



# Einordnung

	Office-Suite	Textsatz	Desktop Publishing
1. Einleitung			
2. Software	LibreOffice, OpenOffice, Microsoft Office	$\TeX$ , LaTeX, ConText, XeLaTeX, LuaLaTeX	Scribus, Adobe InDesign
3. Konzepte			
4. Präambel			
5. Strukturierung	Texte, Tabellenkalkulation, Präsentationen	Textsatz, Formelsatz	Flexibler Textsatz
6. Formatierung			
7. Formelsatz	WYSIWYG (What you see is what you get)	WYSIWYM (What you see is what you mean)	WYSIWYG
8. Bilder			
9. Tabellen	Bedienbarkeit, Interaktion, breite Anwendung	Textsatz, Stabilität, wissenschaftliche Anforderungen	Professionalität, Flexibilität
10. Listen			
11. BibLaTeX	Synergie einzelner Komponenten, breite Anwendung	Produktivität, hervorragende Ergebnisse	Professionelle Anwendungen, universell
12. Hyperref			
13. Minipages			
14. Zweispaltiges			
15. Übersicht			

# Einleitung

## 1. Einleitung

## 2. Software

## 3. Konzepte

## 4. Präambel

## 5. Strukturierung

## 6. Formatierung

## 7. Formelsatz

## 8. Bilder

## 9. Tabellen

## 10. Listen

## 11. BibLaTeX

## 12. Hyperref

## 13. Minipages

## 14. Zweispaltiges

## 15. Übersicht

- Kompilierbare Hochsprache für Textsatz
- Saubere Layouts und Textsatz (→ Typografie)
- Gutes Handling von Objekten
  - Bilder, Tabellen, Schemata
- Literaturverwaltung und Literaturverzeichnisse
- Sehr stabil auch für große Dokumente
- Dynamische, automatische Verlinkung
  - „siehe Abbildung 1“, Literaturzitate

# Einleitung

## 1. Einleitung

## 2. Software

## 3. Konzepte

## 4. Präambel

## 5. Strukturierung

## 6. Formatierung

## 7. Formelsatz

## 8. Bilder

## 9. Tabellen

## 10. Listen

## 11. BibLaTeX

## 12. Hyperref

## 13. Minipages

## 14. Zweispaltiges

## 15. Übersicht

- $\text{\TeX}$  als ursprüngliche Sprache für englischen Sprachraum und Textsatz von Büchern → Donald E. Knuth
- LaTeX Erweiterung mit Makros zur einfacheren Bedienbarkeit durch Leslie **L**amport
- KOMA-Script für nicht englischsprachige Regionen und weitere „Usability-Features“
- XeLaTeX → erweiterter Schriftarten-, Codierungs- und Grafiksupport
- LuaLaTeX → Integration der Interpretersprache Lua
- ConText → separate Entwicklung unabhängig von LaTeX
  - Interaktive PDFs und Dokumente für Darstellung an Rechnern

# Software – TeX

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- TeX-Distributionen
  - Stellen Compiler (LaTeX, XeLaTeX, LuaLaTeX, ConTeXt, BibLaTeX, Biber, ...), Schriftarten sowie Pakete (ähnlich Bibliotheken) und meist Editoren zur Verfügung
  - TeXLive → unixoide Systeme (Linux, BSD, OS X), Windows
    - Sehr umfangreich
  - MikTeX → Windows
    - Grafische Oberfläche, einige Pakete fehlen oder sind schwer integrierbar
- Editoren
  - **ShareLaTeX** (Browser, Versionsverwaltung, kollaborativ)
  - **TexMaker**, TexStudio, TexWorks
  - Gummi, Kile, ...
  - nano, emacs, ...
  - (Lyx)

# Software – TexMaker

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

The screenshot displays the TexMaker interface with a LaTeX document open. The left sidebar shows a file explorer with a project structure for 'Forschungspraktikum.tex'. The main window shows the LaTeX source code, including sections for 'Theoretische Grundlagen', 'Schrödinger-Gleichung', and 'Hamiltonoperator'. The right window shows the rendered PDF output, featuring mathematical equations and a table of relative energies for four rotamers of thiazol.

**Table 1: relative, nullpunktkorrigierte Energien der Rotamere**

	Rotamer 1	Rotamer 2	Rotamer 3
Gasphase	B3LYP20 2,07 kJ mol <sup>-1</sup>	B3LYP35 2,04 kJ mol <sup>-1</sup>	cam-B3LYP 1,93 kJ mol <sup>-1</sup>
1,1'-Sulfonylbis(methan)	B3LYP20 1,03 kJ mol <sup>-1</sup>	B3LYP35 0,99 kJ mol <sup>-1</sup>	cam-B3LYP 0,83 kJ mol <sup>-1</sup>

**Abbildung 1: formulierbare Rotamere des Thiazol**

Abbildung 1 zeigt vier verschiedene Konformationen (Rotamere) des Thiazol-Ringsystems, beschriftet als (a) Rotamer 1, (b) Rotamer 2, (c) Rotamer 3 und (d) Rotamer 4. Die Strukturen sind als chemische Formeln dargestellt, die die räumliche Anordnung der Atome und die Orientierung der Substituenten zeigen.

# Software – TexWorks

## 1. Einleitung

## 2. Software

## 3. Konzepte

## 4. Präambel

## 5. Strukturierung

## 6. Formatierung

## 7. Formelsatz

## 8. Bilder

## 9. Tabellen

## 10. Listen

## 11. BibLaTeX

## 12. Hyperref

## 13. Minipages

## 14. Zweispaltiges

## 15. Übersicht

Dabei sind  $i$  und  $j$  die Indizes der Elektronen und  $A$  und  $B$  jene der Kerne. Analytisch nicht lösbar ist allerdings der Term der Elektron-Elektron-Repulsion, da der Elektron-Elektron-Abstand nicht konstant ist. Näherungen für diese Terme zu finden, ist Ziel der meisten Methoden der Quantenchemie, z.B. der Hartree-Fock-Näherung und der  $\text{post-HF}$  dft, die in den folgenden Abschnitten besprochen werden werden.

Weiterhin ist die Wellenfunktion des Systems zunächst unbekannt. Ein Ansatz, diese zu erhalten, besteht aus der Linearkombination von Atomorbitalen  $\psi_{i\alpha}$   $s:\psi_i$  zu Molekularorbitalen  $\psi_{i\alpha}$   $s:\psi_i$ .

$$\Psi = \sum_{i\alpha} \sum_{j\beta} c_{ij} \psi_{i\alpha} \psi_{j\beta}$$
$$\Psi_{\text{Hartree-Produkt}} = \prod_{i=1}^N \psi_{i\alpha}(\mathbf{r}_i)$$

Die elektronische Gesamtwellenfunktion  $\Psi$   $s:\Psi$  kann aus den Molekularorbitalen als Hartreeprodukt erhalten werden, wobei  $\mathbf{r}_i$  die Raumkoordinate ist.

$$\Psi_{\text{Hartree-Produkt}} = \prod_{i=1}^N \psi_{i\alpha}(\mathbf{r}_i)$$

Dieses erfüllt jedoch nicht die Bedingung der Antisymmetrie, die für Fermionen gelten muss.

$$\Psi_{\text{Antisymmetrie}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (-1)^P \prod_{i=1}^N \psi_{i\alpha}(\mathbf{r}_{P(i)})$$

Um das Prinzip der Antisymmetrie der Wellenfunktion zu wahren, können Linearkombinationen aus Hartree-Produkten gebildet werden, die dieses Prinzip erfüllen. Diese sind aus Slater-Determinanten erhältlich (mit den Molekularorbitalen von  $1$  bis  $K$  und  $N$  Elektronen  $\psi_{i\alpha}$  Levine2013,Jensen2007,Szabo1996):

$$\Psi_{\text{Slater}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (-1)^P \prod_{i=1}^N \psi_{i\alpha}(\mathbf{r}_{P(i)})$$

Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird durch die Coulomb- und Austauschintegrale  $J_{ij}$  und  $K_{ij}$  beschrieben. Der Zweielektronenoperator lautet somit für ein Elektron  $1$  und angewandt auf eine beliebige Funktion  $\psi$ :

$$H_{12} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \psi_i^*(\mathbf{r}_1) \psi_j(\mathbf{r}_1) \int \psi(\mathbf{r}_2) H_{12} \psi(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2$$

Dabei beschreibt der Coulomboperator  $J_{ij}$  die potenzielle Energie des Elektrons  $1$ , welches sich im elektrischen Feld des Elektrons  $2$  im gleichen Raumorbitale bewegt. Dabei wird Elektron  $2$  durch seine Dichte  $\rho(\mathbf{r}_2)$  repräsentiert. Der Austauschoperator  $K_{ij}$  beschreibt den Energiebeitrag, der aus der Bedingung, dass die Wellenfunktion antisymmetrisch bezüglich des Austauschs zweier Elektronen sein muss, resultiert. Insgesamt ergibt sich der Fock-Operator für ein Elektron  $1$  somit zu:

$$F_{11} = H_{11} + \sum_{j=1}^N \rho_j(\mathbf{r}_1) J_{ij}(\mathbf{r}_1) - \sum_{j=1}^N \rho_j(\mathbf{r}_1) K_{ij}(\mathbf{r}_1)$$

**Table 1:** relative, nullpunktkorrigierte Energien der Rotamere bezogen auf das jeweils energetisch günstigere

	Rotamer 1	Rotamer 3
Gasphase	B3LYP20	2,07 kJ mol <sup>-1</sup>
	B3LYP35	2,04 kJ mol <sup>-1</sup>
	cam-B3LYP	1,93 kJ mol <sup>-1</sup>
1,1'-Sulfinyl-bis(methan)	B3LYP20	1,03 kJ mol <sup>-1</sup>
	B3LYP35	0,99 kJ mol <sup>-1</sup>
	cam-B3LYP	0,83 kJ mol <sup>-1</sup>

