

Das chemmacros Bundle

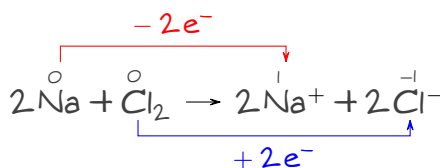
v3.0a

2012/02/01

Pakete **chemmacros**, **chemformula** und **ghsystem**

Clemens NIEDERBERGER

<https://bitbucket.org/cgnieder/chemmacros/>
contact@mychemistry.eu



Inhaltsverzeichnis

	8. Einheiten für die Verwendung mit si-unitx	10
I. Bevor es los geht	3	9. Säure/Base 11
1. Lizenz, Voraussetzungen und README	3	10. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen 11
2. Motivation	3	10.1. Ionenladungen 12
3. Laden des Bundles	4	10.2. Oxidationszahlen 13
4. Paketoptionen	4	10.3. Partialladungen und Ähnliches . 14
5. Setup	6	11. Reaktionsmechanismen 15
II. chemmacros	6	12. Redoxreaktionen 16
6. Teilchen, Ionen und Symbole	6	13. (Standard) Zustand, Thermodynamik 18
7. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke	8	13.1. Thermodynamische Größen . . 18
7.1. IUPAC-Namen 8		13.1.1. Neue Größen definieren 19
7.2. Stereodeskriptoren und Nomenklatur 8		13.1.2. Größen umdefinieren . . 20
7.3. Lateinische Ausdrücke 10		13.2. Zustandsgrößen 20
		14. Spektroskopie 21
		15. Befehle für mhchem 22
		16. Reaktionsumgebungen 23
		16.1. Durch CHEMMACROS definiert . . 23

16.2. Eigene Reaktionen	24	28.3. Anpassung	44
16.3. Liste der Reaktionen	25	29. Text unter Formeln	45
17. Phasen	26	29.1. Syntax	45
18. Newman-Projektionen	27	29.2. Anpassung	46
19. s, p und Hybrid-Orbitale	28	30. Format und Schrift	46
20. CHEMFORMULA-Unterstützung	31	31. Verwendung in Mathematik-Umgebungen	49
21. Übersicht über die Optionen	31	32. Weitere Beispiele	49
 III. chemformula	 33	 IV. ghsystem	 51
22. Setup	33	33. Setup	51
23. Das Grundprinzip	33	34. Die Gefahren- (H) und Sicherheits-	51
24. Stöchiometrische Faktoren	35	sätze (P) aufrufen	51
25. Summenformeln	36	34.1. Einfacher Aufruf	51
25.1. Addukte	36	34.2. Sätze mit Platzhaltern	52
25.2. Tiefstellungen	37	34.3. Sätze mit Lücken	53
25.3. Befehle	37	34.4. Kombinierte Sätze	54
25.4. Ladungen und andere Hochstel-		35. Piktogramme	54
lungen	38	35.1. Die Bilder	54
25.5. Bindungen	38	35.2. Der Bildtyp hängt von der Engi-	
25.6. Anpassung	39	ne ab	56
26. Spezielle Input-Typen	40	36. Verfügbare Sprachen	57
27. Geschützter Input	41	37. Liste aller Sätze	57
27.1. Text	41	 V. Anhang	 67
27.2. Mathematik	41	Vorschläge und Bugreports	67
28. Pfeile	42	Index	68
28.1. Pfeiltypen	42		
28.2. Beschriftung	43		

Teil I.

Bevor es los geht

1. Lizenz, Voraussetzungen und README

Das **CHEMMACROS**-Bundle steht unter der \LaTeX Project Public License (LPPL) Version 1.3 oder später. (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>)

CHEMMACROS verwendet die Pakete `expl3`, `xparse`¹, `l3keys2e`² und `xfrac`³, die Teil der `l3kernel`⁴- und `l3packages`⁵-Bundles sind. `expl3` ist Teil des `l3kernel` und `xparse`, `l3keys2e` und `xfrac` sind Teil der `l3packages`.

Offensichtlich werden **CHEMFORMULA** und **GHSYSTEM** als Teil dieses Bundles geladen.

CHEMMACROS verwendet zudem `siunitx`⁶, `mathtools`⁷, `bm`⁸ und `environ`⁹ sowie `tikz`¹⁰ und die `TikZ` libraries `calc` und `arrows`.

Die Paketoption `bpchem` (Abschnitt 4) benötigt `bpchem`¹¹, die Paketoption `xspace` benötigt `xspace`¹² und die Paketoption `method = mhchem` benötigt `mhchem`¹³.

CHEMMACROS wurde 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 21 listet alle von **CHEMMACROS**' Optionen und ihre Module auf. In diesem Dokument werden Optionen `grün` und Module `rot` dargestellt.

CHEMFORMULA verwendet die Pakete **CHEMMACROS** und `nicefrac`¹⁴. **CHEMFORMULA** hat keine eigenen Paketoptionen sondern leitet alle weiter an **CHEMMACROS**.

GHSYSTEM verwendet die Pakete **CHEMMACROS**, `tabu`¹⁵, `longtable`¹⁶, `ifpdf`¹⁷ und `graphicx`¹⁸. **GHSYSTEM** hat keine eigenen Paketoptionen sondern leitet alle weiter an **CHEMMACROS**.

2. Motivation

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

Ich nehme an, dass fast jeder Chemiker, der \LaTeX für seine Dokumente verwendet, das großartige Paket `mhchem` kennt. **CHEMFORMULA** soll *kein* Ersatz für `mhchem` sondern eine Alternative sein. Ich überlegte eine ganze Zeit lang hin und her, ob ich **CHEMFORMULA** wirklich schreiben sollte. Ein paar Kleinigkeiten in `mhchem` haben mich 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. Letztlich hat mich der Spaß und die Herausforderung überzeugt.

¹ CTAN: `xparse` ² CTAN: `l3keys2e` ³ CTAN: `xfrac` ⁴ CTAN: `l3kernel` ⁵ CTAN: `l3packages` ⁶ CTAN: `siunitx`
⁷ CTAN: `mathtools` ⁸ CTAN: `bm` ⁹ CTAN: `environ` ¹⁰ CTAN: `pgf` ¹¹ CTAN: `bpchem` ¹² CTAN: `xspace` ¹³ CTAN: `mhchem`
¹⁴ CTAN: `nicefrac` ¹⁵ CTAN: `tabu` ¹⁶ CTAN: `longtable` ¹⁷ CTAN: `ifpdf` ¹⁸ CTAN: `graphicx`

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. Wenn Sie zufrieden mit mhchem sind, gibt es keinen Grund, zu **CHEMFORMULA** zu wechseln. Aber vielleicht sind Sie ja neugierig.

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 wurde¹⁹, 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.

3. Laden des Bundles

Das Laden von **CHEMMACROS** via

```
1 \usepackage{chemmacros} % 'chemmacros', 'formula' and 'ghs' are loaded
```

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

```
1 \usepackage[ghs=false]{chemmacros} % 'chemmacros' and 'formula' 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} % 'chemmacros', 'formula' and 'ghs' are loaded
2 or
3 \usepackage[ghs=false]{chemformula} % 'chemmacros' and 'formula' are loaded
```

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:

¹⁹ http://www.unece.org/trans/danger/publi/ghs/implementation_e.html

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

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

Sowohl `CHEMFORMULA` als auch `GHSYSTEM` haben keine eigenen Paketoptionen. Wenn Sie sie explizit laden, können ihnen `CHEMMACROS`' Optionen gegeben werden. Sie werden dann an `CHEMMACROS` weitergereicht.

- 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 Ladungen²⁰: reale (+/-) und formale (\oplus/\ominus) 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` \oplus und `\oplus` \oplus . Default = `chem`
- option** `detect-bold` = true/false Diese Option bestimmt, ob Makros wie `\pKa` eine fette Schriftserie erkennen. **fetter** pK_S Text vs. **fetter** pK_S Text. Default = false
- option** `EZ` = chemmacros/cool Der Befehl `\E` wird durch das Paket `cool`²¹ ebenfalls definiert. Mit dieser Option können Sie wählen, welche Definition verwendet wird, siehe Seite 9. Default = `chemmacros`
- option** `german` = true/false Diese Option ändert die Befehle `\pKa`, `\sld` und `\lqd`. Default = false.
- option** Diese Option hat den Alias `ngerman`.
- option** `ghs` = true/false Das Paket `GHSYSTEM` abschalten. Die Einstellung `ghs` = false wird das Laden von `GHSYSTEM` unterbinden. Default = true
- option** `method` = chemformula/mhchem Sie können wählen, ob `CHEMMACROS` `mhchem` oder `CHEMFORMULA` für die Reaktionsumgebungen (siehe Abschnitt 16) und die Teilchen (siehe Abschnitt 6) verwendet. Default = `chemformula`. 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 der `CHEMFORMULA` Einstellung `\chemsetup[chemformula]{font-spec={[[Color=darkgray]Latin Modern Sans}}` gesetzt.
- option** `version` = 1/2/bundle Diese Option stellt die Definition einiger Befehle wieder her, so dass Dokumente, die mit v1.* gesetzt wurden, Korrekt kompilieren. Default = `bundle`. Eigentlich sind 2 und `bundle` Aliase. Diese Option kann nur in der Präambel gesetzt werden.

²⁰ Vielen Dank an Christoph Schäfer, der mich darauf aufmerksam machte, dass v1.1 die Ladungen zu nachlässig behandelte! ²¹ CTAN: `cool`

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.

Teil II.

chemmacros

6. Teilchen, Ionen und Symbole

Einige einfache Makros, um häufig verwendete Teilchen darzustellen. Außerdem ein Symbol. Bitte beachten Sie, dass sie unterschiedlich dargestellt werden, je nach dem, welche Paketoptionen Sie verwenden. Diese Befehle können auch im Mathematikmodus eingesetzt werden.

`\Hp1` H^+ (Proton)

`\Hyd` OH^- (Hydroxid)

`\HtO` H_3O^+ (Oxoniumion) (H three O)

`\water` H_2O

`\el` e^- (Elektron)

`\prt` p^+ (Proton)

`\ntr` n^0 (Neutron)

`\Nu` Nu^- (Nukleophil)

`\El` E^+ (Elektrophil)

`\ba` ba^- (Base)

`\fplus` \oplus

`\fminus` \ominus

`\transitionstatesymbol` \neq (verwendet `TikZ`)

`\standardstate` \ominus . Dieses Symbol wird nur dann von `CHEMMACROS` bereitgestellt, wenn das Paket `chemstyle`²² nicht geladen wurde. Die Idee ist von dort ausgeliehen²³.

Ein weiterer Befehl erlaubt das Setzen von Radikalen mit Ladungen und Tiefstellungen.

