



Lehrstuhl für Physikalische Chemie und Didaktik
Kurs „ \LaTeX für angehende Naturwissenschaftler“
im Sommersemester 2019

Till Biskup, Matthias Marquardt, Johann Seibert, Christopher Kay

— Aufgabenblatt 3 vom 14.05.2019 —

Vorbemerkung

Hilfreiche Informationen zur Bearbeitung der folgenden Aufgaben – u.a. die Folien der vorangegangenen Präsentationen und weiteres Material – werden Ihnen auf der zum Kurs gehörigen Internetseite

<https://www.till-biskup.de/de/lehre/latex-einfuehrung/>

sowie via Moodle bereitgestellt. Sollten Sie über den Kurs hinaus die Aufgaben weiter bearbeiten wollen, finden Sie dort alle benötigten Informationen.

Hinweise zur Bearbeitung

Erstellen Sie sich einen Ordner für das Aufgabenblatt, in dem Sie dann die einzelnen \LaTeX -Dokumente erstellen, da der Aufruf von \LaTeX bzw. pdf\LaTeX eine Reihe weiterer Dateien neben der finalen PDF-Datei erzeugt und das sonst schnell unübersichtlich wird.

Um das Ergebnis Ihrer Eingabe zu sehen, müssen Sie das Dokument immer durch den Aufruf von pdf\LaTeX^1 übersetzen. Das ist in modernen \LaTeX -IDEs normalerweise der Standard.

Aufgabe 3–1 Paket `amsmath`

Auch wenn \LaTeX von Hause aus exzellente Möglichkeiten für den mathematischen Formelsatz mitbringt, ist es eine gute Idee, immer das Paket `amsmath` der \mathcal{AMS} (*American Mathematical Society*) zu laden, wenn man Formeln setzen möchte.

Kopieren Sie sich das Dokument `protokoll-vorlage.tex` vom vorangegangenen Aufgabenblatt, speichern Sie es unter dem Namen `mathematik.tex` und ergänzen Sie die Dokument-Präambel um das Einbinden des Pakets `amsmath`. Löschen Sie anschließend die eigentlichen Dokumentinhalte. Für den Rest des Aufgabenblatts arbeiten Sie in diesem Dokument. Verwenden Sie für die einzelnen Aufgaben Abschnitte, die Sie über `\section` erzeugen. Benennen Sie die Abschnitte entsprechend der in den jeweiligen Aufgaben gegebenen Überschriften.

Tipp: Um nicht mit der Nummerierung durcheinander zu kommen, können Sie für diese Aufgabe (Paket `amsmath`) ebenfalls einen Abschnitt erstellen.

¹Strenggenommen spielt es keine Rolle, ob sie pdf\LaTeX oder eine andere Variante von \LaTeX verwenden, im Kontext des Kurses wollen wir aber ein PDF-Dokument als Resultat erhalten.

Aufgabe 3–2 Formeln im Fließtext, Hoch- und Tiefstellen, griechische Buchstaben

Wie Sie auf den Folien gesehen haben, bietet \LaTeX grundsätzlich zwei Arten von Formelsatz: im Fließtext und abgesetzt. Hier werden wir zunächst Formeln in den Fließtext einbinden und uns mit generellen Aspekten wie Hoch- und Tiefstellen und griechischen Buchstaben vertraut machen.

Reproduzieren Sie den folgenden Text für sich selbst:

Gegeben seien zwei Dipole p_1 und p_2 im Abstand r zueinander in beliebiger Orientierung. Der Winkel zwischen den beiden Dipolen p_n mit $n = 1, 2$ sei als θ gegeben.

Ein Polynom zweiten Grades ist allgemein gegeben als $y = c_1x^2 + c_2x + c_3$ mit den Koeffizienten c_i und $i = 1, 2, 3$.

Achten Sie dabei darauf, welche Teile des vorangegangenen Textes Sie in einer mathematischen Umgebung setzen müssen.

Aufgabe 3–3 Abgesetzte Formeln

Häufig möchte man Formeln vom Text absetzen. Das erhöht die Lesbarkeit, außerdem können Formeln im Fließtext zur Vergrößerung des Zeilenabstandes führen, was ebenfalls unschön ist.