Abbildung 1: formulierbare Rotamere des Thiazol

6 | MC1.3 Physikalische Chemie, 2015

100 % Seite 6 von 30

# LaTeX – Eine Einführung



# Software – nano

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

```

\vec{k}^A(\vec{v}(r)) - \vec{k}^B(\vec{v}(r)) \neq \vec{\mathit{a}}(\text{konst.})
\end{equation}
formulieren.
Zunächst wird gezeigt, dass die Stromdichten  $\vec{j}(s;j)^A(\vec{v}(r), t)$ ,  $\vec{j}(s;j)^B(\vec{v}(r), t)$ , die zugehörig zu  $\vec{j}(s;j)^A(\vec{v}(r), t)$  und  $\vec{j}(s;j)^B(\vec{v}(r), t)$  sind, sich stets unterscheiden. Dabei sind die Stromdichten;
\begin{equation}
\vec{j}(\vec{v}(r), t) = \frac{1}{2} \left( \vec{\Psi}^*(\vec{v}(r), t) \nabla \Psi(\vec{v}(r), t) - \nabla \Psi^*(\vec{v}(r), t) \Psi(\vec{v}(r), t) \right)
\end{equation}
\label{eq:Stromdichte-WF}
\end{equation}
und hängen mit den Elektronendichten über die Kontinuitätsgleichung zusammen:
\begin{equation}
\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{v}(r), t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{v}(r), t) = 0
\end{equation}
\label{eq:Kontinuitätsgleichung-Stromdichte-Elektronendichte}
\end{equation}
Diese zeigt, dass die zeitliche Änderung der Elektronendichte in einem bestimmten Volumen gleich dem Fluss der Stromdichte durch jenes Volumen ist.
Für den definierten Anfangszustand, zu dem sich das System im Grundzustand befindet und das externe Potenzial nicht vorhanden ist, sind die Stromdichten und Elektronendichten bekannt.
\begin{align}
\vec{j}(\vec{v}(r), t_0) &= \vec{j}^B(\vec{v}(r), t_0) = \vec{j}_0(\vec{v}(r)) \label{eq:StromdichteTD-GS} \\
\rho(\vec{v}(r), t_0) &= \rho_0(\vec{v}(r)) \label{eq:ElektronendichteTD-GS}
\end{align}
\end{align}
Ihre zeitliche Entwicklung ist über den Zusammenhang
\begin{equation}
\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}(\vec{v}(r), t) \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{v}(r), t) \right) = - \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}(\vec{v}(r), t) \right)
\end{equation}
\label{eq:EquationOfMotion-Stromdichten}
\end{equation}
gegeben. Deren Subtraktion liefert;
\begin{equation}
\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}(\vec{v}(r), t) \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{v}(r), t) \right) = - \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}(\vec{v}(r), t) \right)
\end{equation}
\label{eq:EquationOfMotion-Stromdichten-Elektronendichte}
\end{equation}
Wird dieser Ausdruck bei  $t = t_0$  ausgewertet, erhält man eine Verknüpfung der Stromdichten mit dem zeitabhängigen Potenzial:
\begin{equation}
\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}(\vec{v}(r), t) \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{v}(r), t) \right) = - \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}(\vec{v}(r), t) \right)
\end{equation}
\label{eq:externesTDPotenzial-Stromdichten-Elektronendichte}
\end{equation}
Es ist ersichtlich, dass die rechte Seite von Gleichung \ref{eq:externesTDPotenzial-Stromdichten-Elektronendichte} nicht den Wert 0 annehmen kann, da die ursprünglich Annahme verbietet, dass  $\vec{j}(s;j)^A(\vec{v}(r), t)$  und  $\vec{j}(s;j)^B(\vec{v}(r), t)$  den gleichen Wert annehmen.
Es ist nunmehr nötig, auch einen eindeutigen Zusammenhang zwischen den Stromdichten und den Elektronendichten zu finden. Wird die Kontinuitätsgleichung \ref{eq:Kontinuitätsgleichung-Stromdichte-Elektronendichte} auf die Elektronendichten  $\rho(\vec{v}(r), t)$  angewandt, erhält man;
\begin{equation}
\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{v}(r), t) + \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}(\vec{v}(r), t) \right) = - \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{v}(r), t) \right)
\end{equation}
\label{eq:externesTDPotenzial-Stromdichten-Elektronendichte}
\end{equation}
und mit dem Zusammenhang aus Gleichung \ref{eq:externesTDPotenzial-Stromdichten-Elektronendichte};
\begin{equation}
\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{v}(r), t) \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}(\vec{v}(r), t) \right) \right) = - \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{v}(r), t) \right)
\end{equation}
\label{eq:Zusammenhang-TDeDen-TDextPot}
\end{equation}
sodass ein Zusammenhang zwischen dem zeitabhängigen externen Potenzial und der zeitabhängigen Elektronendichte hergestellt ist. Sofern der rechte Term nicht 0 werden kann, können die beiden verschiedenen externen Potenziale nicht die gleichen zeitabhängigen Elektronendichten
\begin{equation}
\int \rho(\vec{v}(r), t) \left( \nabla \cdot (\vec{v}^A - \vec{v}^B) \right)^2 \text{d}^3r = \int \rho(\vec{v}(r), t) \left( \nabla \cdot (\vec{v}^A - \vec{v}^B) \right) \text{d}^3r = \int \rho(\vec{v}(r), t) \left( \nabla \cdot (\vec{v}^A - \vec{v}^B) \right) \text{d}^3r
\end{equation}
Das Kreisintegral kann dabei für reelle Potenziale vernachlässigt werden, da der Abfall der Asymptote mindestens  $1/r$  beträgt und der zweite Term durch die Annahme entfällt. Somit wird
\begin{equation}
\rho(\vec{v}(r), t) \left( \nabla \cdot (\vec{v}^A - \vec{v}^B) \right) = 0
\end{equation}
erhalten. Da die Elektronendichte ein positiver Wert ist  $\rho(\vec{v}(r), t) > 0$ , muss der zweite Faktor 0 sein
\begin{equation}
\nabla \cdot (\vec{v}^A - \vec{v}^B) = 0
\end{equation}
und somit
\begin{equation}
\vec{v}^A(\vec{v}(r), t) = \vec{v}^B(\vec{v}(r), t) + \vec{\mathit{a}}(\text{konst.})
\end{equation}
Dies ist ein Widerspruch zu der Annahme, die in Gleichung \ref{eq:Entwicklung-zeitabhängige-Potenziale} getroffen wurde. Deshalb kann der zweite Term in Gleichung \ref{eq:Zusammenhang-TDeDen-TDextPot} nicht 0 werden. Es besteht somit ein eindeutiger Zusammenhang zwischen den Stromdichten und den Elektronendichten.
Ebenso wie bei der Grundzustands-\acronym{dft} existiert ein zeitabhängiger Kohn-Sham-Formalismus, bei dem ebenso die Elektronendichte aus nicht wechselwirkenden Orbitalen erhalten wird (Gleichung \ref{eq:KohnShamAnsatz}).
\begin{equation}
\rho(\vec{v}(r), t) = \sum_{i=1}^N \sum_{\text{limits}} |\psi_i(\vec{v}(r), t)|^2
\end{equation}
\label{eq:KohnShamAnsatz}
\end{equation}
Die so formalisierten Orbitale müssen die zeitabhängige Kohn-Sham-Gleichung erfüllen
\begin{equation}
\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_s(\vec{v}(r), t) \right) \psi_i(\vec{v}(r), t) = \epsilon_i \psi_i(\vec{v}(r), t)
\end{equation}
\label{eq:KohnShamAnsatz}
\end{equation}
Von diesem Ansatz ausgehend kann ebenfalls ein Austausch-Korrelationsfunktional abgeleitet werden, welches nun ein Funktional der zeitabhängigen Elektronendichte ist.
Zur Bestimmung molekularer Eigenschaften im Rahmen des bisherigen Konstrukts der \acronym{dft} wird meist die linear-response-Methode verwendet. Der Name leitet sich von der Entwicklung der Elektronendichte als Reihe durch die Störung des externen Potenzials ab
\begin{equation}
\rho(\vec{v}(r), t) = \rho_0(\vec{v}(r)) + \rho_1(\vec{v}(r), t) + \dots
\end{equation}
\end{equation}

```



# Software – ShareLaTeX

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- TeX-Editor online
- Gleichzeitiges, transparentes Arbeiten mehrerer Personen am gleichen TeX-Dokument
- Registrierung bei <https://de.sharelatex.com/> oder auf eigenem Server (Docker-Image, NodeJS) <https://phillipseeber.no-ip.org:55555/>
- Freie Version und kommerziell verfügbar bei sharelatex.com
- Dateiversionierung um Änderungen verfolgen zu können und alte Versionen zu nutzen

# Software – ShareLaTeX

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

The screenshot displays a LaTeX editor interface for a document titled "Masterarbeit". The left pane shows a file explorer with a project structure including "Einleitung", "Ergebnisse", "Theorie", and "Quantum\_Chemistry...". The main editor shows LaTeX source code for a document about the Born-Oppenheimer approximation and molecular Hamiltonian. The code includes sections for the Born-Oppenheimer approximation, the molecular Hamiltonian, and the transformation to a mass-centered system. The right pane shows the rendered document, which includes a 3D ball-and-stick model of a heme molecule and its spin states, labeled as (a) Oxid, (b) Hydroxid, and (c) Apo.

# Software – Literatur

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- JabRef
  - Grafische Literaturverwaltung
  - Verlinkungen zu Dateien und Websites
  - Plugin für LibreOffice / OpenOffice
  - Erzeugt und liest LaTeX-Bib-Dateien (plain text)
  - Windows, Unixoid, OS X → Java
- I, Librarian
  - Grafische Literaturverwaltung
  - Export in viele gängige Formate
  - Datenbankintegration (AutoFill für Metadaten)
  - Browser-basiert
  - Verwaltung großer Sammlungen, hervorragende Suche

# Software – JabRef

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

The screenshot displays the JabRef application window. The main window shows a table of bibliographic entries with columns for #, Entrytype, Author, Title, Year, Journal, Owner, Timestamp, and Bibtexkey. Entry 6 is highlighted, showing details for 'NWChem: a comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations' by Valiev et al. (2010).

#	Entrytype	Author	Title	Year	Journal	Owner	Timestamp	Bibtexkey
1	Standard	Incedy et al.	Compendium of Analytical Nomenclature (definitive rules 1997); Orange ...	1998		phillip	2013.02.24	orangebook
2	Standard	Connelly et al.	Nomenclature of Inorganic Chemistry	2005		phillip	2013.08.17	redbook
3	Article	Hanwell et al.	Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualisation, and ana...	2012	J. Cheminform.	phillip	2014.01.20	Avogadro
4	Article	Allouche	Gabedit - A graphical user interface for computational chemistry softwar...	2011	J. Comput. Chem.	phillip	2014.01.22	Gabedit
5	Article	Turnkey et al.	Psi4: An open-source ab initio electronic structure program	2012	WIREs Comput. Mol. Sci.	phillip	2014.01.22	Psi4
6	Article	Valiev et al.	NWChem: a comprehensive and scalable open-source solution for large ...	2010	Comput. Phys. Commun.	phillip	2014.01.22	NWChem
7	Book	Chivers and Sleightholme	Introduction to Programming with Fortran	2012		phillip	2014.03.30	Chivers2012
8	Book	Cowley	An Introduction to Cosmochemistry	1994		phillip	2014.03.30	Cowley1994
9	Book	Levine	Quantum Chemistry	2013		phillip	2014.03.30	Levine2013
10	Book	Szabo and Ostlund	Modern Quantum Chemistry	1996		phillip	2014.03.30	Szabo1996
11	Book	Bender et al.	Grid Computing - Eine Basistechnologie für Computational Science	2010		phillip	2014.04.07	Bender2010
12	Article	Bode and Gordon	Macmolplt: a graphical user interface for GAMESS	1998	J. Mol. Graphics Mod.	phillip	2014.04.13	Macmolplt
13	Book	Gordon and Schmidt	Theory and Applications of Computational Chemistry: the first forty years	2005		phillip	2014.05.11	GAMESS2
14	Article	Schmidt et al.	General Atomic and Molecular Electronic Structure System	1993	J. Comput. Chem.	phillip	2014.05.11	GAMESS1
15	Book	Jensen	Introduction to Computational Chemistry	2007		phillip	2014.07.05	Jensen2007
16	Book	Leach and Gillet	An Introduction to Cheminformatics	2007		phillip	2014.07.05	Leach2007
17	Book	Carey and Sundberg	Advanced Organic Chemistry - Part A: Structure and Mechanism	2008		phillip	2014.10.26	Carey2008
18	Book	Carey and Sundberg	Advanced Organic Chemistry - Part B: Reactions and Synthesis	2008		phillip	2014.10.26	Carey2008a
19	Book	Clayden et al.	Organische Chemie	2013		phillip	2014.10.26	Clayden2013
20	Book	Wedler and Freund	Lehrbuch der Physikalischen Chemie	2013		phillip	2014.10.26	Wedler2013
21	Book	Cramer	Essentials of Computational Chemistry - Theories and Models	2004		phillip	2015.06.17	Cramer2004
22	Book	Lewars	Computational Chemistry - Introduction to the Theory and Applications o...	2011		phillip	2015.06.17	Lewars2011
23	Book	Atkins and dePaula	Physikalische Chemie	2008		phillip		Atkins2008
24	Book	Becker	Organikum	2009		phillip		Becker2009
25	Book	Breitmaier and Jung	Organische Chemie: Grundlagen, Stoffklassen, Reaktionen, Konzepte, M...	2005		phillip		Breitmaier2005
26	Standard	Cohen et al.	Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry: Green Book	2007		phillip		greenbook
27	Standard	Favre and Powell	Nomenclature of Organic Chemistry: Blue Book	2004		phillip		bluebook
28	Book	Hellwinkel	Die systematische Nomenklatur der organischen Chemie: Eine Gebraue...	2006		phillip		Hellwinkel2006
29	Book	Hesse et al.	Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie	2012		phillip		Hesse2012
30	Book	Holleman et al.	Lehrbuch der Anorganischen Chemie	2007		phillip		Holleman2007
31	Standard	McNaught	Compendium of Chemical Terminology: Gold Book	1997		phillip		goldbook
32	Book	Otto	Analytische Chemie	2011		phillip		Otto2011
33	Book	Riedel and Janiak	Anorganische Chemie	2007		phillip		Riedel2007
34	Book	Vollhardt and Schore	Organische Chemie	2011		phillip		Vollhardt2011

The detailed view of entry 6 shows:

- Author: Valiev, M. and Bylaska, E. J. and Govind, N. and Kowalski, K. and Straatsma, T. P. and van Dam, H. J. J. and Wang, D. and Nieplocha, J. and Apra, E. and Windus, T. L. and de Jong, W. A.
- Title: NWChem: a comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations
- Journal: Comput. Phys. Commun.
- Year: 2010
- Bibtexkey: NWChem

Status: Datei geöffnet '/home/phillip/Dokumente/Chemie/Literatur/Literatur.bib' mit 34 Einträge.

# Software – I, Librarian

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

The screenshot displays a library management interface with a sidebar on the left and a main grid of article cards. The sidebar includes search filters (AND, OR, phrase), a search bar, and navigation options like 'Create project' and 'Active'. The main grid shows 10 items, each with a title, author, and a set of icons for actions like 'Shelf', 'Clipboard', and 'Aureothin & AurH'. The article titles include 'The valence and spin state of iron in oxymyoglobin as inferred from Resonance Raman Spectroscopy', 'Heme oxygenase: function, multiplicity, regulatory mechanisms, and clinical applications', 'The 2-His-1-Carboxylate Facial Triad - An Emerging S...', 'Pyran formation by an atypical CYP-mediated four-electron oxygenation-cyclization cascade in an engineered aureothin pathway', 'Vinylogous chain branching catalysed by a dedicated polyketide synthase module', 'Structural fine-tuning of a multifunctional cytochrome P450 monooxygenase', and 'Bioinspired total synthesis of sespenine'.



