



Tobias Görlach

Short Tipps for Nature Scientists  
— in german —

Eine ganz schnelle Übersicht  
für Naturwissenschaftler

Achtung: Dies ist keine Einführung;  
L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X Kenntnisse vorausgesetzt!



Tobias B. Görlach

# Short Tipps for

for

# Nature Scientists

in German

EINE GANZ SCHNELLE ÜBERSICHT  
ÜBER  $\LaTeX$ -TIPPS  
FÜR NATURWISSENSCHAFTLER



OKTOBER  
2012  
Version 0.1

# Vorabversion! Änderungen vorbehalten.

Die ist eine ganz kurze Snippet Sammlung für Naturwissenschaftler, die gerne mit  $\LaTeX$  arbeiten möchten und für die ein oder andere Aufgabe noch eine adäquate Lösung suchen. Dies ist keine allgemeine Einführung in  $\LaTeX$ , sondern soll in kurzen Beispielen zeigen welche Pakete was machen und wofür sie eingesetzt werden können. Das Bescherrschen der Grundlagen wird vorausgesetzt.

Die Auswahl der Beispiele erfolgte nach den Erfahrungen des Autors aus der Praxis. Zum Teil bestehen sie aus Beispielen die aus Anforderungen an einen Naturwissenschaftler erwachsen, zum Teil aber auch nur aus schönen Beispielen, die zeigen was  $\TeX$  so alles kann.

Ich übernehme keinerlei Verantwortung für alles was aus der Umsetzung entstehen kann. Weiterhin übernehme ich keine Verantwortung für Richtigkeit.

Tobias B. Görlach, im Oktober 2011

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Daten darstellen</b>	<b>1</b>
1.1	Tabellen . . . . .	1
1.1.1	Klassische Tabelle . . . . .	1
1.1.2	Erweiterte Tabellen . . . . .	1
1.1.3	Tabellen aus externen Dateien . . . . .	2
1.2	Diagramme . . . . .	3
1.2.1	pgf . . . . .	3
<b>2</b>	<b>SI-Einheiten</b>	<b>5</b>
<b>3</b>	<b>Mathematik</b>	<b>7</b>
3.1	Klammern . . . . .	7
3.2	Griechische Buchstaben . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Chemie</b>	<b>9</b>
4.1	Summenformel . . . . .	9
4.2	Strukturformel . . . . .	9
4.2.1	Reaktionsschemata . . . . .	10
<b>5</b>	<b>Bibliographie</b>	<b>11</b>



# Kapitel 1

## Daten darstellen

### 1.1 Tabellen

#### 1.1.1 Klassische Tabelle

Die klassische Methode mit  $\text{\LaTeX}$  eine Tabelle zu erzeugen, ist die `tabular`-Umgebung. Der Syntax ist in Beispiel 1.1 dargestellt.

Beispiel 1.1: Eine einfache Tabelle.

```
1 \begin{tabular}{lll}
2 Nummer & Zeit & Platz \\
3 1 & 12 & 1 \\
4 2 & 13 & 2 \\
5 \end{tabular}
```

Nummer	Zeit	Platz
1	12	1
2	13	2

Mit dem Paket `booktabs` [2] lassen sich einfach vertikale Linien eingezogen werden, die gegenüber den Standard-Befehl `\hline` den Vorteil haben, unterschiedliche vertikale Abstände zu erzeugen. So kann wie in Beispiel 1.2 gezeigt eine schöne Tabelle erzeugt werden. Vertikale Striche (engl. `rules`) sollten vermieden werden, da diese den Lesefluss stören.

