

# L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X für Naturwissenschaftler

Ansprechender Text- und Formelsatz von Abschlussarbeiten

## 4. Mathematischer Formelsatz

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



**UNI  
FREIBURG**

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Sommersemester 2018



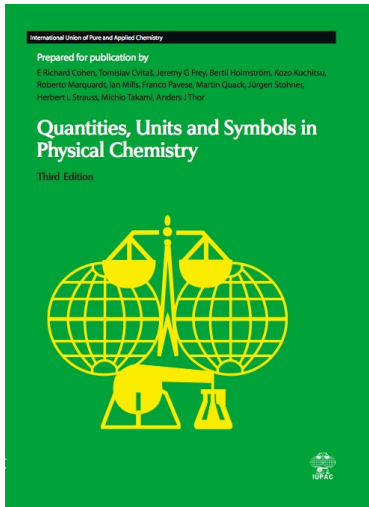
- 🔑 Mathematischer Formelsatz folgt genauso festen Regeln wie die Orthografie – auch wenn sie fast niemand kennt.
- 🔑 Nur wenige Verlage (Lehrbücher, Journale) halten sich an die Regeln und Empfehlungen für den Formelsatz.
- 🔑 Mathematische Formeln fügen sich hinsichtlich Interpunktion in den sie umgebenden Text ein.
- 🔑  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  und  $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  ermöglichen *per se* exzellenten Formelsatz, das `amsmath`-Paket sollte trotzdem geladen werden.
- 🔑 Semantische Textauszeichnung erhöht die Lesbarkeit des Quelltextes und sorgt für konsistenten Formelsatz.

Grundregeln des mathematischen Formelsatzes

Die  $\text{\LaTeX}$ -Pakete der American Mathematical Society (AMS)

Umgebungen und Befehle

Semantische Textauszeichnung und Umdefinitionen



## IUPAC Green Book

„Goldstandard“ für den  
mathematischen Formelsatz  
(und darüber hinaus) in der  
physikalischen Chemie

online frei verfügbar

Details und URL auf der  
Webseite zum Kurs

Eine *physikalische Größe*  $Q$  kann als Produkt eines *Zahlenwertes*  $\{Q\}$  und einer *Einheit*  $[Q]$  ausgedrückt werden:

$$Q = \{Q\} [Q].$$

Alle drei – Größe, Zahlenwert und Einheit – lassen sich mit den gewöhnlichen Regeln der Algebra manipulieren, z. B.:

$$\lambda = 5.896 \times 10^{-7} \text{ m} \qquad \lambda/\text{m} = 5.896 \times 10^{-7} .$$

- Der Schrägstrich zwischen Größe und Einheit bei Achsenbeschriftungen ist keine typografische Konvention, sondern algebraische Notwendigkeit.

## Eigene leidvolle Erfahrung ...

“ *To give units in brackets [sic!] follows the ACS style guide and therewith our journal style.*

*It has been checked by the Editorial Office that your proof corrections have been carried out (as far as they meet journal style).*

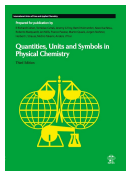
– Editorial Office, Unnamed Journal

P.S.: Das steht ziemlich sicher *nicht* im ACS style guide.

☞ Manchmal führt Prinzipien zu reiten auch nicht weiter ...

- ▶ Symbole für physikalische Größen
  - Namen und Symbole sind Empfehlungen.
  - Symbole sollten immer klar benannt werden.
- ▶ Symbole für Einheiten
  - Namen und Symbole sind *verbindlich*.
  - festgelegt durch internationale Organisationen

## Für Empfehlungen zu Symbolen physikalischer Größen:



IUPAC Green Book

Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry

nicht nur Regeln zum mathematischen Formelsatz ...

## Symbole physikalischer Größen

- ▶ einzelner Buchstabe
  - kursiv
  - aus dem lateinischen oder griechischen Alphabet
  - Groß- und Kleinbuchstaben erlaubt
  
- ▶ Indices
  - zur näheren Erläuterung
  - Symbole physikalischer Größen: kursiv
  - andere Indices: aufrecht
  
- ▶ Erläuterungen in Klammern
  - hinter dem Symbol für die Größe
  - alternativ oder zusätzlich zu Indices
  
- ☛ Symbole für physikalische Größen sind *Empfehlungen*.