# Software – Strukturformeleditoren

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- MarvinSketch
  - Sehr gute Bedienung und Qualität
  - Windows, Unixoid, OS X → Java
  - Kostenfrei mit Registrierung, mit Lizenz diverse Zusatzfeatures
- JchemPaint
  - Angenehme Bedienung, Nur 2D Strukturen
  - Windows, Unixoid, OS X → Java
  - OpenSource
- ChemSketch
  - Einfache Strukturen, Output für komplizierte Strukturen mäßig
  - Freeware mit Einschränkungen
  - „ProVersionen“ → ChemDraw, ChemBioDraw
    - Sehr teuer mit vielen Features

# Software – MarvinSketch

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

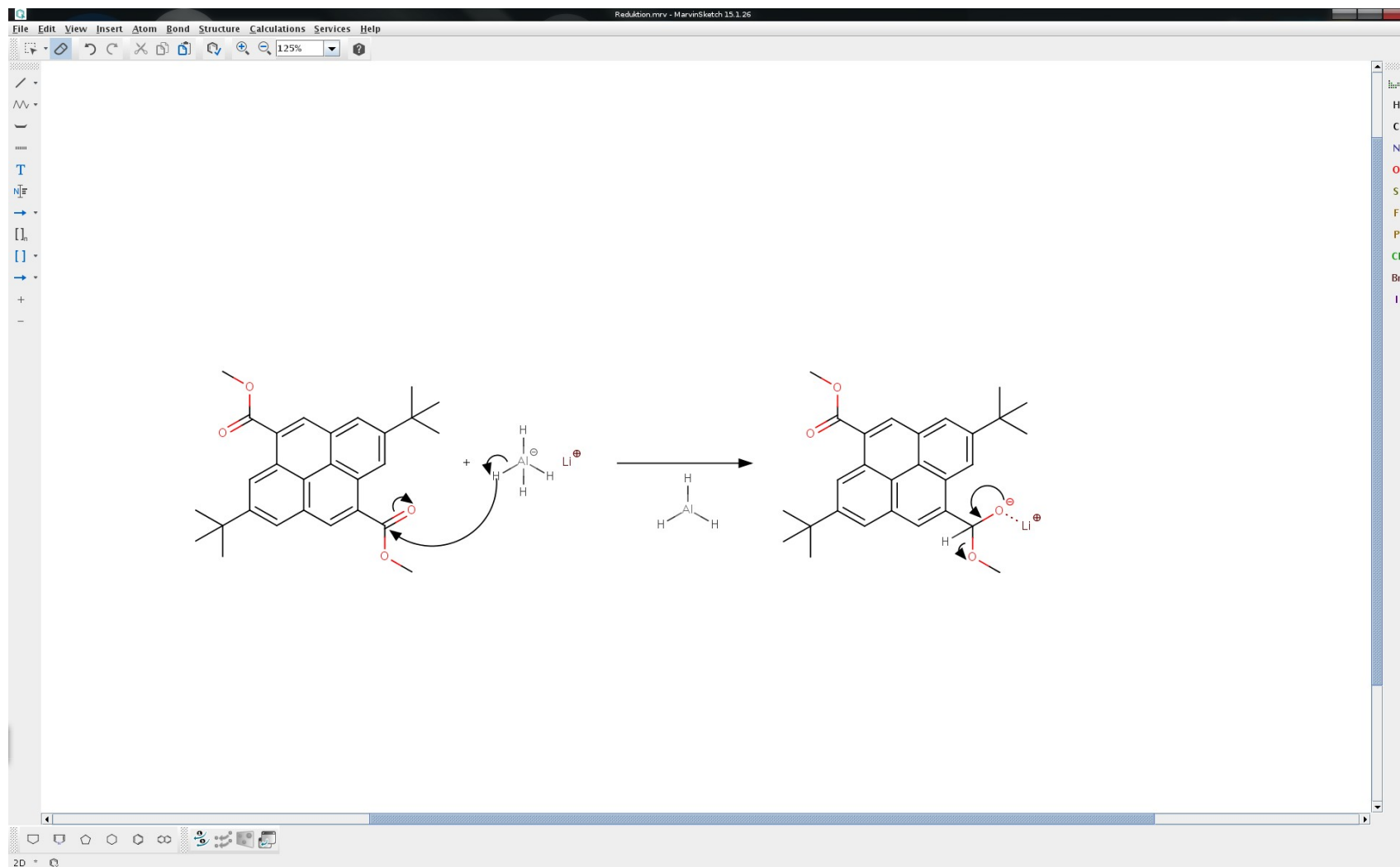
11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht





# Software – JChemPaint

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

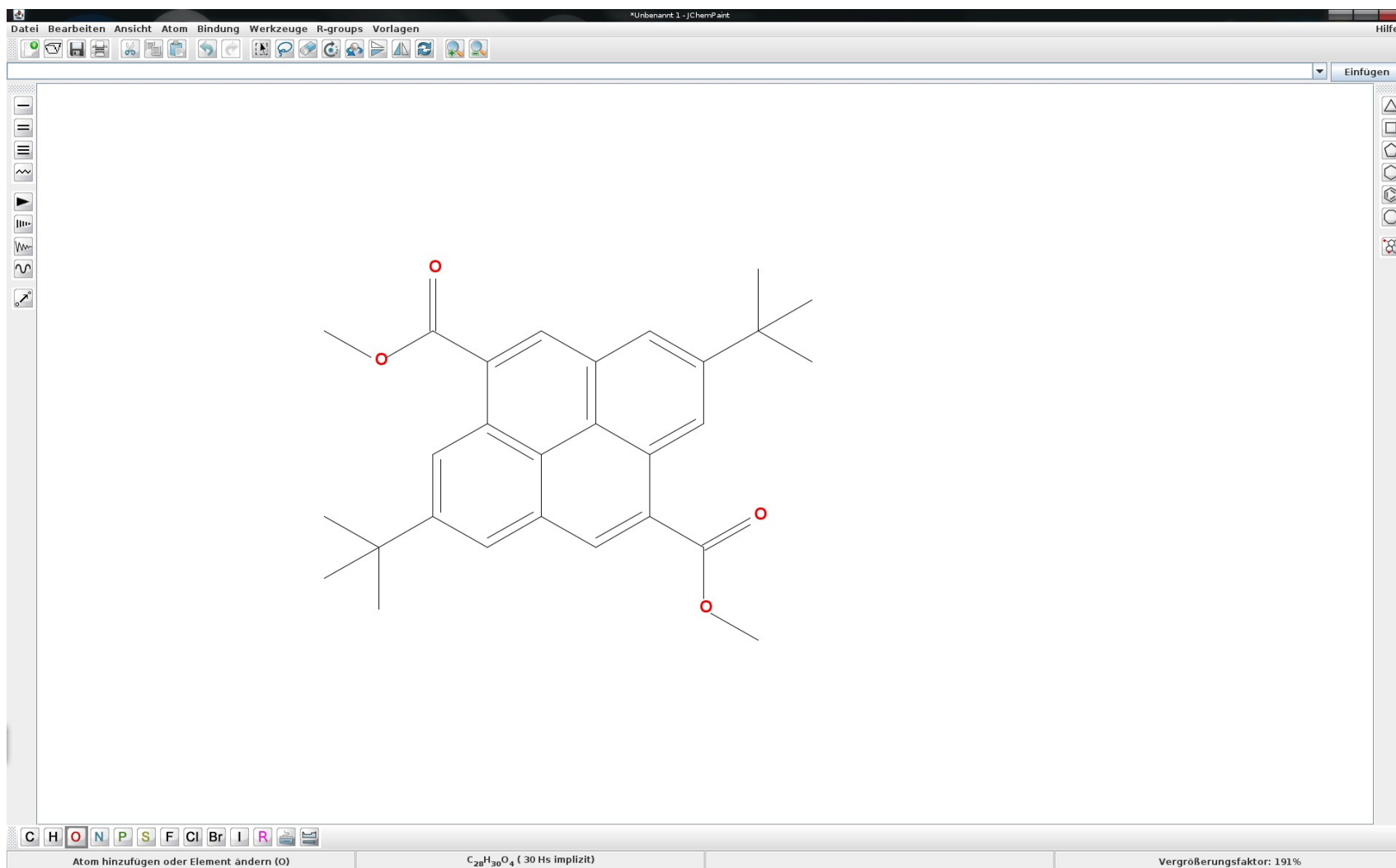
11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht



# Software – Plot und Berechnungen

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

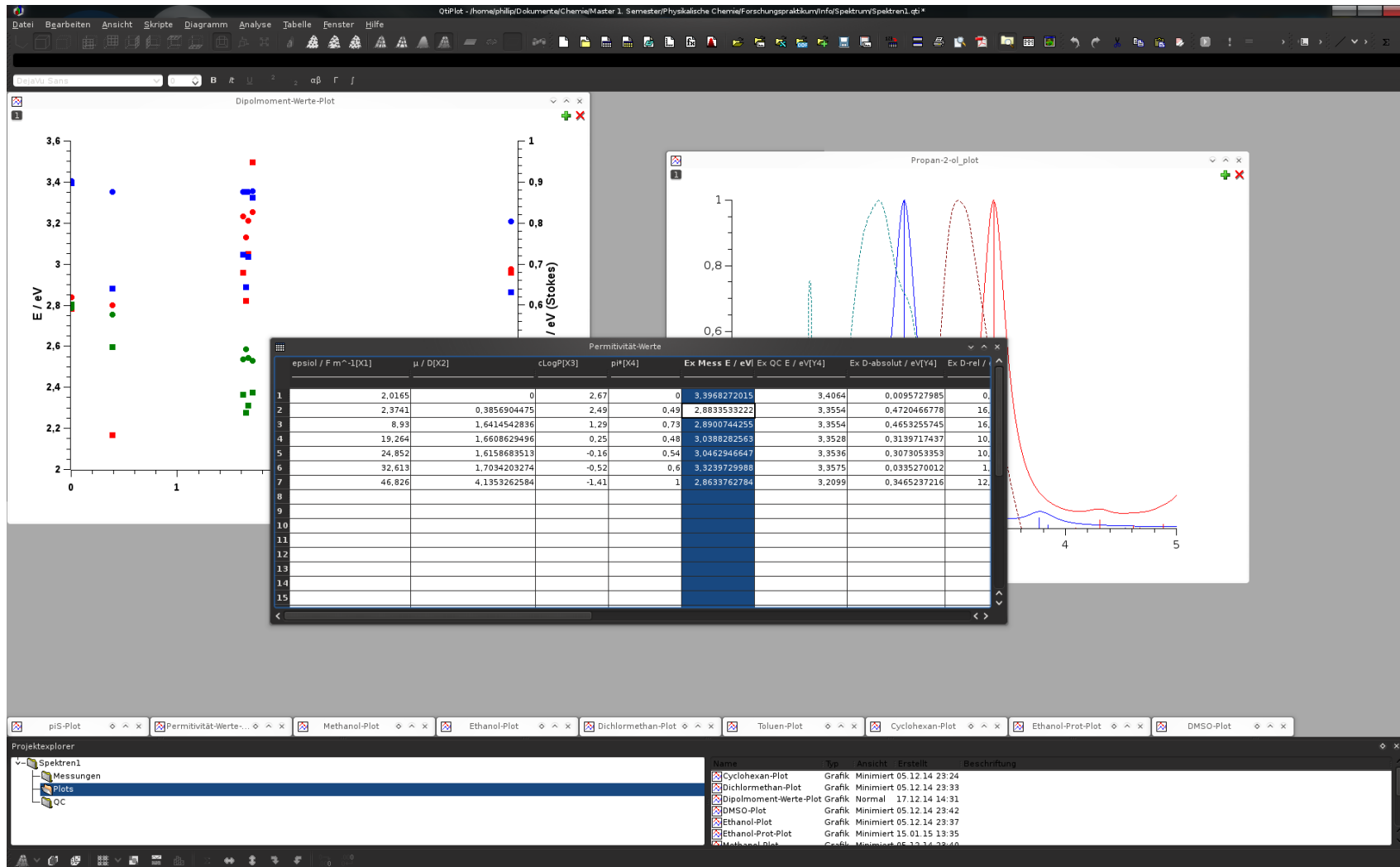
14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- LibreOffice / OpenOffice Calc, Microsoft Excel
  - Umfangreiche Tabellenkalkulation mit einfachen Plotfunktionen
  - Hervorragend für komplexe Berechnungen (insbesondere Statistik → Analytik) und bestimmte Scripting-Aufgaben
  - Einfache Plots
- QtiPlot / Origin
  - Professionelle Datenanalyse
  - Umfangreiche Darstellungsmöglichkeiten, auch mehrdimensional
  - Diverse Funktionen aber weniger flexibel für heterogene Datensätze
- GnuPlot
  - Enorm mächtiges CLI-Programm
  - Jeder erdenkliche Darstellungstyp auch für große Datenmengen (z.B. 3D Heatmaps)

# Software – QtiPlot

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht



# Software – Spezialfälle

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- Avogadro
  - 3D Moleküleditor, Visualisierung von Kristallstrukturen, Orbitale, Normalmoden, Proteine, Kraftfelder
  - Angenehme Bedienung, sehr hochwertiger Output
- Jmol
  - Ähnlich Avogadro mit größerem Fokus auf Biomoleküle
- **Inkscape** (!)
  - Vektorgrafiksoftware
  - Sehr hilfreich für Strukturformeln und alle Diagrammtypen