Reproduzieren Sie den folgenden Text für sich selbst:

Ein Polynom zweiten Grades ist allgemein gegeben als

$$y = c_1x^2 + c_2x + c_3$$

mit den Koeffizienten c_i und $i = 1, 2, 3$.

Tip: Sie können den eigentlichen Text aus der vorherigen Aufgabe kopieren und müssen ihn nur anpassen.

Welche (auf den Folien genannten) Möglichkeiten stehen Ihnen zur Verfügung, diese Art von abgesetzter Formel zu erzeugen? Wie können Sie kontrollieren, ob die Formeln durchnummeriert werden oder nicht?

Aufgabe 3–4 Brüche, Summen, Produkte, Integrale

Eine Stärke des mathematischen Formelsatzes mit \LaTeX ist, dass viele Befehle intuitiv sind und das Schreiben von Formeln erlauben. Das gilt insbesondere, aber nicht nur, für Brüche (\frac), Summen (\sum), Produkte (\prod) und Integrale (\int). Die Grenzen für die drei letztgenannten Zeichen können Sie über die üblichen Möglichkeiten für Hoch- und Tiefstellung erzeugen. Achten Sie darauf, dass Sie geschweifte Klammern verwenden müssen, wenn Sie mehr als ein Zeichen hoch- oder tiefstellen wollen.

Reproduzieren Sie den folgenden Text für sich selbst:

Eine Lorentz-Kurve $f(x)$ lässt sich schreiben als

$$f(x) = \frac{a_1}{(x - a_2)^2 + a_3}$$

mit den Koeffizienten a_i mit $i = 1, 2, 3$.

Ein Polynom $P(x)$ ist allgemein gegeben als

$$P(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$$

mit den Koeffizienten a_i und $n \geq 0$.

Tipp: Der Vergleichsoperator \geq lässt sich über den Befehl `\ge` (bzw. `\geq`, für *greater equal*) erzeugen. Gleiches gilt analog für \leq über `\le` (bzw. `\leq`, für *less equal*). Die Ungleichheit \neq können Sie schließlich mit dem Befehl `\ne` (bzw. `\neq`, für *not equal*) setzen.

Aufgabe 3–5 Ausgerichtete mehrzeilige Formeln

Häufig wollen Sie, z.B. für eine Herleitung oder Umformung, mehrzeilige Formeln an Operatoren, z.B. dem Gleichheitszeichen, ausrichten. Dafür eignet sich die Umgebung `align` (aus dem `amsmath`-Paket) sehr gut. Zur Ausrichtung verwenden Sie das „kaufmännische Und“: `&`.

Reproduzieren Sie die folgende Formel für sich selbst:

$$\begin{aligned} P(x) &= \sum_{i=0}^n a_i x^i \\ &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n, \quad n \geq 0 \end{aligned}$$

Tipp: Die drei zentrierten Punkte erzeugen Sie durch den Befehl `\dots`, den zusätzlichen Abstand nach dem Komma durch den Befehl `\quad`.

Aufgabe 3–6 Vordefinierte Operatoren

\LaTeX stellt eine Reihe vordefinierter Befehle für Operatoren, z.B. `\sin`, `\cos`, `\exp`, \dots , zur Verfügung. Das hat zwei entscheidende Vorteile: Erstens ergibt sich so eine viel lesbarere Formel im \LaTeX -Quelltext, und zweitens müssen Operatoren im korrekten mathematischen Formelsatz immer in aufrechter Schrift gesetzt werden, was diese Befehle automatisch berücksichtigen.

Reproduzieren Sie den folgenden Text für sich selbst:

Die Gauss-Funktion lässt sich schreiben als

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

mit der Position μ des Maximums und der Breite σ .

Die Funktion zweier Parameter

$$f(x, \phi) = A \cdot \sin(x + \phi)$$

lässt sich als Summe zweier Funktionen schreiben, so dass sie nur noch linear von einem Parameter abhängt:

$$g(x) = a_1 \sin(x) + a_2 \cos(x) .$$

Tipp: Die Wurzel können Sie über den Befehl `\sqrt` erzeugen. Das aufrechte π erhalten Sie über das zusätzliche Paket `upgreek`. Details sind im Foliensatz gegeben. Da es sich bei π in diesem Fall um eine mathematische Konstante (die Kreiszahl, $\pi = 3.1415\dots$) handelt, benötigen Sie abweichend vom kursiven griechischen Buchstaben π die aufrechte Variante π . Die Anpassung der Größe der Klammern erreichen Sie durch Voranstellen von `\left` bzw. `\right`.