Beispiel 1.2: Eine einfache Tabelle mit `booktabs`.

```
1 \begin{tabular}{lll}\toprule
2 Nummer & Zeit & Platz \\
3 1 & 12 & 1 \\
4 2 & 13 & 2 \\
5 \end{tabular}
```

Nummer	Zeit	Platz
1	12	1
2	13	2

#### 1.1.2 Erweiterte Tabellen

Mit dem Paket `tabu` [1] lassen sich die Möglichkeiten, die die Standard-Tabellen in  $\text{\LaTeX}$  bieten ausbauen. `tabu` führt eine neue Syntax zur Bestimmung der Spalten-Parameter ein und bietet eine neue einfache Methode Tabellen mit Umbrüchen innerhalb von Tabellenzeilen über mehrere Seiten laufen zu lassen. Zusammen mit den Paketen `xcolor` und `longtable` lassen sich so sehr anspruchsvolle Layouts umsetzen. Wichtig ist allerdings hierbei, dass man sich nicht von den Möglichkeiten überrumpeln lässt und so zu verspielte und nicht sachgemäße Tabellen erzeugt. Im Normalfall wäre eine Tabelle wie in Beispiel 1.3 nicht zielführend. Es wird in diesem Beispiel aber zweierlei gezeigt: die einfache Syntax für Farben in Tabellen (benötigt das Paket `xcolor`) und die neuartigen Optionen in der Spaltendeklaration. Es wird ein Bruchteil der

## Kapitel 1 Daten darstellen

Gesamtbreite angeben, der die Spaltenbreite bestimmt. Hier können viele weitere Argumente übergeben werden. `tabu` kennt auch Hooks für das Paket `siunitx`.

Beispiel 1.3: Eine einfache Tabelle mit `tabu`.

```
1 \taburowcolors [1]13{ red!40!white
  ..blue!40!white}
2 \begin{tabu} to \textwidth {X[1]X
  [3]X[1]}
3 a&die lange zeile &d\\a&die lange
  zeile &d\\a&die lange zeile &d\\
4 a&die lange zeile &d\\a&die lange
  zeile &d\\a&die lange zeile &d\\
5 a&die lange zeile &d\\a&die lange
  zeile &d\\a&die lange zeile &d\\
6 a&die lange zeile &d\\a&die lange
  zeile &d\\a&die lange zeile &d\\
7 $\frac{\text{textwidth}}{4}$ &&$\frac{\text{textwidth}}{4}\cdot 3$ &&$\frac{\text{textwidth}}{4}$ \\
8 \end{tabu}
```

a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
a	die lange zeile	d
$\frac{\text{textwidth}}{4}$	$\frac{\text{textwidth}\cdot 3}{4}$	$\frac{\text{textwidth}}{4}$

### 1.1.3 Tabellen aus externen Dateien

Im gezeigten Beispiel 1.4 wurde eine Datei die mit `filecontents` erzeugt wurde wieder eingebunden und zur Tabelle gemacht. Dies macht das Paket `pgfplotstable` [4] möglich.

Beispiel 1.4: Einbinden einer Tabelle aus einer externen Datei.

```
1 \begin{filecontents}{datei}
2 # Kommentar
3 #Tag Keimzahl
4     9.80e+07
5     5.10e+07
6     2.32e+07
7 \end{filecontents}
8 \pgfplotstableset{use comma,every head row/.style
  ={%
9 before row=\toprule,after row=\midrule},
10 every last row/.style={%
11 after row=\bottomrule}
12 }
13 \pgfplotstabletypeset[columns/0/.style={%
14 column name=Tag},%
15 columns/1/.style={%
16 column name=\si{KbE} \per\gram},%
17 sci sep align]}{datei}
```

Tag	KbE /g
4	$9,8\cdot 10^7$
6	$5,1\cdot 10^7$
8	$2,32\cdot 10^7$



## 1.2 Diagramme

Das Zeichnen von Diagrammen kann entweder direkt durch  $\LaTeX$  oder durch ein externes Programm erfolgen. Ersteres hat den Vorteil, dass die erzeugten Diagrammen als Vektorgrafiken vorliegen und somit eine hohe Qualität erreicht werden kann. Renderschlieren oder ein pixeliges Aussehen sind ausgeschlossen. Externe Programme haben oft den Nachteil, dass die Ausgabeformate verlustbehaftet sind, der Vorteil ist allerdings die oftmals einfachere Bedienung.

### 1.2.1 pgf

Für  $\LaTeX$  existieren zwei bekannte Pakete die das Anlegen von Diagrammen erleichtern. Das ältere `PSTricks` arbeitet nur mit Umwegen mit `pdfLaTeX` zusammen, wohingegen `pgf` [9] bzw. die Erweiterung `pgfplots` [3] sowohl nativ mit `pdfLatex` als auch mit `latex` arbeitet.