# Software – Avogadro

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

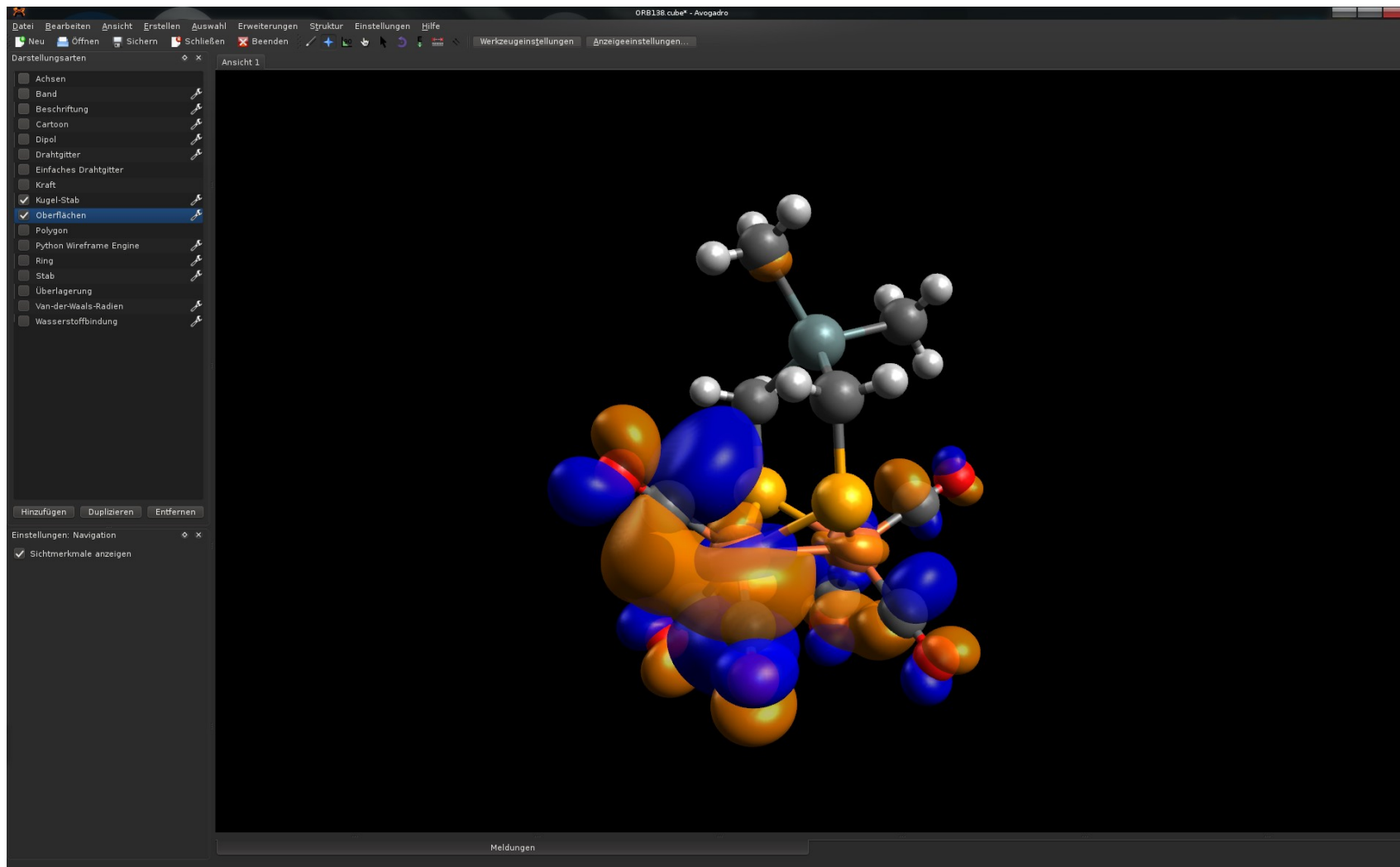
11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht



# Software – Jmol

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

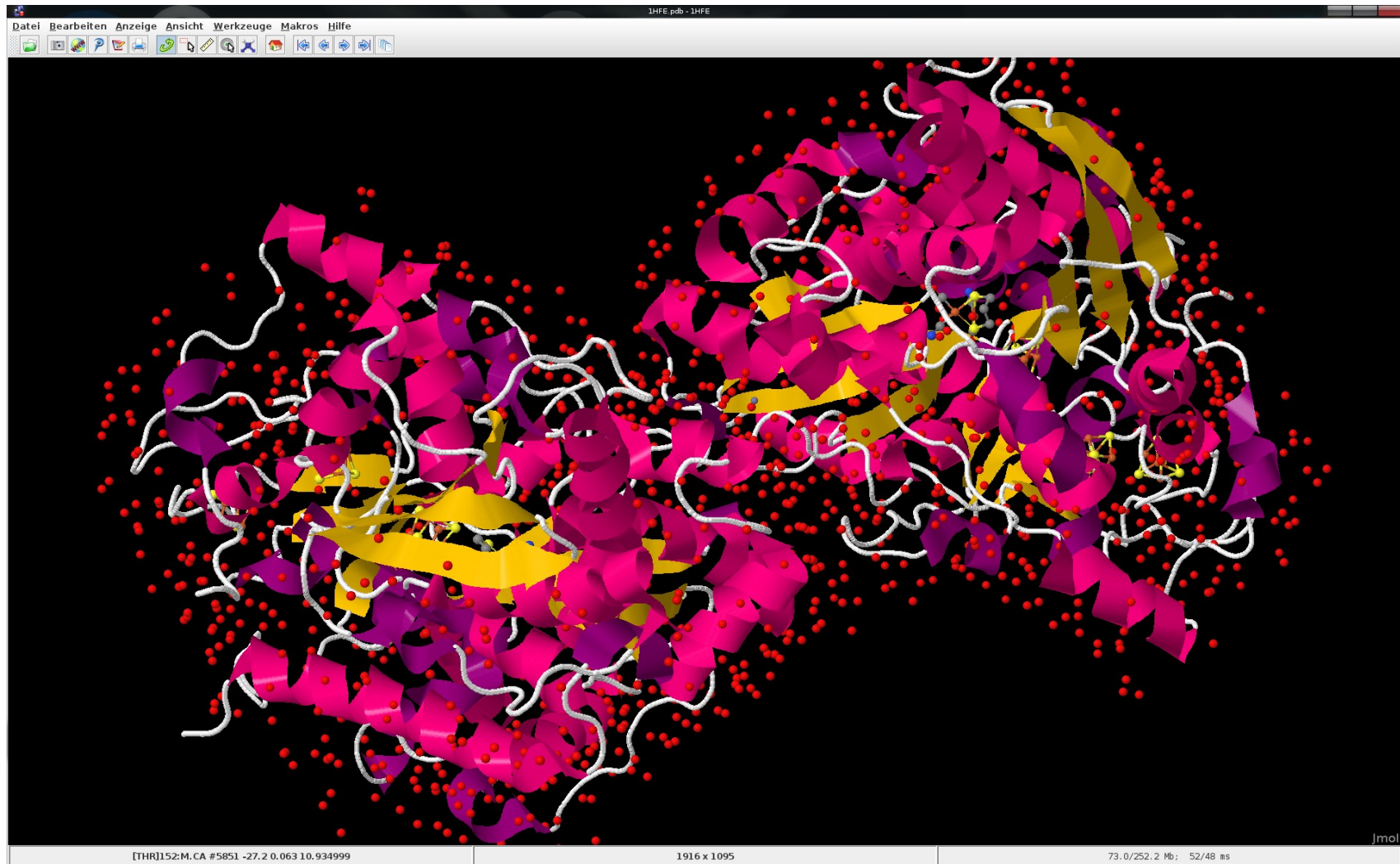
11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht





# Software – Inkscape

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

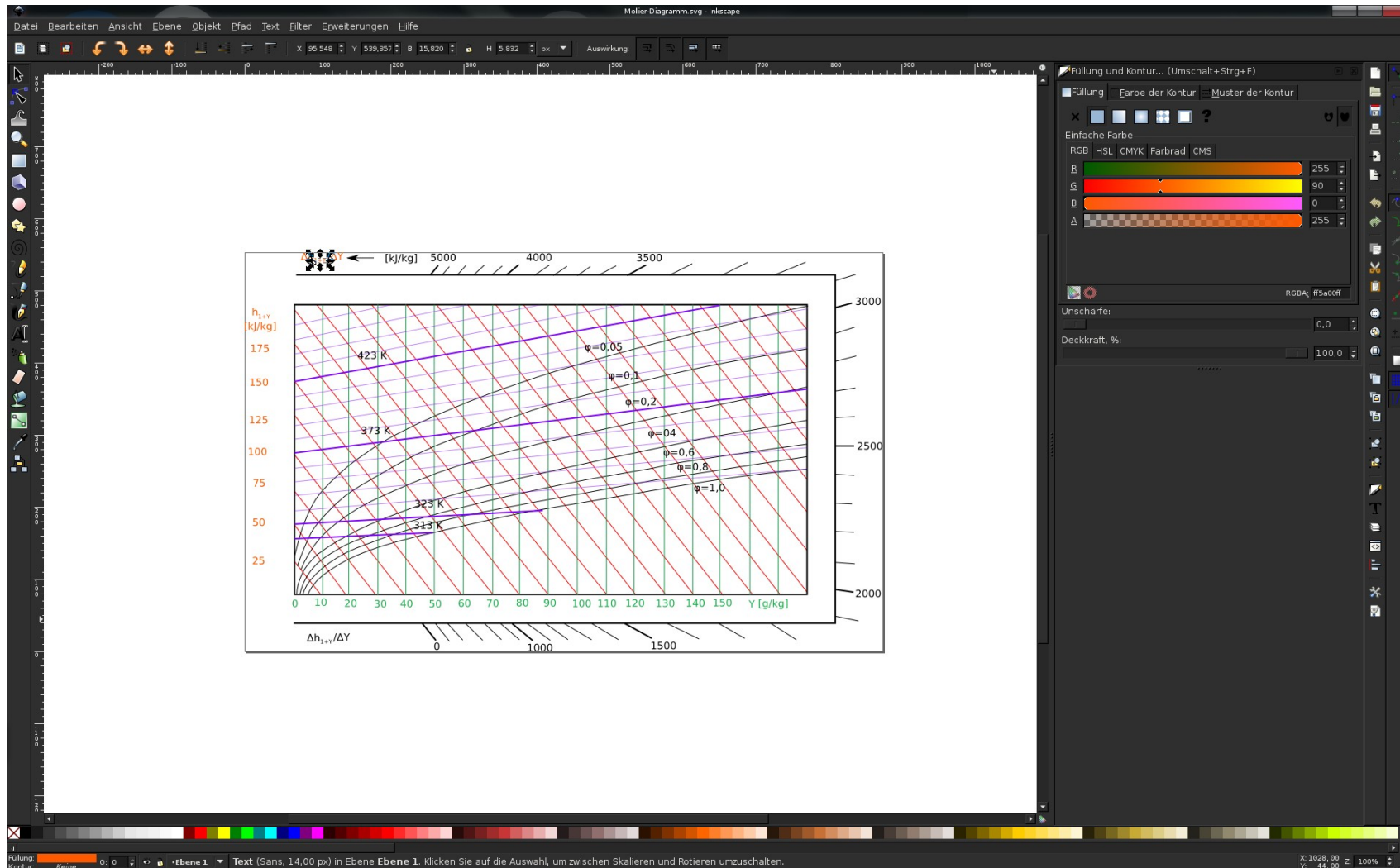
11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht





# Konzepte

- Dokumente sind zweigliedrig
  - Header (in LaTeX „Präambel“)
    - legt Formatierungen fest
    - Lädt Pakete (wie Bibliotheken z.B. in Fortran oder C)
    - Globale Inhalte (z.B. wie Seiten nummerieren, Kopf-Fußzeile)
  - Inhalt
    - Begrenzt durch Umgebung
    - Textkörper
    - Anweisungen Bilder zu platzieren
    - Tabellen

**Wir werden im Weiteren XeLaTeX verwenden**

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

# Konzepte – Syntax

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- Befehle nach folgendem Schema
  - $\backslash$ *BEFEHL*[*optionale Parameter*]{*nötige Parameter*}
- Interpretierte Symbole
  - $\{ \}$  → begrenzt Optionen, gruppiert Elemente
  - $\%$  → Kommentar (wird nicht interpretiert)
  - $\$$  → Matheumgebung im Text
  - $\_$  → Tiefstellen
  - $\wedge$  → hochstellen
  - $\&$  → Formatierungsmarkierung (Tabellen, Gleichungen)
  - $\backslash\backslash$  → Zeilenumbruch (Tabellen, Gleichungen)
  - Ausgabe interpretierter Symbole mit einem vorangestellten  $\backslash$ 
    - $\backslash\&$  ergibt ein  $\&$  in der Ausgabe

# Konzepte – Syntax

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- Neben Befehlen auch Umgebungen (z.B. für Bilder, Tabellen, Gleichungen)
- Aufruf nach Schema
  - $\backslash\text{begin}[Parameter]\{Name\}$   
*Inhalt der Umgebung*  
 $\backslash\text{end}\{Name\}$
- Gruppierende Befehle, z.B. kurzzeitige Formatierungen
  - $\backslash\text{Befehl}\{Inhalt\}$

# Präambel – documentclass

- Beginnt mit `\documentclass[Optionen]{Klasse}`
  - Wichtige Koma-Klassen:
    - `scrartcl` → Abschnittsgliederung, gut für Protokolle, artikelartige Publikationen
    - `scrreprt` → Kapitelgliederung, umfangreiche Arbeiten (Bachelor, Master, Doktor)
    - `scrbook` → Kapitelgliederung für Bücher
    - `beamer` → LaTeX Präsentationen
  - Wichtige Optionen:
    - `fontsize=Xpt` → Schriftgröße
    - `twoside` → beidseitiger Druck
    - `twocolumn` → zweispaltiger Textsatz

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

# Präambel – usepackage

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- Pakete einbinden nach Schema
  - `\usepackage[Optionen]{Paketname}`
- **Wichtige Pakete** (und vorgeschlagene Parameter):
- `\usepackage[babelshorthands]{polyglossia}`  
`\setmainlanguage{german}`
  - Worttrennung, Umlaute, Alphabet
  - `babelshorthands` ermöglicht Nutzung von Babel-Shortcuts (ältere Implementierung für LaTeX)
- `\usepackage[no-math]{fontspec}`
  - Ermöglicht alle TTF als Schriftart zu verwenden
  - Kein Wechsel der Mathe-Schriftart
  - Mathematische Sonderzeichen nur in wenigen Fonts vollständig!

# Präambel – usepackage

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- **Nützliche Pakete:**

- `\usepackage{scrpage2}`

- `\pagestyle{scrheadings}`

- Kopf- und Fußzeilen

- `\usepackage{amssymb}`

- `\usepackage{amsmath}`

- `\usepackage{icomma}`

- Formelsatz, quasi unverzichtbar

- icomma nur nutzen wenn Komma als Dezimaltrennzeichen statt Punkt!

