

L^AT_EX - gleich setzt's was!

Ein kleiner Einführungskurs in L^AT_EX

Teil 4: Chemie und L^AT_EX

Jörg Binnewald, August 2011
<http://latex.esc-now.de>



Dieses Dokument steht unter der
Creative Commons 3.0 BY-NC.

Inhalt

- 1 Überblick
- 2 mhchem-Paket
- 3 bpchem-Paket
- 4 Abkürzungen
- 5 Literatur

Hinweis zu den Slides

Diese Slides gelten als unterstützendes Material zu einem L^AT_EX-Einsteigerkurs. Der vorgestellte Befehlsumfang ist deshalb auf wichtige Grundfunktionen beschränkt. Außerdem werden in diesem Kurs nicht die Standard L^AT_EX-Dokument-Klassen beschrieben, wie in den meisten Einsteigerkursen, sondern die KOMA-Script-Klassen.

Die vollständigen Kurs-Materialien sowie weiterführende Informationen sind unter <http://latex.esc-now.de> zu finden.

August 2011, Jörg Binnewald

Inhalt

- 1 Überblick
- 2 mhchem-Paket
- 3 bpchem-Paket
- 4 Abkürzungen
- 5 Literatur

Chemie und L^AT_EX - Was ist möglich?

- ▶ Summenformeln und Reaktionsgleichungen mit dem Paket *mhchem*
- ▶ Abkürzungen und das Handling von langen IUPAC-Namen mit dem Paket *bpchem*
- ▶ eigene Abkürzungen definieren
- ▶ Organische Strukturformeln mit folgenden Paketen:
 - ▶ *xymtex*
<http://xymtex.com/fujitas3/xymtex/indexe.html>
 - ▶ *ochem*
<http://www.2k-software.de/ingo/ochem.html>

Inhalt

- 1 Überblick
- 2 mhchem-Paket
 - Grundlagen
 - besondere Zeichen
 - Bindungen
 - Reaktionen
 - erweiterte Anwendung
 - Tricks
- 3 bpchem-Paket
- 4 Abkürzungen
- 5 Literatur

Das mhchem-Paket

- ▶ *mhchem* dient dem Satz von Summenformeln und Reaktionsgleichungen.
- ▶ Um alle Funktionen von *mhchem* zu nutzen, muss Version 3 geladen werden:

```
\usepackage[version=3]{mhchem}
```

Grundlagen

- ▶ *mhchem* arbeitet mit einer sehr intuitiven Syntax.
- ▶ Die darzustellenden Objekte werden dem Befehl `\ce{}` übergeben.
- ▶ Beispiele:

<code>\ce{H2O}</code>	H ₂ O	<code>\ce{1/2O2}</code>	$\frac{1}{2} \text{O}_2$
<code>\ce{Al2O3}</code>	Al ₂ O ₃	<code>\ce{H2_{(aq)}}</code>	H _{2(aq)}
<code>\ce{2SO4-}</code>	2 SO ₄ ⁻	<code>\ce{[B2O3(OH)4]-}</code>	[B ₂ O ₃ (OH) ₄] ⁻
<code>\ce{Mg^{2+}}</code>	Mg ²⁺	<code>\ce{Fe(CN)_{\frac{6}{2}}}</code>	Fe(CN) _{$\frac{6}{2}$}
<code>\ce{Y^{99+}}</code>	Y ⁹⁹⁺	<code>\ce{^{227}_{90}Th+}</code>	$^{227}_{90}\text{Th}^+$

besondere Zeichen

<code>\ce{Ce^{VI}}</code>	Ce^{VI}
<code>\ce{Al2(SO4)3*18H2O}</code>	$\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 18 \text{H}_2\text{O}$
<code>\ce{[Cd\{SC(NH2)2\}2]}</code>	$[\text{Cd}\{\text{SC}(\text{NH}_2)_2\}_2]$
<code>\ce{RNO2^{-.}}</code>	RNO_2^-
<code>\ce{\\$ \mu \hyphen \\$Cl}</code>	$\mu\text{-Cl}$

