

chemexec

v1.0

06. März 2011
Clemens Niederberger

(chemische) Übungsaufgabenblätter

Inhaltsverzeichnis

1	Lizenz	2
2	Über	3
3	Neu in Version v1.0	3
4	Paket-Optionen	3
5	Neue Befehle	4
5.1	Mathematik	4
5.2	Chemie	4
5.2.1	Teilchen und Ladungen	4
5.2.2	Stereodeskriptoren	5
5.2.3	Anionen	5
5.2.4	Kompatibilität mit mhchem.sty	5
5.2.5	Befehle für ‘mhchem’	6
6	Neue Umgebungen	7
6.1	Die beispiel-Umgebung	7
6.1.1	Die Optionen color, linecolor & english	7
6.1.2	Unnummerierte Beispiele	8
6.2	Die definition-Umgebung	9
6.2.1	Die Optionen shade, shadecolor & color	9
6.2.2	Die defformel-Umgebung	10
6.3	Die exkurs-Umgebung	11
7	Aufgaben/Lösungen	12
7.1	Optionen	12
7.2	Die alphalist-Umgebung	12
7.3	Beispiel	13
8	Ersatz für echem.sty	15
9	Nachwort	16

1 Lizenz

chemexec v1.0 steht unter der LaTeX Project Public License Version 1.3 oder später.
(<http://www.latex-project.org/lppl.txt>)

2 Über

Das `chemexec` Paket stellt einige kleine Umgebungen und Befehle zur Verfügung, die ich für die Verwendung in Übungsblättern und Unterrichtsskripten brauchte. So gibt es nun die `definition`-Umgebung, die `beispiel`-Umgebung u.ä. Außerdem den einen oder anderen nützlichen Befehl, der einem Schreibezeit abnimmt.

Für Arbeitsblätter haben sich die Aufgaben/Lösungs-Befehle in Abschnitt 7 als recht nützlich erwiesen.

Das Paket ersetzt `ochem.sty` für OCHEM von Ingo Klöckl¹.

3 Neu in Version v1.0

`chemexec` ist neu überarbeitet und dabei etwas verschlankt worden. Die Befehle `\lw`, `\lwbar`, `\atomconnect` und die `Schema`-Umgebung sind herausgeflogen. Dafür funktionieren jetzt alle Befehle auch mit `pdflatex`, da alle Zeichnungen (siehe etwa Abschnitt 5.2.2) nun mit `TikZ` und nicht mehr mit `pstricks` erstellt werden.

4 Paket-Optionen

Folgende Optionen können ausgewählt werden:

- Die Option `'chapter'` ändert die Zähler-Einstellung für die Aufgaben und Lösungen (Abschnitt 7) und die Beispiele (Abschnitt 6.1).
- Die Option `'color=farbe'` ändert die Farbe der Nummern, mit denen die Aufgaben und Lösungen durchnummeriert werden, der Linien, die die `beispiel`-Umgebung einrahmen, und der Überschrift der `definition`-Umgebung (Abschnitt 6.2) in `farbe`.
Default ist Dunkelblau:

```
\xdefinecolor{dunkelblau}{rgb}{0,0.33,0.62}.
```
- Die Option `'english'` ändert die Überschriften der Aufgaben (Exercise), Lösungen (Solution), Beispiele (Example) und den Exkurs (Excursus).
- Die Option `'exercise'` ermöglicht das Verwenden der Befehle für die Aufgaben und Lösungen.
- Mit der Option `'exersize=groesse'` lässt sich die Schriftgröße der Überschriften der Aufgaben und Lösungen einstellen.

¹<http://www.2k-software.de/ingo/ochem.html>

- Die Option ‘here’ legt für die Schema-Gleitumgebung als Positionierung H (genau hier) fest.
- Die Option ‘shade=boolean’ ändert das prinzipielle Layout der definition-Umgebung, kann die Werte true oder false einnehmen, Default ist shade=false.
- Die Option ‘shadecolor=farbe’ ändert die Hintergrundfarbe der definition-Umgebung in farbe, wenn die Option ‘shade’ ausgewählt ist.
- Die Option ‘numcolor=farbe’ ändert die Farbe der Nummern, mit denen die Aufgaben und Lösungen durchnummeriert werden, in farbe.

