

Inhaltsverzeichnis

Autorenverzeichnis XIII

Vorwort zur achten Auflage XV

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	42
2.3.3	Berechnung von Determinanten	45
2.4	Lineare Unabhängigkeit und Rang einer Matrix	48
2.4.1	Lineare Unabhängigkeit	48
2.4.2	Rang einer Matrix	50
2.5	Lösungstheorie linearer Gleichungssysteme	52
2.5.1	Lösbarkeit linearer Gleichungssysteme	52
2.5.2	Berechnung der Inversen einer Matrix	57
3	Unendliche Zahlenfolgen und Reihen	61
3.1	Unendliche Zahlenfolgen	61
3.1.1	Definitionen und Beispiele	61
3.1.2	Konvergenz einer Zahlenfolge	63
3.1.3	Das Rechnen mit Grenzwerten	65
3.2	Unendliche Reihen	69
3.2.1	Definitionen und Beispiele	69
3.2.2	Konvergenzkriterien	72
3.2.3	Das Rechnen mit unendlichen Reihen	75
3.2.4	Potenzreihen	77

4	Funktionen	81
4.1	Erläuterung des Funktionsbegriffes	81
4.2	Funktionen einer Variablen	82
4.2.1	Darstellung	82
4.2.2	Umkehrung und implizite Darstellung einer Funktion	84
4.2.3	Wichtige Begriffe zur Charakterisierung von Funktionen	85
4.2.4	Einige spezielle Funktionen	87
4.2.5	Stetigkeit	98
4.2.6	Funktionsfolgen	100
4.3	Funktionen mehrerer Variablen	103
4.3.1	Darstellung	103
4.3.2	Definitionsbereiche	108
4.3.3	Stetigkeit	109
5	Vektoralgebra	113
5.1	Rechnen mit Vektoren	113
5.1.1	Definition eines Vektors	113
5.1.2	Rechenregeln für Vektoren	116
5.1.3	Skalarprodukt	119
5.1.4	Vektorprodukt	121
5.1.5	Spatprodukt	124
5.2	Darstellung von Vektoren in verschiedenen Basen	127
5.2.1	Lineare Unabhängigkeit von Vektoren	127
5.2.2	Basis im \mathbb{R}^3 und Basiswechsel	131
5.2.3	Orthonormalbasis	135
6	Analytische Geometrie	139
6.1	Analytische Darstellung von Kurven und Flächen	139
6.1.1	Darstellung durch Gleichungen in x , y und z	139
6.1.2	Parameterdarstellung	148
6.2	Lineare Abbildungen	151
6.2.1	Definitionen	151
6.2.2	Eigenwerte und Eigenvektoren	153
6.2.3	Drehungen und Spiegelungen	157
6.3	Koordinatentransformationen	164
6.3.1	Lineare Transformationen	164
6.3.2	Transformation auf krummlinige Koordinaten	171
7	Differenziation und Integration einer Funktion einer Variablen	177
7.1	Differenziation	177
7.1.1	Die erste Ableitung einer Funktion	177
7.1.2	Rechenregeln für das Differenzieren	181
7.1.3	Differenziation einiger Funktionen	185
7.1.4	Differenziation komplexwertiger Funktionen	188
7.1.5	Höhere Ableitungen	193