Formeln als Index:

`\$V_{\ce{H2O}}\$` $V_{\text{H}_2\text{O}}$

oder:

`V_{\ce{H2O}}\$` $V_{\text{H}_2\text{O}}$

Bindungen

$A-B=C\equiv D$ `\ce{A-B=C#D}`

$A-B=C\equiv D$ `\ce{A\sbond B\dbond C\tbond D}`

$A-B=C\equiv D$ `\ce{A\bond{-} B\bond{=} C\bond{#} D}`

$A\text{---}B=C$ `\ce{A\bond{~} B\bond{~-} C}`

$A\equiv B\equiv C\equiv D$ `\ce{A\bond{~=} B\bond{~--} C\bond{---} D}`

$A\cdots B\cdots C$ `\ce{A\bond{...} B\bond{....} C}`

$A\rightarrow B\leftarrow C$ `\ce{A\bond{->} B\bond{<-} C}`

Reaktionen



Achtung: $\hat{}$ und \vee müssen jeweils durch ein Leerzeichen von der Formel getrennt sein, damit die Pfeile korrekt dargestellt werden!

erweiterte Anwendung

- ▶ Wie bereits bekannt, kann die $\$$ -Umgebung in `\ce` verwendet werden.

So können z.B. Stoffe benannt werden:

```
\ce{Mg + 1/2O2 ->
$\underset{\text{Magnesiumoxid}}{\ce{MgO}}$}
```

erzeugt: $Mg + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow \underset{\text{Magnesiumoxid}}{MgO}$

- ▶ `\ce` kann aber genauso auch innerhalb von Mathematikumgebungen verwendet werden, z.B.:

```
\begin{equation*}
K = \frac{[\ce{Hg^{2+}}][\ce{Hg}]}{[\ce{Hg_2^{2+}}]}
```

erzeugt:

$$K = \frac{[Hg^{2+}][Hg]}{[Hg_2^{2+}]}$$

erweiterte Anwendung

- ▶ Da `\ce` auch in Formel-Umgebungen verwendet werden kann, lassen sich so einfach Reaktionsgleichungen fortlaufend nummerieren.
- ▶ Verwendet man in Formelumgebungen statt `\ce` den Befehl `\cee`, so kann der `&`-Operator zur Ausrichtung verwendet werden.

Beispiel:

```
\begin{align}  
  \cee{A + B &\rightarrow C} \\  
  C &\rightarrow D + E  
\end{align}
```

erzeugt:



Tricks

Alle Anweisungen sollten grundsätzlich per `\ce`-Befehl übergeben werden.

Treten jedoch in einigen Fällen Fehler auf, insbesondere bei verschachtelten `\ce`-Befehlen, so sollte statt `\ce` der `\cf`-Befehl innerhalb der Verschachtlung verwendet werden.

Tricks

Manchmal werden Formeln mit Serifen (z.B. H₂O) und manchmal ohne Serifen (z.B. H₂O) dargestellt. Woran liegt das?

- ▶ Die Serifen entstehen, wenn *mhchem* im Mathematikmodus verwendet wird und somit Mathematikschriften gerendert werden.

`$\ce{H2O}$` H₂O

`$\ce{H2O}$` H₂O

- ▶ Um eine einheitliche Darstellung zu erhalten, einfach alle Formeln im Mathematik-Modus darstellen.

Inhalt

- 1 Überblick
- 2 mhchem-Paket
- 3 bpchem-Paket
 - Abkürzungen
 - Verbindungen nummerieren
 - IUPAC-Namen trennen
- 4 Abkürzungen
- 5 Literatur

Übersicht

- ▶ Mit *bpchem* können Formeln gesetzt werden, jedoch nicht so komfortabel wie mit *mhchem*.
- ▶ *bpchem* stellt einige Abkürzungen häufig verwendeter Zeichenketten zur Verfügung.
- ▶ Mit *bpchem* können Verbindungen nummeriert werden.
- ▶ Mit *bpchem* lassen sich lange IUPAC-Namen trennen.