5 Neue Befehle

5.1 Mathematik

Ich habe einige kleine Befehle definiert, die ich immer wieder brauchte:

- `\vek{}` Pfeilschreibweise für Vektoren: `\vek{a}`, `\vek{A}` ergibt \vec{a} , \vec{A} .
- `\abs{}` Betrag: `\abs{\vek{a}}`, `\abs{-\frac{i}{2}}` ergibt $|\vec{a}|$, $|\frac{-i}{2}|$.

Beide Befehle funktionieren sowohl in normalem Text als auch in der Mathematik-Umgebung.

5.2 Chemie

Für die Chemie habe ich die folgenden Befehle immer wieder als sehr nützlich empfunden.

5.2.1 Teilchen und Ladungen

- `\el` Elektron: e^{\ominus}
- `\prt` Proton: p^{\oplus}
- `\ntr` Neutron: n^0
- `\Hp1` Proton: H^{\oplus}
- `\Hyd` Hydroxid: OH^{\ominus}
- `\ox{ }{ }` Oxidationszahlen
 $Ca\ox{-1}{F}_2$
das erste Argument ist die Oxidationszahl, das zweite das Element.
- `\om` und `\op` Ladungen \ominus und \oplus .
Beide Befehle haben ein optionales Argument für die Anzahl der Ladungen:
 $Ca\op[2] Ca^{2\oplus}$, $\phosphat\om[3] PO_4^{3\ominus}$.

5.2.2 Stereodeskriptoren

Einige Deskriptoren zur Erleichterung der Nomenklatur.

- `\Rcip` und `\Scip`, rectus und sinister: (*R*) (*S*)
- `\Dfi` und `\Lfi`, dexter und laevus: D L
- `\E` und `\Z`, entgegen und zusammen: (*E*) (*Z*)
- `\rconf` und `\sconf` R/S-Konfiguration: \textcircled{R} und \textcircled{S} . Beide Befehle haben ein optionales Argument, mit dem der Buchstabe geändert werden kann: `\rconf[]` \textcircled{R}

5.2.3 Anionen

Ebenfalls definiert sind folgende Säurereste:

- `\nitrat`: NO₃
- `\nitrit`: NO₂
- `\sulfat`: SO₄
- `\sulfit`: SO₃
- `\phosphat`: PO₄
- `\phosphit`: PO₃
- `\carbonat`: CO₃

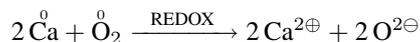
Alle Chemie-Befehle sind sowohl im Text- als auch im Mathematik-Modus einsetzbar.

5.2.4 Kompatibilität mit `mhchem.sty`

Die Chemie-Befehle sind auch in den Formelsatz-Befehlen (`\ce{}` u.ä.) des ‘mhchem’-Pakets von Martin Hensel² einsetzbar. Tatsächlich lädt `chemexec` ‘mhchem’ (in der Version 3) automatisch, falls es vorhanden ist. Es muss also nur dann geladen werden, wenn ihm Optionen mitgegeben werden sollen.

$$\ce{2[Ca] + [O]2 -> T[REDOX] 2Ca[O]2}$$

²<http://www.ctan.org/tex-archive/macros/latex/contrib/mhchem/>

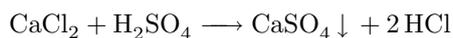


Beachten Sie bitte, dass Sie die Lücke vor `\om`, `\op`, `\ox` `{ }` lassen sollten, sonst kann das zu Fehlermeldungen oder falscher Darstellung führen:

`\ce{Ca\op[2]} Ca⊕[2]`

Weitere Beispiele:

```
\begin{align*}
\cee{Na} & \quad \quad \quad \&->T[ox] Na\op{} + \el}\} \\
\cee{HCl_{aq}} & \quad \quad \quad \&<=> H\op_{aq} + Cl\om_{aq}}}\} \\
\cee{H2O} & \quad \quad \quad \&<<=> \Hp1 + \Hyd}\} \\
\cee{CaCl2 + H2\sulfat{}} & \quad \quad \quad \&-> Ca\sulfat{} v + 2 HCl}
\end{align*}
```



`chemexec` sollte *nach* ‘mhchem’ eingebunden werden, wenn Sie das ‘mhchem’ Paket Laden, um ihm Optionen mitzugeben.