`\R[<sign>]{<subscript>}`

```
1 \R[+]{tert} \R[-]{sek} \R{prim}  $\text{R}_{\text{tert}}^+ \text{R}_{\text{sek}}^- \text{R}_{\text{prim}}$ 
```

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

`particle` `elpair` = false/dots/dash

Sie hat nur dann Auswirkungen, wenn das Paket `chemfig`²⁴ geladen wurde, da sie dessen Befehl `\Lewis` verwendet.

```
1 % needs package 'chemfig'
2 \ba[elpair] \Nu[elpair=dash]  $\text{ba}^- \text{Nu}^-$ 
3
4 \chemsetup{particle}{elpair}  $\text{ba}^- \text{Nu}^-$ 
5 \ba \Nu
```

²² CTAN: `chemstyle` ²³ Vielen Dank an den Paketautoren [Joseph Wright](#). ²⁴ CTAN: `chemfig`

7. Nomenklatur, Stereodeskriptoren und lateinische Ausdrücke

7.1. IUPAC-Namen

Ähnlich wie das Paket `bpchem` stellt `CHEMMACROS` einen Befehl²⁵ 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`²⁶ 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[2.2.2.11,4]-undecane-2-do-
decyl-5-(heptadecylisododecylthioes-
ter)
```

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 `\^`.

7.2. Stereodeskriptoren und Nomenklatur

Die Makros dieses Abschnitts sollen das Schreiben von IUPAC-Namen vereinfachen.

Cahn-Ingold-Prelog

`\Rcip` (*R*)

`\Scip` (*S*)

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

Fischer

`\Dfi` *D*

`\Lfi` *L*

²⁵ Die Idee und die Umsetzung stammt aus dem Paket `bpchem` von Bjørn Pedersen. ²⁶ Eigentlich verwendet `\^` einen `CHEMFORMULA`-Befehl.

cis/trans, zusammen/entgegen, syn/anti & tert Bitte beachten Sie, dass die Befehle `\cis` und `\trans` auch von bpchem definiert werden. Wenn Sie das Paket laden, werden sie von CHEMMACROS überschrieben. Bei bpchem haben sie immer ein `\xspace` angehängt, bei CHEMMACROS nie.

`\cis` *cis*

`\trans` *trans*

`\Z` (*Z*)

`\E` (*E*) (`\E` wird auch durch das Paket cool definiert. Durch Verwenden der Paketoption `EZ = cool` werden anstelle von `\E` und `\Z` durch CHEMMACROS `\Ent` und `\Zus` bereitgestellt.)

`\syn` *syn*

`\anti` *anti*

`\tert` *tert*

ortho/meta/para

`\ortho` *o*

`\meta` *m*

`\para` *p*

Absolute Konfiguration (verwendet TikZ)

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

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

Beispiele:

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

D-Weinsäure =
 (2*S*,3*S*)-Weinsäure
 D-(–)-Threose =
 (2*S*,3*R*)-(–)-2,3,4-Trihydroxybutanal
cis-2-Butene =
 (*Z*)-2-Butene,
 (2*E*,4*Z*)-Hexadiene
m-Xylol =
 1,3-Dimethylbenzene

7.3. Lateinische Ausdrücke

Zuletzt gibt es diese beiden Makros für lateinische Ausdrücke:

`\insitu` *in situ*

`\abinitio` *ab initio*

Wenn Sie das Paket `chemstyle` ebenfalls geladen haben²⁷, werden sie mit `chemstyle`s Befehl `\latin` definiert. Das bedeutet, dass ihr Erscheinungsbild dann von `chemstyle`s Option `abbremp` abhängt:

1	<code>\insitu, \abinitio\</code>	<i>in situ, ab initio</i>
2	<code>\cstsetup{abbremp=false}</code>	in situ, ab initio
3	<code>\insitu, \abinitio</code>	

Wenn `chemstyle` nicht geladen wurde werden sie immer *kursiv* gesetzt.

8. 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` cm³ Die Einheiten `\cmc`, `\molar` und `\Molar` werden durch das Paket `chemstyle` ebenfalls definiert. `CHEMMACROS` definiert sie nur, wenn `chemstyle` nicht geladen wurde.

²⁷ `chemstyle` definiert andere ähnliche Befehle wie *et al.*, *in vacuo*.

`\molar` mol dm⁻³

`\moLar` mol L⁻¹

`\Molar` M

`\MolMass` g mol⁻¹

`\normal` N

`\torr` torr

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

9. Säure/Base

Einfache Darstellung von pH , pK_S ... (der Befehl `\pKa` hängt von der Paketoption `german` ab, siehe Abschnitt 4.)

`\pH` pH

`\pOH` pOH

`\Ka` K_S

`\Kb` K_B

`\Kw` K_W

`\pKa[<num>]` `\pKa`: pK_S , `\pKa[1]`: pK_{S1}

`\pKb[<num>]` `\pKb`: pK_B , `\pKb[1]`: pK_{B1}

`\p{<anything>}` z. B.: `\p{\Kw}` pK_W

1	<code>\Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]\</code>	$K_S K_B pK_S pK_{S1} pK_B pK_{B1}$
2	<code>\chemsetup[option]{german=true}</code>	$K_S K_B pK_S pK_{S1} pK_B pK_{B1}$
3	<code>\Ka \Kb \pKa \pKa[1] \pKb \pKb[1]</code>	

10. Oxidationszahlen, reale und formale Ladungen

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

10.1. Ionenladungen

Einfache Verwendung von (realen) Ladungen:

`\pch[<number>]` positive Ladung (**plus** + **charge**)

`\mch[<number>]` negative Ladung (**minus** + **charge**)

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

Das gleiche für formale Ladungen:

`\fpch[<number>]` positive Ladung

`\fmch[<number>]` negative Ladung

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

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:

1	<code>\chemsetup[charges]{append=false}</code>	
2	<code>\ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}</code>	$\text{H}_{(\text{aq})}^+ \text{H}_{(\text{aq})}^+$
3		$\text{H}_{(\text{aq})}^+ \text{H}_{(\text{aq})}^+$
4	<code>\chemsetup[charges]{append=true}</code>	
5	<code>\ce{H\pch\aq} \ce{H\aq\pch}</code>	$\text{H}_{(\text{aq})}^+ \text{H}_{(\text{aq})}^+$

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

1	<code>\chemsetup[charges]{append=false}</code>	
2	<code>\ce{\ox{1,H}\pch\aq}</code>	$\text{H}_{(\text{aq})}^+$
3		$\text{H}_{(\text{aq})}^+$
4	<code>\chemsetup[charges]{append=true}</code>	
5	<code>\ce{\ox{1,H}\pch\aq}</code>	$\text{H}_{(\text{aq})}^+$

10.2. Oxidationszahlen

Eingabe von Oxidationszahlen::

`\ox[<keyval>]{<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}
   I      II    -II-I
Na, Ca, S, 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 $\overset{1.2}{X}$. Default = comma

```
1 \ox[roman=false]{2,Ca} \ox{2,Ca} \ \overset{2}{Ca} \overset{II}{Ca}
2 \ox[pos=super]{3,Fe}-Oxid \ \overset{Fe^{III}}{Fe}-Oxid
3 \ox[pos=side]{3,Fe}-Oxid \ \overset{Fe(III)}{Fe}-Oxid
4 \ox[parse=false]{?,Mn} \overset{?}{Mn}
```

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

```
1 \ox{3,Fe} \ox*{3,Fe} \overset{III}{Fe} \overset{III}{Fe}
```

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}}
   +I  +II -II±0
Na, Ca, S, F2
```

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

Vergleichen Sie O_2^{-1} mit O_2^{-1}

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

```
1   \ox{.5,\ch{Br2}} \ch{"\ox{1/3,I}" 3+}       $\text{Br}_2 \text{I}_3^{0.5 \frac{1}{3}+}$ 
```

Der Bruch verwendet den `\sfrac`-Befehl des `xfrac`-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.

10.3. Partialladungen und Ähnliches

Vielleicht selten genutzt, manchmal aber praktisch:

`\delp` $\delta+$ (delta + plus)

`\delm` $\delta-$ (delta + minus)

`\fdelp` $\delta\oplus$

`\fdelm` $\delta\ominus$

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

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

$\delta\oplus \quad \delta\ominus$
 $\text{H} - \text{Cl} \quad \text{Br} - \text{H}$

Auch diese Makros lassen sich gut mit chemfig einsetzen.

`\scrp` + (scriptstyle + plus)

`\scrm` – (scriptstyle + minus)

`\fscrp` \oplus

`\fscrm` \ominus

`\fsscrp` \oplus (verwendet `\scriptscriptstyle`)

`\fsscrm` \ominus

```
1 \setatomsep{1.8em}\chemfig{CH_3-\chemabove{C}{\scrp}(-[6]C|H_3)-\vphantom{H_3}CH_3}
2
3 \chemfig{\fmch{}}|O-\chemabove{N}{\fscrp}(-[1]O|\fmch)-[7]O|\fmch}
  CH3—C+—CH3
        |
        CH3
        |
⊕
O⊖—N—O⊖
    |
    O⊖
```

11. 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 $E1_{cb}$

12. Redoxreaktionen

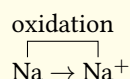
CHEMMACROS stellt zwei Befehle zur Verfügung, mit denen die Übertragung von Elektronen in Redoxreaktionen angezeigt werden kann²⁸. Beide Befehle verwenden **TikZ**.

`\OX{<name>,<atom>}`

`\redox(<name1>,<name2>)[<tikz>][<num>]{<text>}`

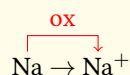
`\OX` setzt `<atom>` in einen Knoten (eine „Node“) mit dem Namen `<name>`. Wenn Sie zwei `\OX` verwendet haben, dann können sie mit `\redox` verbunden werden. Die Namen der zu verbindenden Knoten werden in runde Klammern geschrieben. Da `\redox` ein Tikzpicture mit den Optionen `remember picture, overlay`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

```
1 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b){oxidation}
```



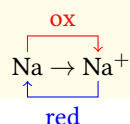
Diese Linie kann mit **TikZ**-Keys in `[<tikz>]` angepasst werden:

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



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}
```



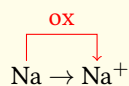
Die Voreinstellung der vertikalen Linien kann mit

`\redox` `\dist = <dim>` Default = `.6em`

²⁸ Dank an [Peter Cao](#), der dieses Feature vorgeschlagen hat.

angepasst werden:

```
1 \chemsetup{redox/dist=1em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}
```

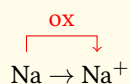


Zusätzlich erlaubt die Option

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

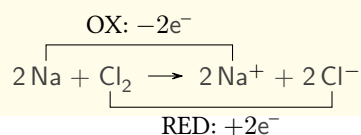
den Abstand zwischen Atom und Anfang der Linie zu verändern.

```
1 \chemsetup{redox/sep=.5em}
2 \OX{a,Na} $\rightarrow$ \OX{b,Na}\pch\redox(a,b)[->,red]{ox}
```

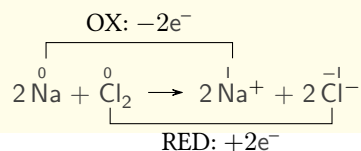


Beispiele:

```
1 \ch{ 2 "\OX{o1,Na}" + "\OX{r1,Cl}" {}2 -> 2 "\OX{o2,Na}" \pch{} + 2 "\OX{r2,Cl}" \
mch }
2 \redox(o1,o2){\small OX: $- 2\text{e}$}
3 \redox(r1,r2)[][-1]{\small RED: $+ 2\text{e}$}
```



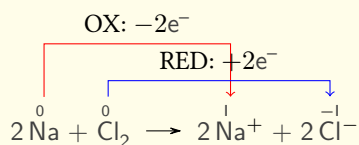
```
1 \ch{ 2 "\OX{o1,\ox{0,Na}}" + "\OX{r1,\ox{0,Cl}}" {}2 -> 2 "\OX{o2,\ox{+1,Na}}" \pch
{} + 2 "\OX{r2,\ox{-1,Cl}}" \mch }
2 \redox(o1,o2){\small OX: $- 2\text{e}$}
3 \redox(r1,r2)[][-1]{\small RED: $+ 2\text{e}$}
```



```

1 \ch{ 2 "\OX{o1,\ox{0,Na}}" + "\OX{r1,\ox{0,Cl}}" {}2 -> 2 "\OX{o2,\ox{+1,Na}}" \pch
   {} + 2 "\OX{r2,\ox{-1,Cl}}" \mch }
2 \redox(o1,o2)[draw=red,->][3.33]{\small OX: $- 2\text{el}$}
3 \redox(r1,r2)[draw=blue,->]{\small RED: $+ 2\text{el}$}