## Symbole von Einheiten

- ▶ allgemeine Hinweise
  - aufrecht
  - keine Pluralformen
  - kein Punkt, es sei denn am Satzende
  
- ▶ Kleinbuchstaben
  - Ausnahme: Ableitung von Eigennamen (z.B. Hz)
  - Ausnahme: Liter – l und L erlaubt
  
- ▶ Präfixe für dezimale Vielfache
  - werden direkt angeschlossen
  
- ☛ Symbole für Einheiten und Präfixe sind *verbindlich* und von internationalen Organisationen festgelegt.

## Produkte und Quotienten physikalischer Größen

Gültige Schreibweise für Produkte:

$$a b \quad \text{oder} \quad ab \quad \text{oder} \quad a \cdot b \quad \text{oder} \quad a \times b$$

aber *niemals* der Stern (\*). Entsprechend für Quotienten:

$$a/b \quad \text{oder} \quad \frac{a}{b} \quad \text{oder} \quad ab^{-1}$$

## Hinweise

- ▶ Nur ein Schrägstrich (/) pro Ausdruck, es sei denn, es werden Klammern verwendet.
- ▶ Klammern zur Vermeidung von Uneindeutigkeiten

## Produkte und Quotienten von Einheiten

- ▶ grundsätzlich
  - gleiche Regeln wie für physikalische Größen
- ▶ Unterschiede
  - kein  $\times$  als Multiplikationszeichen
  - Abstand zwischen multiplizierten Einheiten, wenn kein Multiplikationszeichen gesetzt wird

## Beispiel

$$1 \text{ N} = 1 \text{ m kg s}^{-2} = 1 \text{ m kg/s}^2 \quad (\checkmark)$$

aber *nicht*

$$1 \text{ N} = 1 \text{ mkg s}^{-2} \quad (\times)$$

### grundsätzliche Regel

- ▶ **kursiv**
  - Symbole für physikalische Größen
  - Variablen
- ▶ **aufrecht**
  - Zahlen
  - Symbole für Einheiten
  - Beschriftungen (auch wenn nur ein Buchstabe)
- ▶ gilt gleichermaßen für griechische Buchstaben
- ▶ Textauszeichnung (aufrecht, kursiv, ...) dient der *inhaltlichen* Unterscheidung.

## Beispiele

Masse des Elektrons

$$m_e$$

Definition Elektronenvolt (eV) über Elementarladung ( $e$ )

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

Boltzmann-Konstante

$$k_B$$

$i$ -tes Element von  $x$

$$x_i$$

### aufrecht

- ▶ Zahlen, Beschriftungen, mathematische Konstanten
- ▶ Symbole für Elemente des Periodensystems
- ▶ Symbole für Elementarteilchen
- ▶ mathematische Operatoren
- ▶ griechische Buchstaben in der chemischen Nomenklatur

### kursiv

- ▶ Variablen
- ▶ Symbole für physikalische Größen
- ▶ physikalische Konstanten (gemessene Größen)
- ▶ Symbole für chemische Elemente in der Nomenklatur

### fett und kursiv

- ▶ Vektoren (vorzugsweise Kleinbuchstaben)
- ▶ Matrizen (vorzugsweise Großbuchstaben)

### fett, serifenlos und kursiv (optional)

- ▶ Tensoren (um den Tensorcharakter zu betonen)

### alternative Schreibweisen

- ▶ Vektoren und Matrizen alternativ mit Pfeil
- ▶ Tensoren zweiten Ranges mit Doppelpfeil

### veraltete Schreibweisen

- ▶ Vektoren und Matrizen fett, aber nicht kursiv

“ *Serifenlose Schriften sind für anspruchsvollen Formelsatz grundsätzlich nicht geeignet. Viele Buchstaben können leicht mit anderen Zeichen verwechselt werden. Bei vielen Buchstaben ist hier auch der Unterschied zwischen Groß- und Kleinbuchstabe geringer.*

[...]

*Texte mit wenig Mathematik (und vor allem mit wenigen Formelzeichen) lassen sich natürlich serifenlos setzen.*

– Johannes Küster

☛ **Unterscheidbarkeit ist im Formelsatz essentiell.**



### Grundregel

Satzzeichen werden grundsätzlich wie im Textsatz behandelt. Mathematische Formeln fügen sich hinsichtlich Interpunktion in den sie umgebenden Text ein.