Beispiel 1.5 zeigt zwei Diagramme die mit Hilfe von `pgfplots` erstellt wurden. Im ersten Diagramm wurde eine externe Tabellendatei eingelesen und dargestellt. Hierbei können verschiedene Darstellungen gewählt werden. Im zweiten Diagramm wurde eine Funktion durch die internen Mathematiksysteme von `pgf` errechnet und gesetzt. Alternativ kann über `pgfplots` das Programm *GNUplot* angesteuert werden, was oftmals zu besseren Rechenergebnissen führt.

### Geschwindigkeit

Eine kleine Anmerkung zur Performance: Sollen Diagramme mit sehr vielen Datenpunkten gezeichnet werden, so kann es passieren, dass es entweder sehr lange dauert oder  $\TeX$  mit der Fehlermeldung `TeX capacity exceeded, sorry [main memory size=3000000]...` aussteigt. In letzterem Fall kann man die maximale Speicherbelegung der  $\TeX$ -Engine erhöhen. Dies kann bei  $\TeX$ Live in der Datei `/usr/local/texlive/2012/texmf.cnf` geschehen. Diese Datei überschreibt die Einstellungen in der Datei `/usr/local/texlive/2012/texmf/web2c/texmf.cnf`, welche laut den Distributoren nicht verändert werden sollte. Diese kann aber zum lernen des Syntaxes herangezogen werden.

Als Beispiel soll die Darstellung von 600 Spektren mit 401 Datenpunkten, also 240600 Punkten im Diagramm, dienen. Ein solches Diagramm konnte von  $\TeX$  und `pgfplots` auch nach Erhöhung des Speichers nicht berechnet werden. Nach einer Reduktion auf nunmehr 24000 Punkte dauerte die Berechnung auf einem 2,4 GHz C2D Rechner immerhin noch ca. 15 Minuten.

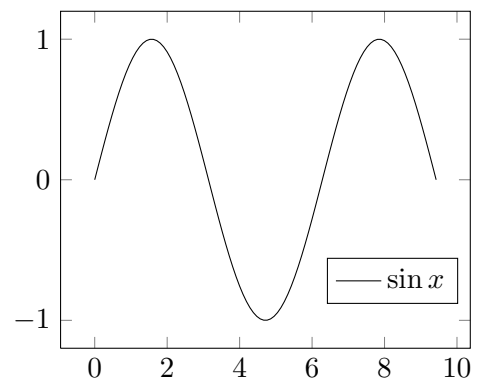
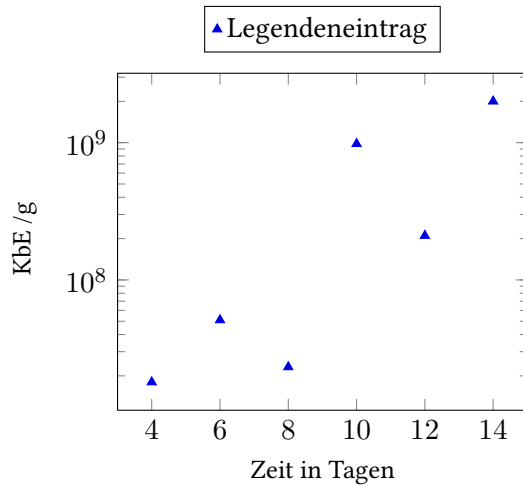
Als Richtwert kann man maximal ca. 30000 Datenpunkte als in einem vernünftigen Rahmen berechenbar ansehen.