- `\usepackage{graphicx}`

- Grafiken einbinden, Floatumgebungen

# Präambel – usepackage

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- **Nützliche Pakete:**
- `\usepackage{siunitx}`
  - Sauberer Einheitensatz (geschütztes Leerzeichen zwischen Dimension und Größe, aufrechte Symbole, ...)
  - Später mehr
- `\usepackage[...]{biblatex}`
  - Literaturverzeichnisse und Formatierung
  - Später mehr
- `\usepackage[paper=a4paper, left=15mm, right=15mm, top=25mm, bottom=40mm]{geometry}`
  - Ränder festlegen



# Inhalt – Strukturierung

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- Dokumente beginnen mit `\begin{document}` und enden mit `\end{document}`
- Textkörper und inhaltspezifische Formatierungen
  - Überschriften, Listen, Bilder, ...
- Textkörper schlicht als Text
- Absätze durch Leerzeile, einfacher Zeilenumbruch ist kein Absatz!
- Überschriften verschiedener Gliederungstiefe
- \* ermöglichen in vielen nummerierten Umgebungen Unterdrückung der Nummerierung
- Labels unmittelbar nach nummerierendem Befehl ermöglicht Querreferenzen

# Inhalt – Strukturierung

Mit `scrbook`:

## 1 Kapitel

### 1.1 Abschnitt

#### 1.1.1 Unterabschnitt

nicht nummeriert

Name 1

Paragraph

Name 2

- Gliederungsebenen absteigend:

`\part{Band}` (`scrbook`)

`\chapter{Kapitel}` (`scrreprt`)

`\section{Abschnitt}`

`\subsection{Unterabschnitt}`

`\subsection*{nicht nummeriert}`

`\subsubsection{Name 1}`

`\paragraph{Paragraph}`

`\subparagraph{Name 2}`

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

# Inhalt – Strukturierung

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Verfügbare Gliederungstiefe und Nummerierung von gewählter Klasse abhängig
  - `part` nur in `scrbook`, `chapter` ab `scrreprt`, ...
- Höhere / geringere „Tiefe“ der Nummerierung mit `\setcounter{secnumdepth}{X}`
- Inhaltsverzeichnisse erstellen basierend auf diesen Gliederungsebenen → `\tableofcontents`
  - „Tiefe“ des Inhaltsverzeichnisses mit `\setcounter{tocdepth}{X}`
- Abbildungsverzeichnis → `\listoffigures`
- Tabellenverzeichnis → `\listoftables`

# Inhalt – Strukturierung – Titelseite

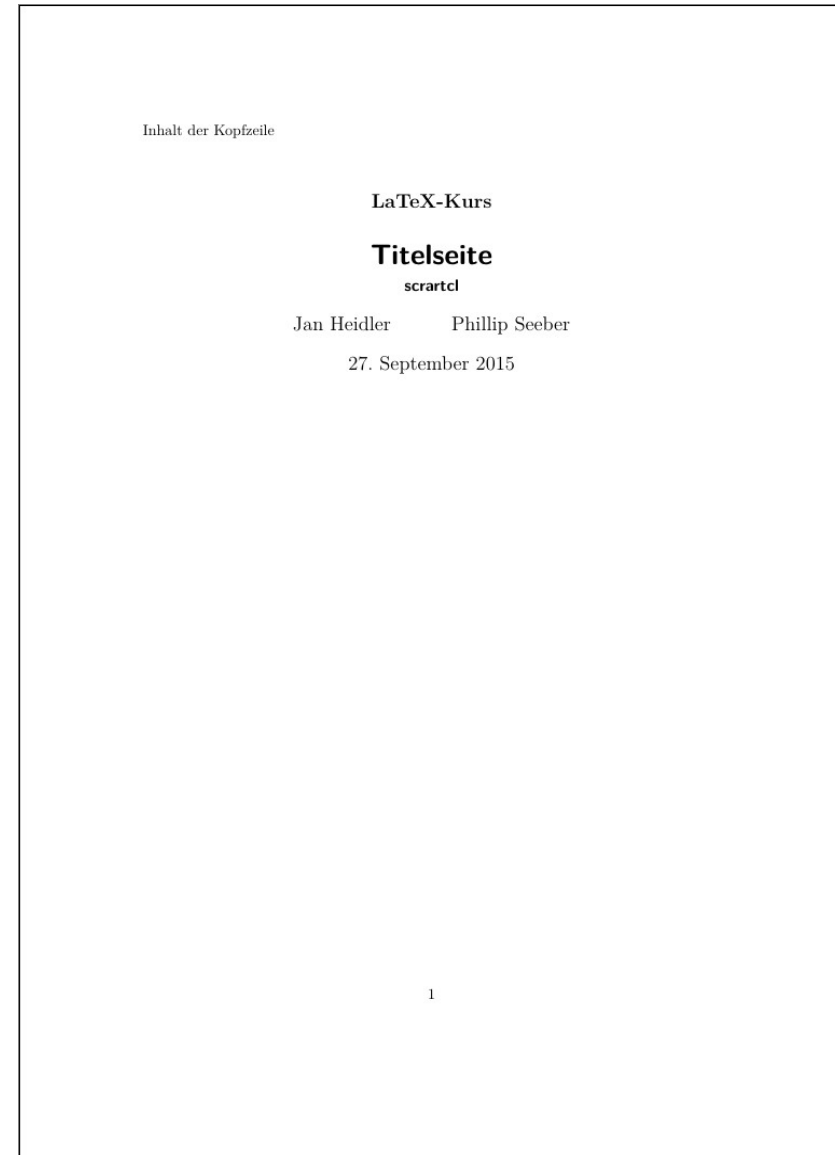
- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Basierend auf der Dokumentklasse automatische Titelseite möglich
  - Auch selber gestalten mit `\begin{titlepage} ... \end{titlepage}`
- Im Präambel folgende Informationen definieren
  - `\titlehead{Kopfzeile}`
  - `\subject{Dokumentart (Bachelor-, Master-, Diplomarbeit, ...)}`
  - `\title{Dokumenttitel}`
  - `\subtitle{Untertitel}`
  - `\author{Jan Heidler \and Phillip Seeber }`
    - Alternativ mit gewünschtem Zeichen trennen
  - `\date{Datum}`
    - oder aktuelles mit `\today`
  - `\thanks{Fußnote}`

# Inhalt – Strukturierung – Titelseite

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Im Dokument mit `\maketitle` Titelseite platzieren
- `scrbook`
- `scrreprt`
- `scrartcl`



# Inhalt – Strukturierung – Grafiken

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- Grafiken können mit `\includegraphics` eingefügt werden und in einer float-Umgebung platziert werden. Nummerierung erfolgt in der Bildunterschrift mittels `\caption` (später mehr)

- `\begin{figure}`

```
\includegraphics[...]{...}
```

```
\caption{Bildunterschrift}
```

```
\end{figure}
```

- Ein durch eine caption gezählte Grafik taucht in `\listoffigures` auf

# Inhalt – Strukturierung – Tabellen

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- Grafiken können mit `\begin{tabular}` eingefügt werden und in einer float-Umgebung platziert werden. Nummerierung erfolgt in der Tabellenüberschrift mittels `\caption[...]{...}` (später mehr)

- `\begin{table}`

```
\caption{Tabellenüberschrift}
```

```
\begin{tabular}{...}
```

```
...
```

```
\end{tabular}
```

```
\end{table}
```

- Ein durch eine caption gezählte Grafik taucht in `\listoftables` auf

# Inhalt – Strukturierung – Label

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Nach nummerierenden Befehlen (`\caption`, `\section`, `\chapter`, ...) kann ein `\label{Tag Name}` zum referenzieren eingefügt werden
  - `\section{Sectionname}`  
`\label{sec:Sectionname}`
- Referenzierung mittels `\ref{sec:Sectionname}` auf die Nummer bzw. mit `\eqref{}` auf Gleichung
  - Unterscheidet sich nur in der Formatierung
  - Formal kann mit `\eqref` auch auf z.B. Sections referenziert werden, mit `\ref` auch auf Gleichungen



# Inhalt – Strukturierung / Formatierung

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Manipulation der Seitennummerierung mit `\pagenumbering{Stil}`
  - `gobble` → keine Seitennummerierung
  - `arabic` → arabische Zahlen
  - `roman` → kleine römische Zahlen
  - `Roman` → große römische Zahlen
  - `alph` → Kleinbuchstaben
  - `Alph` → Großbuchstaben
- Zähler für Seitenzahl manipulieren
  - `\setcounter{page}{Seitenzahl}`

# Inhalt – Strukturierung / Formatierung

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- `scrbook` und `book` Klassen mit zusätzliche Befehlen
  - `\frontmatter` → römische Nummerierung; Vorwort, Inhaltsverzeichnis u.Ä.
  - `\mainmatter` → arabische Nummerierung; Inhalt
  - `\appendix` → Anhang, Großbuchstaben
  - `\backmatter` → Literaturverzeichnis, Abkürzungsverzeichnis, ...
- `\input{}` und `\include{}` zum Einfügen anderer `.tex` Dateien
  - z.B. Kapitel in extra `.tex` Datei schreiben und in „Rahmenwerk“ einfügen
  - `\include` führt `\clearpage` vor einfügen der `.tex` aus (→ Seitenumbruch und vorherige Floatumgebungen werden platziert)
  - `\input` → quasi direktes Einfügen des Inhalts der `.tex`

# Inhalt – Strukturierung – Übung 1

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- Bild einfügen:

```
\begin{figure}
  \includegraphics[scale=0.5]{Bilder/Lamm}
  \caption{ein Lamm}
  \label{img:Lamm}
\end{figure}
```

- Tabelle einfügen:

```
\begin{table}
  \caption{Eine Tabelle}
  \label{tab:Eine Tabelle}
  \begin{tabular}{l r}
    links oben & rechts oben \\
    links unten & rechts unten
  \end{tabular}
\end{table}
```

# Inhalt – Formatierung – Seite

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Seitenränder komfortabel über *geometry* Paket
  - `\usepackage[paper=a4paper, left=15mm, right=15mm, top=25mm, bottom=40mm]{geometry}`
- Bindekorrektur versetzt Inhalt entsprechend der Seitenzahl
  - `\documentclass[BCOR=10mm]{Klasse}`
- Beidseitiger Druck → Wechsel von innen und außen z.B. in Kopfzeile, Bindkorrektur
  - `\documentclass[twoside]{Klasse}`
- Zweispaltiges Layout
  - `\documentclass[twocolumn]{Klasse}`

# Inhalt – Formatierung – Seite

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Kopf- und Fußzeile
  - Paket `scrpage2` (KOMA-kompatibel, nicht `fancyhdr` nutzen!)
  - `\usepackage[Optionen]{scrpage2}`
    - `headsepline` → Kopfzeile mit Linie abtrennen
    - `headtopline` → Linie über Kopfzeile
    - `footsepline` → Fußzeile mit Linie abtrennen
    - `footbotline` → Linie unter Fußzeile
    - `automark` → Kapitel in Kopf- / Fußzeile anzeigen **möglich**
  - `\pagestyle{scrheadings}` im Präambel aktiviert Kopf- / Fußzeilen für jede Seite
  - Im Dokument kann jederzeit mit `\pagestyle{Stil}` umgeschaltet werden
    - `plain` → nur Seitenzahl in der Fußzeile
    - `empty` → keine Kopf- und Fußzeile
    - `scrheadings` → Kopf- und Fußzeile gemäß der Einstellungen

# Inhalt – Formatierung – Seite

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Kopf- und Fußzeile
  - Inhalt über Befehle im Präambel angeben
    - `\ihead{Inhalt}` → innen Kopf
    - `\chead{Inhalt}` → Mitte Kopf
    - `\ohead{Inhalt}` → außen Kopf
    - `\ifoot{Inhalt}` → innen Fuß
    - `\cfoot{Inhalt}` → Mitte Fuß
    - `\ofoot{Inhalt}` → außen Fuß
  - `\pagemark` → Seitenzahl platzieren
    - `\setkomafont{pagenumber}{...}`
  - `\automark[gerade Seite]{ungerade Seite}`
    - z.B. `\automark[section]{chapter}`
  - `\headmark` → durch automark spezifiziertes einfügen

# Inhalt – Formatierung – Seite

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Zeilenabstand
  - `\usepackage[singlespacing]{setspace}`
  - Alternativ `onehalfspacing` oder `doublespacing`
- Umbrüche
  - Leerzeile → Absatz
    - `\parindent Größe` → Einrückung bei Absatz (Präambel)
    - `\parskip Größe` → Abstand des Absatzes (Präambel)
  - `\newline` → einfacher Zeilenumbruch
  - `\newpage` → einfacher Seitenumbruch
  - `\pagebreak` → einfacher Seitenumbruch, versucht an Unterseite bündig zu sein
  - `\clearpage` → Seitenumbruch mit erzwungener Ausgabe aller Floats
  - `\cleardoublepage` → gleiches für zweiseitige Dokumente



# Inhalt – Formatierung

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Tipp: blindtext um Formatierungen zu begutachten
  - `\usepackage{blindtext}`
  - `\begin{document}`
  - ...
  - `\blindtext` oder `\blinddocument`
  - `\end{document}`

# Inhalt – Formatierung – Text

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Schriftgrößen werden relativ zur globalen Schriftgröße geändert
- Änderung nachfolgend für jeweilige Umgebung
  - `\begin{umgebung}`  
`\LARGE`  
...  
`\end{umgebung}`
  - Global mit Koma-Script
    - `\setkomafont{section}{\LARGE}`
  - Lokal begrenzt durch Klammern
    - `{\tiny Hier Text}`

Schriftgröße	Ergebnis
<code>\tiny</code>	tiny
<code>\scriptsize</code>	scriptsize
<code>\footnotesize</code>	footnotesize
<code>\small</code>	small
<code>\normalsize</code>	normalsize
<code>\large</code>	large
<code>\Large</code>	Large
<code>\LARGE</code>	LARGE
<code>\huge</code>	huge
<code>\Huge</code>	Huge

# Inhalt – Formatierung – Text

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Global über fontspec Paket
  - `\usepackage[no-math]{fontspec}`
  - `\setmainfont{Liberation Sans}`
- Für Objekte über Koma-Script
  - `\setkomafont{chapter}{\huge \fontspec{Liberation Sans}}`
- Lokal für einzelne Worte
  - Hervorheben mit `\emph{Text}`
  - Serifenfrei mit `\textsf{Text}`
  - Schreibmaschinenschrift mit `\texttt{Text}`
  - Kursiv (italic) mit `\textit{Text}`
  - Fett (bold) mit `\textbf{Text}`
  - Kapitälchen mit `\textsc{Text}`
  - Serifenschrift mit `\textrm{Text}`

- Für Koma-Scripte und andere globale Befehle:
  - `\bfseries` → fett
  - `\itshape` → kursiv
  - `\sffamily` → serifenfreie Schrift
  - `\rmfamily` → Serifenschrift
  - ...