5.2.5 Befehle für ‘mhchem’

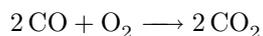
`chemexec` stellt einige Befehle für das Erstellen von Reaktionen mit ‘mhchem’ zur Verfügung:

```
1 nummerierte Reaktion:
2 \reaction{2 H2 + O2 -> 2 H2O}%
3 unnummerierte Reaktion:
4 \reaction*{2 CO + O2 -> 2 CO2}
5 mehrere ausgerichtete Reaktionen:
6 \reactions{Cl_2 &-> 2 Cl. \} Cl. + CH4 &-> HCl + {}.CH3}
```

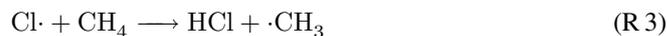
nummerierte Reaktion:



unnummerierte Reaktion:



mehrere ausgerichtete Reaktionen:



6 Neue Umgebungen

6.1 Die `beispiel`-Umgebung

Für Übungsblätter und ähnliches benötigte ich immer wieder eine Umgebung, die Beispiele hervorhebt und durchnummeriert:

```
1 \begin{beispiel}
2   Ein Beispiel.
3 \end{beispiel}
```

Das ergibt folgenden Output:

Beispiel 1:
Ein Beispiel.

Wenn man ein zweites Beispiel im gleichen Rahmen bringen möchte, kann man den Befehl `\bsp` verwenden:

```
1 \begin{beispiel}
2   Ein erstes Beispiel.
3   \bsp
4   Ein zweites.
5 \end{beispiel}
```

Beispiel 2:
Ein erstes Beispiel.
Beispiel 3:
Ein zweites.

6.1.1 Die Optionen `color`, `linecolor` & `english`

Die Paket-Option `'linecolor=farbe'` ermöglicht, die Default-Farbe der umschließenden Linien zu ändern. Zum Beispiel ergibt

```
1 % Pr"aambel:
2 \usepackage[linecolor={rgb:red,4;green,6}]{chemexec}
3 % im Dokument:
4 \begin{beispiel}
5   Gr"une Linien per Paketoption.
6 \end{beispiel}
```

folgenden Output:

Beispiel 4:

Grüne Linien per Paketoption.

Auch die Paket-Option ‘color=farbe’ ändert die Farben der Linien, wirkt sich aber noch auf weitere Befehle wie die definition-Umgebung aus.

Mit der Befehls-Option ‘linecolor=farbe’ kann man auch die Farbe eines konkreten Beispiels ändern. So ergibt

```
1 \begin{beispiel}[linecolor=purple]
2   Die purpurne Einzelversion.
3 \end{beispiel}
```

folgenden Output:

Beispiel 5:

Die purpurne Einzelversion.

Die Paket-Option ‘english’ erzeugt die englische Überschrift ‘Example’.

6.1.2 Unnummerierte Beispiele

Wenn Sie gerne unnummerierte Beispiele mögen oder die Beispiele mit Buchstaben durchzählen wollen, können Sie das wie üblich mit der Neudefinition der Zählerausgabe realisieren.

```
1 \renewcommand{\thebeispiel}{}
2 \begin{beispiel}
3   Jetzt ohne Z"ahler!
4 \end{beispiel}
```

Beispiel

Jetzt ohne Zähler!

```
1 \renewcommand{\thebeispiel}{\alph{beispiel}}
2 \begin{beispiel}
3   Oder alphabetisch \ldots
4 \end{beispiel}
```

Beispiel g)

Oder alphabetisch ...

6.2 Die definition-Umgebung

Die definition-Umgebung erstellt einen Kasten mit farbiger Überschrift:

```

1 \begin{definition}
2   Der Betrag eines Vektors betr\"agt
3   \begin{equation}
4     \abs{\vek{a}}=\sqrt{a_x^2+a_y^2+a_z^2}
5   \end{equation}
6 \end{definition}

```

DEFINITION Der Betrag eines Vektors beträgt:

$$|\vec{a}| = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \quad (1)$$

6.2.1 Die Optionen shade, shadecolor & color

Mit der Umgebungs-Option 'shade=boolean' ändert sich das Layout:

```

1 \begin{definition}[shade=true]
2   Der Betrag eines Vektors betr\"agt
3   \begin{equation}
4     \abs{\vek{a}}=\sqrt{a_x^2+a_y^2+a_z^2}
5   \end{equation}
6 \end{definition}

```

DEFINITION Der Betrag eines Vektors beträgt:

$$|\vec{a}| = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \quad (2)$$

Mit den Optionen 'shadecolor=farbe' und 'color=farbe' lässt sich das Layout noch weiter beeinflussen:

```

1 \begin{definition}[shade=true,shadecolor=green!15,color=black]
2   Der Betrag eines Vektors betr\"agt
3   \begin{equation}
4     \abs{\vek{a}}=\sqrt{a_x^2+a_y^2+a_z^2}
5   \end{equation}
6 \end{definition}

