B
23^123}
```



- Wenn eine Formel mit einer Hochstellung *startet*, werden Hoch- und Tiefstellung *rechts* ausgerichtet, ansonsten *links*.
- Wenn eine Hochstellung einer Tiefstellung *folgt*, wird sie zusätzlich um eine Länge verschoben, die durch die Option `charge-hshift = <dim>` bestimmt wird, siehe auch Seite 52f.

Der zweite Punkt folgt der IUPAC-Empfehlung:

In writing the formula for a complex ion, spacing for charge number can be added (staggered arrangement), as well as parentheses:  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $(\text{SO}_4)^{2-}$  The staggered arrangement is now recommended.

IUPAC Green Book [Coh+08, p. 51]

### 25.5. Bindungen

#### 25.5.1. Natürliche Bindungen

`CHEMFORMULA` kennt drei Sorten Bindungen, die ich “natürliche Bindungen” nennen werde:

```
1 einfach: \ch{CH3-CH3} \
2 doppel: \ch{CH2=CH2} \
3 dreifach: \ch{CH#CH}
```

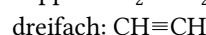
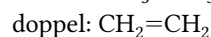
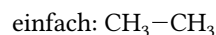


Tabelle 3: Bindungen, die mit `\bond` aufgerufen werden können.

| Name   | Aussehen | Aliase     |
|--------|----------|------------|
| single | —        | normal, sb |
| double | =        | db         |
| triple | ≡        | tp         |
| dotted | .....    | semisingle |
| deloc  | —        | semidouble |
| tdeloc | ≡        | semitriple |
| co>    | →        | coordright |
| <co    | ←        | coordleft  |

### 25.5.2. Flexible Bindungen

**Predefined Bindungen** Zusätzlich zu den drei natürlichen Bindungen gibt es ein paar weitere, die mit folgendem Befehl aufgerufen werden können:

► `\bond{<bond name>}`

Die vordefinierten Bindungstypen sind in Tabelle 3 aufgeführt.

```
1 \ch{C\bond{sb}C\bond{db}C\bond{tp}C\bond{deloc}C\bond{tdeloc}C\bond{co>}C\bond{<co}C}
C-C=C≡C≡C→C←C
```

**Eigene Bindungen** `CHEMFORMULA` stellt Befehle bereit, mit denen eigene Bindungen definiert werden können:

► `\DeclareChemBond{<name>}{<code>}`

► `\RenewChemBond{<name>}{<code>}`

► `\DeclareChemBondAlias{<new name>}{<old name>}`

► `\ShowChemBond{<name>}`

Die Verwendung wird am ehesten durch ein Beispiel beschrieben. Schauen Sie zunächst, wie die `single` und die `co>` Bindung definiert sind:

```
1 \DeclareChemBond{single}
2 { \draw[chembond] (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond-end) ; }
3 \DeclareChemBond{coordright}
4 { \draw[chembond,butt cap->] (chemformula-bond-start) -- (chemformula-
5 \DeclareChemBondAlias{co>}{coordright}
```

Hier sind zwei Dinge wichtig: die Namen der Anfangs- und der Endkoordinaten, `chemformula-bond-start` und `chemformula-bond-end`, und der `TikZ`-Stil der Bindungen `chembond`.

Sagen wir, Sie wollen eine bestimmte Art von gestrichelter Bindung definieren. Sie könnten folgendes tun:

```

1 \usetikzlibrary{decorations.pathreplacing}
2 \makeatletter
3 \DeclareChemBond{dashed}
4 {
5   \draw[
6     chembond,
7     decorate,
8     decoration={ticks,segment length=\chemformula@bondlength/10,amplitude=1.5
9     pt}]
10    (chemformula-bond-start) -- (chemformula-bond-end) ;
11 }
12 \makeatother
13 \chemsetup[chemformula]{bond-length=2ex}
14 \ch{C\bond{dashed}C}

```

C $\text{---}$ C

Dieses Beispiel zeigte Ihnen ein weiteres Makro: `\chemformula@bondlength`. Es existiert nur, damit Sie die Länge der Bindung, wie sie mit `bond-length` festgelegt wird, direkt verwenden können.

## 25.6. Anpassung

Diese Optionen ermöglichen Ihnen, den Output anzupassen:

- ▶ `subscript-vshift` = <dim> → Extra vertikale Verschiebung der Tiefstellungen. Default = 0pt
- ▶ `subscript-style` = text|math → Stil, der für die Tiefstellungen verwendet wird. Default = text
- ▶ `charge-hshift` = <dim> → Verschiebung von Hochstellungen, wenn sie einer Tiefstellung folgen. Default = .25em
- ▶ `charge-style` = text|math → Stil, der für Hochstellungen verwendet wird. Default = text
- ▶ `adduct-space` = <dim> → Leerraum links und rechts des Addukt-Punktes. Default = .1333em
- ▶ `bond-length` = <dim> → Die Länge der Bindungen. Default = .5833em
- ▶ `bond-offset` = <dim> → Der Abstand zwischen Atom und Bindung. Default = .07em
- ▶ `bond-style` = <tikz> → `TikZ`-Optionen für die Bindungen. Zunächst undefiniert.
- ▶ `radical-style` = <tikz> → `TikZ`-Optionen für den Radikalpunkt. Zunächst undefiniert.
- ▶ `radical-radius` = <dim> → Der Radius des Radikalpunktes. Default = .2ex

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

## 25. Summenformeln

|   |   |  |
|---|---|--|
| 1 | <code>\ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}</code> | $\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$ |
|---|---|--|

Sie werden verschoben, wenn sie einer Tiefstellung *folgen*, was der IUPAC-Empfehlung entspricht [Coh+08, p. 51]. Den Betrag der Verschiebung kann man mit der Option `charge-hshift` festlegen.

|   |  |  |
|---|--|--|
| 1 | <code>\ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\</code>           | $\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$ |
| 2 | <code>\chemsetup[chemformula]{charge-hshift=.5ex}</code> |  |
| 3 | <code>\ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\</code>           | $\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$ |
| 4 | <code>\chemsetup[chemformula]{charge-hshift=.5pt}</code> | $\text{SO}_4^{2-} \text{NH}_4^+ \text{Na}^+$ |
| 5 | <code>\ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}</code>              |  |

Ungeachtet der IUPAC-Empfehlung erstellt **CHEMFORMULA** keine voll gestaffelten Hochstellungen in der Voreinstellung, da ich die in manchen Fällen schwer zu lesen und in anderen Fällen hässlich finde. Da das aber eine subjektive Empfindung ist, gibt Ihnen **CHEMFORMULA** nicht nur die Möglichkeit, einen absoluten Wert für die Verschiebung festzulegen, sondern stellt auch eine Möglichkeit für voll gestaffelte Hochstellungen bereit. Dafür verwenden Sie `charge-hshift = full`.

|   |   |  |
|---|---|--|
| 1 | <code>\ch[charge-hshift=0pt]{C5H11+} \ch[charge-hshift=0pt]{SO4^2-} \\</code> |  |
| 2 | <code>\ch{C5H11+} \ch{SO4^2-} \\</code>                                       |  |
| 3 | <code>\ch[charge-hshift=1ex]{C5H11+} \ch[charge-hshift=1ex]{SO4^2-} \\</code> |  |
| 4 | <code>\ch[charge-hshift=full]{C5H11+} \ch[charge-hshift=full]{SO4^2-}</code>  |  |

$\text{C}_5\text{H}_{11}^+ \text{SO}_4^{2-}$   
 $\text{C}_5\text{H}_{11}^+ \text{SO}_4^{2-}$   
 $\text{C}_5\text{H}_{11}^+ \text{SO}_4^{2-}$   
 $\text{C}_5\text{H}_{11}^+ \text{SO}_4^{2-}$

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

|   |   |  |
|---|---|--|
| 1 | <code>\ch{M^x+} \ch{SO4^2-} \\</code>                     |  |
| 2 | <code>\chemsetup[chemformula]{charge-style = math}</code> |  |
| 3 | <code>\ch{M^x+} \ch{SO4^2-}</code>                        |  |

$\text{M}^{x+} \text{SO}_4^{2-}$   
 $\text{M}^{x+} \text{SO}_4^{2-}$

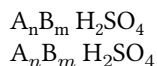
Die Option `subscript-vshift` kann verwendet werden, um die vertikale Verschiebung der Tiefstellungen anzupassen.

|   |  |  |
|---|--|--|
| 1 | <code>\ch{H2SO4} \ch{Na3PO4} \\</code>                       |  |
| 2 | <code>\chemsetup[chemformula]{subscript-vshift=.5ex}</code>  |  |
| 3 | <code>\ch{H2SO4} \ch{Na3PO4} \\</code>                       |  |
| 4 | <code>\chemsetup[chemformula]{subscript-vshift=-.2ex}</code> |  |
| 5 | <code>\ch{H2SO4} \ch{Na3PO4}</code>                          |  |

$\text{H}_2\text{SO}_4 \text{Na}_3\text{PO}_4$   
 $\text{H}_2\text{SO}_4 \text{Na}_3\text{PO}_4$   
 $\text{H}_2\text{SO}_4 \text{Na}_3\text{PO}_4$

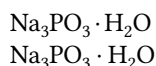
Sie können außerdem wählen, in welchem Modus die Tiefstellungen gesetzt werden:

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



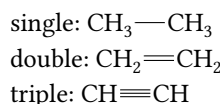
Mit der Option `adduct-space` kann der Leerraum links und rechts des Addukt-Zeichens festgesetzt werden.

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



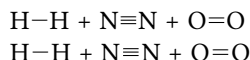
Die Länge der Bindungen ändern:

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



Sie können ebenfalls den Abstand zwischen Atom und Bindung einstellen:

```
1 \ch{H-H + N+N + O=O} \\
2 \ch[bond-offset=1pt]{H-H + N+N + O=O}
```



## 26. Spezielle Input-Typen

Es gibt einige "spezielle Input-Typen".

### 26.1. Single-Token Input

Die erste Sorte besteht nur aus einem Token, nämlich einem der folgenden:

- `\ch{ + }` → + Erstellt ein Plus-Zeichen zwischen Formeln mit Leerraum links und rechts:  
`\ch{2 Na + Cl2}`  $2 Na + Cl_2$
- `\ch{ v }` → ↓ Zeichen für eine Fällung/Niederschlag: `\ch{BaSO4 v}`  $BaSO_4 \downarrow$
- `\ch{ ^ }` → ↑ Zeichen für entweichendes Gas: `\ch{H2 ^}`  $H_2 \uparrow$

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

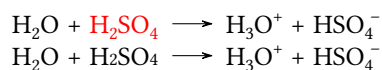
- `plus-space = <skip>` → Eine elastische Länge. Default = .3em plus .1em minus .1em

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

## 26.2. Optionen Input

Manchmal möchte man eine Option nur auf einen Teil einer, sagen wir, Reaktion anwenden. Natürlich können Sie `\ch` mehrmals verwenden.

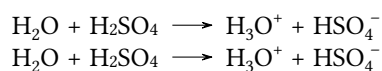
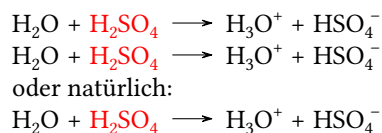
|   |  |
|---|--|
| 1 | <code>\ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-&gt; H3O+ + HSO4-} \</code>      |
| 2 | <code>\ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-&gt; H3O+ + HSO4-} \</code> |



Das unterbricht allerdings die Eingabe im Quelltext und *könnte* die Abstände beeinflussen. Deshalb gibt es eine Alternative:

- `\ch{ @<options> }` → Die angegebenen Optionen sind *nur* aktiv bis nach der *nächsten* Summenformel.

|   |  |
|---|--|
| 1 | <code>\ch{H2O +}\textcolor{red}{\ch{H2SO4}}\ch{-&gt; H3O+ + HSO4-} \</code>      |
| 2 | <code>\ch{H2O + @&lt;format=\color{red}&gt; H2SO4 -&gt; H3O+ + HSO4-} \</code>   |
| 3 | <code>oder nat\"urlich:\</code>  |
| 4 | <code>\ch{H2O + \textcolor{red}{\ch{H2SO4}} -&gt; H3O+ + HSO4-}\[1em]</code>     |
| 5 | <code>\ch{H2O +}\ch[subscript-vshift=2pt]{H2SO4}\ch{-&gt; H3O+ + HSO4-} \</code> |
| 6 | <code>\ch{H2O + @&lt;subscript-vshift=2pt&gt; H2SO4 -&gt; H3O+ + HSO4-}</code>   |



Das ist ein experimentelles Feature und mag in zukünftigen Versionen fallen gelassen werden.

## 27. Geschützter Input

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

### 27.1. Text

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

► `\ch{ "<escaped text>" }`

► `\ch{ '<escaped text>' }`