Befehl	Ergebnis
<code>\emph</code>	<i>Emphasize</i>
<code>\textsf</code>	Serifenfrei
<code>\texttt</code>	Monospace
<code>\textit</code>	<i>Kursiv</i>
<code>\textbf</code>	<b>Fett</b>
<code>\textsc</code>	KAPITÄLCHEN
<code>\textrm</code>	Serifenschrift

# Inhalt – Formatierung – Text

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Text unterstreichen mit `\underline{Text}`
  - keine Umbrüche mehr (Worttrennung, Zeilenumbruch)
- Text hoch- / tiefstellen
  - `\textsuperscript{Text}`
  - `\textsubscript{Text}`

# Inhalt – Formatierung – Text

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Farbiges Text über color Paket
  - `\usepackage{xcolor}`
- 68 Farben vordefiniert (von „Red“ bis „CarnationPink“), eigene definierbar
  - `\definecolor{Name}{Farbmodell}{Werte}`
  - „rgb“ für [0...1] für jeden Kanal, „RGB“ für [0...255] für jeden Kanal, „HTML“ für hexadezimal Farbcodes, ...
- Text färben mittels
  - `{\color{Name} Text}` → nur für gruppierten Inhalt
  - `\color{Name} Text ...` → für gesamten folgenden Inhalt, zurück auf schwarz wechseln `\color{black}`
- Text farbig hinterlegen
  - `\colorbox{Name}{Text}`

# Inhalt – Formatierung – Übung 2

---

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

## Formatierung

# Inhalt – Formelsatz

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- LaTeX gilt als bestes existentes Programm für Formelsatz
- Wird auch von professionellen DTP-Programmen eingebunden
- Plugins für LibreOffice, OpenOffice vorhanden:
  - $E_1 = \langle \psi_1 | \hat{H}_1 | \psi_1 \rangle < \langle \psi_2 | \hat{H}_1 | \psi_2 \rangle$
- Formeln werden in verschiedenen Mathe-Umgebungen gesetzt, die Syntax ändern und z.B. auf Mathe-Fonts wechseln

# Inhalt – Formelsatz – Umgebungen

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- `$ Inhalt $` für Mathematik im Fließtext
  - Passt z.B. Brüche in der Höhe an um Zeilenabstand konstant zu halten
  - Keine Nummerierung
- `\begin{equation} ... \end{equation}`
  - Nummerierte, zentrierte Formel außerhalb des Fließtextes, einzeilig
- `\begin{align} ... \end{align}`
  - Nummerierte, zentrierte Formel, außerhalb des Fließtextes, mehrzeilig, jede Zeile nummeriert, Ausrichtung an Markierungen
- `\begin{equation} \begin{split} ... \end{split} \end{equation}`
  - Nummerierte, zentrierte Formel, außerhalb des Fließtextes, mehrzeilig, nur eine Nummer, Ausrichtungen an Markierungen



# Inhalt – Formelsatz – Umgebungen

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Eher Spezialfälle für wirklich komplizierte Sachen:
- `\begin{alignat} ... \end{alignat}`
  - Ähnlich wie `\begin{align} ... \end{align}`, ermöglicht aber diverse Ausrichtungsmarkierungen, die alle eingehalten werden
- `\begin{multline} ... \end{multline}`
  - Umbrüche ohne Ausrichtung für einen Einzeiler, der aber zu lang ist
- Unterdrückung der Nummerierungen aller Mathe-Umgebungen durch `*`
  - `\begin{umgebung*} ... \end{umgebung*}`

# Inhalt – Formelsatz – Umgebungen

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- **Fließtext Mathematik**

- $\$$  *Inhalt*  $\$$

- Versucht Höhe möglichst klein zu halten

- Klappt nicht immer

- Keine Nummerierung

- Beispielsweise für Formelzeichen im Text u.Ä.

viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muß keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie Lorem ipsum dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

$$\sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i = \sum_{i=1}^{N/2} H_{ii}^{\text{core}} + \sum_{i=1}^{N/2} \sum_{j=1}^{N/2} (2J_{ij} - K_{ij})$$
 Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textaus-

gaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: Dies ist ein Blindtext

# Inhalt – Formelsatz – Umgebungen

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- **Equation**
- `\begin{equation} ... \end{equation}`
- Einzeiler, Formel zentriert in der Breite, abgesetzt vom Text, nummeriert

$$\sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i = \sum_{i=1}^{N/2} H_{ii}^{\text{core}} + \sum_{i=1}^{N/2} \sum_{j=1}^{N/2} (2J_{ij} - K_{ij}) \quad (1)$$

# Inhalt – Formelsatz – Umgebungen

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- **Align**
- `\begin{align} ... \end{align}`
- Mehrzeiler mit Ausrichtung an eine Symbol, jede Zeile nummeriert
  - Ausrichtung hier am „=“

$$\sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i = \sum_{i=1}^{N/2} H_{ii}^{\text{core}} + \sum_{i=1}^{N/2} \sum_{j=1}^{N/2} (2J_{ij} - K_{ij}) \quad (3)$$

$$E_{\text{HF}} = 2 \sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i - \sum_{i=1}^{N/2} \sum_{j=1}^{N/2} (2J_{ij} - K_{ij}) + V_{\text{NN}} \quad (4)$$

# Inhalt – Formelsatz – Umgebungen

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- **Split**
- `\begin{equation} \begin{split} ... \end{split} \end{equation}`
- Mehrzeiler mit Ausrichtung an eine Symbol, jede Zeile nummeriert
  - Ausrichtung hier am „=“

$$\sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i = \sum_{i=1}^{N/2} H_{ii}^{\text{core}} + \sum_{i=1}^{N/2} \sum_{j=1}^{N/2} (2J_{ij} - K_{ij}) \tag{2}$$
$$E_{\text{HF}} = 2 \sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i - \sum_{i=1}^{N/2} \sum_{j=1}^{N/2} (2J_{ij} - K_{ij}) + V_{\text{NN}}$$

# Inhalt – Formelsatz – Umgebungen

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- **Alignat**
- `\begin{alignat} ... \end{alignat}`
- Merhzeiler, jede Zeile nummeriert, Ausrichtung an mehreren Zeichen

$$\bar{u}_C(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = u_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}} \sum_{n=1}^{\infty} u_i(\mathbf{k}, \mathbf{r} - ) + e^{-i\mathbf{k}} \sum_{n=1}^{\infty} u_i(\mathbf{k}, \mathbf{r} + ) \quad (5)$$

$$= u_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}} (\chi_C^-(\mathbf{k}, \mathbf{r} - ) - u_0(\mathbf{k}, \mathbf{r} - )) + e^{-i\mathbf{k}} (\chi_C^-(\mathbf{k}, \mathbf{r} + ) - u_0(\mathbf{k}, \mathbf{r} + )) \quad (6)$$

$$= -u_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}} \chi_C^-(\mathbf{k}, \mathbf{r} - ) + e^{-i\mathbf{k}} \chi_C^-(\mathbf{k}, \mathbf{r} + ), \quad (7)$$

# Inhalt – Formelsatz – Umgebungen

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- **Multline**
- `\begin{multline} ... \end{multline}`
- Einzeiler mit Umbruch, nur eine Nummer

$$\begin{aligned} \int \rho_{e,0} (\nabla(v^A - v^B))^2 d^3 r = \\ - \int (v^A - v^B) \nabla(\rho_{e,0} \nabla(v^A - v^B)) d^3 r \\ + \oint (v^A - v^B) \rho_{e,0} \nabla(v^A - v^B) d\mathbf{S} \quad (55) \end{aligned}$$

# Inhalt – Formelsatz

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Zahlen, Buchstaben, Interpunktationen wie getippt

- $\$ a + b - 5 = 26 c \$$

$$a + b - 5 = 26c$$

- Hoch- und Tiefstellung mit  $\wedge$  und  $\_$

- $\$ a^5 = b_g \$$

$$a^5 = b_g$$

- Aber:  $\$ a^6i \$$

$$a^6i$$

- Stattdessen:  $\$ a^{\{6 i\}} \$$

$$a^{6i}$$

- Brüche

- $\$ \frac{26 a}{78^{\{g + c\}}} \$$

$$\frac{26a}{78^{g+c}}$$

- $\$ \frac{\frac{a}{b}}{c} \$$

$$\frac{\frac{a}{b}}{c}$$



# Inhalt – Formelsatz

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Unterscheide Variable von Operator von Dimension von Index
  - Variablen kursiv (z.B.  $x$ )
  - Operator aufrecht mit Abstand (z.B.  $a \sin(x)$ )
  - Dimension aufrecht (z.B.  $\text{cm s}^{-1}$ )  $\rightarrow$  zu Einheiten später mehr
  - Index für Abkürzung (z.B.  $k_B$  für Boltzmannkonstante) aufrecht
  - Laufindex kursiv (z.B. in Summation  $a_i$ )
- Kommandos für viele Operatoren vorhanden
  - `\sin` `\tan` `\cos` `\ln` `\lg`
- Ansonsten (z.B. für differentielles „d“)
  - `\operatorname{d}`
- `\mathrm{Buchstaben}` für aufrechten Buchstaben
- `\text{Text}` für Text in Matheumgebungen

# Inhalt – Formelsatz

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

## • Integrale

- `$ \int x^2 d x $`
  - falsch! (kein aufrechtes „d“)
- `$ \int x^2 \mathrm{d} x $`
  - Falsche Abstände
- `$ \int x^2 \operatorname{d} x $`
  - Richtig
- `$ \int \limits_0^{10} x^{\frac{10}{3}} \operatorname{d} x $`
- `$ \iint x^{a^n} \operatorname{d} x $`

$$\int x^2 dx$$

$$\int x^2 dx$$

$$\int x^2 dx$$

$$\int_0^{10} x^{\frac{10}{3}} dx$$

$$\iint x^{a^n} dx$$

# Inhalt – Formelsatz

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- **Summen und Produkte**

- `$ \sum \limits_{i = 1}^N J_i $`

$$\sum_{i=1}^N J_i$$

- `$ \prod \limits_{i = 1}^N K^i_j $`

$$\prod_{i=1}^N K_j^i$$

# Inhalt – Formelsatz – Sonderzeichen

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

## • Griechische Buchstaben

- Aufruf mit `\Name`
- z.B. `\gamma` für kleines Gamma und `\Gamma` für großes Gamma
- Teilweise Variationen mit verändertem Aussehen
  - `\phi` und `\varphi`
  - `\Phi` und `\varPhi`

## • Diverse (!) Sonderzeichen

- Mehr oder weniger intuitive Namen
- **Tipp: Detexify**  
<http://detexify.kirelabs.org/classify.html>
- Erkennung von gezeichneten Symbolen → LaTeX-Befehl

## • Wichtige Sonderzeichen:

- `\cdot` →  $\cdot$  → Multiplikation
- `\cdots` →  $\dots$  → kontextabhängig
- `\pm` und `\mp` →  $\pm$   $\mp$
- `\approx` →  $\approx$
- `\rightarrow` →  $\rightarrow$
- `\rightleftarrows` →  $\rightleftarrows$
- `\leq` und `\geq` →  $\leq$   $\geq$
- `\sqrt[a]{x}` →  $\sqrt[a]{x}$
- `\overline{x}` →  $\overline{x}$
- `\vec{x}` →  $\vec{x}$
- `\hat{x}` und `\widehat{x}` →  $\hat{H}$   $\widehat{H}$

# Inhalt – Formelsatz – Klammern

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Runde Klammern () per simpler Eingabe verfügbar
- Eckige und geschwungene Klammern mit vorrangestelltem Slash, weitere Klammertypen über Befehle
- Größenanpassung von Klammern mittels Befehlen
- $\left\langle \textit{Klammertyp} \textit{ hoher Inhalt} \right\rangle \textit{Klammertyp}$ 
  - $\left( \frac{\textit{oben}}{\textit{unten}} \left\{ \textit{hoher Inhalt} \right\} e^{\phi} \right)$
- Klammern müssen geschlossen werden → Bei Zeilenumbruch Fehlermeldung
  - Lösung mit entsprechender Anzahl von  $\left.$   $\right.$ . Statt der Klammer schließenden / öffnenden Befehle

# Inhalt – Formelsatz – Matrizen

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Matrizen und andere geordnete Arrays als Umgebungen, tabellenartig