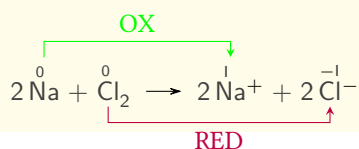
```



```

1 \ch{ 2 "\OX{o1,\ox{0,Na}}" + "\OX{r1,\ox{0,Cl}}" {}2 -> 2 "\OX{o2,\ox{+1,Na}}" \pch
   {} + 2 "\OX{r2,\ox{-1,Cl}}" \mch }
2 \redox(o1,o2)[green,-stealth]{\small OX}
3 \redox(r1,r2)[purple,-stealth][-1]{\small RED}

```



13. (Standard) Zustand, Thermodynamik

13.1. Thermodynamische Größen

Die folgenden Befehle verwenden siunitx:

`\Enthalpy[<keyval>](<subscript>){<value>}`

`\Entropy[<keyval>](<subscript>){<value>}`

`\Gibbs[<keyval>](<subscript>){<value>}`

Ihre Verwendung ist ziemlich selbsterklärend:

1	<code>\Enthalpy{123} \\\</code>	$\Delta H^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$
2	<code>\Entropy{123} \\\</code>	$S^\ominus = 123 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
3	<code>\Gibbs{123}</code>	$\Delta G^\ominus = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$

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 \Enthalpy[unit=\kilo\joule][-285] \ \ \Delta H^\ominus = -285 \text{kJ}
2 \Gibbs[delta=false][0] \ \ \Delta G^\ominus = 0 \text{kJ mol}^{-1}
3 \Entropy[delta=\Delta,exponent=]{56.7} \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 \Enthalpy{-1234.56e3} \ \
2 \sisetup{per-mode=symbol,exponent-product=\cdot,output-decimal-marker={,},group-four
  -digits=true}
3 \Enthalpy{-1234.56e3}

\Delta H^\ominus = -1234.56 \times 10^3 \text{kJ mol}^{-1}
\Delta H^\ominus = -1\,234,56 \cdot 10^3 \text{kJ/mol}
```

13.1.1. Neue Größen definieren

Mit dem Befehl

`\setnewstate[<keyval>]{<name><symbol>{<unit>}}`

können neue Größen definiert werden.

```
1 \setnewstate{Helmholtz}{A}{\kilo\joule\per\mole}
2 \setnewstate[subscript-left=false,exponent=]{ElPot}{E}{\volt}
3 \Helmholtz{123.4} \ \
4 \ElPot{-1.1} \ \
5 \ElPot[exponent=0]{$\ch{Sn}|\ch{Sn^2+}||\ch{Pb^2+}|\ch{Pb}}{0.01}

\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>`

13.1.2. Größen umdefinieren

Mit

```
\renewstate[<keyval>]{<name><symbol>{<unit>}}
```

kann man bestehende Größen umdefinieren:

```
1 \renewstate{Enthalpy}{h}{\joule}           $\Delta_f h^\ominus = 12.5\text{J}$ 
2 \Enthalpy(f){12.5}
```

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

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

```
1 \setnewstate[exponent=]{enthalpy}{h}{\kilo\joule\per\mole}% molar
2 \renewstate[exponent=]{Enthalpy}{H}{\kilo\joule}% absolute
3 \enthalpy{-12.3} \Enthalpy{-12.3}
```

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

13.2. Zustandsgrößen

Die Befehle, die in Abschnitt 13.1 vorgestellt wurden, verwenden intern den Befehl²⁹

```
\State[<keyval>]{<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}}, \State[exponent=\
  SI{1000}{\celsius}]{H}
```

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

Wieder hat er (fast) die gleichen Optionen:

state **exponent** = <anything>

state **subscript-left** = true/false

state **delta** = <anything>/false

²⁹ Beachten Sie, dass {<subscript>} ein *optionales* Argument ist.

14. Spektroskopie

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:

^1H -NMR (400 MHz, CDCl_3): $\delta = 1.59\ldots$

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

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

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

Alle Argumente sind optional! Ohne Argumente³⁰ erhalten wir:

1	<code>\NMR \</code>	^1H -NMR: δ
2	<code>\NMR*</code>	^1H -NMR

Das erste Argument spezifiziert die Art der NMR:

1	<code>\NMR{13,C}</code>	^{13}C -NMR: δ
---	-------------------------	--------------------------------

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

1	<code>\NMR(400)</code>	^1H -NMR (400 MHz): δ
---	------------------------	---------------------------------------

Auch mit Einheit:

1	<code>\NMR(4e8,\hertz)</code>	^1H -NMR (4×10^8 Hz): δ
---	-------------------------------	---

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

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

Mit dem dritten Befehl schließlich kann das Lösungsmittel angegeben werden:

1	<code>\NMR[CDCl3]</code>	^1H -NMR (CDCl_3): δ
---	--------------------------	---

Die Optionen

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

nmr **nucleus** = {<num>,<elem>} Default = {1,H}

legen die Default-Werte fest.

Beispiele:

```
1  {\chemsetup[nmr]{nucleus={13,C}}\NMR(100) \NMR*(100) } \\  
2  \NMR*{19,F}[CFCl3] \NMR*{19,F}(285)[CFCl3] \\  
3  \NMR(400)[CDCl3] = \num{1.59} (q, 1H, \textit{J} = \SI{11.6}{\hertz}, H-4)
```

¹³C-NMR (100 MHz): δ ¹³C-NMR (100 MHz)
¹⁹F-NMR (CFCl₃) ¹⁹F-NMR (285 MHz, CFCl₃)
¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ = 1.59 (q, 1H, J = 11.6 Hz, H-4)

15. 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 CHEM-FORMULA.

CHEMMACROS stellt nur einen Befehl speziell für mhchem³¹ bereit. Er erlaubt es, Text unter eine Formel zu schreiben.

\mhName[<keyval>]{<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** = Die Schriftgröße des Textes. Default = **\tiny**

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

³⁰ Alle Argumente können beliebig kombiniert werden. Der Befehl kann auch im Mathematik-Modus eingesetzt werden.

³¹ CHEMFORMULA hat seine eigene Möglichkeit.

```

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}

4 C2H5Cl + Pb/Na → Pb(C2H5)4 + NaCl
                        former
                        antiknock
                        additive
4 C2H5Cl + Pb/Na → Pb(C2H5)4 + NaCl
                    former antiknock
                    additive

```

16. Reaktionsumgebungen

16.1. 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.

<pre> 1 Reaktion mit Zähler: 2 \begin{reaction} 3 A -> B 4 \end{reaction} </pre>	<p>Reaktion mit Zähler:</p> $A \rightarrow B \quad \{1\}$
---	---

<pre> 1 Reaktion ohne Zähler: 2 \begin{reaction*} 3 C -> D 4 \end{reaction*} </pre>	<p>Reaktion ohne Zähler:</p> $C \rightarrow D$
--	--

```

1  mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler:
2  \begin{reactions}
3    A      &-> B + C \\
4    D + E &-> F
5  \end{reactions}

```

mehrere ausgerichtete Reaktionen mit Zähler:

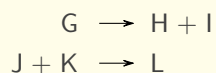


```

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>}`³².

```

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

```



16.2. Eigene Reaktionen

Sie können mit dem Befehl

`\newreaction[<keyval>]{<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`

³² Durch das mathtools Paket zur Verfügung gestellt.

Zum einen `star`, die auch die gesternte 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

`\newreaction[star]{reaction}{equation}` und

`\reaction[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 \newreaction[star,arg]{reactionsat}{alignat}
```

Damit ist die `reactionsat`-Umgebung definiert.

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

A	→	B	→	C	→	D	
aaaaa	→	bbbbb	→	cccc	→	dddd	{5}

A	→	B		C	→	D	
aaaaa	→	bbbbb	cccc	→	dddd	{6}	

16.3. 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.

`\listoreactions`

```
1 \listofreactions
```

Reaktionsverzeichnis

Reaktion {1}	23
Reaktion {2}	24
Reaktion {3}	24
Reaktion [4]	24
Reaktion {5}	25
Reaktion {6}	25
Reaktion {7}: Autoprotolyse	26
Reaktion {8}: Synthese von Alkanen	49

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

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

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

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 \begin{reaction}[Autoprotolyse]
2 2 H2O <=> H3O+ + OH-
3 \end{reaction}
```

$$2 \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^- \quad \{7\}$$

17. Phasen

Anzeigen der Phase einer Substanz.

\sld[<anything>] (f)

\lqd[<anything>] (fl)

\gas (g)

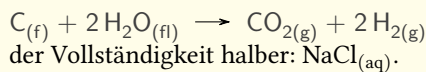
\aq (aq)

Bitte beachten Sie, dass die Befehle **\solid** und **\liquid** der v1.* nun **\sld** bzw. **\lqd** heißen. Beachten Sie außerdem, dass beide innerhalb von **\ch** kein optionales Argument haben!

```

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

```

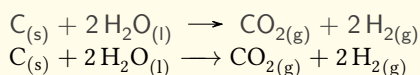


Mit der Paketoption `german = false` (siehe Abschnitt 4) erhält man die englischen Varianten:

```

1 {\chemsetup[option]{german=false}
2 \ch{C\sld{}} + 2 H2O\lqd{} -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{} }\
3 \ce{C\sld[s] + 2 H2O\lqd[l] -> CO2\gas{} + 2 H2\gas{}

```



Offensichtlich ist `\sld[s]` identisch mit `\lqd[s]`.

Man kann auch an andere Einsatzmöglichkeiten denken:

```

1 C\sld[Graphit]

```

$$\text{C}_{(\text{Graphit})}$$

18. Newman-Projektionen

CHEMMACROS stellt den Befehl

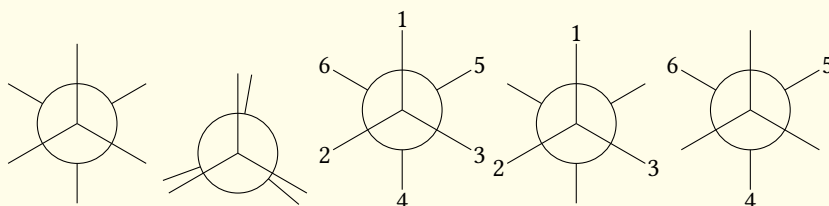
```
\newman[<keyval>](<angle>){<1>,<2>,<3>,<4>,<5>,<6>}
```

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

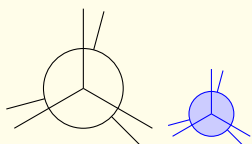
newman `scale` = `<factor>` Skaliert die ganze Projektion. Default = 1

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

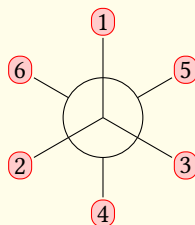
newman **atoms** = <tikz> Aussehen der Knoten, in die die Atome geschrieben werden, mit **TikZ**-Keys anpassen.

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

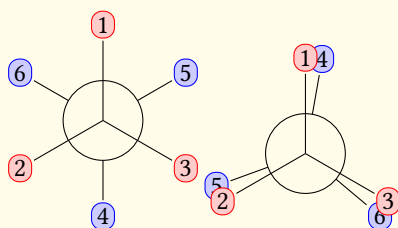
```
1 \chemsetup[newman]{angle=45} \newman{}
2 \newman[scale=.75,ring={draw=blue,fill=blue!20}]{}
```



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



```
1 \chemsetup[newman]{
2   atoms = {draw=red,fill=red!20,inner sep=2pt,rounded corners},
3   back-atoms = {draw=blue,fill=blue!20,inner sep=2pt,rounded corners}
4 }
5 \newman{1,2,3,4,5,6} \newman(170){1,2,3,4,5,6}
```



19. s, p und Hybrid-Orbitale

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

\orbital[<keyval>]{<type>}

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

s

p

sp

sp2

sp3

```
1 \orbital{s} \orbital{p} \orbital{sp} \orbital{sp2} \orbital{sp3}
```



Abhängig vom Typ stehen verschiedene Optionen zur Modifikation zur Auswahl:

orbital **phase** = +/- Ändern der Phase des Orbitals (alle Typen).