```

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

II
CaO
...Na + ...Cl2 → ...NaCl
A -> B

```

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

## 27.2. Mathematik

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

► `\ch{ $<escaped math>$ }`

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

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

► `math-space = <skip>` → Eine elastische Länge. Default = .1667em plus .0333em minus .0117em

|  |  |
|--|--|
| 1 <code>\ch{\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -&gt; \$2n\$ NaCl} \\</code> | $2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$ |
| 2 <code>\chemsetup[chemformula]{math-space=.25em}</code>       | $2n\text{Na} + n\text{Cl}_2 \longrightarrow 2n\text{NaCl}$ |
| 3 <code>\ch{\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -&gt; \$2n\$ NaCl} \\</code> | $A- > B$   |
| 4 <code>\ch{\$A-&gt;B\$}</code>                                |  |

## 28. Pfeile

### 28.1. Pfeiltypen

Pfeile werden auf die gleiche intuitive Weise eingegeben wie bei `mhchem`. Es gibt eine Reihe verschiedener Typen:

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

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

► `\ch{ -/> } → ⇝` reagiert nicht (rechts)



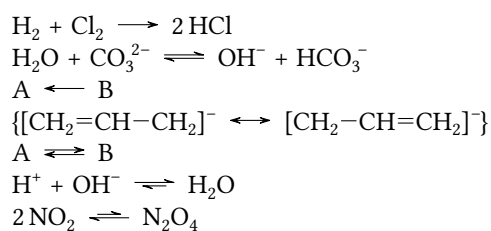
- `\ch{ </- }` →  $\leftarrow$  reagiert nicht (links)
- `\ch{ <-> }` →  $\longleftrightarrow$  Mesomerie-Pfeil
- `\ch{ <> }` →  $\rightleftharpoons$  Reaktion in beide Richtungen
- `\ch{ == }` →  $=$  stöchiometrische Gleichung
- `\ch{ <=> }` →  $\rightleftharpoons$  Gleichgewichts-Pfeil
- `\ch{ <=>> }` →  $\rightleftharpoons$  Gleichgewicht liegt rechts
- `\ch{ <=>< }` →  $\rightleftharpoons$  Gleichgewicht liegt links
- `\ch{ <0> }` →  $\longleftrightarrow$  Isolobal-Pfeil

Diese Pfeile werden alle mit **TikZ** gezeichnet.

```

1 \ch{H2 + Cl2 -> 2 HCl} \\
2 \ch{H2O + CO3^2- <=> OH- + HCO3-} \\
3 \ch{A <- B} \\
4 \ch{\{ [CH2=CH-CH2] - <-> [CH2-CH=CH2] - \}} \\
5 \ch{A <> B} \\
6 \ch{H+ + OH- <=>> H2O} \\
7 \ch{2 NO2 <=>< N2O4}

```



## 28.2. Beschriftung

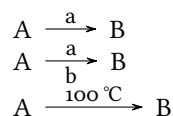
Die Pfeile haben zwei optionale Argumente für Beschriftungen.

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

```

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

```

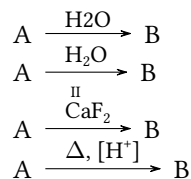


Der Beschriftungstext kann unabhängig vom Pfeil verarbeitet werden. Das Rezept ist einfach: verwenden Sie Leerzeichen.

```

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

```

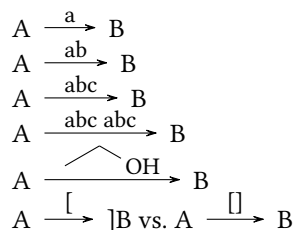


Mit den Leerzeichen verarbeitet `CHEMFORMULA` den Teil zwischen den Klammern als normalen Input. Die Pfeile lesen ihre Argumente erst *nach* der Verarbeitung. Wie Sie sehen können “wachsen” die Pfeile mit der Länge der Beschriftungen. Konstant bleibt der überstehende Teil. Im letzten Beispiel können Sie außerdem sehen, dass eckige Klammern in den Pfeilargumenten durch `\[` und `\]` erstellt werden sollten. Außerhalb von `\ch` behalten Sie natürlich ihre übliche Bedeutung. Diese Befehle sind nötig da die sonst übliche Methode (Verstecken der Klammern in geschweiften Klammern) aufgrund der Art, wie `\ch` sein Argument liest, nicht funktioniert.

```

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

```



### 28.3. Anpassung

Mit folgenden Optionen können Sie das Erscheinungsbild der Pfeile anpassen:

- ▶ **arrow-offset** = <dim> → Die Länge, die ein Pfeil links und rechts über die Beschriftung hinausragt. Die Länge eines leeren Pfeils beträgt zwei mal `arrow-offset`. Eine  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = .75em
- ▶ **arrow-yshift** = <dim> → Verschiebt einen Pfeil nach oben (positiver Wert) oder nach unten (negativer Wert). Eine  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = 0pt
- ▶ **arrow-ratio** = <factor> → Das Verhältnis der Pfeillängen der ver unbalancierten Gleichgewichtspfeile. .4 würde bedeuten, dass der kürzere Pfeil 0.4 mal so lang ist, wie der längere Pfeil. Default = .6
- ▶ **compound-sep** = <dim> → Der Leerraum zwischen Formeln und Pfeilen. Eine  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = .5em
- ▶ **label-offset** = <dim> → Der Leerraum zwischen Pfeilen und ihrer Beschriftung. Eine  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = 2pt

- **label-style** = <font command> → Die relative Schriftgröße der Beschriftung. Default = `\footnotesize`

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

```

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

```

Standard:  $A \xrightleftharpoons[y]{x} B$   
 länger:  $A \xrightleftharpoons[12pt]{x} B$   
 höher:  $A \xrightleftharpoons[2pt]{x} B$   
 ausbalancierter:  $A \xrightleftharpoons[.8]{x} B$   
 Bschriftung weiter weg:  $A \xrightleftharpoons[4pt]{x} B$   
 größerer Abstand zu Formeln:  $A \xrightleftharpoons[2ex]{x} B$   
 kleinere Beschriftungen:  $A \xrightleftharpoons[\tiny]{x} B$

## 28.4. Pfeiltypen bearbeiten

Die Pfeile wurden mit dem Befehl

- `\DeclareChemArrow{<tokens>}{<tikz>}`

definiert. {<tokens>} sind die Zeichen, die ersetzt werden mit dem tatsächlichen Pfeilcode. Der Hauptpfeil wurde z. B. via

```

1 \DeclareChemArrow{->}{\draw[-cf] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end) ;}

```

definiert. Wenn Sie selbst Pfeile definieren wollen, benötigen Sie grundlegende Kenntnisse von **TikZ**.<sup>35</sup>

Es gibt einige vordefinierte Koordinaten, die Sie verwenden können und sollten:

**(cf\_arrow\_start)** Der Pfeilanzfang.

**(cf\_arrow\_end)** Das Pfeilende.

**(cf\_arrow\_mid)** Die Pfeilmitte.

**(cf\_arrow\_mid\_start)** Der Anfang des kürzeren Pfeils in Typen wie  $\rightleftharpoons$ .

**(cf\_arrow\_mid\_end)** Das Ende des kürzeren Pfeils in Typen wie  $\rightleftharpoons$ .

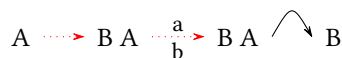
**cf, left cf, right cf** Für **CHEMFORMULA** definierte Pfeilspitzen.

<sup>35</sup> Bitte lesen Sie dazu das pgfmanual.

```

1 \DeclareChemArrow{.>}{\draw[-cf,dotted,red] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end);}
2 \DeclareChemArrow{n>}{\draw[-cf] (cf_arrow_start) .. controls ([yshift=3ex]cf_
   arrow_mid) .. (cf_arrow_end);}
3 \ch{A .> B} \ch{A .>[a][b] B} \ch{A n> B}

```



Wenn Sie einen existierenden Pfeil umdefinieren möchten, können Sie folgende zwei Befehle verwenden:

► `\RenewChemArrow{<tokens>}{<tikz>}`

► `\ShowChemArrow{<tokens>}`

Der zweite zeigt Ihnen die bestehende Definition, der erste definiert den bestehenden Pfeil neu.

