

Ansgar Jüngel
Hans G. Zachmann

Mathematik für Chemiker

7. aktualisierte und erweiterte Auflage

WILEY-VCH
Verlag GmbH & Co. KGaA

Inhaltsverzeichnis

Vorwort zur siebten Auflage *XIII*

Vorwort zur sechsten Auflage *XV*

Vorwort zur ersten Auflage *XVII*

1	Mathematische Grundlagen	1
1.1	Die Sprache der Mathematik	1
1.2	Mengenlehre	3
1.3	Zahlen	6
1.4	Einige Rechenregeln	12
1.5	Kombinatorik	15
2	Lineare Algebra	23
2.1	Matrizen	23
2.2	Lineare Gleichungssysteme und Gauß-Algorithmus	31
2.3	Determinanten	38
2.3.1	Definition	38
2.3.2	Rechenregeln	41
2.3.3	Berechnung von Determinanten	44
2.4	Lineare Unabhängigkeit und Rang einer Matrix	46
2.4.1	Lineare Unabhängigkeit	46
2.4.2	Rang einer Matrix	48
2.5	Lösungstheorie linearer Gleichungssysteme	50
2.5.1	Lösbarkeit linearer Gleichungssysteme	50
2.5.2	Berechnung der Inversen einer Matrix	55
3	Unendliche Zahlenfolgen und Reihen	59
3.1	Unendliche Zahlenfolgen	59
3.1.1	Definitionen und Beispiele	59
3.1.2	Konvergenz einer Zahlenfolge	61
3.1.3	Das Rechnen mit Grenzwerten	64

3.2	Unendliche Reihen	68
3.2.1	Definitionen und Beispiele	68
3.2.2	Konvergenzkriterien	71
3.2.3	Das Rechnen mit unendlichen Reihen	74
3.2.4	Potenzreihen	76
4	Funktionen	79
4.1	Erläuterung des Funktionsbegriffes	79
4.2	Funktionen einer Variablen	80
4.2.1	Darstellung	80
4.2.2	Umkehrung und implizite Darstellung einer Funktion	82
4.2.3	Wichtige Begriffe zur Charakterisierung von Funktionen	84
4.2.4	Einige spezielle Funktionen	85
4.2.5	Stetigkeit	96
4.2.6	Funktionenfolgen	99
4.3	Funktionen mehrerer Variablen	102
4.3.1	Darstellung	102
4.3.2	Definitionsbereiche	107
4.3.3	Stetigkeit	108
5	Vektoralgebra	111
5.1	Rechnen mit Vektoren	111
5.1.1	Definition eines Vektors	111
5.1.2	Rechenregeln für Vektoren	114
5.1.3	Skalarprodukt	117
5.1.4	Vektorprodukt	119
5.1.5	Spatprodukt	122
5.2	Darstellung von Vektoren in verschiedenen Basen	125
5.2.1	Lineare Unabhängigkeit von Vektoren	125
5.2.2	Basis im \mathbb{R}^3 und Basiswechsel	128
5.2.3	Orthonormalbasis	132
6	Analytische Geometrie	137
6.1	Analytische Darstellung von Kurven und Flächen	137
6.1.1	Darstellung durch Gleichungen in x , y und z	137
6.1.2	Parameterdarstellung	146
6.2	Lineare Abbildungen	149
6.2.1	Definitionen	149
6.2.2	Eigenwerte und Eigenvektoren	151
6.2.3	Drehungen und Spiegelungen	155
6.3	Koordinatentransformationen	162
6.3.1	Lineare Transformationen	162
6.3.2	Transformation auf krummlinige Koordinaten	169