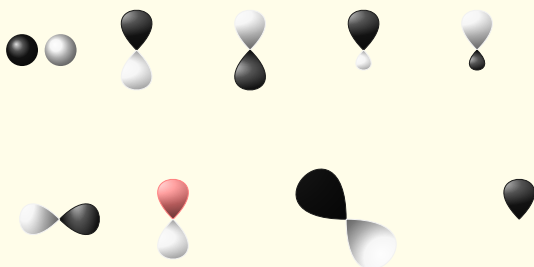
orbital **scale** = <factor> Ändern der Größe des Orbitals (alle Typen).

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:

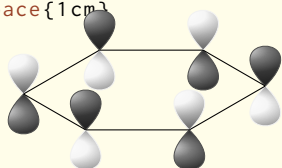
orbital **overlay** = true/false Das Orbital „braucht keinen Platz“; es wird mit dem *TikZ*-Key `overlay` gezeichnet.

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

```

1 \vspace{1cm}\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}-[:150,.9]{\
   orbital[phase=-]{p}}-[,1.3]\orbital{p}-[: -150,1.1]{\orbital[phase=-]{p}}??}
8 \vspace{1cm}

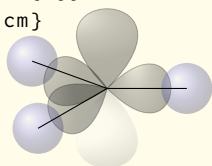
```



```

1 \vspace{2cm}\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[angle=170,half]{p}}{\orbital[angle=-150,half]{p}}(-[: -150]\orbital{s})-\
   orbital{s}}
11 \vspace{2cm}

```



20. CHEMFORMULA-Unterstützung

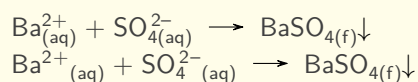
CHEMFORMULA und **CHEMMACROS** arbeiten eng zusammen. Das funktioniert aber noch nicht perfekt. Es gibt sogar Einschränkungen. Wenn Sie die vermeiden wollen, verwenden Sie einfach `method = mhchem` und vergessen diesen Abschnitt und den nächsten Teil.

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}    H⊕ + OH⊖ ⇌ H2O
2 \ch{H+ + OH- <=> H2O}
```

Die Befehle `\sld` und `\lqd` haben kein optionales Argument innerhalb von `\ch`.

```
1 \ch{Ba^{2+}\aq{}} + SO4^{2-}\aq{} -> BaSO4\sld{} v} \\
2 \ch{Ba^2+ \aq{} + SO4^2- \aq{} -> BaSO4\sld{} v}
```



Die Option `synchronize` erkennt das Format und die Schrifteinstellungen von **CHEMFORMULA** und übernimmt sie für die Teilchen-Makros.

21. Übersicht über die Optionen

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

`\chemsetup[<module>]{<keyval>}` oder

`\chemsetup{<module>/<keyval>}` gesetzt werden.

Manche Optionen können ohne Wert verwendet werden. Dann wird der unterstrichene Wert verwendet.

Option	Modul	Werte	Default	
Paketoptionen:				
<code>bpchem</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	false	Seite 5
<code>circled</code>	<code>option</code>	<u>formal</u> /all/none	formal	Seite 5
<code>circletype</code>	<code>option</code>	<u>chem</u> /math	chem	Seite 5
<code>detect-bold</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	false	Seite 5
<code>EZ</code>	<code>option</code>	<u>chemmacros</u> /cool	chemmacros	Seite 5
<code>german</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	false	Seite 5
<code>ghs</code>	<code>option</code>	<u>true</u> /false	true	Seite 5

Option	Modul	Werte	Default	
method	option	chemformula/formula	formula	Seite 5
strict	option	true/false	false	Seite 5
synchronize	option	true/false	false	Seite 5
version	option	1/2	2	Seite 5
xspace	option	true/false	true	Seite 6
\ba, \Nu:				
elpair	particle	dots/dash/false	false	Seite 7
\pch, \mch, \fpch, \fmch:				
append	charges	true/false	false	Seite 12
\ox:				
parse	ox	true/false	true	Seite 13
roman	ox	true/false	true	Seite 13
pos	ox	top/super/side	top	Seite 13
explicit-sign	ox	true/false	false	Seite 13
decimal-marker	ox	comma/point	point	Seite 13
\OX, \redox:				
dist	redox	<dim>	.6em	Seite 16
sep	redox	<dim>	.2em	Seite 17
\Enthalpy, \Entropy, \Gibbs:				
exponent		<anything>	\standardstate	Seite 18
delta		<anything>/false		Seite 18
subscript		left/right		Seite 19
unit		<unit>		Seite 19
\setnewstate, \renewstate:				
exponent		<anything>	\standardstate	Seite 18
delta		<anything>/false		Seite 18
subscript		<anything>		Seite 19
subscript-left		true/false		Seite 19
\State:				
exponent	state	<anything>	\standardstate	Seite 20
delta	state	<anything>/false		Seite 20
subscript-left	state	true/false		Seite 20
\NMR:				
unit	nmr	<unit>	\mega\hertz	Seite 21
nucleus	nmr	{<num>,<atom symbol>}	{1,H}	Seite 22
\newreaction:				
star		true/false	false	Seite 24
arg		true/false	false	Seite 24
list-name	reaction	<anything>	List of reactions	Seite 26
list-entry	reaction	<anything>	Reaction	Seite 26
\mhName:				
align	mhName	<alignment>	\centering	Seite 22
format	mhName	<commands>		Seite 22
fontsize	mhName	<fontsize>	\tiny	Seite 22
width	mhName	<dim>		Seite 22
\newman:				
angle	newman	<angle>	0	Seite 27
scale	newman	<factor>	1	Seite 27
ring	newman	<tikz>		Seite 28
atoms	newman	<tikz>		Seite 28

Option	Modul	Werte	Default	
<code>back-atoms</code>	<code>newman</code>	<code><tikz></code>		Seite 28
<code>\orbital <type> = s/p/sp/sp2/sp3:</code>				
<code>phase</code>	<code>orbital/<type></code>	<code>+/-</code>	<code>+</code>	Seite 29
<code>scale</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><factor></code>	<code>1</code>	Seite 29
<code>color</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><color></code>	<code>black</code>	Seite 29
<code>angle</code>	<code>orbital/<type></code>	<code><angle></code>	<code>90</code>	Seite 29
<code>half</code>	<code>orbital/p</code>	<code>true/false</code>	<code>false</code>	Seite 29
<code>overlay</code>	<code>orbital</code>	<code>true/false</code>	<code>false</code>	Seite 30
<code>opacity</code>	<code>ornital</code>	<code><num></code>	<code>1</code>	Seite 30

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	<code>\ch{H2O} \</code>	H_2O
2	<code>\ch{Sb2O3} \</code>	Sb_2O_3
3	<code>\ch{H+} \</code>	H^+
4	<code>\ch{CrO4^2-} \</code>	CrO_4^{2-}
5	<code>\ch{AgCl2-} \</code>	AgCl_2^-
6	<code>\ch{[AgCl2]-} \</code>	$[\text{AgCl}_2]^-$
7	<code>\ch{Y^{99+}} \</code>	Y^{99+}
8	<code>\ch{Y^{99+}} \</code>	Y^{99+}
9	<code>\ch{H2_{(aq)}} \</code>	$\text{H}_{2(\text{aq})}$
10	<code>\ch{NO3-} \</code>	NO_3^-
11	<code>\ch{(NH4)2S} \</code>	$(\text{NH}_4)_2\text{S}$
12	<code>\ch{^{227}_{90}Th+} \</code>	$^{227}_{90}\text{Th}^+$
13	<code>\$V_{\ch{H2O}}\$ \</code>	$V_{\text{H}_2\text{O}}$
14	<code>\ch{Ce^{IV}} \</code>	Ce^{IV}
15	<code>\ch{KCr(SO4)2 * 12 H2O}</code>	$\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$

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.

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

1	<code>\ch{A + B ->[a] C} \</code>	$A + B \xrightarrow{a} C$
2	<code>\ce{A + B ->[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 \ch{2} \\  
2 \ch{12}  
3  
4 % decimals:  
5 \ch{3.5} \\  
6 \ch{5,75}  
7  
8 % fractions:  
9 \ch{3/2} \\  
10 \ch{1_1/2}
```

	2
	12
	3.5
	5.75
	$\frac{3}{2}$
	$1\frac{1}{2}$

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}
```

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 = <dim> Der Leerraum nach einem stöchiometrischen Faktor. Eine $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge. Default = `.1667em`

```
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-frac`, 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-frac}{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.

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

$\frac{3}{2}$ $1\frac{1}{2}$

 $3/2 \quad 1^{1/2}$

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=.2em]{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>	H_2SO_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}`

`\ch{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>	H_2SO_4
---	-------------------------	-------------------------

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

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 `\ch{A\hspace{2mm}B}` wird einen Fehler geben, da `\hspace` in etwa so etwas sieht:
`\hspace{$_2$mm}`.

Siehe Abschnitt 27.1 für einen Ausweg.

25.4. Ladungen und andere Hochstellungen

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

1	<code>\ch{A^{x-}}</code>	<code>\</code>	A^{x-}
2	<code>\ch{A^x-}</code>	<code>\</code>	A^{x-}
3	<code>\ch{A^{x}-}</code>	<code>\</code>	A^{x-}
4	<code>\ch{A^{x-\$}}</code>	<code>\</code>	A^{x-}
5	<code>\ch{RNO2^{-.}}</code>	<code>\</code>	RNO_2^{--}
6	<code>\ch{^31H}</code>	<code>\</code>	3_1H
7	<code>\ch{^{14}6C}</code>	<code>\</code>	$^{14}_6C$
8	<code>\ch{^{58}_{26}Fe}</code>		$^{58}_{26}Fe$

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

1	<code>\ch{SO4^2-}</code>	<code>\ch{Ca^2+ SO4^2-}</code>	SO_4^{2-}	$Ca^{2+}SO_4^{2-}$
---	--------------------------	--------------------------------	-------------	--------------------

25.5. Bindungen

CHEMFORMULA kennt drei Sorten Bindungen:

1	einfach: <code>\ch{CH3-CH3}</code>	<code>\</code>	einfach: CH_3-CH_3
2	doppel: <code>\ch{CH2=CH2}</code>	<code>\</code>	doppel: $CH_2=CH_2$
3	dreifach: <code>\ch{CH+CH}</code>		dreifach: $CH \equiv CH$

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 = .3ex

`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. Als Default-Länge wird die Länge eines Halbgeviertstrichs verwendet, wie sie mit `\settowidth{<len>}{\textendash}` bestimmt wird.

