

LaTeX-Stammtisch
Freiberg

Arsenik bis Znucalit

Spaß mit chemischen Formeln in LaTeX

Thomas Benkert

17. Mai 2009



Inhaltsverzeichnis

1	Summenformeln	2
1.1	mhchem und rsphrase	2
2	Strukturformeln	5
2.1	ochem	5
2.2	xymtex	6
3	Formatierung für Zeitschriften	7
3.1	achemso	7
3.2	chembst	8
3.3	chemstyle	8
4	Diverses	9

1 Summenformeln

1.1 mhchem und rsphrase

mhchem

3

Allgemeines:

- vereinfachte Eingabe von Summenformeln und Reaktionsgleichungen
- Autor: Martin Hensel
- Version: 3.07, 2007-05-19
- Einbindung: `\usepackage[version=3]{mhchem}`
- späteres Setzen mittels `\mhchemoptions{option=abc}`
- `\cf{}`, `\ce{}` und `\cee{}`
- weiteres Paket: rsphrase

<code>\cf{As2O3}</code>	As_2O_3
<code>\ce{2As + 1 1/2 O2 -> As2O3}</code>	$2\text{As} + 1\frac{1}{2}\text{O}_2 \longrightarrow \text{As}_2\text{O}_3$

Beispiele für Verbindungen, Moleküle und Isotope

<code>\cf{As2O3}</code>	As_2O_3
<code>\cf{OH-}</code>	OH^-
<code>\cf{CaSO4^2-}</code>	CaSO_4^{2-}
<code>\cf{Ca[SO4]*2H2O}</code>	$\text{Ca}[\text{SO}_4] \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$
<code>\cf{H2O_{(liq)}}</code>	$\text{H}_2\text{O}_{(\text{liq})}$
<code>\ce{1 1/2 O2}</code>	$1 \frac{1}{2} \text{O}_2$
<code>\ce{^{227}_{90}Th+}</code>	$^{227}_{90}\text{Th}^+$

Bindungen

<code>\ce{C6H5-CHO}</code>	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-CHO}$
<code>\ce{X=Y#Z}</code>	$\text{X}=\text{Y}\equiv\text{Z}$
<code>\ce{A\sbond B\dbond C\tbond D}</code>	$\text{A}-\text{B}=\text{C}\equiv\text{D}$
<code>\ce{A\bond{-}B\bond{=}C\bond{\#}D}</code>	$\text{A}-\text{B}=\text{C}\equiv\text{D}$
<code>\ce{A\bond{~}B\bond{~}C}</code>	$\text{A}\cdots\text{B}=\text{C}$
<code>\ce{A\bond{\dots}B\bond{\dots}C}</code>	$\text{A}\cdots\text{B}\cdots\text{C}$
<code>\ce{A\bond{->}B\bond{<-}C}</code>	$\text{A}\rightarrow\text{B}\leftarrow\text{C}$

Mathe

<code>\ce{H_{\frac{4}{2}}O}</code>	$\text{H}_{\frac{4}{2}}\text{O}$
<code>\ce{A ->[\Delta] B}</code>	$\text{A} \xrightarrow{\Delta} \text{B}$

Probleme

<code>\ce{A ->[\Delta] B}</code>	$\text{A} \xrightarrow{\Delta} \text{B}$
<code>\mhchemoptions{font=sf} ...</code>	$\text{A} \xrightarrow{\Delta} \text{B}$
<code>\ce{Me*H2O}</code>	$\text{Me} \cdot \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{Me} \cdot \text{H}_2\text{O}$

`mhchem.sty`: Zeilen 1026 und 1030:

```
\mhchem@mathortext@ii{\, \cdot \,} {\, \ensuremath{\{\ \cdot \}} \,} %
```

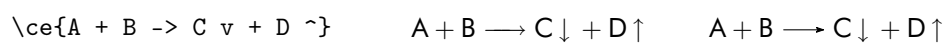
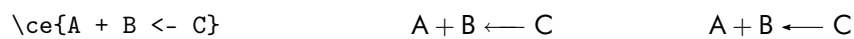
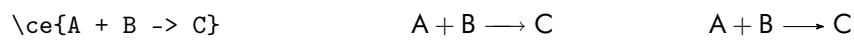
Präzipitate und Gase