7.1.6	Mittelwertsatz der Differentialrechnung	194
7.1.7	Anwendungen	195
7.2	Integration von Funktionen	198
7.2.1	Das bestimmte Integral	198
7.2.2	Das unbestimmte Integral	204
7.2.3	Integrationsmethoden	208
7.2.4	Uneigentliche Integrale	217
7.2.5	Anwendungen	221
7.3	Differenziation und Integration von Funktionenfolgen	227
7.4	Die Taylor-Formel	230
7.5	Unbestimmte Ausdrücke: Regel von de l'Hospital	238
7.6	Kurvendiskussion	244
7.6.1	Definitionen	244
7.6.2	Bestimmung von Nullstellen	245
7.6.3	Bestimmung von Extrema	248
7.6.4	Bestimmung von Wendepunkten und Sattelpunkten	250
8	Differenziation und Integration von Funktionen mehrerer Variablen	253
8.1	Differenziation	253
8.1.1	Die partielle Ableitung	253
8.1.2	Höhere Ableitungen und der Satz von Schwarz	257
8.1.3	Existenz einer Tangentialebene	259
8.1.4	Das totale Differenzial	261
8.1.5	Die Kettenregel	263
8.1.6	Differenziation impliziter Funktionen	266
8.1.7	Partielle Ableitungen in der Thermodynamik	269
8.2	Einfache Integrale	273
8.3	Bereichsintegrale	277
8.3.1	Definition des zweidimensionalen Bereichsintegrals	277
8.3.2	Berechnung des zweidimensionalen Bereichsintegrals	279
8.3.3	Allgemeine Bereichsintegrale	283
8.3.4	Transformationsformel	284
8.3.5	Berechnung von Volumina und Oberflächen	291
8.4	Kurvenintegrale	300
8.4.1	Definition und Berechnung	300
8.4.2	Wegunabhängigkeit des allgemeinen Kurvenintegrals	305
8.4.3	Vollständiges und unvollständiges Differenzial	308
8.4.4	Satz von Gauß im \mathbb{R}^2	311
8.5	Oberflächenintegrale	314
8.6	Die Taylor-Formel	317
8.7	Extremwerte	321
8.7.1	Definitionen	321
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	343
9.1.6	Rechenregeln	347
9.1.7	Krummlinige Koordinaten	348
9.2	Tensorrechnung	354
9.2.1	Tensoren zweiter Stufe	354
9.2.2	Tensoren höherer Stufe	357
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	367
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	377
10.2.3	Eigenschaften	381
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	430
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	448
11.3.4	Die erzwungene Schwingung	451
11.3.5	Systeme von Differenzialgleichungen zweiter Ordnung	454
11.4	Spezielle lineare Differenzialgleichungen zweiter Ordnung	460
11.4.1	Potenzreihenansatz	460
11.4.2	Die Legendre-Differenzialgleichung	464
11.4.3	Die Laguerre-Differenzialgleichung	470
11.4.4	Die Bessel-Differenzialgleichung	473

- 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 493
 - 12.4.1 Lösung durch Separationsansatz 493
 - 12.4.2 Allgemeine Lösungsformel 496
 - 12.4.3 Die schwingende Membran 498
 - 12.5 Die Schrödinger-Gleichung 503
 - 12.5.1 Die stationäre Gleichung 503
 - 12.5.2 Der harmonische Oszillator 504
 - 12.5.3 Das Wasserstoffatom 507

- 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 531
 - 13.2.3 Lineare Operatoren 535
 - 13.2.4 Dualräume und Dirac-Notation 536
 - 13.3 Beschränkte lineare Operatoren 541
 - 13.3.1 Definition und Beispiele 541
 - 13.3.2 Projektoren 544
 - 13.3.3 Symmetrische Operatoren 546
 - 13.4 Unbeschränkte lineare Operatoren 554
 - 13.4.1 Selbstadjungierte Operatoren 554
 - 13.4.2 Die heisenbergsche Unschärferelation 559
 - 13.4.3 Spektraldarstellung selbstadjungierter Operatoren 561
 - 13.5 Zeitentwicklung quantenmechanischer Systeme 570

- 14 Wahrscheinlichkeitsrechnung 575**
 - 14.1 Einleitung 575
 - 14.1.1 Aufgaben der Wahrscheinlichkeitsrechnung 575
 - 14.1.2 Der Ereignisraum 576
 - 14.1.3 Zufallsgrößen 578
 - 14.2 Diskrete Zufallsgrößen 580
 - 14.2.1 Statistische Definition der Wahrscheinlichkeit 580
 - 14.2.2 Summe von Ereignissen 581

14.2.3	Bedingte Wahrscheinlichkeit	584
14.2.4	Produkt von Ereignissen	586
14.2.5	Totale Wahrscheinlichkeit	587
14.3	Kontinuierliche Zufallsgrößen	590
14.3.1	Wahrscheinlichkeitsdichte	590
14.3.2	Verteilungsfunktion	592
14.4	Kette von unabhängigen Versuchen	598
14.4.1	Herleitung der exakten Gleichungen	598
14.4.2	Diskussion der Funktion $P_n(m)$	600
14.4.3	Näherungsgesetze für große n	602
14.4.4	Markowsche 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	621
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	630
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	645
16.2.1	Newton-Verfahren im Eindimensionalen	645
16.2.2	Newton-Verfahren im Mehrdimensionalen	646
16.3	Eigenwertprobleme	650
16.3.1	Potenzmethode	650
16.3.2	QR-Verfahren	652
16.4	Gewöhnliche Differenzialgleichungen	655
16.4.1	Euler-Verfahren	655
16.4.2	Runge-Kutta-Verfahren	659
16.4.3	Steife Differenzialgleichungen	661
16.5	Computational Chemistry	664
16.5.1	Dichtefunktionaltheorie	664

16.5.2	Maschinelernen	670
16.5.3	Softwarepakete	677
	Antworten und Lösungen	679
	Literatur	729
	Weiterführende Literatur	731
	Stichwortverzeichnis	735