7	Differenziation und Integration einer Funktion einer Variablen	175
7.1	Differenziation	175
7.1.1	Die erste Ableitung einer Funktion	175
7.1.2	Rechenregeln für das Differenzieren	179
7.1.3	Differenziation einiger Funktionen	183
7.1.4	Differenziation komplexwertiger Funktionen	187
7.1.5	Höhere Ableitungen	191
7.1.6	Mittelwertsatz der Differenzialrechnung	192
7.1.7	Anwendungen	193
7.2	Integration von Funktionen	196
7.2.1	Das bestimmte Integral	196
7.2.2	Das unbestimmte Integral	203
7.2.3	Integrationsmethoden	207
7.2.4	Uneigentliche Integrale	216
7.2.5	Anwendungen	220
7.3	Differenziation und Integration von Funktionenfolgen	226
7.4	Die Taylor-Formel	228
7.5	Unbestimmte Ausdrücke: Regel von de l'Hospital	236
7.6	Kurvendiskussion	242
7.6.1	Definitionen	242
7.6.2	Bestimmung von Nullstellen	244
7.6.3	Bestimmung von Extrema	247
7.6.4	Bestimmung von Wendepunkten und Sattelpunkten	249
8	Differenziation und Integration von Funktionen mehrerer Variablen	251
8.1	Differenziation	251
8.1.1	Die partielle Ableitung	251
8.1.2	Höhere Ableitungen und der Satz von Schwarz	255
8.1.3	Existenz einer Tangentialebene	258
8.1.4	Das totale Differenzial	259
8.1.5	Die Kettenregel	262
8.1.6	Differenziation impliziter Funktionen	265
8.1.7	Partielle Ableitungen in der Thermodynamik	268
8.2	Einfache Integrale	271
8.3	Bereichsintegrale	275
8.3.1	Definition des zweidimensionalen Bereichsintegrals	275
8.3.2	Berechnung des zweidimensionalen Bereichsintegrals	278
8.3.3	Allgemeine Bereichsintegrale	282
8.3.4	Transformationsformel	283
8.3.5	Berechnung von Volumina und Oberflächen	290
8.4	Kurvenintegrale	299
8.4.1	Definition und Berechnung	299
8.4.2	Wegunabhängigkeit des allgemeinen Kurvenintegrals	304
8.4.3	Vollständiges und unvollständiges Differenzial	308

8.4.4	Satz von Gauß im \mathbb{R}^2	310
8.5	Oberflächenintegrale	313
8.6	Die Taylor-Formel	317
8.7	Extremwerte	320
8.7.1	Definitionen	320
8.7.2	Bestimmung von Extremwerten und Sattelpunkten	322
8.7.3	Bestimmung von Extremwerten unter Nebenbedingungen	325
9	Vektoranalysis und Tensorrechnung	333
9.1	Vektoranalysis	333
9.1.1	Vektor- und Skalarfelder	333
9.1.2	Der Gradient	335
9.1.3	Konservative Vektorfelder	338
9.1.4	Die Divergenz und der Satz von Gauß im \mathbb{R}^3	340
9.1.5	Die Rotation und der Satz von Stokes	344
9.1.6	Rechenregeln	347
9.1.7	Krummlinige Koordinaten	349
9.2	Tensorrechnung	354
9.2.1	Tensoren zweiter Stufe	354
9.2.2	Tensoren höherer Stufe	358
10	Fourier-Reihen und Fourier-Transformation	361
10.1	Fourier-Reihen	361
10.1.1	Reelle Fourier-Reihen	361
10.1.2	Komplexe Fourier-Reihen	368
10.1.3	Fourier-Reihe einer Funktion in mehreren Variablen	370
10.2	Fourier-Transformation	373
10.2.1	Definitionen	373
10.2.2	Beispiele	378
10.2.3	Eigenschaften	382
10.2.4	Anwendungen in der Chemie	392
10.3	Orthonormalsysteme	399
11	Gewöhnliche Differenzialgleichungen	405
11.1	Beispiele und Definitionen	405
11.2	Differenzialgleichungen erster Ordnung	412
11.2.1	Richtungsfeld, Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen	412
11.2.2	Trennung der Variablen	415
11.2.3	Lineare Differenzialgleichungen	417
11.2.4	Systeme homogener linearer Differenzialgleichungen	421
11.2.5	Systeme inhomogener linearer Differenzialgleichungen	431
11.2.6	Exakte Differenzialgleichungen	433
11.3	Lineare Differenzialgleichungen höherer Ordnung	439
11.3.1	Allgemeines über die Existenz von Lösungen	439
11.3.2	Die ungedämpfte freie Schwingung	443

- 11.3.3 Die gedämpfte freie Schwingung 449
- 11.3.4 Die erzwungene Schwingung 451
- 11.3.5 Systeme von Differenzialgleichungen zweiter Ordnung 455
- 11.4 Spezielle lineare Differenzialgleichungen zweiter Ordnung 461
- 11.4.1 Potenzreihenansatz 461
- 11.4.2 Die Legendre-Differenzialgleichung 464
- 11.4.3 Die Laguerre-Differenzialgleichung 470
- 11.4.4 Die Bessel-Differenzialgleichung 474