Aufgabe 3–7 Eigene Anpassungen: Vektoren, Konstanten, Differentialoperator

Vektoren werden handschriftlich oft mit einem Pfeil über dem Symbol gekennzeichnet, und das ist auch die normale Ausgabe von \LaTeX bei Verwendung des Befehls `\vec`. Die Empfehlung der IUPAC ist allerdings, Vektoren fett und kursiv zu setzen. Entsprechend empfiehlt sich eine Umdefinition des Befehls, wie auf den Folien angegeben, zumal fetter und gleichzeitig kursiver Formelsatz in \LaTeX nicht ganz trivial zu bewerkstelligen ist. Darüber hinaus sollten mathematische Konstanten (wie die imaginäre und eulersche Zahl) und der Differentialoperator immer aufrecht gesetzt werden. Auch hier empfiehlt sich die Definition eigener Befehle, wie im Foliensatz angegeben.

Ergänzen Sie Ihre Dokument-Präambel um die am Ende des Foliensatzes gegebenen Befehle für Vektoren, den Differentialoperator, die imaginäre Einheit und die Eulerzahl. Fügen Sie außerdem das Paket `upgreek` für aufrechte griechische Symbole (und damit z.B. die Kreiszahl π) hinzu.

Reproduzieren Sie den folgenden Text für sich selbst:

Die Euler-Identität ist gegeben zu:

$$e^{i\pi} = -1 .$$

Ein Zeilenvektor \mathbf{a} kann als einzelne Zeile einer Matrix aufgefasst werden

$$\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)$$

und besteht aus einzelnen Elementen a_i mit $i = 1 \dots n$.

Gegeben sei die Funktion

$$f(x) = c_1x^2 + c_2x + c_3 .$$

Die erste Ableitung dieser Funktion lautet entsprechend

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = 2x + c_2 .$$

Die Stammfunktion $F(x)$ der ersten Ableitung ist wieder die ursprüngliche Funktion:

$$F(f'(x)) = \int f'(x)dx = \int \frac{df(x)}{dx} dx = c_1x^2 + c_2x + c_3 .$$

Aufgabe 3–8 Text in Formeln

Oft möchte man Text innerhalb von Formeln schreiben, entweder als Erläuterung oder zwischen Formeln. Das `amsmath`-Paket stellt dafür zwei Befehle zur Verfügung: `\text` für Text innerhalb von Formeln und `\intertext` für Text zwischen Formeln, insbesondere wenn die Ausrichtung der Formelteile zueinander erhalten bleiben soll.

Reproduzieren Sie den folgenden Text für sich selbst:

Ein Polynom ist allgemein definiert als:

$$P(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i \quad \text{mit } n \geq 0 .$$

Gegeben sei die Funktion

$$f(x) = c_1 x^2 + c_2 x + c_3 .$$

Die erste Ableitung dieser Funktion lautet entsprechend

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = 2x + c_2 .$$

Beachten Sie im zweiten Fall, dass die beiden Gleichungen entsprechend im Gegensatz zur vorherigen Aufgabe am Gleichheitszeichen ausgerichtet sind. Das erhöht mitunter ganz immens die Übersichtlichkeit und Lesbarkeit.

Aufgabe 3–9 Korrekter Formelsatz: aufrechte Indices und Einheiten

Alle Indices, die nicht für Formelzeichen stehen, sondern z.B. Abkürzungen sind, sollten aufrecht geschrieben werden, nicht kursiv. Typische Beispiele aus der physikalischen Chemie sind die Boltzmann-Konstante, k_B , oder die Masse des Elektrons, m_e . Da Formelzeichen aus allgemeinen Erwägungen wann immer möglich *einzelne* Zeichen sein sollten, können beschreibende Indices auch länger werden. Physikalische Einheiten müssen ebenfalls *immer* aufrecht geschrieben werden. Nutzen Sie Ihr Wissen aus der vorangegangenen Aufgabe, um aufrechte Indices bzw. Einheiten zu erzeugen.