Beispiel 1.5: Zwei einfache Diagramme.

```

1 \begin{filecontents}{datei2}
2   #Kommentar
3   4     1.80e+07
4   6     5.10e+07
5   8     2.32e+07
6   10    9.80e+08
7   12    2.10e+08
8   14    2.00e+09
9 \end{filecontents}
10 \begin{tikzpicture}[baseline]
11   \begin{semilogyaxis}[width=7cm, xlabel=\small Zeit in Tagen,%
12     ylabel={\small\si{ KbE \per\gram }},%
13     legend style={at={( 0.5 , 1.2)},anchor=north,%
14       cells={anchor=east}}%
15     ]
16   ]
17   \addplot plot[mark=triangle*, only marks] file {datei2};
18   \addlegendentry{Legendeneintrag} ;
19   \end{semilogyaxis}\end{tikzpicture}\hspace{1cm}%
20   \begin{tikzpicture}[baseline]
21     \begin{axis}[width=7cm,
22       legend style={at={( .65 , .2)},anchor=west,%
23         cells={anchor=east}}%
24       ]
25     ]
26     \addplot[mark=none, domain=0:3*pi, samples=100] function {\sin(x)};
27     \addlegendentry{\$\sin x\$} ;
28     \end{axis}
29   \end{tikzpicture}

```



# Kapitel 2

## SI-Einheiten

Das Setzen von Einheiten im Fließtext und in Tabellen erfordert große Anstrengungen um die gängigen Normen einzuhalten. In unregelmäßigen Abständen gibt die Physikalische Technische Bundesanstalt neue Informationen rund um das SI-System heraus [8]. Das momentan beste Paket zur Umsetzung der Anforderungen die Typographie von Einheiten ist `siunitx` [12]. Das Paket bietet diverse Befehle um Einheitenzeichen sowie Dimensionen, auch in Tabellen<sup>1</sup>, richtig zu setzen. Weiterhin hat die Verwendung von `siunitx` den Vorteil, dass das Erscheinungsbild der Ausgabe lokal oder global verändert werden kann. So kann wie in Beispiel 2.1 gezeigt, der Dezimaltrenner mit einem Befehl verändert werden.

Beispiel 2.1: `siunitx`.

<pre>1 \sisetup{locale=DE} 2 3 \SI{3.5e3}{\joule\squared\per\lumen\cubic}\ 4 5 \begin{tabular}{S} \toprule 6   {Nicht Ausgerichtet} \ \midrule 7   34.2345 \ \ 8   -6.7835 \ \ 9   90.473 \ \ 10  5642.5 \ \ 11  1.2e3 \ \ e4 \ \ 12 \bottomrule 13 \end{tabular}\ 14 15 \num[output-decimal-marker={.}]{\le .12}</pre>	$3,5 \cdot 10^3 \text{ J}^2 \text{ lm}^{-1}$ <hr/> <p style="text-align: center;">Nicht Ausgerichtet</p> <hr/> $\begin{array}{r} 34,2345 \\ -6,7835 \\ 90,473 \\ 5642,5 \\ 1,2 \cdot 10^3 \\ 10^4 \end{array}$ <hr/> $\leq 0.12$
---	--

<sup>1</sup>`siunitx` arbeitet auch mit `tabu` zusammen.





### 3.2 Griechische Buchstaben

Obschon hinreichend bekannt sollen im Folgenden die Griechischen Buchstaben aus dem Mathematik Modus dargestellt werden. Die Zeichen aus dem Mathematik Modus eignet sich nicht zum Schreiben griechischer Texte. Hier muss vielmehr ein geeigneter Zeichensatz in Verbindung mit einer griechischen Type gewählt werden um eine direkte Eingabe ausserhalb des Mathematik Modus zu ermöglichen. Weiterhin ist zu Beachten, dass das Aussehen der Zeichen von der gewählten Type abhängt, sofern diese einen Mathematik-Schnitt besitzt.

Tabelle 3.1: Die griechischen Buchstaben aus dem Mathematik Modus und ihre lateinische Entsprechung.