- ▶ nach Formeln Satzzeichen immer aufrecht setzen
  - gilt insbesondere für das Komma
- ▶ ggf. etwas Leerraum vor dem Satzzeichen
  - vor allem nach Brüchen und Indices
  - Eindeutigkeit: Satzzeichen *kein* Formelbestandteil
- 👉  $\text{\LaTeX}$  kennt Befehle für unterschiedlich großen Leerraum.

“ *Mathematics books and journals do not look as beautiful as they used to. It is not that their mathematical content is unsatisfactory, rather that the old and well-developed traditions of typesetting have become too expensive. Fortunately, it now appears that mathematics itself can be used to solve this problem.*

– Donald E. Knuth

- Der Ursprung von  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  war die Notwendigkeit für guten mathematischen Formelsatz.
- $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  bringt *per se* sehr gute Fähigkeiten zum mathematischen Formelsatz mit.

### Tipp

Jeder, der häufiger mathematische Formeln mit  $\text{\LaTeX}$  setzt, sollte das Paket `amsmath` laden.

- ▶ Erweiterungen der American Mathematical Society (AMS)
  - deutliche Verbesserung des eh schon guten Formelsatzes
  - zusätzliche Symbole
  - Hilfe für semantische Textauszeichnung

#### Listing 1: Einbinden des Pakets `amsmath` in $\text{\LaTeX}$

```
\usepackage{amsmath}
```

## Gründe für die Verwendung von `amsmath`

- ▶ semantische Textauszeichnung
  - Bsp.: einfache Definition neuer Operatoren
  - sorgt für korrekte Typografie von Grenzen etc.
- ▶ sehr gute Umgebung(en) für ausgerichtete Formeln
  - im Standardumfang von  $\text{\LaTeX}$  sehr mühsam
  - gerade bei mehrzeiligen Formeln unerlässlich
- ▶ verbesserte Handhabung von Gleichungsnummern
  - bei langen Formeln
  - Problem: Formel sollte nicht in Nummer hereinragen
- ▶ nachrangige Gleichungsnummerierung
  - Bsp.: (1.3a) (1.3b) (1.3c)

### Die zwei mathematischen Modi in L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X

- ▶ Formeln und Formelzeichen im Fließtext (*inline*)
  - nicht für komplexe Formeln
  - alle mathematischen Zeichen (z.B. Variablen) im Text
- ▶ abgesetzte Formeln (*display style*)
  - Großteil der mathematischen Formeln
  - eigene typografischen Regeln (die L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X beherrscht)

### Unterscheidung bei abgesetzten Formeln

- ▶ ein- oder mehrzeilig
- ▶ ausgerichtet oder nicht
- ▶ nummeriert oder nicht nummeriert

## Formeln und Formelzeichen im Fließtext

### Listing 2: Formeln und Formelzeichen im Fließtext in L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X

Gegeben seien zwei Dipole  $p_1$  und  $p_2$  im Abstand  $r$  zueinander in beliebiger Orientierung.

- ▶ Begrenzer:  $\$$ 
  - Es gibt noch andere, die aber selten gebraucht werden.
- ▶ Einsatzgebiete
  - Verweis auf bzw. Nennung von Formelzeichen im Text
- ▶ Einschränkungen
  - Höhere Formeln vergrößern (unschön) die Zeilenhöhe.
  - Komplexere Formeln im Text sind oft schwer lesbar.

## Abgesetzte Formeln

### Listing 3: Beispiel für abgesetzte Formeln in L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X

```
\begin{equation*}
V = \frac{1}{4\uppi\varepsilon_0}
\frac{p_1 p_2 - 3(p_1\hat{\vec{r}})(p_2\hat{\vec{r}})}{r^3}
\end{equation*}
```

- ▶ **Umgebung**
  - `equation*` ist nur ein Beispiel
  - vgl. die Dokumentation des `amsmath`-Pakets
- ▶ **Formel erscheint abgesetzt vom Text**
  - nummeriert oder nicht nummeriert
  - Nutzer ist für Zeilenumbrüche selbst verantwortlich
  - Leerzeilen sind in den Umgebungen *nicht* erlaubt.