Reproduzieren Sie den folgenden Text für sich selbst:

Die Masse des Elektrons wird normalerweise geschrieben als

$$m_e .$$

Die Einheit Elektronenvolt (eV) ist über die Elementarladung e definiert:

$$1 \text{ eV} = e \cdot 1 \text{ V} .$$

An diesem Beispiel lässt sich zeigen, dass der kursive bzw. aufrechte Satz von Zeichen Bedeutung transportiert und *nicht* eine Frage der persönlichen Vorlieben ist.

Der Wert der Boltzmann-Konstante k_B lautet in SI-Einheiten:

$$k_B = 1,380\,648\,52(79) \cdot 10^{-23} \text{ J/K} .$$

Indices von Elementen sind hingegen Formelzeichen und daher kursiv zu setzen:

$$x_i .$$

Tipp: Die Abstände zwischen Zahl und Einheit erzeugen Sie am Besten über den Befehl `\;`. (Gleiches gilt für das Absetzen von Satzzeichen von den Formeln.) Um das Komma im Zahlenwert

für die Boltzmann-Konstante als Dezimaltrennzeichen zu markieren, schließen Sie es einfach in geschweifte Klammern ein. Ansonsten setzte \LaTeX nach dem Komma einen (an dieser Stelle inkorrekten) kleinen Leerraum. Die kleinen Abstände in den Nachkommastellen (Dreierblöcke) können Sie durch den Befehl $\backslash,$ erreichen. Den zentrierten Punkt (für das Produkt) erhalten Sie mit dem Befehl \backslashcdot .

Aufgabe 3–10 Verweise auf Formeln

Bereits in einem früheren Aufgabenblatt wurde eine besondere Stärke von \LaTeX behandelt: das robuste Setzen von Verweisen. Das gilt ebenso für Gleichungen. Um auf eine Gleichung zu verweisen, muss sie natürlich nummeriert sein. Dazu kommt, dass Verweise auf Gleichungsnummern im Fließtext immer in runden Klammern erscheinen sollten. Das `amsmath`-Paket liefert ihnen dazu den zusätzlichen Befehl \backslasheqref , der sich um die Klammern kümmert.

Reproduzieren Sie den folgenden Text für sich selbst:

Der Anteil f_m der Moleküle im Zustand m im thermischen Gleichgewicht ist durch die Boltzmann-Verteilung gegeben:

$$f_m = \exp\left(-\frac{m\Delta E}{k_B T}\right) \quad (10.1)$$

Bei Raumtemperatur ist $k_B T \approx 200 \text{ cm}^{-1}$, und typische Abstände für die Energien von Schwingungszuständen liegen bei $\Delta E \approx 1000 \text{ cm}^{-1}$. Einsetzen in Gleichung (10.1) ergibt für die ersten beiden angeregten Schwingungszustände:

$$f_1 \approx \exp(-5) = 6.7 \cdot 10^{-3} \quad \text{und} \\ f_2 \approx \exp(-10) = 4.5 \cdot 10^{-5} .$$

Damit lässt sich abschätzen, dass sich weniger als ein Prozent aller Moleküle bei Raumtemperatur in einem angeregten Schwingungszustand befinden.

Achten Sie auf *sprechende* Marken für die Gleichung. Eine Durchnummerierung ist *nicht* sinnvoll und widerspricht der Idee von \LaTeX für Verweise. Schließlich sollten Sie vom Inhalt auf die Marke und umgekehrt schließen können. Da es sich im vorliegenden Fall um die Boltzmann-Verteilung handelt, wäre eine Marke, die den Namen „Boltzmann“ beinhaltet, sicherlich sinnvoll.

Hinweis: Die Gleichungsnummerierung wird bei Ihnen ggf. nicht den vorangestellten Abschnitt haben, sondern fortlaufend nummeriert sein. Davon sollten Sie sich nicht stören lassen. Wichtig ist, dass die im Fließtext erscheinende Gleichungsnummer in runden Klammern erscheint und auf die korrekte Formel verweist.