



Thomas Benkert



# Arsenik bis Znucalit

Spaß mit chemischen Formeln in LaTeX

17. Mai 2009



## Summenformeln

mhchem und rsphrase

## Strukturformeln

ochem  
xymtex

## Formatierung für Zeitschriften

achemso  
chembst  
chemstyle

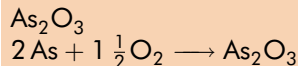
## Diverses

# Summenformeln

## 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`

```
\cf{As2O3}
\ce{2As + 1 1/2 O2 -> As2O3}
```



## Beispiele für Verbindungen, Moleküle und Isotope

`\cf{As2O3}` $\text{As}_2\text{O}_3$ `\cf{OH-}` $\text{OH}^-$ `\cf{CaSO4^2-}` $\text{CaSO}_4^{2-}$ `\cf{Ca[S04]*2H2O}` $\text{Ca}[\text{SO}_4] \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ `\cf{H2O_{(liq)}}` $\text{H}_2\text{O}_{(\text{liq})}$ `\ce{1 1/2 O2}` $1 \frac{1}{2} \text{O}_2$ `\ce{~{227}_{90}Th+}` ${}^{227}_{90}\text{Th}^+$

## Bindungen

`\ce{C6H5-CHO}` $C_6H_5-CHO$ `\ce{X=Y#Z}` $X=Y\equiv Z$ `\ce{A\sbond B\dbond C\tbond D}` $A-B=C\equiv D$ `\ce{A\bond{-}B\bond{=}C\bond{\#}D}` $A-B=C\equiv D$ `\ce{A\bond{\sim}B\bond{\sim-}C}` $A\cdots B=C$ `\ce{A\bond{\dots}B\bond{\dots}C}` $A\cdots B\cdots C$ `\ce{A\bond{->}B\bond{<-}C}` $A\rightarrow B\leftarrow C$

## Mathe

```
\ce{H_{\frac{4}{2}}O}
```



```
\ce{A ->[\Delta] B}
```



## Probleme

```
\ce{A ->[\Delta] B}
```



```
\mhchemoptions{font=sf} ...
```



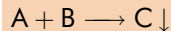
```
\ce{Me*H2O}
```

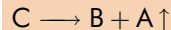


mhchem.sty: Zeilen 1026 und 1030:

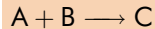
```
\mhchem@mathortext@ii{\, \cdot \,}{\, \ensuremath{\{\cdot\}} \,}%
```

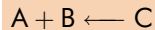
## Präzipitate und Gase

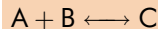
$$\text{\ce{A + B -> C v}}$$


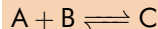
$$\text{\ce{C -> B + A ^}}$$


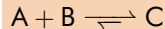
## Reaktionsgleichungen

$$\text{\ce{A + B -> C}}$$


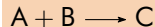
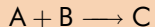
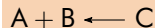
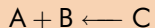
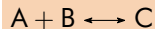
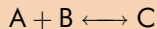
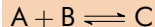
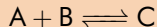
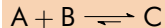
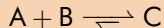
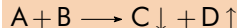
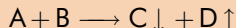
$$\text{\ce{A + B <- C}}$$


$$\text{\ce{A + B <-> C}}$$


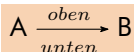
$$\text{\ce{A + B <=> C}}$$


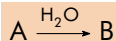
$$\text{\ce{A + B <=>> C}}$$


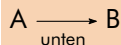


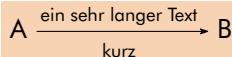
schönere Pfeile mit `arrows=pgf-filled``\ce{A + B -> C}``\ce{A + B <- C}``\ce{A + B <-> C}``\ce{A + B <=> C}``\ce{A + B <=>> C}``\ce{A + B -> C v + D ^}`