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

```
1 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}          SO42- NH4+ Na+
```

Sie werden verschoben, wenn sie einer Tiefstellung *folgen*. Den Betrag der Verschiebung kann man mit der Option `charge-hshift` festlegen.

```
1 \chemsetup[chemformula]{charge-hshift=0pt}
2 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+} \\\
3 \chemsetup[chemformula]{charge-hshift=1ex}
4 \ch{SO4^2-} \ch{NH4+} \ch{Na+}
```

SO₄²⁻ NH₄⁺ Na⁺
SO₄²⁻ NH₄⁺ Na⁺

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

```
1 \ch{M^x+} \ch{SO4^2-} \\\
2 \chemsetup[chemformula]{charge-style = math}
3 \ch{M^x+} \ch{SO4^2-}
```

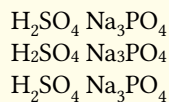
M^{x+} SO₄²⁻
M^{x+} SO₄²⁻

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

```

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

```

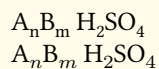


Sie können außerdem wählen, in welchem Modus die Tiefstellungen gesetzt werden:

```

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

```

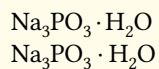


Mit der Option `adduct-space` kann der Leerraum links und rechts des Addukt-Zeichens festgesetzt werden.

```

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

```

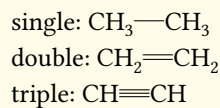


Die Länge der Bindungen ändern:

```

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

```



26. Spezielle Input-Typen

Es gibt einige “spezielle Input-Typen”. Sie bestehen nur aus einem Token, nämlich einem der folgenden:

`\ch{ + }` + Erstellt ein Plus-Zeichen zwischen Formeln mit Leerraum links und rechts:

`\ch{2 Na + Cl2}` 2Na + Cl₂

`\ch{ v }` ↓ Zeichen für eine Fällung/Niederschlag: `\ch{BaSO4 v}` BaSO₄↓

`\ch{ ^ }` ↑ Zeichen für entweichendes Gas: `\ch{H2 ^}` H₂↑

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

`plus-space = <dim>` Eine TeX-Länge. Default = .3em

```
1 \ch{A + B}\ \ A + B
2 \ch[plus-space=4pt]{A + B} A + B
```

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'}
```

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{ $<escaped math>$ }`

<pre>1 escaped text: \ch{"\$x\$" H2O} \\ 2 escaped math: \ch{\$x\$ H2O} \\ 3 \ch{\$2n\$ Na + \$n\$ Cl2 -> \$2n\$ NaCl}</pre>	<pre>escaped text: xH₂O escaped math: x H₂O 2n Na + n Cl₂ → 2n NaCl</pre>
---	--

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

`math-space` = <dim> Eine TeX-Länge. Default = .1667em

```
1 \ch{$2n$ Na + $n$ Cl2 -> $2n$ NaCl} \\
2 \chemsetup[chemformula]{math-space=.2em}
3 \ch{$2n$ Na + $n$ Cl2 -> $2n$ NaCl} \\
4 \ch{$A->B$}
```

$2n \text{ Na} + n \text{ Cl}_2 \rightarrow 2n \text{ NaCl}$

$2n \text{ Na} + n \text{ Cl}_2 \rightarrow 2n \text{ NaCl}$

$A \rightarrow B$

28. Pfeile

28.1. Pfeiltypen

Pfeile werden auf die gleiche intuitive Weise eingegeben wie bei mhchem. Es gibt sechs verschiedene Typen:

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

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

`\ch{ <-> }` ↔ Mesomerie-Pfeil

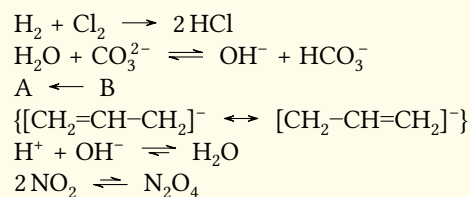
`\ch{ <=> }` ⇌ Gleichgewichts-Pfeil

`\ch{ <=>> }` ⇌ Gleichgewicht liegt rechts

`\ch{ <<=> }` ⇌ Gleichgewicht liegt links

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{H+ + OH- <=>> H2O} \\
6 \ch{2 NO2 <<=> N2O4}
```



28.2. Beschriftung

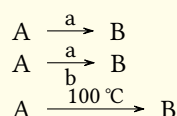
Die Pfeile haben zwei optionale Argumente für Beschriftungen.

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

```

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

```

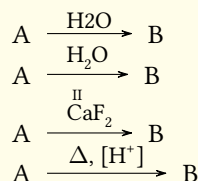


Der Beschriftungstext kann unabhängig vom Pfeil verarbeitet werden. Das Rezept ist einfach: verwenden Sie Leerzeichen.

```

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

```

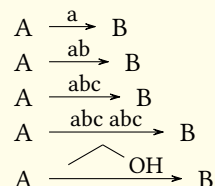


Mit den Leerzeichen verarbeitet **CHEMFORMULA** den Teil zwischen den Klammern als normalen Input. Die Pfeile lesen ihre Argumente erst *nach* der Verarbeitung. Wie Sie sehen können „wachsen“ die Pfeile mit der Länge der Beschriftungen. Konstant bleibt der überstehende Teil.

```

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}

```



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 \TeX -Länge. Default = 1.5ex

arrow-yshift = <dim> Verschiebt einen Pfeil nach oben (positiver Wert) oder nach unten (negativer Wert). Eine \TeX -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

arrow-tips = <type> Bestimmt die Pfeilspitzen. Im Prinzip könnten alle von *TikZ* Pfeilen verwendet werden. Die Option verlangt jedoch, dass erstens <type> selbst eine Pfeilspitze sein muss *und* dass zweitens die Spitzen left <type> und right <type> definiert sein müssen. Wenn Sie also nicht selbst Pfeilspitzen definieren, können Sie nur zwischen cf und to wählen. Default = cf

arrow-style = <tikz> *TikZ*-Keys zur freien Gestaltung der Pfeile.

compound-sep = <dim> Der Leerraum zwischen Formeln und Pfeilen. Eine \TeX -Länge. Default = 1ex

label-offset = <dim> Der Leerraum zwischen Pfeilen und ihrer Beschriftung. Eine \TeX -Länge. Default = 2pt

label-style = Die relative Schriftgröße der Beschriftung. Default = `\footnotesize`

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

```
1 Standard: \ch{A \Leftrightarrow[x][y] B} \\
2 l"anger: \ch[arrow-offset=12pt]{A \Leftrightarrow[x][y] B} \\
3 h"oher: \ch[arrow-yshift=2pt]{A \Leftrightarrow[x][y] B} \\
4 ausbalancierter: \ch[arrow-ratio=.8]{A \Leftrightarrow[x][y] B} \\
5 andere Pfeilspitzen: \ch[arrow-tips=to]{A \Leftrightarrow[x][y] B} \\
6 Bschriftung weiter weg: \ch[label-offset=4pt]{A \Leftrightarrow[x][y] B} \\
7 gr"o\ss erer Abstand zu Formeln: \ch[compound-sep=2ex]{A \Leftrightarrow[x][y] B} \\
8 anderes TikZ: \ch[arrow-style={thick,red}]{A \Leftrightarrow[x][y] B} \\
9 kleinere Beschriftungen: \ch[label-style=\tiny]{A \Leftrightarrow[x][y] B}
```

Standard: $A \xrightarrow[y]{x} B$
 länger: $A \xrightarrow[y]{x} B$
 höher: $A \xrightarrow[y]{x} B$
 ausbalancierter: $A \xrightarrow[y]{x} B$
 andere Pfeilspitzen: $A \xrightarrow[y]{x} B$
 Bschriftung weiter weg: $A \xrightarrow[y]{x} B$
 größerer Abstand zu Formeln: $A \xrightarrow[y]{x} B$
 anderes TikZ: $A \xrightarrow[y]{x} B$
 kleinere Beschriftungen: $A \xrightarrow[y]{x} B$

Wenn Sie Ihren eigenen `pgfarrows` oder passende Aliase so definieren³³, dass Sie die Spitzen `<type>`, `left <type>` und `right <type>` verfügbar haben, können Sie sie mit `arrow-tips` verwenden:

```
1 % 'left hook' and 'right hook' are already defined in the tikzlibrary 'arrows'
2 \pgfarrowsdeclarealias{hook}{hook}{hooks}{hooks}%
3 % 'left hook reversed' and 'right hook reversed' are already defined in the
  tikzlibrary 'arrows'
4 \pgfarrowsdeclarealias{hook reversed}{hook reversed}{hooks reversed}{hooks reversed}%
5 \ch[arrow-tips=hook]{A -> B <=> C} \\
6 \ch[arrow-tips=hook reversed]{A -> B <=> C}
```

$A \rightarrow B \rightleftharpoons C$
 $A \rightarrow B \rightleftharpoons C$

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:

```
1 \ch{!(ethanol)( CH2CH2OH )}
```

$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
ethanol

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

³³ Lesen Sie das PGFMANUAL zu Details.

H ₂ O	H ₂ O	H ₂ O	H ₂ O	H ₃ O ⁺
water	water	2n - 1	H ₂ O	oxonium

```
1 \ch{H2O~(!)} \ \ H2O (!)
2 \ch{A!{}}{()} A!()
```

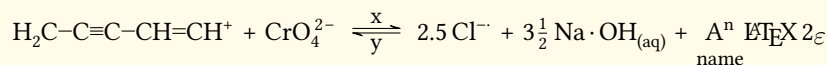
H ₂ SO ₄	→	B
Säure		
H ₂ SO ₄	→	B
Säure		
H ₂ SO ₄	→	B
N: Säure		
H ₂ SO ₄	→	B
Säure		

46

```

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

```

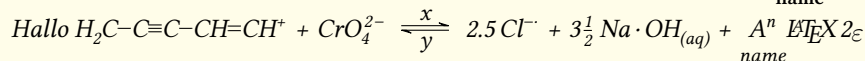
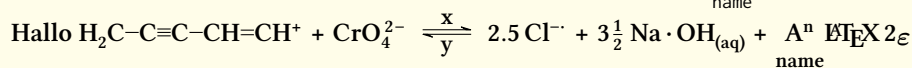
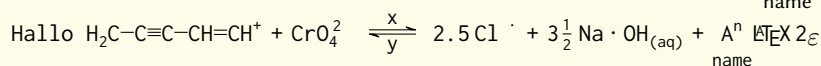
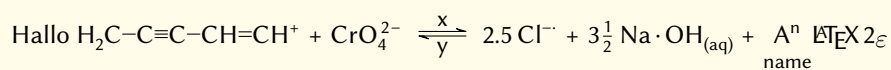


Nun ändern wir verschiedene Aspekte der Schrift und sehen, was passiert:

```

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.

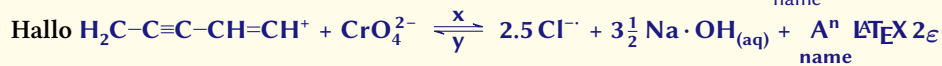
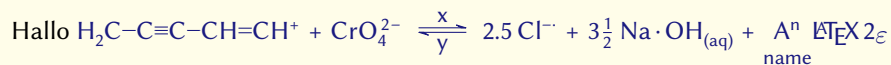
Wenn Sie dieses Default-Verhalten oder das Default-Format ändern wollen, können Sie diese Option verwenden:

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

```



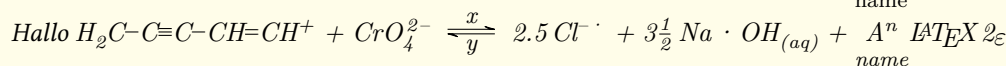
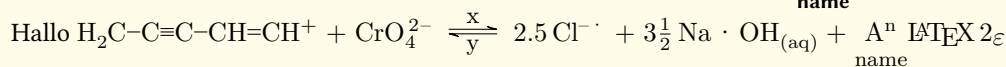
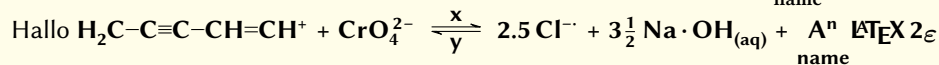
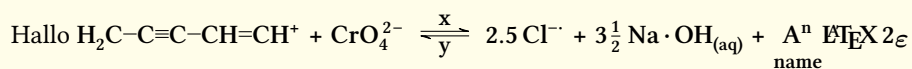
Sie können ebenfalls speziell die Schriftfamilie, Schriftserie und Schriftform des Output setzen:

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
```

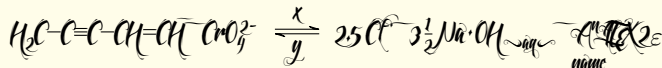
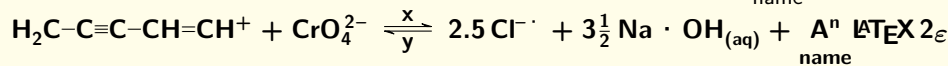
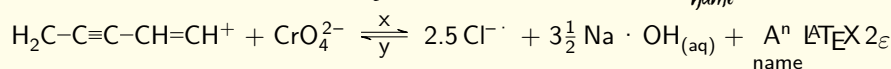
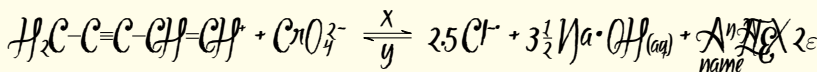
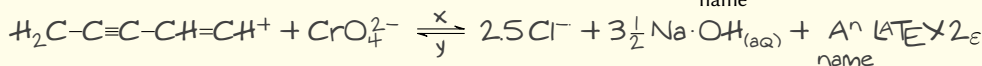
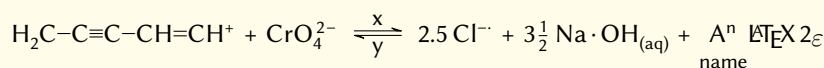


Wenn Sie Xe_{La}TeX oder Lua_{La}TeX verwenden und das Paket fontspec³⁴ geladen haben, können Sie die Schrift von **CHEMFORMULA** auch damit ändern:

font-spec = {} oder mit Optionen

font-spec = {[<options>]}

```
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={Feathergraphny Decoration}} \sample
```



³⁴ CTAN: fontspec

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.