Symbol	Symbol groß	Varietät	Varietät groß	Lateinische Entsprechung
$\alpha$	—			Alpha
$\beta$				Beta
$\gamma$				Gamma
$\delta$	$\Delta$			Delta
$\epsilon$				Epsilon
$\zeta$				Zeta
$\eta$				Eta
$\theta$		$\vartheta$		Theta
$\iota$				Iota
$\kappa$				Kappa
$\lambda$				Lambda
$\mu$				Mü
$\nu$				Nü
$\xi$				Xi
$\pi$				Pi
$\rho$				Rho
$\sigma$				Sigma
$\tau$				Tau
$\upsilon$				Upsilon
$\phi$	$\Phi$			Phi
$\chi$				Chi
$\psi$				Psi
$\omega$	$\Omega$			Omega

# Kapitel 4

## Chemie

### 4.1 Summenformel

In der KOMA-Script-Anleitung [6] schlagen die Autoren die Definition eines eigenen Befehles bestehend aus `\textsubscript` vor 4.1

Beispiel 4.1: Darstellung chemischer Formeln mit Hilfe des KOMA-Scripts

<pre>1 \newcommand*{\Mol}[2]{#1\textsubscript{#2}} 2 \Mol H2O \\ 3 \Mol {Fe}4\Mol{[Fe\Mol{(CN)}{6}]}{3}</pre>	$\text{H}_2\text{O}$ $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3$
---	--

Ein weiterführendes Paket ist `mhchem` [5]. Es bietet eine weitreichende Sammlung für die Darstellung für Formeln, Verhältnisse und Reaktionen in der Chemie.

Beispiel 4.2: Einige Beispiele mit `mhchem`.

<pre>1 \ce{KCr(SO4)2.12H2O} \\ 2 \ce{CH3=CH2#NH} \\ 3 \ce{A=T} \ce{C#G} \\ 4 \ce{2H2O &lt;=&gt; H3O+ + OH-}</pre>	$\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$ $\text{CH}_3=\text{CH}_2\equiv\text{NH}$ $\text{A}=\text{T} \quad \text{C}\equiv\text{G}$ $2 \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$
---	--

### 4.2 Strukturformel

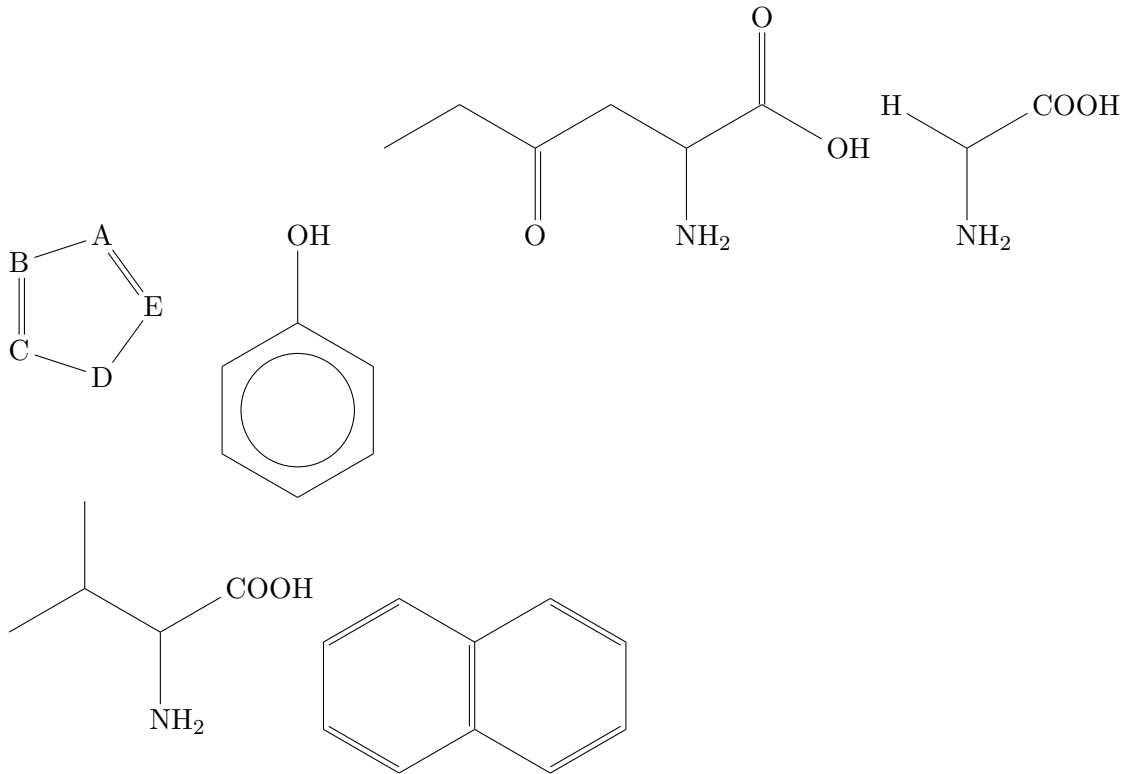
Mit dem Paket `chemfig` [10] können qualitativ hochwertige und beliebig komplexe Struktur- oder Koordinationsformeln von Molekülen erstellt werden. Auch hier gilt, dass mit steigender Komplexität der Formeln auch die Komplexität des zugehörigen Codes ansteigt.