12 Partielle Differenzialgleichungen 479

- 12.1 Definition und Beispiele 479
- 12.2 Die Potenzialgleichung 483
- 12.2.1 Lösung durch Fourier-Transformation 483
- 12.2.2 Lösung durch Fourier-Reihenansatz 484
- 12.2.3 Lösung in Polarkoordinaten 487
- 12.3 Die Wärmeleitungsgleichung 489
- 12.3.1 Lösung durch Fourier-Transformation 489
- 12.3.2 Lösung durch Separationsansatz 491
- 12.4 Die Wellengleichung 494
- 12.4.1 Lösung durch Separationsansatz 494
- 12.4.2 Allgemeine Lösungsformel 497
- 12.4.3 Die schwingende Membran 499
- 12.5 Die Schrödinger-Gleichung 504
- 12.5.1 Die stationäre Gleichung 504
- 12.5.2 Der harmonische Oszillator 505
- 12.5.3 Das Wasserstoffatom 509

13 Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik 519

- 13.1 Einführung 519
- 13.1.1 Quantenmechanische Begriffe 519
- 13.1.2 Axiomatik der Quantenmechanik 523
- 13.2 Hilbert-Räume 526
- 13.2.1 Sobolev-Räume 526
- 13.2.2 Vollständige Orthonormalsysteme 532
- 13.2.3 Lineare Operatoren 536
- 13.2.4 Dualräume und Dirac-Notation 537
- 13.3 Beschränkte lineare Operatoren 541
- 13.3.1 Definition und Beispiele 541
- 13.3.2 Projektoren 545
- 13.3.3 Symmetrische Operatoren 547
- 13.4 Unbeschränkte lineare Operatoren 555
- 13.4.1 Selbstadjungierte Operatoren 555
- 13.4.2 Die Heisenberg'sche Unschärferelation 560
- 13.4.3 Spektraldarstellung selbstadjungierter Operatoren 562
- 13.5 Zeitentwicklung quantenmechanischer Systeme 571

14	Wahrscheinlichkeitsrechnung	575
14.1	Einleitung	575
14.1.1	Aufgaben der Wahrscheinlichkeitsrechnung	575
14.1.2	Der Ereignisraum	577
14.1.3	Zufallsgrößen	578
14.2	Diskrete Zufallsgrößen	580
14.2.1	Statistische Definition der Wahrscheinlichkeit	580
14.2.2	Summe von Ereignissen	582
14.2.3	Bedingte Wahrscheinlichkeit	584
14.2.4	Produkt von Ereignissen	587
14.2.5	Totale Wahrscheinlichkeit	588
14.3	Kontinuierliche Zufallsgrößen	590
14.3.1	Wahrscheinlichkeitsdichte	590
14.3.2	Verteilungsfunktion	593
14.4	Kette von unabhängigen Versuchen	598
14.4.1	Herleitung der exakten Gleichungen	598
14.4.2	Diskussion der Funktion $P_n(m)$	601
14.4.3	Näherungsgesetze für große n	602
14.4.4	Markow'sche Ketten	607
14.5	Stochastische Prozesse	614
14.5.1	Definitionen	614
14.5.2	Der Poisson-Prozess	615
15	Fehler- und Ausgleichsrechnung	619
15.1	Zufällige und systematische Fehler	619
15.2	Mittelwert und Fehler der Einzelmessungen	620
15.2.1	Verteilung der Messwerte und Mittelwert	620
15.2.2	Mittlerer Fehler der Einzelmessungen	622
15.2.3	Wahrscheinlicher Fehler der Einzelmessung	623
15.2.4	Praktische Durchführung der Rechnungen	624
15.3	Fehlerfortpflanzung	626
15.3.1	Maximaler Fehler	626
15.3.2	Fortpflanzung des mittleren Fehlers	628
15.3.3	Mittlerer Fehler des Mittelwertes	631
16	Numerische Methoden	633
16.1	Lineare Gleichungssysteme	633
16.1.1	Gauß-Algorithmus	633
16.1.2	Thomas-Algorithmus	637
16.1.3	Iterative Lösungsmethoden	639
16.1.4	Ausgleichsrechnung	642
16.2	Nichtlineare Gleichungen	646
16.2.1	Newton-Verfahren im Eindimensionalen	646
16.2.2	Newton-Verfahren im Mehrdimensionalen	647

16.3	Eigenwertprobleme	650
16.3.1	Potenzmethode	650
16.3.2	QR-Verfahren	653
16.4	Gewöhnliche Differenzialgleichungen	656
16.4.1	Euler-Verfahren	656
16.4.2	Runge-Kutta-Verfahren	659
16.4.3	Steife Differenzialgleichungen	662
16.5	Softwarepakete	665

Antworten und Lösungen	667
-------------------------------	------------

Literaturverzeichnis	701
-----------------------------	------------

Weiterführende Literatur	703
---------------------------------	------------

Stichwortverzeichnis	707
-----------------------------	------------