```

1 \begin{align}
2 \ch[arrow-tips=to]{
3   H2O & \rightarrow[a] H2SO4 \\
4   Cl2 & \rightarrow[x][y] CH4
5 }
6 \end{align}
7 \begin{align*}
8 \ch{
9   RNO2 & \rightleftharpoons[+ e^-] RNO2^{\cdot-} \\
10  RNO2^{\cdot-} & \rightleftharpoons[+ e^-] RNO2^{2-}
11 }
12 \end{align*}

```

$$\begin{array}{lcl} \text{H}_2\text{O} & \xrightarrow{\text{a}} & \text{H}_2\text{SO}_4 \\ \text{Cl}_2 & \xrightarrow[\text{y}]{\text{x}} & \text{CH}_4 \end{array} \quad \begin{array}{l} (1) \\ (2) \end{array}$$

$$\begin{array}{lcl} \text{RNO}_2 & \rightleftharpoons^{+ e^-} & \text{RNO}_2^{\cdot-} \\ \text{RNO}_2^{\cdot-} & \rightleftharpoons^{+ e^-} & \text{RNO}_2^{2-} \end{array}$$

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}][ [ CoNi ] ] C_{n$}H
   _{$2n+2$} + $n$ H2O
3 \end{reaction}

```

$$\underset{\text{Synthesegas}}{n \text{ CO} + (2n + 1) \text{ H}_2} \xrightarrow[\text{[CoNi]}]{200^\circ \text{C}} \text{C}_n\text{H}_{2n+2} + n \text{ H}_2\text{O} \quad \{8\}$$

```

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

```

a)	$\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$	Chlormethan/Methylchlorid
b)	$\text{CH}_3\text{Cl} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{HCl}$	Dichlormethan/Methylenchlorid
c)	$\text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CHCl}_3 + \text{HCl}$	Trichlormethan/Chloroform
d)	$\text{CHCl}_3 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CCl}_4 + \text{HCl}$	Tetrachlormethan/Tetrachlorkohlenstoff

$$\begin{array}{l} \delta-\delta+ \\ \text{C-M} \quad (\leftrightarrow \text{C-Br}) \\ \text{X}\cdot + \cdot\text{Y} \rightleftharpoons \text{X-Y} + \text{Bindungsenergie} \\ \text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_{2(\text{g})} \longrightarrow \text{CO}_{2(\text{g})} + \text{H}_2\text{O}_{(\text{fl})} + \Delta H^\ominus \\ \Delta_f H^\ominus \quad \quad \quad \text{??} \quad \quad \quad 0 \quad \quad \quad -94.3 \quad -57.9 \quad -192.1 \end{array}$$
$$\begin{array}{lcl} \text{CH}_3\text{MgBr} + \text{Cu}^{\text{I}}\text{X} & \longrightarrow & \text{„CH}_3\text{Cu}^{\text{I}}\text{“} + \text{MgBrX} \quad \text{X=Br, I, CN} \\ 2 \text{ MeLi} + \text{CuI} & \longrightarrow & \text{Me}_2\text{CuLi} \quad + \text{Li} \\ & & \text{Dimethylcuprat (Gilman-Cuprat)} \end{array}$$
$$\begin{array}{lll} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3 + \text{Cl}_2 & \xrightarrow[h\nu]{\Delta} & \text{H}_3\text{CCH}_2\text{Cl} + \text{HCl} & \Delta H = -27.1 \text{ kJ} \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3 + \text{Cl}\cdot & \longrightarrow & \text{H}_3\text{CCH}_2\cdot + \text{HCl} & \Delta H = -5.0 \text{ kJ} \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2\cdot + \text{Cl}_2 & \longrightarrow & \text{H}_3\text{CCH}_2\text{Cl} + \text{Cl}\cdot & \Delta H = -23.0 \text{ kJ} \end{array}$$

Teil IV.

ghsystem

33. Setup

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

```
1 \chemsetup[ghsystem]{<options>} oder
2 \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.

```
1 \ghs{h}{200} \\
2 \ghs{H}{224} \\
3 \ghs{euh}{001} \\
4 \ghs{Euh}{202} \\
5 \ghs{p}{201}
```

H200: Instabil, explosiv
H224: Flüssigkeit und Dampf extrem entzündbar.
EUH001: In trockenem Zustand explosionsgefährlich.
EUH202: Cyanacrylat. Gefahr. Klebt innerhalb von Sekunden Haut und Augenlider zusammen. Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.
P201: Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.

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: Instabil, explosiv
2	<code>\ghs[space=\,]{h}{200} \\\</code>	H 200: Instabil, explosiv
3	<code>\ghs*{h}{200} \\\</code>	Instabil, explosiv
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` Show placeholders. Default = false

können sie sichtbar gemacht werden.

```

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

```

H340: Kann genetische Defekte verursachen.

H340: Kann genetische Defekte verursachen. *<Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht>*

H360: Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen.

H360: Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. *<konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt> <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht>*

H370: Schädigt die Organe.

H370: Schädigt die Organe *<oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt>. <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht>*

EUH208: Enthält *<Name des sensibilisierenden Stoffes>*. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.

EUH208: Enthält *<Name des sensibilisierenden Stoffes>*. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.

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: Kann genetische Defekte verursachen. So werden Sie der Gefahr ausgesetzt.

H360: Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. Das sind die Effekte

H370: Schädigt dieses Organ.

EUH208: Enthält Substanz. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.

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: BEI VERSCHLUCKEN:

P401: ... aufbewahren.

P411: Bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.

P413: Schüttgut in Mengen von mehr als kg bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.

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[dots=Arzt kontaktieren!]{p}{301} \\
2 \ghs[text=here]{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: BEI VERSCHLUCKEN:

P401: ... aufbewahren.

P411: Bei Temperaturen von nicht mehr als 50 °C aufbewahren.

P413: Schüttgut in Mengen von mehr als 5.0 kg bei Temperaturen von nicht mehr als 50 °C aufbewahren.

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: Kühl halten. Vor Sonnenbestrahlung schützen.

P301 + P330 + P331: BEI VERSCHLUCKEN: Mund ausspülen. KEIN Erbrechen herbeiführen.

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 2](#) zeigt alle Piktogramme und ihre Dateinamen.

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



Wenn Ihnen die Defaultgröße nicht gefällt, können Sie die Option

`scale = <factor>` Scales the pictogram. Default = 1

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

```
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 2: 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, `XYTEX` und `LuaTEX` `eps`-Dateien in `pdf`-Dateien konvertieren, vorausgesetzt, der Anwender hat Schreibrechte in dem Verzeichnis, in dem die Bilder gespeichert sind.

Die letztgenannte 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/jpg/png
```

jedoch frei wählen.

36. Verfügbare Sprachen

Bis jetzt sind die H- und P-Sätze nur auf deutsch und englisch verfügbar. Das Paket reagiert auf die `CHEMMACROS` Option `german`, erkennt aber die Spracheinstellung von `babel`³⁵ oder `polyglossia`³⁶ (noch) nicht.

Sie können die Sprache auch explizit wählen.

```
language = english/german
```

```
1 \ghs{h}{201}
2
3 \chemsetup[ghsystem]{language=english}
4 \ghs{h}{201}
```

H201: Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.
H201: Explosive; mass explosion hazard.

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 mich³⁷ 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
```

³⁵ CTAN: `babel` ³⁶ CTAN: `polyglossia` ³⁷ contact@mychemistry.eu

`table-row-sep` = <dim> Abstand zwischen den Zeilen. Eine 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`³⁸ 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 3](#) erzeugt wurde:

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

Tabelle 3: Alle H, EUH und P Sätze.

Nummer	Satz
H200	Instabil, explosiv
H201	Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.
H202	Explosiv; große Gefahr durch Splitter, Spreng- und Wurfstücke.
H203	Explosiv; Gefahr durch Feuer, Luftdruck oder Splitter, Spreng- und Wurfstücke.
H204	Gefahr durch Feuer oder Splitter, Spreng- und Wurfstücke.
H205	Gefahr der Massenexplosion bei Feuer.
H220	Extrem entzündbares Gas.
H221	Entzündbares Gas.
H222	Extrem entzündbares Aerosol.
H223	Entzündbares Aerosol.
H224	Flüssigkeit und Dampf extrem entzündbar.
H225	Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar.
H226	Flüssigkeit und Dampf entzündbar.
H228	Entzündbarer Feststoff.
H240	Erwärmung kann Explosion verursachen.
H241	Erwärmung kann Brand oder Explosion verursachen.
H242	Erwärmung kann Brand verursachen.
H250	Entzündet sich in Berührung mit Luft von selbst.

³⁸ CTAN: [booktabs](#)

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
H251	Selbsterhitzungsfähig; kann in Brand geraten.
H252	In großen Mengen selbsterhitzungsfähig; kann in Brand geraten.
H260	In Berührung mit Wasser entstehen entzündbare Gase, die sich spontan entzünden können.
H261	In Berührung mit Wasser entstehen entzündbare Gase.
H270	Kann Brand verursachen oder verstärken; Oxidationsmittel.
H271	Kann Brand oder Explosion verursachen; starkes Oxidationsmittel.
H272	Kann Brand verstärken; Oxidationsmittel.
H280	Enthält Gas unter Druck; kann bei Erwärmung explodieren.
H281	Enthält tiefkaltes Gas; kann Kälteverbrennungen oder -Verletzungen verursachen.
H290	Kann gegenüber Metallen korrosiv sein.
H300	Lebensgefahr bei Verschlucken.
H301	Giftig bei Verschlucken.
H302	Gesundheitsschädlich bei Verschlucken.
H304	Kann bei Verschlucken und Eindringen in die Atemwege tödlich sein.
H310	Lebensgefahr bei Hautkontakt.
H311	Giftig bei Hautkontakt.
H312	Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt.
H314	Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden.
H315	Verursacht Hautreizungen.
H317	Kann allergische Hautreaktionen verursachen.
H318	Verursacht schwere Augenschäden.
H319	Verursacht schwere Augenreizung.
H330	Lebensgefahr bei Einatmen.
H331	Giftig bei Einatmen.
H332	Gesundheitsschädlich bei Einatmen.
H334	Kann bei Einatmen Allergie, asthmaartige Symptome oder Atembeschwerden verursachen.
H335	Kann die Atemwege reizen.
H336	Kann Schläfrigkeit und Benommenheit verursachen.
H340	Kann genetische Defekte verursachen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
H341	Kann vermutlich genetische Defekte verursachen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H350	Kann Krebs erzeugen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H351	Kann vermutlich Krebs erzeugen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H360	Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. <i><konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt> <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H361	Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen oder das Kind im Mutterleib schädigen. <i><konkrete Wirkung angeben, sofern bekannt> <Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H362	Kann Säuglinge über die Muttermilch schädigen.
H370	Schädigt die Organe <i><oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt></i> . <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H371	Kann die Organe <i><oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt></i> schädigen. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H372	Schädigt die Organe <i><oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt></i> bei längerer oder wiederholter Exposition. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H373	Kann die Organe <i><oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt></i> schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. <i><Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht></i>
H400	Sehr giftig für Wasserorganismen.
H410	Sehr giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
H411	Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
H412	Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
H413	Kann für Wasserorganismen schädlich sein, mit langfristiger Wirkung.
H350i	Kann bei Einatmen Krebs erzeugen.