```

1 \texttt{\ShowChemArrow{->}} \
2 \RenewChemArrow{->}{\draw[->,red] (cf_arrow_start) -- (cf_arrow_end) ;}
3 \texttt{\ShowChemArrow{->}} \
4 \ch{A -> B}

\draw [-cf](cf_arrow_start)–(cf_arrow_end);
\draw [->,red] (cf_arrow_start) – (cf_arrow_end) ;
A → B

```

## 29. Text unter Formeln

### 29.1. Syntax

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

► `\ch{ !( <name> ) ( <formula> ) }`

Wenn ein Ausrufezeichen von einem Paar von Klammern gefolgt wird, macht **CHEMFORMULA** folgendes:

|  |  |
|--|--|
| <pre>1 \ch{!(ethanol)( CH2CH2OH )}</pre> | $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ <p style="text-align: center;">ethanol</p> |
|--|--|

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

```

1 \ch{!(water)(H2O)} \quad
2 \ch{!( "\textcolor{blue}{water}" )( H2O )} \quad
3 \ch{!( $2n-1$ )( H2O )} \quad
4 \ch{!( H2O )( H2O )} \quad
5 \ch{!(oxonium)( H3O+ )}

```

### 30. Format und Schrift

|                           |                           |                            |                                      |  |
|---------------------------|---------------------------|----------------------------|--------------------------------------|--|
| H <sub>2</sub> O<br>water | H <sub>2</sub> O<br>water | H <sub>2</sub> O<br>2n - 1 | H <sub>2</sub> O<br>H <sub>2</sub> O | H <sub>3</sub> O <sup>+</sup><br>oxonium |
|---------------------------|---------------------------|----------------------------|--------------------------------------|--|

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

|   |                               |                      |
|---|-------------------------------|----------------------|
| 1 | <code>\ch{H2O~(!)} \\\</code> | H <sub>2</sub> O (!) |
| 2 | <code>\ch{A!{}} \\\</code>    | A!()                 |

#### 29.2. Anpassung

**CHEMFORMULA** stellt zwei Optionen bereit, um den Text anzupassen:

- **name-format** = <commands> → Das Ausgabeformat des Textes. Das kann beliebiger Input sein. Default = `\scriptsize\centering`
- **name-width** = <dim>|auto → Die Breite der Box, in die der Text geschrieben wird. auto erkennt die Breite der Beschriftung und setzt die Box auf diese Breite. Default = auto

```

1 \ch{!(S"aure)( H2SO4 ) -> B} \\\
2 \ch[name-format=sffamily\small]{!(S"aure)( H2SO4 ) -> B} \\\
3 \ch[name-format=\scriptsize N:~]{!(S"aure)( H2SO4 ) -> B} \\\
4 \ch[name-width=3em,name-format=\scriptsize\raggedright]{!(S"aure)( H2SO4 ) -> B}
  }

```

H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> → B  
 Säure  
 H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> → B  
 Säure  
 H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> → B  
 N: Säure  
 H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> → B  
 Säure

### 30. Format und Schrift

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

```

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

```

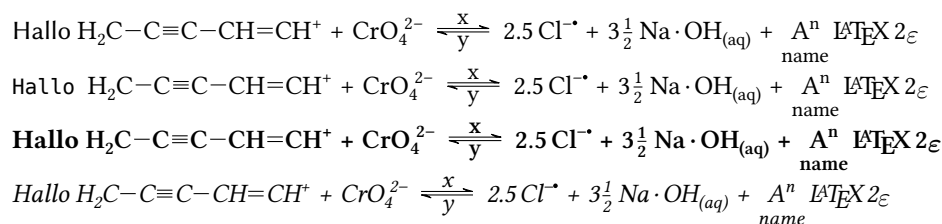
$$\text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}^+ + \text{CrO}_4^{2-} \xrightleftharpoons[\text{y}]{\text{x}} 2.5 \text{Cl}^{\cdot-} + 3\frac{1}{2} \text{Na}\cdot\text{OH}_{(\text{aq})} + \text{A}^n \text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}_{2\epsilon}$$

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

```

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

```



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

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

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

```

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

```

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

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

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

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

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

- **font-family** = <family> → Ändert die Schriftfamilie des Output mit: **\fontfamily{<family>}\selectfont**.
- **font-series** = <series> → Ändert die Schriftserie des Output mit: **\fontseries{<series>}\selectfont**.
- **font-shape** = <shape> → Ändert die Schriftform des Output mit: **\fontshape{<shape>}\selectfont**.

```

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

```

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

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

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

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

Wenn Sie  $\text{X}_{\text{E}}\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  oder  $\text{L}^{\text{A}}\text{U}^{\text{A}}\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  verwenden und das Paket `fontspec`<sup>36</sup> geladen haben, können Sie die Schrift von `CHEMFORMULA` auch damit ändern:

► `font-spec` = {<font>} oder mit Optionen

► `font-spec` = {[<options>]<font>}

```

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

```

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

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

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

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

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

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

## 31. Verwendung in Mathematik-Umgebungen

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

<sup>36</sup> CTAN: `fontspec`

```

1 \begin{align}
2 \quad \text{\texttt{\textbackslash ch}}{
3 \quad \text{H2O} \& \text{->[a] H2SO4} \\\
4 \quad \text{Cl2} \& \text{->[x][y] CH4}
5 \quad }
6 \end{align}
7 \begin{align*}
8 \quad \text{\texttt{\textbackslash ch}}{
9 \quad \text{RNO2} \quad \&\text{<=>[ + e- ] RNO2^{\text{--}}} \\\
10 \quad \text{RNO2^{\text{--}}} \&\text{<=>[ + e- ] RNO2^{2-}}
11 \quad }
12 \end{align*}

```

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

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

$$\text{RNO}_2 \rightleftharpoons^{+e^-} \text{RNO}_2^{\text{--}}$$

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

## 32. Weitere Beispiele

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

```

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

```

$$n \text{ CO} + (2n + 1) \text{ H}_2 \xrightarrow[\text{[CoNi]}]{200^\circ\text{C}} \text{C}_n\text{H}_{2n+2} + n \text{ H}_2\text{O} \quad \{12\}$$

Synthesegas

```

1 \begin{reactions*}
2 "a)" && \text{CH4} + \text{Cl2} &\text{->} \text{CH3Cl} + \text{HCl} && "\text{\texttt{\textbackslash small} Chlormethan/Methylchlorid}"
3 \\\
4 "b)" && \text{CH3Cl} + \text{Cl2} &\text{->} \text{CH2Cl2} + \text{HCl} && "\text{\texttt{\textbackslash small} Dichlormethan/Methylenchlorid}"
5 \\\
6 "c)" && \text{CH2Cl2} + \text{Cl2} &\text{->} \text{CHCl3} + \text{HCl} && "\text{\texttt{\textbackslash small} Trichlormethan/Chloroform}"
7 \\\
8 "d)" && \text{CHCl3} + \text{Cl2} &\text{->} \text{CCl4} + \text{HCl} && "\text{\texttt{\textbackslash small} Tetrachlormethan/Tetrachlorkohlenstoff}"
9 \end{reactions*}

```

|    |  |  |
|----|--|--|
| a) | CH <sub>4</sub> + Cl <sub>2</sub> → CH <sub>3</sub> Cl + HCl                 | Chlormethan/Methylchlorid              |
| b) | CH <sub>3</sub> Cl + Cl <sub>2</sub> → CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> + HCl | Dichlormethan/Methylenchlorid          |
| c) | CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> + Cl <sub>2</sub> → CHCl <sub>3</sub> + HCl  | Trichlormethan/Chloroform              |
| d) | CHCl <sub>3</sub> + Cl <sub>2</sub> → CCl <sub>4</sub> + HCl                 | Tetrachlormethan/Tetrachlorkohlenstoff |

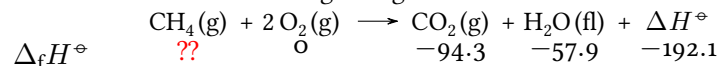
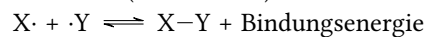
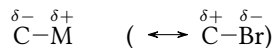


### 32. Weitere Beispiele

```

1 \chemsetup[ox]{parse=false}\ch{"\ox{\delm,C}" -{\ "ox{\delp,M}" \quad ( <-> "\
ox{\delp,C}" -{\ "ox{\delm,Br}" )} \
2 \ch[adduct-space=0pt]{X. + .Y <=> X-Y + Bindungsenergie} \
3 \ch[name-format=\normalsize]{!(\State{H}{f})\quad)!(\textcolor{red}{??})( CH
4 gas{ } ) + !(\num{0})( 2 02\gas{ } )> !(\num{-94.3})( C02\gas{ } ) + !(\num
5 -57.9)( H20\ldq{ } ) + !(\num{-192.1})( "\State{H}{ } )}

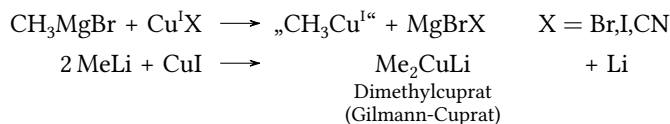
```



```

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

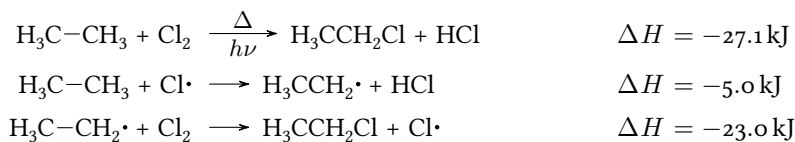
```



```

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

```



Das folgende Beispiel zeigt, wie das kürzen von Formeln erreicht werden kann.<sup>37</sup>

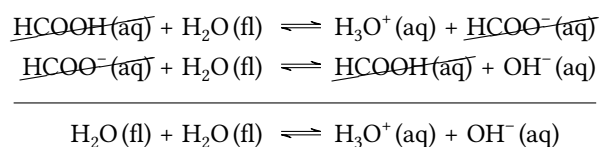
---

<sup>37</sup> Inspiriert durch eine Frage auf TeX.SE: <http://tex.stackexchange.com/q/30118/5049>

```

1 % needs 'cancel'
2 \begin{align*}
3   \centering
4   \ch{\cancel{HCOOH}\aq} + H2O\lqd{} &\rightleftharpoons H3O^+\aq{} + \cancel{HCOO^-\aq{}} \\
5   \ch{\cancel{HCOO^-\aq{}} + H2O\lqd{}} &\rightleftharpoons \cancel{HCOOH\aq{}} + OH^-\aq{} \\
6   \cline{1-2}
7   \ch{H2O\lqd{}} + H2O\lqd{} &\rightleftharpoons H3O^+\aq{} + OH^-\aq{}
8 \end{align*}

```



## Teil IV.

# ghsystem

### 33. Setup

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

- `\chemsetup[ghsystem]{<options>}` oder
- `\chemsetup{ghsystem/<option1>,ghsystem/<option2>}`

eingestellt werden. Sie können den entsprechenden Befehlen auch lokal als optionales Argument mitgegeben werden.

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

#### 34.1. Einfacher Aufruf

Der prinzipielle Aufruf ist einfach:

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

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

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

|   |                                |   |
|---|--------------------------------|---|
| 1 | <code>\ghs{h}{200} \\</code>   | H200: Unstable explosives.  |
| 2 | <code>\ghs{H}{224} \\</code>   | H224: Extremely flammable liquid and vapour.  |
| 3 | <code>\ghs{euh}{001} \\</code> | EUH001: Explosive when dry.   |
| 4 | <code>\ghs{Euh}{202} \\</code> | EUH202: Cyanoacrylate. Danger. Bonds skin and eyes in seconds. Keep out of the reach of children. |
| 5 | <code>\ghs{p}{201}</code>      | P201: Obtain special instructions before use.   |

Die gesternte Version versteckt die Nummer und liefert nur den Satz. Wenn Sie den Satz verstecken und nur die Nummer ausgeben wollen, können Sie diese Option verwenden:

► `hide = true|false`

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

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

|   |   |                             |
|---|---|-----------------------------|
| 1 | <code>\ghs{h}{200} \\</code>            | H200: Unstable explosives.  |
| 2 | <code>\ghs[space=\\,]{h}{200} \\</code> | H 200: Unstable explosives. |
| 3 | <code>\ghs*{h}{200} \\</code>           | Unstable explosives.        |
| 4 | <code>\ghs[hide]{h}{200}</code>         | H200                        |

#### 34.2. Sätze mit Platzhaltern

Einige Sätze verwenden Platzhalter. Es gibt vier Stück:

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

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

► `fill-in = true|false → Default = false`

können sie sichtbar gemacht werden.

|   |                                       |
|---|---------------------------------------|
| 1 | <code>\ghs{h}{340} \\</code>          |
| 2 | <code>\ghs[fill-in]{h}{340} \\</code> |
| 3 | <code>\ghs{h}{360} \\</code>          |
| 4 | <code>\ghs[fill-in]{h}{360} \\</code> |
| 5 | <code>\ghs{h}{370} \\</code>          |
| 6 | <code>\ghs[fill-in]{h}{370} \\</code> |
| 7 | <code>\ghs{euh}{208} \\</code>        |
| 8 | <code>\ghs[fill-in]{euh}{208}</code>  |

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

H340: May cause genetic defects.  
H340: May cause genetic defects. <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard>  
H360: May damage fertility or the unborn child.  
H360: May damage fertility or the unborn child. <state specific effect if known> <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard>  
H370: Causes damage to organs.  
H370: Causes damage to organs <or state all organs affected, if known>. <state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard>  
EUH208: Contains <name of sensitising substance>. May produce an allergic reaction.  
EUH208: Contains <name of sensitising substance>. May produce an allergic reaction.

Mit folgenden Optionen können die Platzhalter ersetzt werden:

- **exposure** = <text> → Expositions-Platzhalter
- **effect** = <text> → Effekt-Platzhalter
- **organs** = <text> → Organ-Platzhalter
- **substance** = <text> → Substanz-Platzhalter