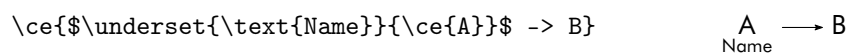
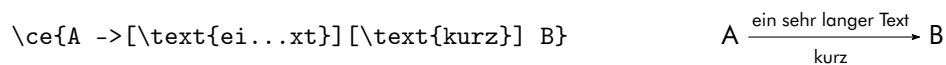
Reaktionsgleichungen



schönere Pfeile mit arrows=pgf-filled



Drunter und Drüber



- Text nur einzellig

Gleichungen ausrichten

- `\cee{}`
- leitet `&` und `\\` an Umgebung weiter
- alle Mathe-Umgebungen geeignet,
- `tabular` nur mit `\ce{}` je Zelle

```

\setlength{\arraycolsep}{.25em}

$$\begin{array}{rcl}
\cee{A + B & \rightarrow & C} \\
\cee{D & \rightarrow & E + F} \\
\cee{G + H & \rightarrow & I + J} \\
& & +K \\
\cee{L & \xrightarrow{\phi} & M}
\end{array}$$


```

Gleichungen nummerieren

- nummerierte Umgebungen verwenden \Rightarrow gleiche Nummern für Formeln und Reaktionsgleichungen
- Lösung: neues Kommando `reaction` (siehe Dokumentation S. 11)

```

\begin{equation}a+b\end{equation}
\reaction{CO2 + C}
\reaction*{CO2 + C}
\reaction[react:co]{CO2 + C}
\begin{equation}a+b\end{equation}
Wie in \ref{react:co} zu sehen \dots

```

$$a + b \quad (1)$$

$$\text{CO}_2 + \text{C} \quad (\text{C}1)$$

$$\text{CO}_2 + \text{C}$$

$$\text{CO}_2 + \text{C} \quad (\text{C}2)$$

$$a + b \quad (2)$$

Wie in C 2 zu sehen ...

`rsphrase`

12

Allgemeines:

- gehört zum `mhchem`-Bündel
- sprachabhängige Ausgabe von R- und S-Sätzen
- neue Befehle `\rsnumber{}` und `\rsphrase{}`

Der Text von Satz `\rsnumber{R1}` lautet "`\rsphrase{}`".

Der Text von Satz R 1 lautet „In trockenem Zustand explosionsgefährlich.“.

In TUBAFprotokoll spezielle Umgebung `rslis`t

```

\begin{rslst}
  \rs{R11}
  \rs{R22}
\end{rslst}

```

R 11 Leicht entzündlich.
R 22 Gesundheitsschädlich beim Verschlucken.

2 Strukturformeln

2.1 ochem

ochem

14

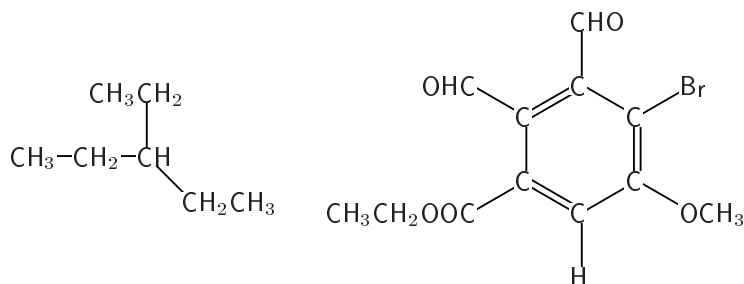
Allgemeines

- für Strukturformeln
- Autor: Ingo Klöckl
- Version: 4/0d, 2001-10-03
- Anweisungen im LaTeX-file, aber noch externer per1-Aufruf nötig

```

\begin{chemistry}
  formula(L,R){_ch3(,0) ch2_ ch_(,90, _ch2ch3(-), -45) _ch2ch3 }
  space(R)
  space(R)
  formula(L,R){_cho(-,-30) _kPh(_cho,_br,_och3,,_cooch2ch3(-)) }
\end{chemistry}

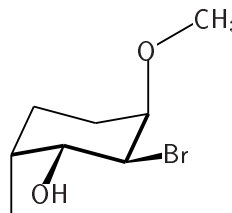
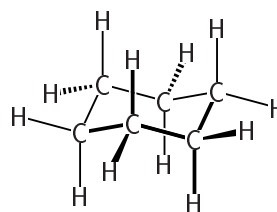
```



```

\begin{chemspecial}
  define('bndlen_', 'N')
  include('condensed.inc')
\end{chemspecial}
\begin{chemistry}
  defaultz
  formula(L,R) { chex_(C)
c1_(h,h) c2_(h,h)
c3_(h,h) c4_(h,h)
c5_(h,h) c6_(h,h) }
  space(R)space(R)
  formula(L,R) { chex_ c1_(0)
c2_(,oh) c3_(,br) c4_(o(r)
_ch3) }
\end{chemistry}

```



2.2 xymtex

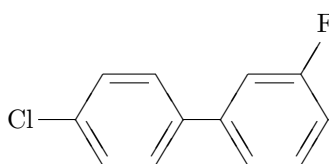
xymtex

 17

Allgemeines:

- für den Satz von Strukturformeln
- Autor: Shinsaku Fujita
- Version: 2.0, 1999-03-20
- modular
- Probleme (Fehler in sty-file?)

```
\bzdrh{1=Cl;4=\bzdrh{1==(y1);3==F}}
```