### Empfehlungen für Umgebungen

- ▶ einzelne Formeln
  - `equation`
- ▶ mehrzeilige Formeln
  - `align`

### Hinweise

- ▶ Es gibt noch weitere Umgebungen
  - Für Details vgl. die Dokumentation
- ▶ Sternformen für nicht nummerierte Gleichungen
  - vergleichbar den Gliederungsbefehlen (`\section` u.a.)
- ▶ Ausrichten mehrzeiliger Formeln (`align`-Umgebung)
  - `&` zum Ausrichten



- ▶ beliebig viele „Spalten“ möglich
  - müssen nicht vorher festgelegt werden
  - aber: jede Zeile muss gleich viele  $\&$ -Zeichen enthalten
- ▶ Ausrichtung normalerweise an Relationssymbolen
  - alternativ an binären Operatoren (+, −, ...)

### Grundregel

Das Zeichen  $\&$  zum Ausrichten von Formeln sollte immer *vor* das Relationssymbol gesetzt werden. Nur so wird der richtige Zwischenraum gesetzt.

- ▶ Hoch- und Tiefstellen
  - mit `^` und `_`
  - funktioniert *nur* im mathematischen Modus
  - Textmodus: `\textsubscript`, `\textsuperscript`
- ▶ Namen für Operatoren etc.
  - durch vorangestellten Backslash, z.B. `\sin`
  - viele Operatorennamen vordefiniert
- ▶ griechische Buchstaben
  - durch vorangestellten Backslash, z.B. `\gamma`
  - Großbuchstaben intuitiv, z.B. `\Gamma`
- ▶ automatisch größenangepasste Klammern
  - Befehlspar `\left ... \right`
  - wenn nur eine Klammer gewünscht: `\left .` bzw. `\right .`

### ▶ Brüche

- `\frac{Zähler}{Nenner}`
- lassen sich verschachteln

### ▶ Wurzeln

- `\sqrt[Wurzelexponent]{Radikand}`
- Wurzelexponent ist *optional*

### ▶ Summen und Produkte

- `\sum` und `\prod`
- Grenzen über `_` und `^`

### ▶ Integrale

- `\int`
- Grenzen über `_` und `^`
- Doppel- und Mehrfachintegrale (amsmath): `\iint` etc.

- ▶ Gründe für spezielle Befehle
  - $\LaTeX$ : Buchstaben in Formeln sind Formelzeichen
  - Folge: kursiv, größerer Abstand zwischen den Zeichen
- ▶ zwei Befehle für Text in Formeln (`amsmath`)
  - `\text`
  - `\intertext`
- ▶ `\text`
  - Text in einer Formel
  - innerhalb einer Formelzeile
  - nutzt die eingestellte Textschriftart
- ▶ `\intertext`
  - kurze Textzeilen zwischen Formeln
  - Ausrichtung der Formelteile zueinander bleibt erhalten

- ▶ allgemeine Regel
  - Gleichungsnummern immer in runden Klammern
  - sowohl an der Gleichung als auch beim Verweis im Text
- ▶ allgemeine Strukturen von  $\text{\LaTeX}$ 
  - `\label` für Marker
  - `\ref` für Verweis
- ▶ Voraussetzung
  - nummerierte Gleichungen (*keine* Stern-Umgebungen)
- ▶ Erweiterung des `amsmath`-Pakets
  - `\eqref`
  - setzt runde Klammern um die Gleichungsnummer
- ▶ Tipps
  - sprechende Marker
  - Präfix „eq:“

### Wo finde ich mehr Informationen?

- ▶  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X} 2_{\epsilon}$ -Kurzbeschreibung
  - erste Einführung in die Fähigkeiten von  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$
- ▶ Dokumentation des `amsmath`-Paketes
  - kurz, knapp, gut
  - am Anfang ggf. etwas überfordernd
- ▶ `mathmode` von Herbert Voß
  - umfassende Beschreibung der Möglichkeiten
  - sprachlich und vom Textsatz ausbaufähig ...

### Tipp

Links zu den Dokumenten auf der Webseite zum Kurs

- ▶ semantische Textauszeichnung
  - bessere Lesbarkeit der Formel im  $\text{\LaTeX}$ -Quellcode
  - einfacher zu schreiben
  - einfacher an einen entsprechenden Stil anpassbar
- ▶ korrekte Typografie gemäß Regeln
  - Manche Regel ist nicht trivial umsetzbar.
  - Korrekte Typografie hängt oft vom Kontext ab.
  - Kontext ist für ein Programm nur über semantische Textauszeichnung zugänglich.
- ▶ Faulheit bzw. Bequemlichkeit
  - zusätzliche Befehle oft kürzer
  - korrekte Typografie manuell mitunter umständlich

## Grundregel

Vektoren und Matrizen sollen fett und kursiv gesetzt werden.