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
H360F	Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.
H360D	Kann das Kind im Mutterleib schädigen.
H361f	Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.
H361d	Kann vermutlich das Kind im Mutterleib schädigen.
H360FD	Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen. Kann das Kind im Mutterleib schädigen.
H361fd	Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen. Kann vermutlich das Kind im Mutterleib schädigen.
H360Fd	Kann die Fruchtbarkeit beeinträchtigen. Kann vermutlich das Kind im Mutterleib schädigen.
H360Df	Kann das Kind im Mutterleib schädigen. Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.
EUH001	In trockenem Zustand explosionsgefährlich.
EUH006	Mit und ohne Luft explosionsfähig.
EUH014	Reagiert heftig mit Wasser.
EUH018	Kann bei Verwendung explosionsfähige/entzündbare Dampf/Luft-Gemische bilden.
EUH019	Kann explosionsfähige Peroxide bilden.
EUH044	Explosionsgefahr bei Erhitzen unter Einschluss.
EUH029	Entwickelt bei Berührung mit Wasser giftige Gase.
EUH031	Entwickelt bei Berührung mit Säure giftige Gase.
EUH032	Entwickelt bei Berührung mit Säure sehr giftige Gase.
EUH066	Wiederholter Kontakt kann zu spröder oder rissiger Haut führen.
EUH070	Giftig bei Berührung mit den Augen.
EUH071	Wirkt ätzend auf die Atemwege.
EUH059	Die Ozonschicht schädigend.
EUH201	Enthält Blei. Nicht für den Anstrich von Gegenständen verwenden, die von Kindern gekaut oder gelutscht werden könnten.
EUH201A	Achtung! Enthält Blei.
EUH202	Cyanacrylat. Gefahr. Klebt innerhalb von Sekunden Haut und Augenlider zusammen. Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.
EUH203	Enthält Chrom(VI). Kann allergische Reaktionen hervorrufen.
EUH204	Enthält Isocyanate. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.
EUH205	Enthält epoxidhaltige Verbindungen. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
EUH206	Achtung! Nicht zusammen mit anderen Produkten verwenden, da gefährliche Gase (Chlor) freigesetzt werden können.
EUH207	Achtung! Enthält Cadmium. Bei der Verwendung entstehen gefährliche Dämpfe. Hinweise des Herstellers beachten. Sicherheitsanweisungen einhalten.
EUH208	Enthält <Name des sensibilisierenden Stoffes>. Kann allergische Reaktionen hervorrufen.
EUH209	Kann bei Verwendung leicht entzündbar werden.
EUH209A	Kann bei Verwendung entzündbar werden.
EUH210	Sicherheitsdatenblatt auf Anfrage erhältlich.
EUH401	Zur Vermeidung von Risiken für Mensch und Umwelt die Gebrauchsanleitung einhalten.
P101	Ist ärztlicher Rat erforderlich, Verpackung oder Kennzeichnungsetikett bereithalten.
P102	Darf nicht in die Hände von Kindern gelangen.
P103	Vor Gebrauch Kennzeichnungsetikett lesen.
P201	Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.
P202	Vor Gebrauch alle Sicherheitshinweise lesen und verstehen.
P210	Von Hitze/Funken/offener Flamme/heißen Oberflächen fernhalten. Nicht rauchen.
P211	Nicht gegen offene Flamme oder andere Zündquelle sprühen.
P220	Von Kleidung/.../brennbaren Materialien fernhalten/entfernt aufbewahren.
P221	Mischen mit brennbaren Stoffen/... unbedingt verhindern.
P222	Kontakt mit Luft nicht zulassen.
P223	Kontakt mit Wasser wegen heftiger Reaktion und möglichem Aufflammen unbedingt verhindern.
P230	Feucht halten mit ...
P231	Unter inertem Gas handhaben.
P232	Vor Feuchtigkeit schützen.
P233	Behälter dicht verschlossen halten.
P234	Nur im Originalbehälter aufbewahren.
P235	Kühl halten.
P240	Behälter und zu befüllende Anlage erden.
P241	Explosionssgeschützte elektrische Betriebsmittel/Lüftungsanlagen/Beleuchtung/... verwenden.
P242	Nur funkenfreies Werkzeug verwenden.
P243	Maßnahmen gegen elektrostatische Aufladungen treffen.
P244	Druckminderer frei von Fett und Öl halten.

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
P250	Nicht schleifen/stoßen/.../reiben.
P251	Behälter steht unter Druck: Nicht durchstechen oder verbrennen, auch nicht nach der Verwendung.
P260	Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen.
P261	Einatmen von Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol vermeiden.
P262	Nicht in die Augen, auf die Haut oder auf die Kleidung gelangen lassen.
P263	Kontakt während der Schwangerschaft und der Stillzeit vermeiden.
P264	Nach Gebrauch ... gründlich waschen.
P270	Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen.
P271	Nur im Freien oder in gut belüfteten Räumen verwenden.
P272	Kontaminierte Arbeitskleidung nicht außerhalb des Arbeitsplatzes tragen.
P273	Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
P280	Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.
P281	Vorgeschriebene persönliche Schutzausrüstung verwenden.
P282	Schutzhandschuhe/Gesichtsschild/Augenschutz mit Kälteisolierung tragen.
P283	Schwer entflammbare/flammhemmende Kleidung tragen.
P284	Atemschutz tragen.
P285	Bei unzureichender Belüftung Atemschutz tragen.
P231 + P232	Unter inertem Gas handhaben. Vor Feuchtigkeit schützen.
P235 + P410	Kühl halten. Vor Sonnenbestrahlung schützen.
P301	BEI VERSCHLUCKEN:
P302	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT:
P303	BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT (oder dem Haar):
P304	BEI EINATMEN:
P305	BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN:
P306	BEI KONTAMINierter KLEIDUNG:
P307	BEI Exposition:
P308	BEI Exposition oder falls betroffen:
P309	BEI Exposition oder Unwohlsein:
P310	Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P311	GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
P312	Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P313	Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P314	Bei Unwohlsein ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P315	Sofort ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P320	Besondere Behandlung dringend erforderlich (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett).
P321	Besondere Behandlung (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett).
P322	Gezielte Maßnahmen (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett).
P330	Mund ausspülen.
P331	KEIN Erbrechen herbeiführen.
P332	Bei Hautreizung:
P333	Bei Hautreizung oder -ausschlag:
P334	In kaltes Wasser tauchen/nassen Verband anlegen.
P335	Lose Partikel von der Haut abbürsten.
P336	Vereiste Bereiche mit lauwarmem Wasser auftauen. Betroffenen Bereich nicht reiben.
P337	Bei anhaltender Augenreizung:
P338	Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter ausspülen.
P340	Die betroffene Person an die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.
P341	Bei Atembeschwerden an die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.
P342	Bei Symptomen der Atemwege:
P350	Behutsam mit viel Wasser und Seife waschen.
P351	Einige Minuten lang behutsam mit Wasser ausspülen.
P352	Mit viel Wasser und Seife waschen.
P353	Haut mit Wasser abwaschen/duschen.
P360	Kontaminierte Kleidung und Haut sofort mit viel Wasser abwaschen und danach Kleidung ausziehen.
P361	Alle kontaminierten Kleidungsstücke sofort ausziehen.
P362	Kontaminierte Kleidung ausziehen und vor erneutem Tragen waschen.
P363	Kontaminierte Kleidung vor erneutem Tragen waschen.
P370	Bei Brand:

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
P371	Bei Großbrand und großen Mengen:
P372	Explosionsgefahr bei Brand.
P373	KEINE Brandbekämpfung, wenn das Feuer explosive Stoffe/Gemische/Erzeugnisse erreicht.
P374	Brandbekämpfung mit üblichen Vorsichtsmaßnahmen aus angemessener Entfernung.
P375	Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen.
P376	Undichtigkeit beseitigen, wenn gefahrlos möglich.
P377	Brand von ausströmendem Gas:Nicht löschen, bis Undichtigkeit gefahrlos beseitigt werden kann.
P378	... zum Löschen verwenden.
P380	Umgebung räumen.
P381	Alle Zündquellen entfernen, wenn gefahrlos möglich.
P390	Verschüttete Mengen aufnehmen, um Materialschäden zu vermeiden.
P391	Verschüttete Mengen aufnehmen.
P301 + P310	BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P301 + P312	BEI VERSCHLUCKEN: Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P301 + P330 + P331	BEI VERSCHLUCKEN: Mund ausspülen. KEIN Erbrechen herbeiführen.
P302 + P334	BEI KONTAKT MIT DER HAUT: In kaltes Wasser tauchen/nassen Verband anlegen.
P302 + P350	BEI KONTAKT MIT DER HAUT: Behutsam mit viel Wasser und Seife waschen.
P302 + P352	BEI KONTAKT MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen.
P303 + P361 + P353	BEI KONTAKT MIT DER HAUT (oder dem Haar): Alle verschmutzten, getränkten Kleidungsstücke sofort ausziehen. Haut mit Wasser abwaschen/duschen.
P304 + P340	BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.
P304 + P341	BEI EINATMEN: Bei Atembeschwerden an die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.
P305 + P351 + P338	BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
P306 + P360	BEI KONTAKT MIT DER KLEIDUNG: Kontaminierte Kleidung und Haut sofort mit viel Wasser abwaschen und danach Kleidung ausziehen.
P307 + P311	BEI Exposition: GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P308 + P313	BEI Exposition oder falls betroffen: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P309 + P311	BEI Exposition oder Unwohlsein: GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P332 + P313	Bei Hautreizung: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P333 + P313	Bei Hautreizung oder -ausschlag: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P335 + P334	Lose Partikel von der Haut abbürsten. In kaltes Wasser tauchen/nassen Verband anlegen.
P337 + P313	Bei anhaltender Augenreizung: Ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.
P342 + P311	Bei Symptomen der Atemwege: GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
P370 + P376	Bei Brand: Undichtigkeit beseitigen, wenn gefahrlos möglich.
P370 + P378	Bei Brand: ... zum Löschen verwenden.
P370 + P380	Bei Brand: Umgebung räumen.
P370 + P380 + P375	Bei Brand: Umgebung räumen. Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen.
P371 + P380 + P375	Bei Großbrand und großen Mengen: Umgebung räumen. Wegen Explosionsgefahr Brand aus der Entfernung bekämpfen.
P401	... aufbewahren.
P402	An einem trockenen Ort aufbewahren.
P403	An einem gut belüfteten Ort aufbewahren.
P404	In einem geschlossenen Behälter aufbewahren.
P405	Unter Verschluss aufbewahren.
P406	In korrosionsbeständigem/... Behälter mit korrosionsbeständiger Auskleidung aufbewahren.
P407	Luftspalt zwischen Stapeln/Paletten lassen.
P410	Vor Sonnenbestrahlung schützen.
P411	Bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.
P412	Nicht Temperaturen von mehr als 50 °C aussetzen.
P413	Schüttgut in Mengen von mehr als kg bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.
P420	Von anderen Materialien entfernt aufbewahren.

weiter auf der nächsten Seite

Nummer	Satz
P422	Inhalt in/unter ... aufbewahren.
P402 + P404	In einem geschlossenen Behälter an einem trockenen Ort aufbewahren.
P403 + P233	Behälter dicht verschlossen an einem gut belüfteten Ort aufbewahren.
P403 + P235	Kühl an einem gut belüfteten Ort aufbewahren.
P410 + P403	Vor Sonnenbestrahlung geschützt an einem gut belüfteten Ort aufbewahren.
P410 + P412	Vor Sonnenbestrahlung schützen und nicht Temperaturen von mehr als 50 °C aussetzen.
P411 + P235	Kühl und bei Temperaturen von nicht mehr als °C aufbewahren.
P501	Inhalt/Behälter ... zuführen.