3 Formatierung für Zeitschriften

3.1 achemso

achemso

 19

Allgemeines:

- Unterstützung für Veröffentlichungen in Zeitschriften der American Chemical Society (ACS)
- Autor: Joseph Wright
- Version: v3.2b, 2009-04-28
- Dateien:
 - Klassen- u. Stildatei
 - BibTeX-Stile (`achemso`, `biochem`)
 - `natmove` (verschiebt Zitat nach Punctuation)

unterstützte Zeitschriften:

- | | | |
|-----------------------|---------------------------|------------------------|
| • Acc. Chem. Res. | • Energy Fuels | • J. Phys. Chem. A |
| • ACS Chem. Biol. | • Environ. Sci. Technol. | • J. Phys. Chem. B |
| • ACS Nano | • Ind. Eng. Chem. Res. | • J. Phys. Chem. C |
| • Anal. Chem. | • Inorg. Chem. | • J. Proteome Res. |
| • Biochemistry | • J. Agric. Food Chem. | • J. Am. Chem. Soc. |
| • Bioconjugate Chem. | • J. Chem. Eng. Data | • Langmuir |
| • Biomacromolecules | • J. Chem. Inf. Model. | • Macromolecules |
| • Biotechnol. Prog. | • J. Chem. Theory Comput. | • Mol. Pharm. |
| • Chem. Res. Toxicol. | • J. Comb. Chem. | • Nano Lett. |
| • Chem. Rev. | • J. Med. Chem. | • Org. Lett. |
| • Chem. Mater. | • J. Nat. Prod. | • Org. Proc. Res. Dev. |
| • Cryst. Growth Des. | • J. Org. Chem. | • Organometallics |

3.2 chembst

chembst

Allgemeines:

- BibTeX-Stile für diverse chem. Zeitschriften
- Autor: Stephan Schenk
- Version: 0.2.5, 2008-09-18

unterstützte Zeitschriften

- Chem. Commun. (`ChemCommun.bst`)
- Inorg. Chem. (`InorgChem.bst`) für viele von ACS veröff. Zeitschriften
- J. Am. Chem. Soc. (`JAmChemSoc.bst`)
- Chem. Eur. J. (`ChemEurJ.bst`) für viele von Wiley veröff. Zeitschriften
- Curriculum Vitae (`cv.bst`) wie Chem. Eur. J., jedoch mit Artikelüberschriften

3.3 chemstyle

chemstyle

22

Allgemeines:

- Formatvorlagen für diverse Zeitschriften, chemieverwandte Kommandos und weitere Unterstützung des Chemikers
- Autor: Joseph Wright
- Version: v1.3c, 2008-08-18
- aus rsc-Paket hervorgegangen
- neu: biblatex-Nutzung
- Vorlagen in separaten Dateien; eigene erstellbar
- Option `journal=none` (default): alle Befehle, keine Formatierung
- außer `journal`, Optionen später mit `\cstsetup{}` setzbar

unterstützte Zeitschriften

- Angew. Chem., Chem. Eur. J.
- J. Organomet. Chem., Coord. Chem. Rev.
- Inorg. Chem.
- J. Am. Chem. Soc.
- J. Phys. Chem. A, J. Phys. Chem. B
- Org. Lett.
- Chem. Commun., Org. Biomol. Chem., Dalton Trans.
- Tetrahedron, Tetrahedron Lett.

Einheiten

- lädt `siunitx`: bessere Einheiten- und Wertedarstellung¹
- neu: `\standardstate` \rightarrow \leftarrow

Alkyl-Radikale

- Beispiel: `\iPr` \rightarrow *i*-Pr
- verfügbar: `\nPr`, `\iPr`, `\nBu`, `\iBu`, `\sBu`, `\tBu`
- Optionen: `radhyphen`, `rademph`, `radsuper` und `radprefix`
- `\cstsetup{radhyphen=false,radsuper=true}\iPr \tBu` \rightarrow *i*Pr ^tBu

Latinismen

`\etal` or `\invacuo plus \latin{some text}`
 \rightarrow *et al.* or *in vacuo plus some text*

¹siehe Vortrag „Werte und Einheiten“ sowie TUBAFprotokoll-Beispiel

4 Diverses

weitere Pakete

25

bpchem chem. Formeln u. Namen (ers. v. mhchem)

chemarr lange leftrightarpoons mit Text

chemcompounds chem. Bestandteile nummerieren

chemscheme Gleitumgebung f. Schemata und Nummerierung

chemsym chem. Formeln u. Namen (ers. v. mhchem)

rsc BibTeX-styles für Zeitschriften der Royal Society of Chemistry und von Wiley (ers. v. chemstyle)

26

Glückauf!

27