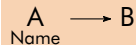
## Drunter und Drüber

$$\backslash\ce{A ->[oben][unten] B}$$


$$\backslash\ce{A ->[\backslash\ce{H2O}] B}$$


$$\backslash\ce{A ->[][\backslash\text{unten}] B}$$


$$\backslash\ce{A ->[\backslash\text{ei...xt}][\backslash\text{kurz}] B}$$


$$\backslash\ce{\$\underset{\backslash\text{Name}}{\backslash\ce{A}}\$ -> B}$$


- Text nur einzellig

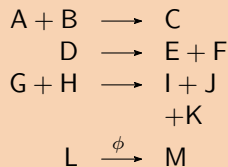
## Gleichungen ausrichten

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

```
\setlength{\arraycolsep}{.25em}

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

```



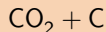
## Gleichungen nummerieren

- nummerierte Umgebungen verwenden
  - ▣ 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

```



Wie in C 2 zu sehen ...

## 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 TUBAFprotokoll1 spezielle Umgebung `rslist`

```
\begin{rslist}
  \rs{R11}
  \rs{R22}
\end{rslist}
```

```
R 11  Leicht entzündlich.
R 22  Gesundheitsschädlich
      beim Verschlucken.
```

## 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 TUBAFprotokoll1 spezielle Umgebung `rslist`

```
\begin{rslist}
  \rs{R11}
  \rs{R22}
\end{rslist}
```

R 11 Leicht entzündlich.  
R 22 Gesundheitsschädlich  
beim Verschlucken.

# Strukturformeln

## Allgemeines

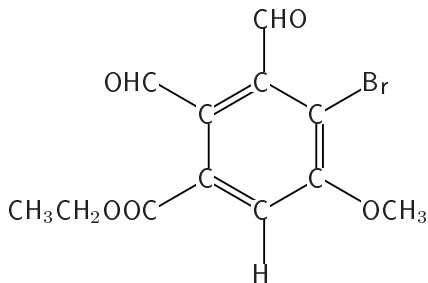
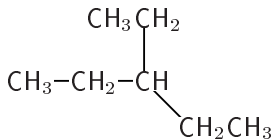
- für Strukturformeln
- Autor: Ingo Klöckl
- Version: 4/0d, 2001-10-03
- Anweisungen im LaTeX-file, aber noch externer `per1`-Aufruf nötig



```

\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}

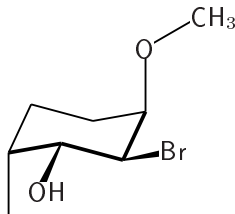
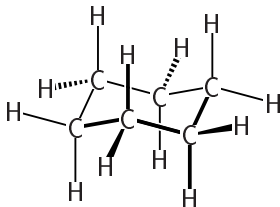
```



```

\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_(o) c2_(,oh)
    c3_(,br) c4_(o(r)
    _ch3) }
\end{chemistry}

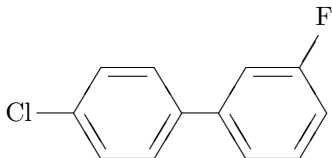
```



## 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}}
```



# Formatierung für Zeitschriften

## 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 Punktuation)

## unterstützte Zeitschriften:

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

## 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

## 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 Wertedarstellung<sup>1</sup>
- neu: `\standardstate`  $\rightsquigarrow$   $\ominus$

## Alkyl-Radikale

- Beispiel: `\iPr`  $\rightsquigarrow$  *i*-Pr
- verfügbar: `\nPr`, `\iPr`, `\nBu`, `\iBu`, `\sBu`, `\tBu`
- Optionen: `radhyphen`, `rademph`, `radsuper` und `radprefix`
- `\cstsetup{radhyphen=false,radsuper=true}\iPr \tBu`  $\rightsquigarrow$  *i*Pr <sup>t</sup>Bu

## Latinismen

`\etal` or `\invacu` plus `\latin{some text}`  
 $\rightsquigarrow$  *et al.* or *in vacuo* plus *some text*

<sup>1</sup>siehe Vortrag „Werte und Einheiten“ sowie TUBAFprotokoll-Beispiel

- `bpchem` chem. Formeln u. Namen (ers. v. `mhchem`)
- `chemarr` lange `leftrightharpoons` 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`)

**Glückauf!**

Znucalit:  $\text{Zn}_{12}\text{Ca}(\text{UO}_2)[(\text{OH})_{22}(\text{CO}_3)_3] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$