```
1 \ghs[exposure=So werden Sie der Gefahr ausgesetzt.]{h}{340} \\  
2 \ghs[effect=Das sind die Effekte]{h}{360} \\  
3 \ghs[organs=dieses Organ]{h}{370} \\  
4 \ghs[substance=Substanz]{euh}{208}
```

H340: May cause genetic defects. So werden Sie der Gefahr ausgesetzt.  
H360: May damage fertility or the unborn child. Das sind die Effekte  
H370: Causes damage dieses Organ.  
EUH208: Contains Substanz. May produce an allergic reaction.

#### 34.3. Sätze mit Lücken

Manche Sätze haben Lücken:

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

P301: IF SWALLOWED:  
P401: Store ...  
P411: Store at temperatures not exceeding °C/°F.  
P413: Store bulk masses greater than kg/lbs at temperatures not exceeding °C/°F.

Mit den folgenden Optionen können diese Lücken gefüllt werden:

- **text** = <text> → Füllt “unsichtbare Lücke”, die einem Doppelpunkt folgt.
- **dots** = <text> → Füllt Lücke, die durch “...” angezeigt wird.
- **C-temperature** = <num> → Füllt Celsius-Temperatur.
- **F-temperature** = <num> → Füllt Fahrenheit-temperatur.
- **kg-mass** = <num> → Füllt Kilogramm-Masse.

► **lbs-mass** = <num> → Füllt Pfund-Masse.

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

P301: IF SWALLOWED: Arzt kontaktieren!

P401: Store hier

P411: Store at temperatures not exceeding 50 °C/122 °F.

P413: Store bulk masses greater than 5.0 kg/11 lbs at temperatures not exceeding 50 °C/122 °F.

### 34.4. Kombinierte Sätze

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

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

P235 + P410: Keep cool. Protect from sunlight.

P301 + P330 + P331: IF SWALLOWED: rinse mouth. Do NOT induce vomiting.

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

## 35. Piktogramme

### 35.1. Die Bilder

Das GHS beinhaltet einige Piktogramme:



Der Befehl

► **\ghspic**[<options>]{<name>}

lädt sie. Tabelle 4 zeigt alle Piktogramme und ihre Dateinamen. Genauer: sie zeigt die Namen, die beim Befehl **\ghspic** verwendet werden müssen. Tatsächlich heißen sie ghsystem\_<name>.<filetype>, wobei <filetype> entweder eps, pdf, jpg oder png ist, siehe auch Abschnitt 35.2.

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



Wenn Ihnen die Defaultgröße nicht gefällt, können Sie die Option

► **scale** = <factor> → Skaliert das Piktogramm. Default = 1

verwenden. Tatsächlich sind die Bilder recht groß. Die Voreinstellung (Faktor = 1) skaliert die Bilder auf ein Zwanzigstel ihrer echten Größe.

```
1 \ghspic[scale=2]{skull}
```



Wenn Sie spezielle `\includegraphics`-Optionen verwenden wollen, z. B. das Piktogramm rotieren, verwenden Sie diese Option:

► `\includegraphics = {<includegraphics keyvals>}`