Teil V.

Anhang

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-Mail³⁹ 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!

³⁹ contact@mychemistry.eu

Index

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

Symbols

<code>\-</code>	8
<code>\^</code>	8
<code>\ </code>	8

A

<code>\abinitio</code>	10
Absolute Konfiguration	9
<code>adduct-space</code>	39 f.
<code>align</code>	22
<code>angle</code>	27, 29
ANHANG	67
<code>\anti</code>	9
<code>append</code>	12
<code>\aq</code>	26
<code>arg</code>	24 f.
<code>arrow-offset</code>	44
<code>arrow-ratio</code>	44
<code>arrow-style</code>	44
<code>arrow-tips</code>	44 f.
<code>arrow-yshift</code>	44
<code>\atm</code>	10
<code>\atmosphere</code>	10
<code>atoms</code>	28

B

<code>\ba</code>	7, 32
<code>babel</code>	57
<code>back-atoms</code>	28
Befehle für <code>mhchem</code>	22 f.
BEVOR ES LOS GEHT	3–6
<code>bm</code>	3
<code>bond-length</code>	39
<code>booktabs</code>	58
<code>bpchem</code>	3, 5
<code>bpchem</code>	3, 5, 8 f.

C

<code>C-temperature</code>	53
Cahn-Ingold-Prelog	8

<code>\cal</code>	10
<code>\calory</code>	10
<code>\centering</code>	32
<code>\ch</code>	26, 31, 33 f., 37, 41 ff., 45, 47, 49
<code>charge-hshift</code>	39
<code>charge-style</code>	39
<code>charges</code>	
<code>append</code>	12
<code>chemfig</code>	7, 14 f.
CHEMFORMULA	33–50
CHEMMACROS	6–33
<code>\chemsetup</code>	6, 31, 34
<code>chemstyle</code>	7, 10 f.
<code>\cip</code>	8
<code>circled</code>	5
<code>circletype</code>	5
<code>\cis</code>	9
<code>cis/trans</code>	9
<code>\cmc</code>	10
<code>color</code>	29
<code>compound-sep</code>	44
<code>cool</code>	5, 9

D

<code>decimal-marker</code>	13, 35
<code>\delm</code>	14
<code>\delp</code>	14
<code>delta</code>	18 ff.
<code>detect-bold</code>	5
<code>\Dfi</code>	8
<code>dist</code>	16
<code>dots</code>	53

E

<code>\E</code>	5, 9
<code>effect</code>	53
Einheiten	10 f.
<code>\El</code>	7
<code>\el</code>	7
<code>elpair</code>	7
<code>\Ent</code>	9
<code>\Enthalpy</code>	18, 32
<code>\Entropy</code>	18, 32

environ	3
expl3	3
explicit-sign	13
exponent	18 ff.
exposure	52
EZ	5, 9

F

F-temperature	53
\fdelm	14
\fdelp	14
fill-in	52
Fischer	8
\fmch	12, 32
\fminus	7
font-family	47
font-series	48
font-shape	48
font-spec	48
fontsize	22
fontspec	48
format	22, 47
Format und Schrift	46 ff.
\fpch	12, 32
\fplus	5, 7
frac-style	35 f.
\fscrm	15
\fscrp	15
\fsscrm	15
\fsscrp	15

G

\gas	26
Gefahren- und Sicherheitssätze	51–54
german	5, 11, 26 f., 57
Geschützter Input	41 f.
math	41
text	41
\ghs	51
ghs	5
\ghs*	51
\ghslistall	57
\ghspic	54
GHSYSTEM	51–67
Aufruf	51
kombinierte Sätze	54

Platzhalter	52
Sätze mit Lücken	53
\Gibbs	18, 32
graphicx	3

H

half	29
\hertz	32
hide	51
\Hpl	7
\HtO	7
\Hyd	7

I

ifpdf	3
includegraphics	55
\insitu	10
Ionenladungen	12
\iupac	8
IUPAC-Namen	8 ff.
Cahn-Ingold-Prelog	8
cis/trans	9
Fischer	8
ortho/meta/para	9
tert	9
zusammen/entgegen	9
IUPAC Names	
syn/anti	9

K

\Ka	11
\Kb	11
kg-mass	53
\Kw	11

L

l3kernel	3
l3keys2e	3
l3packages	3
label-offset	44
label-style	44
Laden des Bundles	4
language	57
Lateinische Ausdrücke	10
lbs-mass	53
\Lfi	8
\liquid	26

<code>list-entry</code>	26
<code>list-name</code>	26
Liste aller Sätze	57–67
<code>\listofreactions</code>	25
<code>longtable</code>	3, 57
<code>\lqd</code>	5, 26 f., 31
M	
<code>math-space</code>	42
Mathematik-Umgebungen	49
<code>mathtools</code>	3, 24
<code>\mch</code>	12, 32
<code>\mech</code>	15
<code>\mega</code>	32
<code>\meta</code>	9
<code>method</code>	3, 5, 22, 31
<code>mhchem</code>	3 ff., 22, 25, 33, 42
<code>\mhName</code>	22, 32
mhName	
<code>align</code>	22
<code>fontsize</code>	22
<code>format</code>	22
<code>width</code>	22
<code>\Molar</code>	10 f.
<code>\moLar</code>	11
<code>\molar</code>	10 f.
<code>\MolMass</code>	11
N	
<code>name-format</code>	46
<code>name-width</code>	46
<code>\newman</code>	27, 32
newman	
<code>angle</code>	27
<code>atoms</code>	28
<code>back-atoms</code>	28
<code>ring</code>	28
<code>scale</code>	27
Newman-Projektionen	27 f.
<code>\newreaction</code>	24 f., 32
<code>ngerman</code>	5
<code>nicefrac</code>	3, 36
<code>\NMR</code>	5, 21, 32
nmr	
<code>nucleus</code>	22
<code>unit</code>	21
<code>\NMR*</code>	21
<code>\normal</code>	11
<code>\ntr</code>	7
<code>\Nu</code>	7, 32
<code>nucleus</code>	22
O	
<code>opacity</code>	30
option	
<code>bpchem</code>	5
<code>circled</code>	5
<code>circletype</code>	5
<code>detect-bold</code>	5
<code>EZ</code>	5
<code>german</code>	5, 11, 26 f., 57
<code>ghs</code>	5
<code>method</code>	5, 22, 31
<code>ngerman</code>	5
<code>strict</code>	5
<code>synchronize</code>	5, 31
<code>version</code>	5
<code>xspace</code>	6
<code>\orbital</code>	28, 33
orbital	
<code>angle</code>	29
<code>color</code>	29
<code>half</code>	29
<code>opacity</code>	30
<code>overlay</code>	30
<code>phase</code>	29
<code>scale</code>	29
Orbitale	28 ff.
<code>organs</code>	53
<code>\ortho</code>	9
<code>ortho/meta/para</code>	9
<code>overlay</code>	30
<code>\OX</code>	16, 32
<code>\ox</code>	13 f., 32
ox	
<code>decimal-marker</code>	13
<code>explicit-sign</code>	13
<code>parse</code>	13
<code>pos</code>	13
<code>roman</code>	13
<code>\ox*</code>	13
Oxidationszahlen	13 f.

P	
\p.....	11
Paketoptionen	4 ff.
\para.....	9
parse.....	13
Partialladungen	14 f.
particle	
elpair.....	7
\pch.....	12, 32
Pfeile	42–45
Anpassung.....	44
Beschriftung.....	43
Typen.....	42
\pH.....	11
phase.....	29
Phasen	26 f.
pic-type.....	57
Piktogramme	54–57
\pKa.....	5, 11
\pKb.....	11
plus-space.....	41
\pOH.....	11
polyglossia.....	57
pos.....	13
\prt.....	7
R	
\R.....	7
\Rcip.....	8
\Rconf.....	9
\reaction.....	25
reaction	
list-entry.....	26
list-name.....	26
reaction (env.).....	23
reaction* (env.).....	23
\reactionlistname.....	26
reactions (env.).....	23
reactions* (env.).....	23
Reaktionsmechanismen	15
Reaktionsumgebungen	23–26
\redox.....	16, 32
redox	
dist.....	16
sep.....	17
Redoxreaktionen	16 ff.
\renewstate.....	20, 32
\renewtagform.....	24
ring.....	28
roman.....	13
S	
Säure/Base	11
scale.....	27, 29, 54
\Scip.....	8
\Sconf.....	9
\scrm.....	15
\scrp.....	15
sep.....	17
\setnewstate.....	19 f., 32
Setup	6
siunitx.....	3, 10 f., 18 f., 21
\sld.....	5, 26 f., 31
\solid.....	26
space.....	51
Spektroskopie	21 f.
Spezielle Input-Typen	40 f.
\standardstate.....	7, 32
star.....	24 f.
\State.....	20, 32
state	
delta.....	20
exponent.....	20
subscript-left.....	20
Stereodeskriptoren und Nomenklatur ..	8 ff.
Stöchiometrische Faktoren	35 f.
nicefrac.....	36
space.....	36
xfrac.....	35
stoich-space.....	35 f.
strict.....	5
subscript.....	19
subscript-left.....	19 f.
subscript-style.....	39
subscript-vshift.....	39
substance.....	53
Summenformeln	36–40
Addukte.....	36
Anpassung.....	39
Befehle.....	37
Bindungen.....	38
Länge.....	40

Hochstellungen	38	<code>width</code>	22
Ladungen	38	X	
Verschiebung	39	<code>xfrac</code>	3, 14, 35
Tiefstellungen	37	<code>xparse</code>	3
Verschiebung	39	<code>xspace</code>	3, 6
<code>\syn</code>	9	<code>xspace</code>	3
<code>synchronize</code>	5, 31	Z	
T		<code>\Z</code>	9
<code>table-caption</code>	57	<code>\Zus</code>	9
<code>table-caption-short</code>	57	<code>zusammen/entgegen</code>	9
<code>table-foot-rule</code>	58		
<code>table-head-number</code>	57		
<code>table-head-rule</code>	58		
<code>table-head-text</code>	57		
<code>table-label</code>	57		
<code>table-last-foot-rule</code>	58		
<code>table-next-page</code>	57		
<code>table-row-sep</code>	58		
<code>table-rules</code>	58		
<code>table-top-head-rule</code>	58		
<code>tabu</code>	3		
Teilchen, Ionen und Symbole	6 f.		
<code>tert</code>	9		
<code>\tert</code>	9		
<code>text</code>	53		
Text unter Formeln	45 f.		
Anpassung	46		
<code>syntax</code>	45		
Thermodynamik	18 ff.		
<code>TikZ</code>	3, 7, 9, 16, 27–30, 42, 44		
<code>tikz</code>	3		
<code>\tiny</code>	32		
<code>\torr</code>	11		
<code>\trans</code>	9		
<code>\transitionstatesymbol</code>	7		
U			
Übersicht über die Optionen (chemmacros)			
31 ff.			
<code>unit</code>	19, 21		
V			
<code>version</code>	5		
W			
<code>\water</code>	7		