```

DEFINITION Der Betrag eines Vektors beträgt:

$$|\vec{a}| = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \quad (3)$$

Die Optionen 'shade=boolean' und 'shadecolor=farbe' sind auch als Paketoptionen einsetzbar. Damit lässt sich das grundsätzliche Aussehen der Kästen einstellen. Die Option 'color=farbe' ist ebenfalls als Paket-Option einsetzbar, wirkt sich dann aber nicht nur auf die definition-Umgebung aus.

```
1 % Pr"aabel:
2 \usepackage[shade=true,shadecolor=yellow!15]{chemexec}
3 % im Dokument:
4 \begin{definition}
5   Der Betrag ...
6 \end{definition}
```

DEFINITION Der Betrag eines Vektors beträgt:

$$|\vec{a}| = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \quad (4)$$

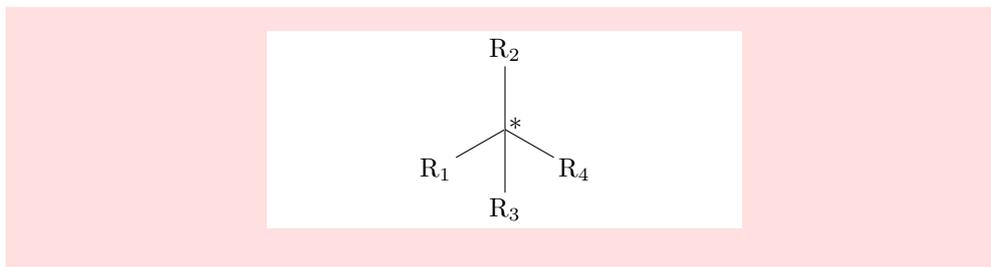
6.2.2 Die defformel-Umgebung

Zusätzlich gibt es die defformel-Umgebung, die lediglich einen weißen Hintergrund erzeugt und ein optionales Argument für die Breite des weißen Kastens besitzt³.

```
1 \begin{definition}[shade=true]
2   Ein Kohlenstoffatom mit vier verschiedenen Substituenten nennt man \
3     textbf{chiral}. Chiralitätszentren werden oft mit einem \
4     textasteriskcentered\ markiert.
5   \begin{defformel}[.5\textwidth]
6     \chemfig{R_1-[:30](-[2]R_2)(-[6]R_3)(-[:30,.15,,,white]{\text{\
7       textasteriskcentered}})-[:30]R_4}
8   \end{defformel}
9 \end{definition}
```

DEFINITION Ein Kohlenstoffatom mit vier verschiedenen Substituenten nennt man **chiral**. Chiralitätszentren werden oft mit einem * markiert.

³Die chemische Struktur wurde mit Hilfe des streeTeX-Pakets von Igor Stokov erstellt.



6.3 Die `exkurs`-Umgebung

Die `exkurs`-Umgebung ist dazu gedacht, in Büchern oder längeren Texten einen Exkurs über ein Thema optisch hervorzuheben und einen Eintrag ins Inhaltsverzeichnis hinzuzufügen.

```
\begin{exkurs}[options]{titel}
...
\end{exkurs}
```

Es gibt zwei Optionen: `toc=toclevel` mit der Default-Einstellung `section` und `color=farbe` mit der Default-Einstellung `dunkelblau`.

```
1 \begin{exkurs}[color=-yellow]{Lorem ipsum}
2 Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed diam
   nonummy nibh euismod tincidunt ut laoreet dolore magna aliquam erat
   volutpat. ...
3 \end{exkurs}
```

EXKURS: Lorem ipsum

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed diam nonummy nibh euismod tincidunt ut laoreet dolore magna aliquam erat volutpat. Ut wisi enim ad minim veniam, quis nostrud exerci tation ullamcorper suscipit lobortis nisl ut aliquip ex ea commodo consequat. Duis autem vel eum iriure dolor in hendrerit in vulputate velit esse molestie consequat, vel illum dolore eu feugiat nulla facilisis at vero eros et accumsan et iusto odio dignissim qui blandit praesent luptatum zuril delenit augue duiis dolore te feugait nulla facilisi.

Die Paket-Option `color=farbe` wirkt sich ebenfalls auf die Farbe der Einschübe aus, mit der Paket-Option `english` wird die Überschrift in `excursus` geändert.