```
1 \ghspic[includegraphics={angle=90}]{skull}
```



Tabelle 4: Alle verfügbaren GHS Piktogramme.

| Name          | Piktogramm | Name            | Piktogramm |
|---------------|------------|-----------------|------------|
| explos        |            | explos-1        |            |
| explos-2      |            | explos-3        |            |
| explos-4      |            | explos-5        |            |
| explos-6      |            |                 |            |
| flame         |            | flame-2-white   |            |
| flame-2-black |            | flame-3-white   |            |
| flame-3-black |            | flame-4-1       |            |
| flame-4-2     |            | flame-4-3-white |            |

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

### 35.2. Der Bildtyp hängt von der Engine ab

Sie wissen vermutlich, dass Sie nicht jeden Bildtyp mit jeder Compiler-Engine verwenden können. pdfTeX im DVI-Modus verlangt eps-Dateien, während pdfTeX im PDF-Modus, XeTeX und LuaTeX eps-Dateien in pdf-Dateien konvertieren, vorausgesetzt, der Anwender hat Schreibrechte in dem Verzeichnis, in dem die Bilder gespeichert sind.

Die letztgenannten können jedoch jpg- und png-Dateien ohne Schwierigkeiten einbinden, während pdfTeX im DVI-Modus das nicht kann.

Um das Problem zu lösen, testet `GHSYSTEM`, welche Engine verwendet wird und falls es pdfTeX ist, in welchem Modus es verwendet wird. Dann wird entweder das eps- oder das png-Bild für die

Piktogramme verwendet. Sie können den Bildtyp über die Option

► `pic-type = eps|pdf|jpg|png`

jedoch frei wählen.

## 36. Verfügbare Sprachen

Bis jetzt sind die H- und P-Sätze nur auf deutsch, englisch und italienisch verfügbar. Das Paket reagiert auf die `CHEMMACROS` Option `german`, erkennt aber die Spracheinstellung von `babel`<sup>38</sup> oder `polyglossia`<sup>39</sup> (noch) nicht.

Sie können die Sprache auch explizit wählen.

► `language = english|german|italian`

|   |   |   |
|---|---|---|
| 1 | <code>\ghs{h}{201}</code>                           | H201: Explosive; mass explosion hazard. |
| 2 |   |   |
| 3 | <code>\chemsetup[ghsystem]{language=english}</code> | H201: Explosive; mass explosion hazard. |
| 4 | <code>\ghs{h}{201}</code>                           |   |

Ich werde in irgendwann in der Zukunft weitere Sprachen implementieren. Das kann aber eine Weile dauern. Wenn Sie gerne zu `GHSYSTEM` beisteuern möchten und die Sätze in einer anderen Sprache tippen wollen, kontaktieren Sie mich<sup>40</sup> gerne. Ich stelle Ihnen dann eine Template-Datei, ein PDF mit den offiziellen Übersetzungen sowie jede weitere Hilfe, die sie benötigen.

## 37. Liste aller Sätze

Wenn Sie gerne alle Sätze auflisten wollen, können Sie

► `\ghslistall[<options>]`

verwenden.

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

- `table-head-number = <text> → Default = Nummer`
- `table-head-text = <text> → Default = Satz`
- `table-next-page = <text> → Default = weiter auf der nächsten Seite`
- `table-caption = <text> → <text> in \caption{<text>}. Default = All H, EUH, and P Statements.`
- `table-caption-short = <text> → <short> in \caption[<short>]{<text>}.`
- `table-label = <text> → Das Label, mit dem man auf die Tabelle \ref und ähnlichen Befehlen verweisen kann. Default = tab:ghs-hp-statements`

<sup>38</sup> CTAN: `babel`   <sup>39</sup> CTAN: `polyglossia`   <sup>40</sup> [contact@mychemistry.eu](mailto:contact@mychemistry.eu)



- `table-row-sep` = <dim> → Abstand zwischen den Zeilen. Eine  $\text{\TeX}$ -Länge. Default = 3pt
- `table-rules` = `default`|`booktabs`|`none` → Der Stil der horizontalen Linien in der Tabelle. `default` verwendet `\hline`, `booktabs` verwendet `\toprule`, `\midrule` und `\bottomrule`. Dieser Wert benötigt das `booktabs`<sup>41</sup> Paket, dass Sie dann einbinden müssen. Default = `default`
- `table-top-head-rule` = `default`|`booktabs`|`none` → Explizites Ändern der Linie. Default = `default`
- `table-head-rule` = `default`|`booktabs`|`none` → Explizites Ändern der Linie. Default = `default`
- `table-foot-rule` = `default`|`booktabs`|`none` → Explizites Ändern der Linie. Default = `default`
- `table-last-foot-rule` = `default`|`booktabs`|`none` → Explizites Ändern der Linie. Default = `default`

Der folgende Code zeigt, wie Tabelle 5 erzeugt wurde:

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

Tabelle 5: All H, EUH, and P Statements.

| Identifier | Statement                                     |
|------------|---|
| H200       | Unstable explosives.                          |
| H201       | Explosive; mass explosion hazard.             |
| H202       | Explosive, severe projection hazard.          |
| H203       | Explosive; fire, blast or projection hazard.  |
| H204       | Fire or projection hazard.                    |
| H205       | May mass explode in fire.                     |
| H220       | Extremely flammable gas.                      |
| H221       | Flammable gas.                                |
| H222       | Extremely flammable aerosol.                  |
| H223       | Flammable aerosol.                            |
| H224       | Extremely flammable liquid and vapour.        |
| H225       | Highly flammable liquid and vapour.           |
| H226       | Flammable liquid and vapour.                  |
| H228       | Flammable solid.                              |
| H240       | Heating may cause an explosion.               |
| H241       | Heating may cause a fire or explosion.        |
| H242       | Heating may cause a fire.                     |
| H250       | Catches fire spontaneously if exposed to air. |
| H251       | Self-heating; may catch fire.                 |

<sup>41</sup> CTAN: `booktabs`

*continues on next page*

| Identifier | Statement   |
|------------|---|
| H252       | Self-heating in large quantities; may catch fire.   |
| H260       | In contact with water releases flammable gases which may ignite spontaneously.  |
| H261       | In contact with water releases flammable gases.   |
| H270       | May cause or intensify fire; oxidiser.  |
| H271       | May cause fire or explosion; strong oxidiser.   |
| H272       | May intensify fire; oxidiser.   |
| H280       | Contains gas under pressure; may explode if heated.   |
| H281       | Contains refrigerated gas; may cause cryogenic burns or injury.   |
| H290       | May be corrosive to metals.   |
| H300       | Fatal if swallowed.   |
| H301       | Toxic if swallowed.   |
| H302       | Harmful if swallowed.   |
| H304       | May be fatal if swallowed and enters airways.   |
| H310       | Fatal in contact with skin.   |
| H311       | Toxic in contact with skin.   |
| H312       | Harmful in contact with skin.   |
| H314       | Causes severe skin burns and eye damage.  |
| H315       | Causes skin irritation.   |
| H317       | May cause an allergic skin reaction.  |
| H318       | Causes serious eye damage.  |
| H319       | Causes serious eye irritation.  |
| H330       | Fatal if inhaled.   |
| H331       | Toxic if inhaled.   |
| H332       | Harmful if inhaled.   |
| H334       | May cause allergy or asthma symptoms or breathing difficulties if inhaled.  |
| H335       | May cause respiratory irritation.   |
| H336       | May cause drowsiness or dizziness.  |
| H340       | May cause genetic defects. <i>&lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i>            |
| H341       | Suspected of causing genetic defects. <i>&lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i> |
| H350       | May cause cancer. <i>&lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i>                     |

*continues on next page*

| Identifier | Statement  |
|------------|--|
| H351       | Suspected of causing cancer. <i>&lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i>   |
| H360       | May damage fertility or the unborn child. <i>&lt;state specific effect if known&gt; &lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i>   |
| H361       | Suspected of damaging fertility or the unborn child. <i>&lt;state specific effect if known&gt; &lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i>                              |
| H362       | May cause harm to breast-fed children.   |
| H370       | Causes damage to organs <i>&lt;or state all organs affected, if known&gt;</i> . <i>&lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i>  |
| H371       | May cause damage to organs <i>&lt;or state all organs affected, if known&gt;</i> . <i>&lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i>                                       |
| H372       | Causes damage to organs <i>&lt;or state all organs affected, if known&gt;</i> through prolonged or repeated exposure. <i>&lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i>    |
| H373       | May cause damage to organs <i>&lt;or state all organs affected, if known&gt;</i> through prolonged or repeated exposure. <i>&lt;state route of exposure if it is conclusively proven that no other routes of exposure cause the hazard&gt;</i> |
| H400       | Very toxic to aquatic life.  |
| H410       | Very toxic to aquatic life with long lasting effects.  |
| H411       | Toxic to aquatic life with long lasting effects.   |
| H412       | Harmful to aquatic life with long lasting effects.   |
| H413       | May cause long lasting harmful effects to aquatic life.  |
| H350i      | May cause cancer by inhalation.  |
| H360F      | May damage fertility.  |
| H360D      | May damage the unborn child.   |
| H361f      | Suspected of damaging fertility.   |
| H361d      | Suspected of damaging the unborn child.  |
| H360FD     | May damage fertility. May damage the unborn child.   |
| H361fd     | Suspected of damaging fertility. Suspected of damaging the unborn child.   |
| H360Fd     | May damage fertility. Suspected of damaging the unborn child.  |
| H360Df     | May damage the unborn child. Suspected of damaging fertility.  |

*continues on next page*

| Identifier | Statement  |
|------------|--|
| EUH001     | Explosive when dry.  |
| EUH006     | Explosive with or without contact with air.  |
| EUH014     | Reacts violently with water.   |
| EUH018     | In use may form flammable/explosive vapour-air mixture.  |
| EUH019     | May form explosive peroxides.  |
| EUH044     | Risk of explosion if heated under confinement.   |
| EUH029     | Contact with water liberates toxic gas.  |
| EUH031     | Contact with acids liberates toxic gas.  |
| EUH032     | Contact with acids liberates very toxic gas.   |
| EUH066     | Repeated exposure may cause skin dryness or cracking.  |
| EUH070     | Toxic by eye contact.  |
| EUH071     | Corrosive to the respiratory tract.  |
| EUH059     | Hazardous to the ozone layer.  |
| EUH201     | Contains lead. Should not be used on surfaces liable to be chewed or sucked by children.   |
| EUH201A    | Warning! contains lead.  |
| EUH202     | Cyanoacrylate. Danger. Bonds skin and eyes in seconds. Keep out of the reach of children.  |
| EUH203     | Contains chromium(VI). May produce an allergic reaction.   |
| EUH204     | Contains isocyanates. May produce an allergic reaction.  |
| EUH205     | Contains epoxy constituents. May produce an allergic reaction.   |
| EUH206     | Warning! Do not use together with other products. May release dangerous gases (chlorine).  |
| EUH207     | Warning! Contains cadmium. Dangerous fumes are formed during use. See information supplied by the manufacturer. Comply with the safety instructions. |
| EUH208     | Contains <name of sensitising substance>. May produce an allergic reaction.  |
| EUH209     | Can become highly flammable in use.  |
| EUH209A    | Can become flammable in use.   |
| EUH210     | Safety data sheet available on request.  |
| EUH401     | To avoid risks to human health and the environment, comply with the instructions for use.  |
| P101       | If medical advice is needed, have product container or label at hand.  |
| P102       | Keep out of reach of children.   |
| P103       | Read label before use.   |
| P201       | Obtain special instructions before use.  |

*continues on next page*

| Identifier | Statement  |
|------------|--|
| P202       | Do not handle until all safety precautions have been read and understood.                            |
| P210       | Keep away from heat/sparks/open flames/hot surfaces. — No smoking.                                   |
| P211       | Do not spray on an open flame or other ignition source.  |