- `\begin{matrix}`

`11 & 12 & 13 \\`

`21 & 22 & 23`

`\end{matrix}`

11 12 13

21 22 23

- `pmatrix` →  $()$

- `bmatrix` →  $[\ ]$

- `Bmatrix` →  $\{ \}$

- `vmatrix` →  $| |$

- `Vmatrix` →  $|| | |$

# Inhalt – Formelsatz – Beispiele

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- `\begin{equation}`

```
\begin{split}
```

```
\rho_{\mathrm{e}}(\vec{r}_1) = N \sum_{\text{alle } \omega} \int \dots \int \left| \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N, \right. \\ \left. \omega_1, \omega_2 \dots \omega_N) \right|^2 d^3 r_2 \dots d^3 r_N
```

```
\label{eq:Elektronendichte}
```

```
\end{split}
```

```
\end{equation}
```

$$\rho_e(\vec{r}_1) = N \sum_{\text{alle } \omega} \int \dots \int \left| \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N, \right. \\ \left. \omega_1, \omega_2 \dots \omega_N) \right|^2 d^3 r_2 \dots d^3 r_N \quad (22)$$

# Inhalt – Formelsatz – Beispiele

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- `\begin{align}`

```
\hat{f}_i &= - \frac{1}{2} \nabla^2 - \sum_{\limits_A} \frac{Z_A}{r_{i A}} \label{eq:HF-1e0operator} \\
```

```
\hat{g}_{i j} &= \frac{1}{r_{i j}} \\ \label{eq:HF-2e0operator}
```

```
\end{align}
```

$$\hat{f}_i = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \sum_A \frac{Z_A}{r_{iA}} \quad (7)$$

$$\hat{g}_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} \quad (8)$$



# Inhalt – Formelsatz – Slunitx

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- `Siunitx` mit diversen Funktionalitäten für Einheitenangaben
  - `\SI{Zahl}{Einheit}` für Angaben von Größe und Dimension
  - `\si{Einheit}` nur für die Einheit
  - `\SIRange{von}{bis}{Einheit}`
  - `\num{Zahl}`
  - `\numrange{von}{bis}`
- Übernimmt direkt saubere Formatierung für Einheiten
  - Aufrecht, mit angemessenen Abständen, mit  $^{-1}$  für geteilt durch
- Unterstützt direkte Potenzen, z.B. `\num{5e-27}` für  $5 \cdot 10^{-27}$
- Einheiten in „gesprochenem Stil“
  - `\si{\kilo \meter \per \mole \per \square \second}` →  $\text{km mol}^{-1} \text{s}^{-2}$

# Inhalt – Formelsatz – Siunitx

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Aussehen aller Einheiten und von-bis-Angaben global mit wenigen Optionen im Präambel manipulierbar
- `\usepackage[Optionen]{siunitx}`  
`\sisetup{math-micro=\mathrm{\mu}, text-micro=\mu}`
  - `locale=DE` → deutscher Stil bei Einheiten und Formeln
  - `repeatunits=true, false` → bei von bis hinter erster und letzter Zahl Einheit angeben oder nur hinter letzter?
  - `range-phrase=\ensuremath{-}` → Bindestrich als „range-phrase“, alternativ z.B. `\text{ bis }`
  - `list-units=brackets, range-units=brackets, multipart-units=brackets` → bei von-bis-Angaben Zahlen klammern

# Inhalt – Formelsatz – mhchem

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- mhchem Paket für chemische Reaktionsgleichungen und Summenformeln → `\usepackage[version=3]{mhchem}`
- Chemische Umgebung mittels `\ce{Inhalt}`
- Summenformeln intuitiv z.B. `\ce{PtCl12(NH3)2}`  $\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2$
- Reaktionsgleichungen
  - `\ce{H2 + 1/2 O2 ->[\Delta T] H2O}`
    - Reaktionspfeile mit `->`, `<-`, `<=>`, `<=>>`, `<<=>`
    - Beschriftung über Pfeil mit erstem Paar `[]` unter Pfeil mit zweitem Paar `[]`
    - Ladungen direkt hinter Molekül mit `+ -`, Addukte mit `*`
    - `[]` wird im Mathe-Modus gesetzt → wenn Text, dann mit `\text{}` in `[]` platzieren
    - Hochstellen wie im Mathe-Modus mit `^` für z.B. Isotope
  - `\ce{N2 + 3 FeS + 3 H2S ->[\Delta T] [\text{exergonisch}] 3 FeS2 + 2 NH3}`  
$$\text{N}_2 + 3\text{FeS} + 3\text{H}_2\text{S} \xrightarrow[\text{exergonisch}]{\Delta T} 3\text{FeS}_2 + 2\text{NH}_3$$

# Inhalt – Formelsatz – Übung 3

---

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

## Formelsatz

# Inhalt – Bilder einbinden

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Grafiken werden üblicherweise in einer Float-Umgebung eingebunden
  - Paket: `\usepackage{graphicx}`
  - `\begin{figure}[Platzierung]`
    - `\centering`
    - `\includegraphics[Optionen]{Relativer Pfad zum Bild}`
    - `\caption[Kurzform]{Bildunterschrift}`
    - `\label{Name zur Referenzierung}`
  - `\end{figure}`
  - Die Platzierung im Fließtext erfolgt automatisch an „sinnvollster“ Position
  - Häufigstes Problem: Zu wenig Text für zu viele Bilder

# Inhalt – Bilder einbinden

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- `\begin{figure}[Platzierung]`
  - Platzierung: `[ h t b p ! ]`  
here; top; bottom; extra page; erzwinge Platzierung
- `\includegraphics[Optionen]{Relativer Pfad zum Bild}`
  - Optionen: `[width=0.5\textwidth]`  
Das Bild nimmt die Hälfte der verfügbaren Breite ein
  - Pfad: `{Bilder/Strukturformel}`
    - Dateiendung muss nicht angegeben werden
    - Pfade relativ zum Hauptdokument
- `\caption[Kurzform]{Bildunterschrift}`
  - In `[Kurzform]` kann Beschreibung für Abbildungsverzeichnis angegeben werden
- `\label{Name zur Referenzierung}`
  - Häufig werden Bilder als `\label{fig:Name}` gekennzeichnet

# Inhalt – Bilder einbinden für Fortgeschrittene

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Umflossene Bilder mit `\usepackage{wrapfig}`

```
\begin{wrapfigure}[Zeilen]{Position}{Breite}  
\includegraphics[Optionen]{Relativer Pfad zum  
Bild}  
\caption{Bildunterschrift}  
\label{Name zur Referenzierung}  
\end{wrapfigure}
```
- Falls Floats zu weit abwandern kann eine Barriere gesetzt werden

```
\usepackage{placeins}  
\FloatBarrier
```
- Mittels `\vspace{Höhe}` und `\hspace{Breite}` können Abstände eingefügt werden. Auch negative Abstände möglich!

# Inhalt – Bilder einbinden für Fortgeschrittene

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

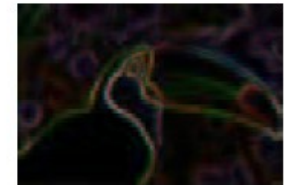
- Subfloats mit `\usepackage{subcaption}`

```
\begin{figure}
  \begin{subfigure}{Breite}
    Bild 1
  \end{subfigure}
  \begin{subfigure}{Breite}
    Bild 2
  \end{subfigure}
\end{figure}
```



(a) Original image

(b) After Laplace edge detection



(c) After Sobel edge detection

Figure 2: Various edge detection algorithms

- Bildunterschriften können auch ohne Float-Umgebung mittels `\captionof{figure}[Kurzname]{Bildunterschrift}` erzeugt werden (Bestandteil von KOMA-Script)



# Inhalt – Tabellen erstellen

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Tabellen werden üblicherweise, wie Bilder, in einer Float-Umgebung eingebunden

```
\begin{table}[Platzierung]  
    \centering  
    \caption[Kurzform]{Bildunterschrift}  
    \label{Name zur Referenzierung}  
    \begin{tabular}{Format}  
        Eintrag 11 & Eintrag 12 \\  
        Eintrag 21 & Eintrag 22  
    \end{tabular}  
\end{table}
```

- Format für die Spalten: { `l r c | p{Breite}` }  
 Left; right; center; vertical line; fixed width

# Inhalt – Tabellen erstellen

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Horizontale Linien mit `\hrule`
- Spalten und Zeilen verbinden
  - `\usepackage{multirow}`
  - `\multicolumn{Spalten}{Ausrichtung}{Eintrag über mehrere Spalten}`
  - `\multirow{Zeilen}{Breite}{Eintrag über mehrere Zeilen}`
    - Bei `\multirow{}{}{}{}` müssen die genutzten Zellen in den nächsten Zeilen explizit als leere Zellen angegeben werden
- Viele zusätzliche Tabellenpakete, die Aussehen und Funktionsumfang verbessern
  - `booktabs`; `tabulary`; `tabularx`; **`ctable`**
  - Die Dokumentation zu `booktabs` beginnt mit Anleitung vernünftige Tabellen zu erstellen!

# Inhalt – Tabellen erstellen mit ctable

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Benutzt `tabularx` und `booktabs`

```
\usepackage{ctable}
```

```
\ctable
```

```
[pos=Position, width=Tabellenbreite,  
caption=Name, label=tab:Name]
```

```
{Spaltenformat}
```

```
{Fußnoten}
```

```
{ \FL
```

```
Eintrag 11 & Eintrag 12 \NN
```

```
Eintrag 21 & Eintrag 22 \LL }
```

- Als zusätzliches Spaltenformat passt `{X}` sich der verfügbaren Breite an

- Horizontale Linien:

```
\FL; \NN; \ML; \LL; \cmidrule(Format){Spalte-Spalte}
```

obere Begrenzung; neue Zeile; mittlere Begrenzung; untere Begrenzung;  
Begrenzung über Ausgewählte Spalten

Fußnoten mit `\tnote[Symbol]{Text}`

# Inhalt – Tabellen erstellen mit booktabs

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- `booktabs` als typografisch saubere Lösung für Tabellen
  - Keine vertikalen Linien, stattdessen 3 Horizontale Linien
    - `\toprule` → Begrenzung oben
    - `\midrule` → Linie in Tabelle
    - `\bottomrule` → Begrenzung unten
    - `\cmidrule{Spalte - Spalte}` → Linie in Tabelle von Spalte bis Spalte
  - `\begin{tabular}{l r}`
    - `\toprule`
    - Header 11 & Header 12* \\
    - `\midrule`
    - Inhalt 21 & Inhalt 22* \\
    - `\bottomrule`
    - `\end{tabular}`

# Inhalt – Bilder, Tabellen – Übung 4

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

## Bilder & Tabellen

# Inhalt – Listen

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Listen werden als Umgebungen gesetzt und können geschachtelt werden
- 3 Typen von Listen:
  - Stichpunkte → `itemize` Umgebung
  - Aufzählung → `enumerate` Umgebun
  - Beschreibungen → `description` Umgebung
- Für Stichpunkte und Aufzählungen einzelne Elemente mit `\item Inhalt`
- Beschreibungen erfordern weiteren Parameter
  - `\item[zu beschreibendes Element] Beschreibung`
  - `\item[Schafe] wollige, vierbeinige Säugetiere mit ausgeprägtem Herdenverhalten`

# Inhalt – Listen – Itemize

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- `\begin{itemize}`
    - `\item Punkt 1`
    - `\item[$\circ$] Punkt 2`
  - `\begin{itemize}`
    - `\item Unterpunkt 1`
  - `\end{itemize}`
  - `\end{itemize}`
  - Die Symbole einzelner Elemente können mittels `\item[symbol]` geändert werden
    - Alternativ global mittels z.B. `\renewcommand{\labelitemi}{ $\star$ }` für erste Ebene,  
`\renewcommand{\labelitemii}{ $\blacksquare$ }` für zweite Ebene usw.
- Punkt 1
  - Punkt 2
    - Unterpunkt 1

# Inhalt – Listen – Enumerate

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- `\begin{enumerate}`
  - `\item Hier ist Punkt 1`      1. Hier ist Punkt 1
  - `\item die 2`                      2. die 2
  - `\begin{enumerate}`
    - `\item das ist 2.1`                      a) das ist 2.1
  - `\end{enumerate}`
  - `\item und die 3`                      3. und die 3
- `\end{enumerate}`
- Manipulation über Paket `enumerate` mit `[Typ]` → `1`, `a`, `A`, `i` auch in Kombination mit z.B. Klammern oder Punkten
  - `\begin{enumerate}[A)`
    - ...
  - `\end{enumerate}`



# Inhalt – Listen – Description

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

- `\begin{description}`

`\item[Lanolin] Wollfett der Schafe`

`\item[Schafe] wiederkäuende Paarhufer mit starker Behaarung`

`\end{description}`

**Lanolin** Wollfett der Schafe

**Schafe** wiederkäuende Paarhufer mit starker Behaarung

- Manipulation der Schrift bspw. mit `enumitem` Paket

- `\setlist[description]{font=\sffamily\bfseries}`

# BibLaTeX mit Biber

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- Literaturverwaltung mit eigenem Compiler in LaTeX integriert  
→ BibTeX (veraltet) und Biber (aktuell)
- Übernimmt Verweise im Text, Erstellung des Literaturverzeichnisses und die komplizierten vorgegebenen Formatierungen
  - [1] N. Author, *Zeitschrifttitel abgekürzt*, **Jahr**, *Ausgabe*, Seiten.
- Informationen werden in einer externen bib-Datei gespeichert und mittels Befehl platziert
  - Gleichzeitig geeignet für Literaturverwaltung mit z.B. Jabref

# BibLaTeX mit Biber – bib Datei

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

```
@Typ{Key,  
  Title           = {Titel der Publikation},  
  Author          = {Namen der Autoren},  
  Journal         = {Name der Zeitschrift},  
  Year            = {Jahreszahl},  
  Number          = {Ausgabe},  
  Pages           = {Seitenzahlen},  
  Volume         = {Band},  
  
  ISSN           = {{ISSN}},  
  Keywords        = {frei wählbare Tags},  
  Url             = {Link zur Publikation},  
  Doi             = {DOI},  
  File           = {Pfad zur lokalen Datei:Typ}  
}
```