Abkürzungen

¹H-NMR: δ `\HNMR`

¹³C-NMR: δ `\CNMR`

cis `\cis`

trans `\trans`

$\eta^{<number>}$ `\hapto{<number>}`

Verbindungen nummerieren

- ▶ Mit `\CNlabel{marker}` und `\CNref{marker}` können Verbindungen fortlaufend nummeriert werden. Dabei ist *marker* wieder ein individueller Bezeichner der Referenzmarke.

- ▶ Beispiel:

```
Schwefel wird u.a. verwendet um \ce{H2SO4}  
(\CNlabel{sre}) herzustellen. \\  
\CNref{sre} ist eine S"auere.
```

erzeugt:

Schwefel wird u.a. verwendet um H₂SO₄ (1) herzustellen.
1 ist eine Säure.

IUPAC-Namen trennen

- ▶ Mit *bpchem* lässt sich die Trennung von langen IUPAC-Bezeichnungen festlegen, so dass L^AT_EX die Bezeichnung immer richtig trennt.
- ▶ Dazu wird der Verbindungsname dem `\IUPAC{}` Befehl übergeben.
- ▶ Bindestriche an denen getrennt werden darf wird darin ein `\` vorangestellt.
- ▶ Weitere mögliche Trennstellen werden mit `\\` markiert.
- ▶ Beispiel:

```
\IUPAC{Tetra \\ cyclo [2.2.2.1^{\{1,4\}}] \ - un \\
  decane - 2 \ - dodecyl \ - 5 \ - (hepta \\ decyl \\
  iso \\ dodecyl \\ thio \\ ester)}
```

erzeugt: Tetracyclo[2.2.2.1^{1,4}] – un-
decane – 2 – dodecyl – 5 – (heptadecylisododecylthioester)

Inhalt

- 1 Überblick
- 2 mhchem-Paket
- 3 bpchem-Paket
- 4 Abkürzungen
- 5 Literatur

Abkürzungen

- ▶ Lange Formeln oder Verbindungsnamen sind lästig, wenn diese oft im Text benötigt werden. Dafür lassen sich jedoch ‚Abkürzungen‘ in der Präambel definieren.
- ▶ allgemeine Syntax: `\newcommand{\neuerbefehl}{befehlskette}`

Abkürzungen

Beispiel 1:

`\newcommand{\quark}{lecker Quark}` Wird nun im Dokument `\quark` aufgerufen, so erzeugt dies ‚lecker Quark‘

Beispiel 2:

```
\newcommand{\cTetra}{\IUPAC{Tetra\|cyclo
  [2.2.2.1^{\{1,4\}}]\-un\|decane-2\|-dodecyl\|-5\|-
  (hepta\|decyl\|iso\|dodecyl\|thio\|ester)}}}
```

Nun muss nur noch `\cTetra` aufgerufen werden zum Erzeugen von:
 Tetracyclo[2.2.2.1^{1,4}] – undecane – 2 – dodecyl – 5 – (heptadecyliso-
 dodecylthioester)

Inhalt

- 1 Überblick
- 2 mhchem-Paket
- 3 bpchem-Paket
- 4 Abkürzungen
- 5 Literatur

Literatur I



Michael Haensel.

The mhchem Bundle, documentation for version 3.07 edition,
19.05.2007.

[http://www.ctan.org/tex-
archive/macros/latex/contrib/mhchem/mhchem.pdf](http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/mhchem/mhchem.pdf).



B. Pedersen.

*The bpchem package**, 25.11.2004.

[http://ftp.uni-erlangen.de/mirrors/CTAN/macros/
latex/contrib/bpchem/bpchem.pdf](http://ftp.uni-erlangen.de/mirrors/CTAN/macros/latex/contrib/bpchem/bpchem.pdf).