| P220       | Keep/Store away from clothing/.../combustible materials.   |
| P221       | Take any precaution to avoid mixing with combustibles ...  |
| P222       | Do not allow contact with air.   |
| P223       | Keep away from any possible contact with water, because of violent reaction and possible flash fire. |
| P230       | Keep wetted with ...   |
| P231       | Handle under inert gas.  |
| P232       | Protect from moisture.   |
| P233       | Keep container tightly closed.   |
| P234       | Keep only in original container.   |
| P235       | Keep cool.   |
| P240       | Ground/bond container and receiving equipment.   |
| P241       | Use explosion-proof electrical/ventilating/lighting/... equipment.                                   |
| P242       | Use only non-sparking tools.   |
| P243       | Take precautionary measures against static discharge.  |
| P244       | Keep reduction valves free from grease and oil.  |
| P250       | Do not subject to grinding/shock/.../friction.   |
| P251       | Pressurized container: Do not pierce or burn, even after use.  |
| P260       | Do not breathe dust/fume/gas/mist/vapours/spray.   |
| P261       | Avoid breathing dust/fume/gas/mist/vapours/spray.  |
| P262       | Do not get in eyes, on skin, or on clothing.   |
| P263       | Avoid contact during pregnancy/while nursing.  |
| P264       | Wash ... thoroughly after handling.  |
| P270       | Do not eat, drink or smoke when using this product.  |
| P271       | Use only outdoors or in a well-ventilated area.  |
| P272       | Contaminated work clothing should not be allowed out of the workplace.                               |
| P273       | Avoid release to the environment.  |
| P280       | Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection.                           |
| P281       | Use personal protective equipment as required.   |

*continues on next page*

| Identifier  | Statement  |
|-------------|--|
| P282        | Wear cold insulating gloves/face shield/eye protection.                              |
| P283        | Wear fire/flame resistant/retardant clothing.  |
| P284        | Wear respiratory protection.   |
| P285        | In case of inadequate ventilation wear respiratory protection.                       |
| P231 + P231 | Handle under inert gas. Protect from moisture.                                       |
| P235 + P410 | Keep cool. Protect from sunlight.  |
| P301        | IF SWALLOWED:  |
| P302        | IF ON SKIN:  |
| P303        | IF ON SKIN (or hair):  |
| P304        | IF INHALED:  |
| P305        | IF IN EYES:  |
| P306        | IF ON CLOTHING:  |
| P307        | IF exposed:  |
| P308        | IF exposed or concerned:   |
| P309        | IF exposed or if you feel unwell:  |
| P310        | Immediately call a POISON CENTER or doctor/physician.                                |
| P311        | Call a POISON CENTER or doctor/physician.  |
| P312        | Call a POISON CENTER or doctor/physician if you feel unwell.                         |
| P313        | Get medical advice/attention.  |
| P314        | Get medical advice/attention if you feel unwell.                                     |
| P315        | Get immediate medical advice/attention.  |
| P320        | Specific treatment is urgent (see ... on this label).                                |
| P321        | Specific treatment (see ... on this label).  |
| P322        | Specific measures (see ... on this label).   |
| P330        | Rinse mouth.   |
| P331        | Do NOT induce vomiting.  |
| P332        | If skin irritation occurs:   |
| P333        | If skin irritation or rash occurs:   |
| P334        | Immerse in cool water/wrap in wet bandages.  |
| P335        | Brush off loose particles from skin.   |
| P336        | Thaw frosted parts with lukewarm water. Do not rub affected area.                    |
| P337        | If eye irritation persists:  |
| P338        | Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing.                  |
| P340        | Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing. |

*continues on next page*

| Identifier         | Statement   |
|--------------------|---|
| P341               | If breathing is difficult, remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing. |
| P342               | If experiencing respiratory symptoms:   |
| P350               | Gently wash with plenty of soap and water.  |
| P351               | Rinse cautiously with water for several minutes.  |
| P352               | Wash with plenty of soap and water.   |
| P353               | Rinse skin with water/shower.   |
| P360               | Rinse immediately contaminated clothing and skin with plenty of water before removing clothes.                  |
| P361               | Remove/Take off immediately all contaminated clothing.  |
| P362               | Take off contaminated clothing and wash before reuse.   |
| P363               | Wash contaminated clothing before reuse.  |
| P370               | In case of fire:  |
| P371               | In case of major fire and large quantities:   |
| P372               | Explosion risk in case of fire.   |
| P373               | DO NOT fight fire when fire reaches explosives.   |
| P374               | Fight fire with normal precautions from a reasonable distance.  |
| P375               | Fight fire remotely due to the risk of explosion.   |
| P376               | Stop leak if safe to do so.   |
| P377               | Leaking gas fire: Do not extinguish, unless leak can be stopped safely.   |
| P378               | Use ... for extinction.   |
| P380               | Evacuate area.  |
| P381               | Eliminate all ignition sources if safe to do so.  |
| P390               | Absorb spillage to prevent material damage.   |
| P391               | Collect spillage.   |
| P301 + P310        | IF SWALLOWED: Immediately call a POISON CENTER or doctor/physician.   |
| P301 + P312        | IF SWALLOWED: Call a POISON CENTER or doctor/physician if you feel unwell.                                      |
| P301 + P330 + P331 | IF SWALLOWED: rinse mouth. Do NOT induce vomiting.  |
| P302 + P334        | IF ON SKIN: Immerse in cool water/wrap in wet bandages.   |
| P302 + P350        | IF ON SKIN: Gently wash with plenty of soap and water.  |
| P302 + P352        | IF ON SKIN: Wash with plenty of soap and water.   |
| P303 + P361 + P353 | IF ON SKIN (or hair): Remove/Take off immediately all contaminated clothing. Rinse skin with water/shower.      |

*continues on next page*

| Identifier         | Statement  |
|--------------------|--|
| P304 + P340        | IF INHALED: Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing.                                 |
| P304 + P341        | IF INHALED: If breathing is difficult, remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing.      |
| P305 + P351 + P338 | IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing. |
| P306 + P360        | IF ON CLOTHING: Rinse immediately contaminated clothing and skin with plenty of water before removing clothes.                   |
| P307 + P311        | IF exposed: Call a POISON CENTER or doctor/physician.  |
| P308 + P313        | IF exposed or concerned: Get medical advice/attention.   |
| P309 + P311        | IF exposed or if you feel unwell: Call a POISON CENTER or doctor/physician.  |
| P332 + P313        | If skin irritation occurs: Get medical advice/attention.   |
| P333 + P313        | If skin irritation or rash occurs: Get medical advice/attention.   |
| P335 + P334        | Brush off loose particles from skin. Immerse in cool water/wrap in wet bandages.   |
| P337 + P313        | If eye irritation persists: Get medical advice/attention.  |
| P342 + P311        | If experiencing respiratory symptoms: Call a POISON CENTER or doctor/physician.  |
| P370 + P376        | In case of fire: Stop leak if safe to do so.   |
| P370 + P378        | In case of fire: Use ... for extinction.   |
| P370 + P380        | In case of fire: Evacuate area.  |
| P370 + P380 + P375 | In case of fire: Evacuate area. Fight fire remotely due to the risk of explosion.  |
| P371 + P380 + P375 | In case of major fire and large quantities: Evacuate area. Fight fire remotely due to the risk of explosion.                     |
| P401               | Store ...  |
| P402               | Store in a dry place.  |
| P403               | Store in a well-ventilated place.  |
| P404               | Store in a closed container.   |
| P405               | Store locked up.   |
| P406               | Store in corrosive resistant/... container with a resistant inner liner.   |
| P407               | Maintain air gap between stacks/pallets.   |
| P410               | Protect from sunlight.   |
| P411               | Store at temperatures not exceeding °C/°F.   |
| P412               | Store at temperatures not exceeding 50 °C/122 °F.  |

*continues on next page*



| Identifier  | Statement  |
|-------------|--|
| P413        | Store bulk masses greater than kg/lbs at temperatures not exceeding °C/°F.   |
| P420        | Store away from other materials.   |
| P422        | Store contents under ...   |
| P402 + P404 | Store in a dry place. Store in a closed container.                           |
| P403 + P233 | Store in a well-ventilated place. Keep container tightly closed.             |
| P403 + P235 | Store in a well-ventilated place. Keep cool.                                 |
| P410 + P403 | Protect from sunlight. Store in a well-ventilated place.                     |
| P410 + P412 | Protect from sunlight. Do not expose to temperatures exceeding 50 °C/122 °F. |
| P411 + P235 | Store at temperatures not exceeding °C/°F . Keep cool.                       |
| P501        | Dispose of contents/container to ...   |

## Teil V.

# Anhang

## Übersicht über die Optionen und Anpassungsmöglichkeiten

### Optionen

In der folgenden Tabelle werden alle Optionen aufgelistet, die **CHEMMACROS** bietet. Alle Optionen, die einem Modul angehören, können mit

- `\chemsetup[<module>]{<options>}` oder
- `\chemsetup{<module>/<options>}` gesetzt werden.

Manche Optionen können ohne Wert verwendet werden. Dann wird der unterstrichene Wert verwendet. Die Optionen der Module **chemformula** und **ghssystem** werden hier nicht extra aufgelistet.

| Option            | Modul         | Werte                    | Default |         |
|-------------------|---------------|--------------------------|---------|---------|
| Paketoptionen:    |               |                          |         |         |
| <b>bpchem</b>     | <b>option</b> | <u>true</u>  false       | false   | Seite 6 |
| <b>circled</b>    | <b>option</b> | formal  <u>all</u>  none | formal  | Seite 6 |
| <b>circletype</b> | <b>option</b> | chem math                | chem    | Seite 6 |
| <b>cmversion</b>  | <b>option</b> | 1 2 bundle               | bundle  | Seite 6 |
| <b>ghssystem</b>  | <b>option</b> | <u>true</u>  false       | true    | Seite 6 |
| <b>iupac</b>      | <b>option</b> | auto restricted strict   | auto    | Seite 6 |
| <b>language</b>   | <b>option</b> | <language>               | english | Seite 6 |

Übersicht über die Optionen und Anpassungsmöglichkeiten

| Option   | Modul     | Werte                   | Default        |          |
|--|-----------|-------------------------|----------------|----------|
| method   | option    | chemformula mhchem      | chemformula    | Seite 6  |
| Nu   | option    | chemmacros mathspec     | chemmacros     | Seite 6  |
| strict   | option    | true false              | false          | Seite 6  |
| synchronize                                    | option    | true false              | false          | Seite 6  |
| greek  | option    | math textgreek upgreek  | upgreek        | Seite 6  |
| xspace   | option    | true false              | true           | Seite 7  |
| \ba, \Nu:                                      |           |                         |                |          |
| elpair   | particle  | dots dash/false         | false          | Seite 10 |
| IUPAC-Befehle:                                 |           |                         |                |          |
| break-space                                    | iupac     | <dim>                   | .01em          | Seite 13 |
| bridge-number                                  | iupac     | sub super               | sub            | Seite 16 |
| cip-kern                                       | iupac     | <dim>                   | .075em         | Seite 14 |