Beispiel 4.3: Chemfig.

```

1 \chemfig{[: -144]A*5(-B=C-D-E=)}\quad%
2 \chemfig{OH-[: -90]**6(-----)}
3 \chemfig{[:120]NH_2*6(-(-([:60]O)-[: -60]OH)--(--[:60])=0)}
4 \chemfig{[:90]NH_2-((-[:30]COOH)-[: -210]H)}
5 \chemfig{[:90]NH_2-((-[:30]COOH)-[: -210](-[: -60])(-[:60]))}
6 \chemfig{*6(=-*6(-=-)=-)}

```



**4.2.1 Reaktionsschemata**

Es existieren verschiedene Pakete, die es ermöglichen Reaktionsschemata darzustellen. Eines relativ neues davon ist mychemistry [7].



# Kapitel 5

## Bibliographie

Die Bibliographie, oder auch Literatur- oder Quellenverzeichnis, ist eines der wichtigsten Bestandteile einer wissenschaftlichen Arbeit. Dabei kommt ,neben den literarisch oder wissenschaftlichen Anforderungen, den formalen Aspekten des richtigen Zitieren eine nicht unbedeutende Rolle zu. Die Anforderungen an das Aussehen der Zitiermarken oder des resultierenden Verzeichnisses werden zumeist von Publikationsziel bestimmt. Zumeist unterscheiden sich die Anforderungen verschiedener wissenschaftlicher Journale nur in Kleinigkeiten. Dennoch kann eine Umsetzung sehr Zeitrauben sein. Besonders, wenn man für verschiedene Ziele publizieren möchte. Maximale Flexibilität bietet das Paket `biblatex`, welches sowohl mit dem Prozessor, also den Programmen, die die Sortierung erledigen, `BibTeX` und `biber` zusammenarbeitet. Da `BibTeX` ein sehr altes Programm ist, bestehen einige Limitierungen bezüglich der Menge der Literatureinträge. Besonders hervorzuheben, ist die relativ gute Anpassbarkeit. Im Gegensatz zu der eigenständigen Syntax von `BibTeX` kann `biblatex` innerhalb der `TeX`-Datei – mit `TeX`-Syntax – verändert werden. Zwar gibt es momentan für `biblatex` noch deutlich weniger vorgefertigte Stile, es ist aber anzunehmen, dass ihre Anzahl in nächster Zeit deutlich zunimmt.



# Literaturverzeichnis

- [1] F. Chervet, tabu and longtabu - Flexible LATEX tabulars, 2.8, **Feb. 2011**.
- [2] S. Fear, Publication quality tables in LATEX, **Apr. 2005**.
- [3] C. Feuersänger, Manual for Package Pgfplots, **Juli 2011**.
- [4] C. Feuersänger, Manual for Package Pgfplots Table, **Juli 2011**.
- [5] M. Hensel, The mhchem Bundle, **Juli 2011**.
- [6] M. Kohm, Jens-Uwe-Morawski, KOMA-Script, **Apr. 2011**.
- [7] C. Niederberger, mychemistry, **Apr. 2011**.
- [8] In, *Bd. 2*, 117, Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), **Juli 2007**.
- [9] T. Tantau, TikZ and PGF Packages, 2.10, **Okt. 2010**.
- [10] C. Tellchea, Chemfig, 1.0a, **Sep. 2011**.
- [11] H. Voß, Math mode, CTAN, **Dez. 2010**.
- [12] J. Wright, siunitx — A comprehensive (SI) units package, **Okt. 2011**.