7 Die Option `exercise`: Nummerierte Aufgaben/Lösungen

Als eigentlicher Kern des Pakets ist ein Zähler/eine Überschrift für Aufgaben definiert, die man mit der Option ‘`exercise`’ aktivieren kann. Die Aufgaben erhalten als Default-Überschrift ‘Aufgabe’, können aber eine beliebige andere als Argument bekommen. Die Nummern sind farbig. Der Befehl lautet:

```
\aufgabe{aufgabentitel}
```

Da ich gerne auch die Möglichkeit habe, die Lösungen anzugeben, habe ich zudem die Befehle

```
\loesung[aufgabentitel]{Loesung} % Loesung eingeben
\doloesung % Loesung kapitelweise ausgeben
\makeloesung % Loesungen auf einmal ausgeben
```

definiert. In den ersten Befehl `\loesung{}` gibt man die Lösung der Aufgabe ein, eventuell mit dem Aufgabentitel als optionalem Argument. Er sollte immer direkt nach der zugehörigen Aufgabe eingesetzt werden. Der zweite Befehl `\doloesung` erzeugt die Ausgabe der Lösungen, die in der aktuellen `\section` gesammelt wurden und der dritte Befehl `\makeloesung` erzeugt alle gesammelten Lösungen auf einmal. Beachten Sie, dass `\doloesung` und `\makeloesung` einander ausschließen. Sie müssen sich für eine von beiden Varianten entscheiden.

Für die Ausgabe der Lösungen ist es unerheblich, ob man jeder Aufgabe eine Lösung zugewiesen hat. `\makeloesung` sollte sinnvollerweise erst *nach allen Aufgaben* gesetzt werden und **kann nur einmal aufgerufen werden**.

7.1 Optionen

Die Option ‘`exersize=groesse`’ ermöglicht die Einstellung der Schriftgröße der Überschriften. Erlaubt sind die bekannten Varianten: `tiny`, `scriptsize`, `footnotesize`, `small`, `normalsize`, `large`, `Large`, `LARGE`, `huge` und `Huge`. Die Default-Einstellung ist `normalsize`.

Mit der Paket-Option ‘`numcolor=farbe`’ kann man die Farbe der Nummern in `farbe` ändern. Die Paket-Option ‘`english`’ erzeugt die englischen Überschriften ‘Exercise’ bzw. ‘Solution’.

In der Default-Einstellung werden die Nummern der Aufgaben mit jeder neuen `section` zurückgesetzt. Die Paket-Option ‘`chapter`’ ändert die Einstellung, so dass der Zähler mit einem neuen `chapter` zurückgesetzt wird.

7.2 Die `alphlist`-Umgebung

Mit der `alphlist`-Umgebung steht eine Liste zur Verfügung, die z.B. Aufgaben automatisch mit a), b) etc. durchzählt.

```

1 \begin{alphalist}
2 \item erster Punkt
3 \item zweiter Punkt
4 \end{alphalist}

```

- a) erster Punkt
b) zweiter Punkt

7.3 Beispiel

In folgendem Listing können Sie die Aufgaben und den Befehl `\doloesung` einmal im Einsatz sehen. Das Ergebnis sehen Sie direkt im Anschluss.

```

1 % Pr"aambel:
2 \usepackage[exercise,exersize=large]{chemexec}
3 % Im Dokument:
4 \par{\Large\bfseries\noindent Aufgaben}
5 \aufgabe{}
6 Geben Sie die Protolysereaktionen von Phosphors"aure an.\loesung{\ce{
7   H3PO4 <=> \Hpl{} + H2PO4\om{} <=> 2\Hpl{} + HPO4 \om[2]{} <=> 3\Hpl
8   {} + PO4 \om[3]}}
9 \aufgabe{Oxidationszahlen}
10 Welche Oxidationsstufe hat der Stickstoff in den folgenden Verbindungen:
11   Ammoniak, Stickstoffmonoxid, Stickstoffdioxid, Salpeters"aure?\
12   loesung[Oxidationszahlen]{
13     \ce{\ox{-3}{N} H3}, \ce{\ox{+2}{N} O}, \ce{\ox{+4}{N} O2}, \ce{H \ox
14     {+5}{N} O3}}
15 \aufgabe{Nomenklatur}
16 Benennen Sie folgende Molek"ule:\\setatomsep{1.4em}
17 \begin{inparaenum}[a]
18   \item\chemfig{-[:30] (=[:60]O)-[:60]OH}
19   \item\chemfig{-[:30] (=[:60]O)-[:60]O-[:60]-[:60]}
20   \item\chemfig{HO-[:30] (=[:60]O)-[:60]-[:60]-[:60] (=[:60]O)
21     -[:60]OH}
22 \end{inparaenum}
23 \loesung[Nomenklatur]{
24 \begin{inparaenum}[a]
25   \item Ethans"aure
26   \item Ethans"aureethylester
27   \item Butandis"aure
28 \end{inparaenum}
29 }
30 \aufgabe{}
31 Zeichnen Sie die Strukturformel von Glycerin. Geben Sie den
32   systematischen Namen nach IUPAC an.
33 \loesung{\chemname{\chemfig{HO-[:30]-[:60] (-[:60]OH)-[:60]-[:60]OH
34   }}{1,2,3-Propantriol}}
35 \vspace{\baselineskip}
36 \par{\Large\bfseries\noindent L"osungen}
37 \doloesung