| coord-use-hyphen                               | iupac     | true false              | true           | Seite 16 |
| hyphen-pre-space                               | iupac     | <dim>                   | .01em          | Seite 13 |
| hyphen-post-space                              | iupac     | <dim>                   | -.03em         | Seite 13 |
| \DeclareChemLatin:                             |           |                         |                |          |
| format   | latin     | <anything>              | \itshape       | Seite 17 |
| \pch, \mch, \fpch, \fmch:                      |           |                         |                |          |
| append   | charges   | true false              | false          | Seite 19 |
| acid/base:                                     |           |                         |                |          |
| p-style  | acid-base | slanted italics upright | upright        | Seite 18 |
| \ox:   |           |                         |                |          |
| align  | ox        | center right            | center         | Seite 20 |
| parse  | ox        | true false              | true           | Seite 20 |
| roman  | ox        | true false              | true           | Seite 20 |
| pos  | ox        | top super side          | top            | Seite 20 |
| explicit-sign                                  | ox        | true false              | false          | Seite 20 |
| decimal-marker                                 | ox        | comma point             | point          | Seite 20 |
| \OX, \redox:                                   |           |                         |                |          |
| dist   | redox     | <dim>                   | .6em           | Seite 24 |
| sep  | redox     | <dim>                   | .2em           | Seite 24 |
| \Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:                   |           |                         |                |          |
| exponent                                       |           | <anything>              | \standardstate | Seite 25 |
| delta  |           | <anything>/false        |                | Seite 25 |
| subscript                                      |           | left right              |                | Seite 25 |
| unit   |           | <unit>                  |                | Seite 25 |
| \DeclareChemState, \RenewChemState:            |           |                         |                |          |
| exponent                                       |           | <anything>              | \standardstate | Seite 25 |
| delta  |           | <anything> false        |                | Seite 25 |
| subscript                                      |           | <anything>              |                | Seite 25 |
| subscript-left                                 |           | true false              |                | Seite 26 |
| \State:  |           |                         |                |          |
| exponent                                       | state     | <anything>              | \standardstate | Seite 27 |
| delta  | state     | <anything> false        |                | Seite 27 |
| subscript-left                                 | state     | true false              |                | Seite 27 |
| \NMR, \begin{spectroscopy} \end{spectroscopy}: |           |                         |                |          |
| unit   | nmr       | <unit>                  | \mega\hertz    | Seite 29 |
| nucleus  | nmr       | {<num>, <atom symbol>}  | {1, H}         | Seite 29 |
| format   | nmr       | <anything>              |                | Seite 29 |
| pos-number                                     | nmr       | side/sub                | side           | Seite 29 |

| Option   | Modul                             | Werte                          | Default                 |          |
|--|-----------------------------------|--------------------------------|-------------------------|----------|
| <code>coupling-unit</code>                           | <code>nmr</code>                  | <code>&lt;unit&gt;</code>      | <code>\hertz</code>     | Seite 29 |
| <code>parse</code>                                   | <code>nmr</code>                  | <code>true false</code>        | <code>true</code>       | Seite 30 |
| <code>delta</code>                                   | <code>nmr</code>                  | <code>&lt;anything&gt;</code>  |                         | Seite 30 |
| <code>list</code>                                    | <code>nmr</code>                  | <code>true false</code>        | <code>false</code>      | Seite 30 |
| <code>list-setup</code>                              | <code>nmr</code>                  |                                | siehe Text              | Seite 30 |
| <code>use-equal</code>                               | <code>nmr</code>                  | <code>true false</code>        | <code>false</code>      | Seite 30 |
| <code>\DeclareChemReaction:</code>                   |                                   |                                |                         |          |
| <code>star</code>                                    |                                   | <code>true false</code>        | <code>false</code>      | Seite 37 |
| <code>arg</code>                                     |                                   | <code>true false</code>        | <code>false</code>      | Seite 37 |
| <code>list-name</code>                               | <code>reaction</code>             | <code>&lt;anything&gt;</code>  | List of reactions       | Seite 38 |
| <code>list-entry</code>                              | <code>reaction</code>             | <code>&lt;anything&gt;</code>  | Reaction                | Seite 38 |
| <code>\mhName:</code>                                |                                   |                                |                         |          |
| <code>align</code>                                   | <code>mhName</code>               | <code>&lt;alignment&gt;</code> | <code>\centering</code> | Seite 33 |
| <code>format</code>                                  | <code>mhName</code>               | <code>&lt;commands&gt;</code>  |                         | Seite 33 |
| <code>fontsize</code>                                | <code>mhName</code>               | <code>&lt;fontsize&gt;</code>  | <code>\tiny</code>      | Seite 33 |
| <code>width</code>                                   | <code>mhName</code>               | <code>&lt;dim&gt;</code>       |                         | Seite 33 |
| <code>phases:</code>                                 |                                   |                                |                         |          |
| <code>pos</code>                                     | <code>phases</code>               | <code>side sub</code>          | <code>side</code>       | Seite 40 |
| <code>space</code>                                   | <code>phases</code>               | <code>&lt;dim&gt;</code>       | <code>.1333em</code>    | Seite 40 |
| <code>\newman:</code>                                |                                   |                                |                         |          |
| <code>angle</code>                                   | <code>newman</code>               | <code>&lt;angle&gt;</code>     | <code>0</code>          | Seite 41 |
| <code>scale</code>                                   | <code>newman</code>               | <code>&lt;factor&gt;</code>    | <code>1</code>          | Seite 41 |
| <code>ring</code>                                    | <code>newman</code>               | <code>&lt;tikz&gt;</code>      |                         | Seite 41 |
| <code>atoms</code>                                   | <code>newman</code>               | <code>&lt;tikz&gt;</code>      |                         | Seite 41 |
| <code>back-atoms</code>                              | <code>newman</code>               | <code>&lt;tikz&gt;</code>      |                         | Seite 41 |
| <code>\orbital &lt;type&gt; = s p sp sp2 sp3:</code> |                                   |                                |                         |          |
| <code>phase</code>                                   | <code>orbital/&lt;type&gt;</code> | <code>+ -</code>               | <code>+</code>          | Seite 42 |
| <code>scale</code>                                   | <code>orbital/&lt;type&gt;</code> | <code>&lt;factor&gt;</code>    | <code>1</code>          | Seite 42 |
| <code>color</code>                                   | <code>orbital/&lt;type&gt;</code> | <code>&lt;color&gt;</code>     | <code>black</code>      | Seite 42 |
| <code>angle</code>                                   | <code>orbital/&lt;type&gt;</code> | <code>&lt;angle&gt;</code>     | <code>90</code>         | Seite 42 |
| <code>half</code>                                    | <code>orbital/p</code>            | <code>true false</code>        | <code>false</code>      | Seite 42 |
| <code>overlay</code>                                 | <code>orbital</code>              | <code>true false</code>        | <code>false</code>      | Seite 43 |
| <code>opacity</code>                                 | <code>ornital</code>              | <code>&lt;num&gt;</code>       | <code>1</code>          | Seite 43 |

## Anpassungsbefehle

Eine ganze Reihe von Befehlen wurde vorgestellt, mit denen die Möglichkeiten von CHEMMACROS erweitert werden können. Sie werden hier noch einmal aufgelistet.

- `\DeclareChemArrow` → Neuen Pfeil definieren, siehe Seite 59.
- `\RenewChemArrow` → Bestehende Pfeile verändern.
- `\DeclareChemBond` → Eine neue Bindung definieren, siehe Seite 51.
- `\RenewChemBond` → Eine Bindung umdefinieren.
- `\DeclareChemBondAlias` → Ein Alias zu einer existierenden Bindung definieren.
- `\DeclareChemIUPAC` → Neuen IUPAC-Befehl definieren, siehe Seite 16.

- ▶ `\RenewChemIUPAC` → IUPAC-Befehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemLatin` → Neue lateinische Ausdrücke definieren, siehe Seite 17.
- ▶ `\RenewChemLatin` → Lateinische Ausdrücke umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemNMR` → Neuen NMR-Befehl definieren, siehe Seite 28.
- ▶ `\RenewChemNMR` → NMR-Befehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemParticle` → Neues Teilchen definieren, siehe Seite 11.
- ▶ `\RenewChemParticle` → Teilchen umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemPhase` → Neuen Phasenbefehl definieren, siehe Seite 40.
- ▶ `\RenewChemPhase` → Phasenbefehl umdefinieren.
- ▶ `\DeclareChemReaction` → Neue Reaktionsumgebung definieren, siehe Seite 37.
- ▶ `\DeclareChemState` → Neue Zustandsgröße definieren, siehe Seite 26.
- ▶ `\RenewChemState` → Zustandsgröße umdefinieren.

## Vorschläge und Bugreports

Feedback zu [CHEMMACROS](#), [CHEMFORMULA](#) und [GHSYSTEM](#) ist hochwillkommen! Wenn Sie Vorschläge haben, Ihnen Features fehlen oder Ihnen Bugs auffallen, zögern Sie nicht, mich zu kontaktieren. Wenn Sie irgendwelche Fehler finden, seien es chemische, falsche Dokumentation usw., wäre ich über eine kurze E-Mail<sup>42</sup> dankbar.

Wenn Sie einen Bug finden, wäre es am besten, Sie schicken mir ein minimales Beispiel, mit dem ich den Bug reproduzieren kann. Sie können ihn auch als "Issue" auf <https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/> melden.

Vielen Dank an alle, die mir schon Feedback zukommen ließen, vor allem (in alphabetischer Reihenfolge):

- [Peter Cao](#)
- Christina Lüdigg
- Dr. Paul King
- Jonas Rivetti (Besonderen Dank für seine Übersetzung der H- und P-Sätze ins Italienische!)
- Christoph Schäfer
- Timo Stein

---

<sup>42</sup> [contact@mychemistry.eu](mailto:contact@mychemistry.eu)

## Quellen

- [Coh+08] E. Richard Cohan, Tomislav Cvitaš, Jeremy G. Frey, Bertil Holmström, Kozo Kuchitsu, Roberto Marquardt, Ian Mills, Franco Pavese, Martin Quack, Jürgen Stohner, Herbert L. Strauss, Michio Takami und Anders J Thor. *“Quantities, Symbols and Units in Physical Chemistry”*, *IUPAC Green Book*. 3rd Edition. 2nd Printing. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 2008.
- [Con+05] Neil G. Connelly, Ture Damhus, Richard M. Hartshorn und Alan T. Hutton. *“Nomenclature of Inorganic Chemistry”*, *IUPAC Red Book*. IUPAC & RSC Publishing, Cambridge, 2005. ISBN: 0-85404-438-8.
- [Eur12] United Nations Economic Commission for Europe. *GHS Implementation*. 20. März 2012. URL: [http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation\\_e.html](http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation_e.html) (besucht am 20. 03. 2012).