# BibLaTeX mit Biber – bib Datei

```
@Article{Hohenberg1964,  
  Title           = {Inhomogeneous Electron Gas},  
  Author          = {Hohenberg, P. and Kohn, W.},  
  Journal         = {Phys. Rev.},  
  Year            = {1964},  
  Pages           = {B864--B871},  
  Volume          = {136},  
  
  Doi              = {10.1103/PhysRev.136.B864},  
  File            = {:/home/phillip/Dokumente/Chemie/Bachelor 6.  
Semester/Bachelorarbeit/Bachelor/Paper/LiteraturZusatz/PhysRev.136.B864.pdf  
:PDF},  
  Issue           = {3B},  
  Numpages        = {0},  
  Owner           = {phillip},  
  Publisher        = {American Physical Society},  
  Timestamp        = {2015.01.28},  
  Url              =  
{http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864}  
}
```

1. Einleitung

2. Software

3. Konzepte

4. Präambel

5. Strukturierung

6. Formatierung

7. Formelsatz

8. Bilder

9. Tabellen

10. Listen

11. BibLaTeX

12. Hyperref

13. Minipages

14. Zweispaltiges

15. Übersicht

# BibLaTeX mit Biber – bib Datei

The screenshot shows the JabRef interface with the following details for the selected entry:

- Title:** VMD: Visual molecular dynamics
- Author:** Humphrey, William; Dalke, Andrew; Schulten, Klaus
- Institution:** Theoretical Biophysics Group, University of Illinois, Urbana 61801, USA.
- Journal:** *J Mol Graph* (1996 Jan 1) **14** (1): 33-38.
- Rating:** 3 stars
- Actions:** PDF, Publisher Website, PubMed, Related Articles, Cited by
- Checkboxes:** Shelf (checked), Clipboard, Aureothin & AurH, Quantum Chemistry (checked)

Abstract	Notes	PDF Notes
<p>Abstract</p> <p>When the atoms employed in each representation are chosen using an extensive atom selection syntax, which includes Boolean operators and regular expressions. VMD provides a complete graphical user interface for program control, as well as a text interface using the Tcl embeddable parser to allow for complex scripts with variable substitution, control loops, and function calls. Full session logging is supported, which produces a VMD command script for later playback. High-resolution raster images of displayed molecules may be produced by generating input scripts for use by a number of photorealistic image-rendering applications. VMD has also been expressly designed with the ability to animate molecular dynamics (MD) simulation trajectories, imported either from files or from a direct connection to a running MD simulation. VMD is the visualization component of MDScope, a set of tools for interactive problem</p>		
Graphical Abstract	Files	IDs
	<p>00177.pdf</p>	<p>I Librarian ID: 177 (stable link)</p> <p>External IDs: PMID:8744570</p> <p>DOI: 10.1016/0263-7855(96)00018-5</p> <p>Citation Key: {VMD_1}</p>
Categories	Keywords	Miscellaneous
!unassigned	Computer Graphics / Computer Simulation / Computers / Models, Molecular / Nucleic Acids / Proteins / User-Computer Interface	<p>Publication type: article (article)</p> <p>Editor:</p> <p>Publisher:</p> <p>Place published:</p> <p>Edition:</p> <p>Custom 2:</p> <p>Custom 3:</p> <p>Custom 4:</p>

**Added:** September 30th, 2016 by Phillip\_Seeber · **Modified:** September 30th, 2016, 4:14 PM by Phillip\_Seeber

Year: 2010

Bibtexkey: NWchem

Status: Datei geöffnet 'home/phillip/Dokumente/Chemie/Literatur/Literatur.bib' mit 34 Einträge.

# BibLaTeX mit Biber – Nutzung im Dokument

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- `\usepackage[style=Stylename, backend=biber]{biblatex}`
  - `style=Stylename` → legt fest wie Literaturverzeichnis und Textmarken aussehen. Style-Dateien sind sehr kompliziert aber für nahezu jeden relevanten Stil verfügbar
  - `style=chem-angew` → in der Fakultät bevorzugter Stil
  - `backend=biber` → nutzt sonst meist biblatex und produziert Fehlermeldungen
  - Viele weitere Optionen verfügbar → Dokumentation
    - z.b. `firstinits=false/true`
  - Mehrere Bib-Dateien können geladen und deren Inhalt genutzt werden → relative Pfade wie bei Bildern aber mit Suffix
    - `\addbibresource{Literatur.bib}`
    - `\addbibresource{ComputationalChemistry.bib}`
    - `\addbibresource{LiteraturZusatz.bib}`

# BibLaTeX mit Biber – Nutzung im Dokument

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Im Text werden Verweise mit `\cite{Key}` platziert
  - *Key* ist der in der Bib-Datei festgelegte, eindeutige String
  - Kann von JabRef, I Librarian usw. automatisch generiert werden
  - `Bla Bla Bla Text. \cite{Hohenberg1964}` → Bla Bla Bla Text. [1]
    - Im Literaturverzeichnis taucht dann volles Zitat auf
- Literaturverzeichnis wird mit `\printbibliography` ausgegeben
- Soll im Literaturverzeichnis Literatur auftauchen, die nicht platziert wurde, vorher an beliebiger Stelle ein `\nocite{Key}`
- Kompilieren mit XeLaTeX, Biber, XeLaTeX

# Inhalt – Listen und Literatur – Übung 5

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

## Listen und Literatur



# LaTeX – Fortgeschrittenes – Hyperref

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- hyperref-Paket für Verlinkungen innerhalb des Dokuments und nach außerhalb (klickbar im PDF)
  - Ermöglicht z.B. Referenzierungen mit `\ref`, das Inhaltsverzeichnis, Literatureinträge, URLs und Mailadressen zu klicken und automatisch zu springen
- `\usepackage[pdftoolbar=true, pdfmenubar=true]{hyperref}`
- `\hypersetup{`  
`pdftitle={Titel des PDFs}`  
`pdfsubject={Inhalt des PDFs}`  
`pdfauthor={Author}`  
`pdfkeywords={beliebige Tags}`  
`pdfcreator={XeLaTeX}`  
`pdfproducer={Latex with hyperref}`  
`}`

# LaTeX – Fortgeschrittenes – Minipages

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- LaTeX-Funktionalität für abgetrennte Unterseiten zur Gestaltung
  - `\begin{minipage}{Breite}`  
*Inhalt, z.B. Bilder, Text, usw...*  
`\end{minipage}`
- Werden zwei Minipages direkt hintereinander platziert, ermöglicht das, sie nebeneinander zu platzieren
  - `\begin{minipage}{Breite}`  
*Inhalt 1*  
`\end{minipage}`  
`\begin{minipage}{Breite}`  
*Inhalt 2*  
`\end{minipage}`

# LaTeX – Fortgeschrittenes – Minipages

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Anwendungsbeispiele:
  - Gerahmter Text
  - Bilder nebeneinander platzieren (auch in Floats)
  - Kurze mehrspaltige Abschnitte
  - Caption neben Bild

*Abbildung 1: NGC6960, ein Teil eines alten Supernovaüberrests in einem Bicolor-Falschfarbenbild mit H- $\alpha$  als Rot und dem zweifach angeregtem Sauerstoff OIII als Blau*



Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: Dies ist ein Blindtext oder Huardest gefburn? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muß keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie Lorem ipsum dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln. Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: Dies ist ein Blindtext oder Huardest gefburn? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muß keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie Lorem ipsum dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

# LaTeX – Fortgeschrittenes – Minipages

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Anwendungsbeispiele:
  - Gerahmter Text
  - Bilder nebeneinander platzieren (auch in Floats)
  - Kurze mehrspaltige Abschnitte
  - Caption neben Bild

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: Dies ist ein Blindtext oder Huardest gefburn? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muß keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie Lorem ipsum dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: Dies ist ein Blindtext oder Huardest gefburn? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muß keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie Lorem ipsum dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: Dies ist ein Blindtext oder Huardest gefburn? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muß keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie Lorem ipsum dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln.

Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld. Der Text gibt lediglich den Grauwert der Schrift an. Ist das wirklich so? Ist es gleichgültig, ob ich schreibe: Dies ist ein Blindtext oder Huardest gefburn? Kjift – mitnichten! Ein Blindtext bietet mir wichtige Informationen. An ihm messe ich die Lesbarkeit einer Schrift, ihre Anmutung, wie harmonisch die Figuren zueinander stehen und prüfe, wie breit oder schmal sie läuft. Ein Blindtext sollte möglichst viele verschiedene Buchstaben enthalten und in der Originalsprache gesetzt sein. Er muß keinen Sinn ergeben, sollte aber lesbar sein. Fremdsprachige Texte wie Lorem ipsum dienen nicht dem eigentlichen Zweck, da sie eine falsche Anmutung vermitteln. Dies hier ist ein Blindtext zum Testen von Textausgaben. Wer diesen Text liest, ist selbst schuld.

# LaTeX – Fortgeschrittenes – Multicols

- 1. Einleitung
- 2. Software
- 3. Konzepte
- 4. Präambel
- 5. Strukturierung
- 6. Formatierung
- 7. Formelsatz
- 8. Bilder
- 9. Tabellen
- 10. Listen
- 11. BibLaTeX
- 12. Hyperref
- 13. Minipages
- 14. Zweispaltiges
- 15. Übersicht

- multicols Paket für mehrspaltige Texte
- Nur für kurze Abschnitte ohne Bilder geeignet
  - Keine Floats mehr möglich!
- `\begin{multicols}{x}[einspaltiger Abschnitt, bpsw. Überschrift]`  
*Inhalt*  
`\end{multicols}`
  - Erzeugt x Spalten, in denen der Inhalt gleichmäßig verteilt wird und einem einspaltigen Kopf
- Im Präambel kann Abstand der Spalten festgelegt werden
  - `\setlength{\columnsep}{Breite}`
- Nicht gleichmäßig verteilter Inhalt mit `\begin{multicols*}{x} ...`
- Lösung für Bilder → wrapfigure (Kategorie: schmutziger Hack!)

# LaTeX – Fortgeschrittenes – zweispaltig

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

- Koma-Option `\twocolumn`
  - Wechsel von `\onecolumn` auf `\twocolumn` erzwingt eigentlich einen Seitenumbruch
  - → unerwünscht für z.B. Abstract auf Seite 1
    - Kein `\twocolumn` im Präambel setzen sondern im Dokument
    - Sofort bei Text-Beginn `\twocolumn` initiieren
    - `\twocolumn[\begin{@twocolumnfalse}`  
*einspaltiger Inhalt (nur am Beginn möglich)*  
`\end{@twocolumnfalse}`  
`]`
  - Verändert Verhalten von Float-Umgebungen
    - Floats nur 1-spaltig, zweispaltige Bilder müssen mit `\begin{floattyp*} ... \end{floattyp*}` gesetzt werden
    - Positionierung nur noch am oberen oder unteren Rand möglich

# LaTeX – Übersicht Pakete

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges

- `amsmath` → Formelsatz, zusätzliche Umgebungen, ...
- `amssymb` → mathematische Sonderzeichen
- `biblatex` → Literaturverwaltung
- `blindtext` → erzeugt Text oder Dokument für ersten Eindruck
- `booktabs` → stellt verbesserte Linien für Tabellen bereit
- `caption` → Erscheinungsbild von Captions zu formatieren
- `color` → Farbige Schrift und Boxen
- `enumerate` → Manipulation von Listen
- `float` → Definition neuer Float-Umgebungen
- `fontspec` → Support für Schriftarten
- `graphicx` → Einbindung und Skalierung von Grafiken

# LaTeX – Übersicht Pakete

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges

- geometry → einfache Manipulation der Seite
- hyperref → dynamische Verlinkungen
- icomma → Komma als Dezimaltrenner
- mhchem → Summenformeln und Reaktionsgleichungen
- multicol → mehrspaltiger Text
- multirow → Zellen in Tabellen zusammenfassen
- polyglossia → Sprachsupport und Sonderzeichen
- scrpage2 → Kopf- und Fußzeilen
- setspace → einfache Manipulation von Absatzabständen
- siunitx → sauberer Satz von Einheiten
- subcaption → Unterbilder in gleicher Float-Umgebung



# LaTeX – Übersicht Umgebungen

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges

- align → mehrzeilige Formeln und Ausrichtung an Zeichen
- Bmatrix → Matrix, {}
- bmatrix → Matrix, []
- center → Inhalt zentrieren
- description → Umgebung für Erklärungen
- document → kennzeichnet beginnenden Inhalt in LaTeX
- enumerate → Aufzählung
- equation → simple Gleichungen
- figure → Float für Grafiken und Bilder
- flushleft → linksbündige Inhalte
- flushright → rechtsbündige Inhalte
- itemize → Stichpunkte

# LaTeX – Übersicht Umgebungen

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges

- `matrix` → Matrix ohne Begrenzungen
- `Minipage` → abgetrennter, begrenzter Bereich
- `multicols` → mehrspaltiger Text
- `pmatrix` → Matrix,  $()$
- `split` → mehrzeilige Formeln, eine Nummer, Ausrichtung
- `table` → Float für Tabellen
- `tabular` → Tabellen erstellen
- `Vmatrix` → Matrix,  $|| ||$
- `vmatrix` → Matrix,  $| |$

# Übung 5 – Reproduktion

1. Einleitung
2. Software
3. Konzepte
4. Präambel
5. Strukturierung
6. Formatierung
7. Formelsatz
8. Bilder
9. Tabellen
10. Listen
11. BibLaTeX
12. Hyperref
13. Minipages
14. Zweispaltiges
15. Übersicht

## Reproduktion eines komplexen Dokuments