```

Aufgaben

1. Aufgabe

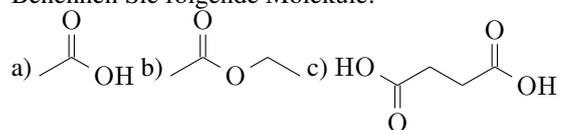
Geben Sie die Protolysereaktionen von Phosphorsäure an.

2. Oxidationszahlen

Welche Oxidationsstufe hat der Stickstoff in den folgenden Verbindungen: Ammoniak, Stickstoffmonoxid, Stickstoffdioxid, Salpetersäure?

3. Nomenklatur

Benennen Sie folgende Moleküle:



4. Aufgabe

Zeichnen Sie die Skelettformel von Glycerin. Geben Sie den systematischen Namen nach IUPAC an.

Lösungen

1. Lösung



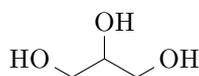
2. Oxidationszahlen



3. Nomenklatur

a) Ethansäure b) Ethansäureethylester c) Butandisäure

4. Lösung



1,2,3-Propantriol

8 Ersatz für echem.sty

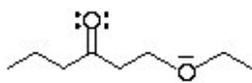
Das Paket `echem.sty` gehört zum OCHEM-Programm von Ingo Klöckl⁴. Es ermöglicht die Darstellung von Elektronen als Punkten und Elektronenpaaren als Strichen an Atome. Die Definition der `\lw`-Befehle orientiert sich an den Definitionen des `'echem'`-Pakets. Zusätzlich stellt `echem.sty` die beiden Makros `\sbond` und `\dbond` zur Verfügung, die es erlauben, im normalen Text eine Einzel- bzw. Doppelbindung darzustellen. Diese beiden Befehle werden im `'mhchem'`-Paket von Martin Hensel ebenfalls definiert.

- `'mhchem'`-Version:
 - `\ce{F\sbond F}`: F–F
 - `\ce{O\dbond O}`: O=O
- `'echem'`-Version:
 - `F\sbond F`: F·F
 - `O\dbond O`: O=O

Um keine Konflikte mit `'mhchem'` zu provozieren, liefert `chemexec` abgesehen von diesen beiden Befehlen und den Makros `\2` und `\3` die gleiche Funktionalität wie `'echem'` und kann an dessen Stelle in der `chemspecial`-Umgebung von OCHEM verwendet werden.

⁴<http://www.2k-software.de/ingo/ochem.html>

```
1 % Pr"aambel
2 \usepackage{ochem,chemexec}
3 % im Dokument:
4 \begin{chemspecial}
5 package("chemexec")
6 \end{chemspecial}
7 \begin{chemistry}
8 formula(L,R){
9   bond(30;-30;30)
10  branch { bond(90,=C)
11            atom("\vdd{O}O\vdd{O}");
12            }
13  bond(-30;30;-30)
14  atom("\hdl[\echhbar]{O}\hdu[\echhbar]{O}O",L,R)
15  bond(30;-30)
16 }
17 \end{chemistry}
```



9 Nachwort

Auch wenn ich mich bemüht habe, sinnvolle chemische Reaktionen einzusetzen, habe ich nicht extra überprüft, ob jedes Beispiel chemisch sinnvoll ist. Vertrauen Sie den Beispielen diesbezüglich nicht, sondern sehen Sie in einem Lehrbuch der Chemie nach