- ▶ `\mathbf` setzt aufrecht und fett
- ▶ Paket `bm` beherrscht griechische Buchstaben
- ▶ Vektor-Befehl `\vec` sollte *umdefiniert* werden

### Listing 4: Mögliche Umdefinition des Befehls `\vec` für Vektoren

```
\usepackage{bm}  
\renewcommand*{\vec}[1]{\bm{#1}}
```



### Grundregel

Der Differentialoperator wird aufrecht gesetzt.

- ▶ Das kleine  $d$  ist ein *Operator*.
- ▶ Operatoren werden immer aufrecht gesetzt.
- ▶ In der Literatur ist das einer der häufigsten Fehler.
- ▶ Lösung: Definition eines (sprechenden) Befehls

#### Listing 5: Mögliche Definition des Differentialoperators

```
\newcommand*{\diff}{\mathrm{d}}
```

### Grundregel

Mathematische Konstanten werden immer aufrecht gesetzt.

- ▶ Eulersche Zahl und imaginäre Einheit einfach definierbar
- ▶ aufrechte griechische Buchstaben über Zusatzpaket

#### Listing 6: Aufrechte mathematische Konstanten: $i$ und $\pi$

```
\newcommand*{\im}{\mathrm{i}}  
\newcommand*{\e}{\mathrm{e}}  
\usepackage[Symbolsmallscale]{upgreek}
```

```
 $\$e^{\im\uppi} = -1\$$ 
```

## 💡 Tipp

Tensoren *können* serifenlos, fett und kursiv gesetzt werden.

- ▶ Hinweis: setzt T1-Schriftkodierung voraus

### Listing 7: Mögliche Definition für Tensoren

```
\usepackage[T1]{inputenc}
\DeclareMathAlphabet{\mathbfsf}{%
  \encodingdefault}{\sfdefault}{bx}{sl}
\newcommand{\tens}[1]{\mathbfsf{#1}}

$\tens{T}$
```

- ▶ Problem
  - Bras und Kets werden häufig verwendet.
  - Ausschreiben ist umständlich und unübersichtlich.
- ▶ Lösung
  - Definition sprechender Befehle

### Listing 8: Mögliche Definitionen von bra und ket

```
\newcommand*{\bra}[1]{\left\langle#1\right\rvert}
```

```
\newcommand*{\ket}[1]{\left\lvert#1\right\rangle}
```

```
\newcommand*{\braket}[2]{\langle#1\lvert#2\rangle}
```

```
 $\bra{\psi_a}$  und  $\ket{\psi_b}$   
 $\braket{\psi_a}{\psi_b}$   
 $\bra{\psi_a} \op{V} \ket{\psi_b}$ 
```

- ▶ Problem
  - Formeln werden im Quelltext schnell lang
  - Übersichtlichkeit und Lesbarkeit leidet
  - Leerzeilen im Quellcode in Matheumgebungen nicht erlaubt
- ▶ Vorteile des mathematischen Modus in  $\text{\LaTeX}$ 
  - Leerzeichen zur Formatierung des Quellcodes möglich
  - Leerraum in der Formel wird unabhängig gesetzt
  - Zeilenumbrüche müssen manuell angegeben werden (`\ \`)
- ▶ Lösungsmöglichkeiten
  - Leerzeichen zwischen Formelteilen
  - Zeilenumbrüche zur Quellcodeformatierung
  - Leerzeilen über vorangestelltes Kommentarzeichen (`%`)
  - horizontale Ausrichtung des Quellcodes
  - sprechende Befehle (semantische Textauszeichnung)



- 🔑 Mathematischer Formelsatz folgt genauso festen Regeln wie die Orthografie – auch wenn sie fast niemand kennt.
- 🔑 Nur wenige Verlage (Lehrbücher, Journale) halten sich an die Regeln und Empfehlungen für den Formelsatz.
- 🔑 Mathematische Formeln fügen sich hinsichtlich Interpunktion in den sie umgebenden Text ein.
- 🔑  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  und  $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  ermöglichen *per se* exzellenten Formelsatz, das `amsmath`-Paket sollte trotzdem geladen werden.
- 🔑 Semantische Textauszeichnung erhöht die Lesbarkeit des Quelltextes und sorgt für konsistenten Formelsatz.