- [Theo8] The European Parliament and The Council of the European Union. *Regulation (EC) No 1272/2008 of the European Parliament and of the Council. on classification, labelling and packaging of substances and mixtures, amending and repealing Directives 67/548/EEC and 1999/45/EC, and amending Regulation (EC) No 1907/2006*. 16. Dez. 2008.

## Index

Überschriften werden **fett**,  
Pakete serifenlos, Befehle  
`\braun`, Optionen `grün` und  
Module (nur `CHEMMACROS`)  
`rot` gesetzt.

### Symbols

`\#` ..... 29  
`\-` ..... 12  
`\[` ..... 58  
`\]` ..... 58  
`\^` ..... 12

### A

`\a` ..... 13  
`\abinitio` ..... 17  
Absolute Konfiguration 15  
`acid-base`  
    `p-style` ..... 18  
`\AddRxnDesc` ..... 39  
`adduct-space` ..... 52, 54  
`align` ..... 20, 33  
`angle` ..... 41 f.  
**ANHANG** ..... 81  
`\anti` ..... 15  
`append` ..... 19  
`\aq` ..... 39  
`arg` ..... 37  
`arrow-offset` ..... 58  
`arrow-ratio` ..... 58  
`arrow-yshift` ..... 58  
`\atm` ..... 17  
`\atmosphere` ..... 17  
`atoms` ..... 41

### B

`\b` ..... 13  
`\ba` ..... 10, 82  
`babel` ..... 72  
`back-atoms` ..... 41

**Befehle für mhchem** ...  
    33 f.

**BEVOR ES LOS GEHT** ..  
    3–9

`bm` ..... 3  
`\bond` ..... 9, 51  
`bond-length` ..... 52  
`bond-offset` ..... 52  
`bond-style` ..... 9, 52  
`booktabs` ..... 73  
`bpchem` ..... 3, 6  
`bpchem` ..... 3, 6, 12  
`break-space` ..... 13  
`\bridge` ..... 9, 16  
`bridge-number` ..... 16

### C

`C-temperature` ..... 68  
Cahn-Ingold-Prelog ... 14  
`\cal` ..... 17  
`\calory` ..... 17  
`\centering` ..... 83  
`\ch` 45 f., 48, 50, 54–58, 60,  
    62 f.  
`charge-hshift` ... 50, 52 f.  
`charge-style` ..... 52  
**charges**  
    `append` ..... 19  
`\Chemalpha` ..... 6, 10 f.  
`\Chembeta` ..... 10 f.  
`\ChemDelta` ..... 10 f.  
`\Chemdelta` ..... 10  
`\Chemepsilon` ..... 10  
`\Chemeta` ..... 10  
`chemfig` ..... 11, 21 f.  
**CHEMFORMULA** 45–66  
`\Chemgamma` ..... 10  
`\Chemkappa` ..... 10  
**CHEMMACROS** ... 9–44  
`\Chemmu` ..... 10  
`\Chemnu` ..... 10  
`\Chemomega` ..... 10  
`\Chempi` ..... 10  
`\Chemrho` ..... 10  
`\chemsetup` 7, 30, 46, 66, 81  
`\Chemsigma` ..... 10  
`chemstyle` ..... 10, 17 f.

`\cip` ..... 14  
`cip-kern` ..... 9, 14  
`circled` ..... 6, 11, 36  
`circletype` ..... 6  
`\cis` ..... 15  
`cis/trans` ..... 15  
`\cmc` ..... 17  
`cmversion` ..... 6  
`color` ..... 42  
`compound-sep` ..... 58  
`cool` ..... 13, 15  
`coord-use-hyphen` .... 16  
`coupling-unit` ..... 29

### D

`\D` ..... 13, 15  
`\d` ..... 14  
`\data` ..... 29 f.  
`\data*` ..... 29  
`decimal-marker` ... 20, 47  
`\DeclareChemArrow` 59, 83  
`\DeclareChemBond` . 51, 83  
`\DeclareChemBondAlias` ..  
    51, 83  
`\DeclareChemIUPAC` 16, 83  
`\DeclareChemLatin` 17, 82,  
    84  
`\DeclareChemNMR` . 28, 30,  
    84  
`\DeclareChemParticle` ...  
    11 f., 84  
`\DeclareChemPhase` 40, 84  
`\DeclareChemReaction` 37,  
    83 f.  
`\DeclareChemState` . 26 f.,  
    82, 84  
`\delm` ..... 21  
`\delp` ..... 21  
`delta` ..... 25 ff., 30  
`dist` ..... 24  
`dots` ..... 68  
**E**  
`\E` ..... 13, 15

# INDEX

effect ..... 68  
**Einheiten** ..... 17 f.  
`\El` ..... 10  
`\el` ..... 9  
`elpair` ..... 10  
`\Enthalpy` ..... 25, 82  
`\Entropy` ..... 25, 82  
`environ` ..... 3  
`experimental (Umg.)` 8, 29  
`explicit-sign` ..... 20 f.  
`exponent` ..... 25 ff.  
`exposure` ..... 68

## F

`F-temperature` ..... 68  
`\fdelm` ..... 21  
`\fdelp` ..... 21  
`fill-in` ..... 67  
Fischer ..... 15  
`\fmch` ..... 19, 82  
`\fminus` ..... 10  
`font-family` ..... 62  
`font-series` ..... 62  
`font-shape` ..... 62  
`font-spec` ..... 63  
`fontsize` ..... 33  
`fontspec` ..... 63  
`format` ..... 17, 29, 33, 62  
**Format und Schrift** 61 ff.  
`\fpch` ..... 19, 82  
`\fplus` ..... 6, 10  
`frac-style` ..... 47  
`\fscrm` ..... 22  
`\fscrp` ..... 22  
`\fsscrm` ..... 22  
`\fsscrp` ..... 22

## G

`\g` ..... 13  
`\gas` ..... 39

## Gefahren- und

### Sicherheitssätze

66–69

`german` ..... 8, 38, 72

## Geschützter Input . 55 f.

`math` ..... 56

`text` ..... 55

`ghs` ..... 6  
`\ghs` ..... 66  
`\ghs*` ..... 66  
`\ghslistall` ..... 72  
`\ghspic` ..... 69  
**GHSYSTEM** ..... 66–81  
    Aufruf ..... 66  
    kombinierte Sätze . 69  
    Platzhalter ..... 67  
    Sätze mit Lücken . 68  
`ghsystem` ..... 6  
`\Gibbs` ..... 25, 82  
`graphicx` ..... 3  
`greek` ..... 6, 8, 11

## H

`\H` ..... 14  
`half` ..... 42  
`\hapto` ..... 9, 16  
`\hertz` ..... 82  
`hide` ..... 67  
`\Hpl` ..... 9  
`\Ht0` ..... 9  
`\Hyd` ..... 9  
`hyphen-post-space` ... 13  
`hyphen-pre-space` .... 13

## I

`ifpdf` ..... 3  
`includegraphics` .... 70  
`\insitu` ..... 17  
**Installation** ..... 5  
`\intertext` ..... 35  
`\invacuo` ..... 17  
**Ionenladungen** ..... 19 f.  
`iupac` ..... 6, 13, 16  
**iupac**

`break-space` ..... 13  
`bridge-number` .... 16  
`cip-kern` ..... 14  
`coord-use-hyphen` 16  
`hyphen-post-space` ..  
    13  
`hyphen-pre-space` 13  
`\iupac` ..... 12–15

## IUPAC-Namen .... 12–17

Cahn-Ingold-Prelog ..  
    14  
`cis/trans` ..... 15  
`eigene` ..... 16  
Fischer ..... 15  
griechische  
    Buchstaben ... 13  
Heteroatome ..... 14  
`ortho/meta/para` .. 15  
`tert` ..... 15  
`vordefiniert` ..... 13  
`zusammen/entgegen` .

15

## IUPAC Namen

`syn/anti` ..... 15

## J

`\J` ..... 29

## K

`\k` ..... 14  
`\Ka` ..... 18  
`\Kb` ..... 18  
`kg-mass` ..... 68  
`\Kw` ..... 18

## L

`\L` ..... 13, 15  
`l3kernel` ..... 3  
`l3packages` ..... 3  
`label-offset` ..... 58  
`label-style` ..... 59  
**Laden des Bundles** .... 5  
`language` ... 6, 8, 18, 39, 72  
**Lateinische Ausdrücke .**

17

## latin

`format` ..... 17  
`\latin` ..... 17  
`lbs-mass` ..... 69  
`list` ..... 30  
`list-entry` ..... 38  
`list-name` ..... 38  
`list-setup` ..... 30  
**Liste aller Sätze** .. 72–81  
`\listofreactions` .... 38

# INDEX

longtable ..... 3, 72  
`\lqd` ..... 8, 39

**M**

`\m` ..... 14  
`math-space` ..... 56

**Mathematik-**  
**Umgebungen** ..  
 63 f.

`mathspec` ..... 6, 10  
`mathtools` ..... 3, 35  
`\mch` ..... 19, 35, 50, 82  
`\mech` ..... 22 f.  
`\mega` ..... 82  
`\meta` ..... 13, 15  
`method` .... 3, 6, 11 f., 33, 35  
`mhchem` . 3 f., 6, 11, 30, 33,  
 37, 45, 56

`mhName`  
`align` ..... 33  
`fontsize` ..... 33  
`format` ..... 33  
`width` ..... 33

`\mhName` ..... 33, 83  
`\Molar` ..... 17 f.  
`\moLar` ..... 18  
`\molar` ..... 17 f.  
`\MolMass` ..... 18

**N**

`\N` ..... 14  
`\n` ..... 14  
`name-format` ..... 61  
`name-width` ..... 61

**Neues** ..... 8 f.

`newman`  
`angle` ..... 41  
`atoms` ..... 41  
`back-atoms` ..... 41  
`ring` ..... 41  
`scale` ..... 41

`\newman` ..... 40, 83

**Newman-Projektionen** .  
 40 ff.

`ngerman` ..... 8  
`nicefrac` ..... 3, 47

`\NMR` ..... 6, 27–30, 82

`nmr`  
`coupling-unit` ... 29  
`delta` ..... 30  
`format` ..... 29  
`list` ..... 30  
`list-setup` ..... 30  
`nucleus` ..... 29  
`parse` ..... 30  
`pos-number` ..... 29  
`unit` ..... 29  
`use-equal` ..... 30

`nmr (Umg.)` ..... 30

`\NMR*` ..... 28

`\normal` ..... 18

`\ntr` ..... 10

`Nu` ..... 6, 10

`\Nu` ..... 6, 10, 82

`\Nuc` ..... 10

`nucleus` ..... 29

**O**

`\O` ..... 14

`opacity` ..... 43

**option**  
`bpchem` ..... 6  
`circled` ..... 6  
`circletype` ..... 6  
`cmversion` ..... 6  
`german` ..... 38, 72  
`ghsystem` ..... 6  
`greek` ..... 6, 11  
`iupac` ..... 6, 13, 16  
`language` ..... 6  
`method` ..... 6, 33  
`Nu` ..... 6, 10  
`strict` ..... 6  
`synchronize` ..... 6  
`xspace` ..... 7

**orbital**  
`angle` ..... 42  
`color` ..... 42  
`half` ..... 42  
`opacity` ..... 43  
`overlay` ..... 43  
`phase` ..... 42

`scale` ..... 42

`\orbital` ..... 42, 83

**Orbitale** ..... 42 ff.

`organs` ..... 68

`\ortho` ..... 15

ortho/meta/para ..... 15

`overlay` ..... 43

`\OX` ..... 23, 82

**ox**  
`align` ..... 20  
`decimal-marker` .. 20  
`explicit-sign` .. 20 f.  
`parse` ..... 20  
`pos` ..... 20  
`roman` ..... 20

`\ox` ..... 4, 20 f., 82

`\ox*` ..... 4, 20

**Oxidationszahlen** .. 20 f.

**P**

`\P` ..... 14

`\p` ..... 18

`p-style` ..... 18

**Paketoptionen** ..... 5 ff.

`\para` ..... 15

`parse` ..... 20, 30

**Partialladungen** .... 21 f.

**particle**  
`elpair` ..... 10

`\pch` ..... 19, 82

**Pfeile** ..... 56–60

Anpassung ..... 58

Beschriftung ..... 57

Typen ..... 56

bearbeiten ..... 59

`\pH` ..... 18

`phase` ..... 42

`\phase` ..... 40

**Phasen** ..... 39 f.

eigene ..... 40

Grundlagen ..... 39

**phases**  
`pos` ..... 40  
`space` ..... 40

`pic-type` ..... 72

**Piktogramme** .... 69–72



## INDEX

`\pKa` ..... 8, 18  
`\pKb` ..... 18  
`plus-space` ..... 54  
`\pOH` ..... 18  
`polyglossia` ..... 72  
`pos` ..... 20, 40  
`\pos` ..... 29  
`pos-number` ..... 29  
`\prt` ..... 10  
  
**R**  
`\R` ..... 13 f.  
`\Rad` ..... 10  
`radical-radius` ..... 52  
`radical-style` ..... 52  
`\Rconf` ..... 15  
`reaction`  
    `list-entry` ..... 38  
    `list-name` ..... 38  
`reaction (Umg.)` .... 8, 34  
`reaction* (Umg.)` .... 34  
`\reactionlistname` ... 38  
`reactions (Umg.)` .... 34  
`reactions* (Umg.)` .... 34  
**Reaktionsmechanismen**  
    22 f.  
**Reaktionsumgebungen**  
    34–39  
`redox`  
    `dist` ..... 24  
    `sep` ..... 24  
`\redox` ..... 23, 82  
**Redoxreaktionen** .. 23 ff.  
`\RenewChemArrow` .. 60, 83  
`\RenewChemBond` .... 51, 83  
`\RenewChemIUPAC` .. 16, 84  
`\RenewChemLatin` .. 17, 84  
`\RenewChemNMR` .... 28, 84  
`\RenewChemParticle` . 11 f.,  
    40, 84  
`\RenewChemPhase` .. 40, 84  
`\RenewChemState` .. 26, 82,  
    84  
`\renewtagform` ..... 35  
`ring` ..... 41  
`roman` ..... 20

**S**  
`\S` ..... 13 f.  
**Säure/Base** ..... 18 f.  
`scale` ..... 41 f., 69  
`\Sconf` ..... 15  
`\scrm` ..... 22  
`\scrip` ..... 22  
`sep` ..... 24  
**Setup** ..... 7  
`\Sf` ..... 14  
`\ShowChemArrow` ..... 60  
`\ShowChemBond` ..... 51  
`\sin` ..... 8  
`siunitx` .... 3, 17 f., 25–29  
`\sld` ..... 8, 39  
`space` ..... 40, 67  
`spectroscopy (Umg.)` .. 82  
**Spektroskopie** ... 27–33  
**Spezielle Input-Typen** ..  
    54 f.  
    Optionen Input ... 55  
    Single-Token Input 54  
**Spracheinstellung** .. 7 f.  
`\standardstate` ... 10, 82  
`star` ..... 37  
`\State` ..... 27, 82  
`state`  
    `delta` ..... 27  
    `exponent` ..... 27  
    `subscript-left` .. 27  
**Stereodeskriptoren und**  
    **Nomenklatur** ..  
    13–16  
**Stöchiometrische**  
    **Faktoren** .. 46 ff.  
    `nicefrac` ..... 47  
    `space` ..... 48  
    `xfrac` ..... 47  
`stoich-space` ..... 47 f.  
`strict` ..... 6, 12, 16, 40  
`subscript` ..... 25 f.  
`subscript-left` .... 26 f.  
`subscript-style` .... 52  
`subscript-vshift` ... 52 f.  
`substance` ..... 68  
**Summenformeln** . 48–54

Addukte ..... 48  
Anpassung ..... 52  
Befehle ..... 49  
Bindungen ..... 50  
    Länge ..... 54  
Hochstellungen ... 49  
    Ladungsbefehle . 50  
    Verhalten ..... 50  
Ladungen ..... 49  
    Verschiebung ... 52  
Tiefstellungen .... 48  
    Verschiebung ... 53  
`\syn` ..... 15  
`synchronize` ..... 6  
  
**T**  
`table-caption` ..... 72  
`table-caption-short` . 72  
`table-foot-rule` ..... 73  
`table-head-number` ... 72  
`table-head-rule` ..... 73  
`table-head-text` ..... 72  
`table-label` ..... 72  
`table-last-foot-rule` 73  
`table-next-page` ..... 72  
`table-row-sep` ..... 73  
`table-rules` ..... 73  
`table-top-head-rule` . 73  
`tabu` ..... 3  
**Teilchen, Ionen und**  
    **Symbole** .. 9–12  
    eigene ..... 11  
    vordefiniert ..... 9  
`\ter` ..... 8  
`tert` ..... 15  
`\tert` ..... 15  
`text` ..... 68  
`textgreek` ..... 6, 11, 13  
**Text unter Formeln** 60 f.  
    Anpassung ..... 61  
    syntax ..... 60  
**Thermodynamik** .. 25 ff.  
`TikZ` .. 3, 15, 23, 41, 43, 52,  
    57, 59  
`tikz` ..... 3  
`\tiny` ..... 83

## INDEX

- `\torr` ..... 18
- `\trans` ..... 13, 15
- `\transitionstatesymbol`  
10
- U**
- Übersicht über die**  
    **Optionen**  
    **(chemmacros) .**  
    81–84
- Umgebungen**
  - experimental .. 8, 29
  - nmr ..... 30
- reaction ..... 8, 34
- reaction\* ..... 34
- reactions ..... 34
- reactions\* ..... 34
- spectroscopy .... 82
- `unit` ..... 25, 29
- `upgreek` ..... 8
- upgreek ..... 6, 11, 13
- `use-equal` ..... 29 f.
- V**
- `\val` ..... 29
- W**
- `\w` ..... 14
- `\water` ..... 9
- `width` ..... 33
- X**
- xfrac ..... 21, 47
- `xspace` ..... 3, 7
- xspace ..... 3
- Z**
- `\Z` ..... 15
- zusammen/entgegen ... 15