

Inhaltsverzeichnis

I. Vektoren und Matrizen	1
A. Vektoren	1
1. Vektoralgebra	1
1.1 Vektoraddition	1
1.2 Vektormultiplikation	3
2. Vektoranalysis	7
2.1 Vektordifferentiation	7
2.2 Vektorintegration	17
3. Krummlinige Koordinaten	25
B. Matrizen	34
4. Typen von Matrizen	34
5. Determinanten	41
6. Rang einer Matrix	45
6.1 Elementare Transformationen	45
6.2 Inverse Matrix	47
6.3 Lineare Abhangigkeit	50
7. Lineare Gleichungen	52
7.1 Inhomogene Gleichungen	54
7.2 Homogene Gleichungen	55
7.3 Allgemeine Losungen	56
8. Vektorraume	57
8.1 Dimension eines Vektorraumes	57
8.2 Basis und Koordinaten	58
9. Lineare Transformationen	59
9.1 Basistransformation	59
9.2 Vektortransformation	60
9.3 Aquivalenztransformationen	63
9.4 Vektoren mit reellen und komplexen Komponenten	63
10. Eigenwertgleichungen	65
10.1 Eigenwerte und Eigenvektoren	65
10.2 Ahnlichkeit mit einer Diagonalmatrix	68
11. Orthogonalisierungsverfahren	70
11.1 Gram-Schmidt-Orthogonalisierung	70
11.2 Lowdin-Orthogonalisierung	73
12. Anwendung	74

12.1	Thermodynamische Kreisprozesse	74
12.2	Hückel-Methode	78
C. Aufgaben	80
II. Gruppentheorie	86
A. Abstrakte Gruppen	86
1.	Grundlagen	86
1.1	Mengen	86
1.2	Abbildungen	87
1.3	Binäroperationen	88
2.	Gruppen	89
2.1	Eigenschaften von Gruppen	89
2.2	Konstruktion von Gruppen	92
3.	Untergruppen	96
4.	Konjugierte Elemente	100
4.1	Klassen	100
4.2	Invariante Untergruppen	102
5.	Homomorphismus und Isomorphismus	102
5.1	Homomorphismus	102
5.2	Isomorphismus	104
B. Molekülsymmetrie	105
6.	Symmetrieeoperationen	105
6.1	Symmetrieeoperationen und Permutationen	105
6.2	Bestimmung von Symmetrieeoperationen	108
6.3	Koordinatensysteme	110
6.4	Sukzessive Symmetrieeoperationen	111
7.	Punktgruppen	112
7.1	Klassifizierung von Punktgruppen	113
7.1.1	Die Gruppen C_n	113
7.1.2	Die Gruppen C_{nv}	114
7.1.3	Die Gruppen C_{nh}	115
7.1.4	Die Gruppen S_{2n}	116
7.1.5	Die Gruppen D_n	117
7.1.6	Die Gruppen D_{nd}	118
7.1.7	Die Gruppen D_{nh}	119
7.1.8	Die Tetraeder- und Oktaedergruppen	120
7.1.9	Die Ikosaedergruppen	121
7.1.10	Die Gruppen linearer Moleküle und Atome	121
7.2	Eigenschaften von Punktgruppen	122
7.2.1	Generatoren	122
7.2.2	Untergruppen	123
7.3	Bestimmung von Punktgruppen	124
C. Darstellungstheorie	126
8.	Matrixdarstellung von Punktgruppen	126

8.1	Lagevektoren und Koordinaten	126
8.2	Darstellung endlicher Gruppen	128
9.	Reduzible und irreduzible Darstellungen	132
9.1	Basen für reduzible Darstellungen	132
9.2	Globale und lokale reduzible Darstellungen	134
9.3	Klassifizierung irreduzibler Darstellungen	136
10.	Eigenschaften irreduzibler Darstellungen	139
10.1	Charakter einer Darstellung	139
10.2	Orthogonalität und Entwicklung	141
10.3	Direkte Produkte	144
10.4	Auswahlregeln	146
10.5	Korrelation von Gruppen und Untergruppen	147
11.	Anwendung	148
11.1	Schwingungen	148
11.2	Molekülorbitaltheorie	149
11.3	Ligandenfeldtheorie	153
11.4	Spinzustände	156
D. Aufgaben		157
III. Differentialgleichungen und spezielle Funktionen		163
A. Gewöhnliche Differentialgleichungen		163
1.	Einführung	163
2.	Differentialgleichungen erster Ordnung	166
2.1	Separation von Variablen	166
2.2	Exakte Differentialgleichungen	168
2.3	Homogene Differentialgleichungen	169
2.4	Variation von Konstanten	170
3.	Differentialgleichungen höherer Ordnung	171
3.1	Operatorenmethode	171
3.2	Potenzreihenentwicklung	175
3.3	Fourierreihen	177
4.	Integraltransformationen	181
4.1	Fouriertransformation	181
4.2	Laplacetransformation	186
4.3	Faltungssatz	189
5.	Numerische Lösung von Differentialgleichungen	192
5.1	Konversion einer Differentialgleichung n -ter Ordnung	192
5.2	Taylorreihenentwicklung	193
5.3	Runge-Kutta-Methoden	194
B. Spezielle Funktionen		197
6.	Integraldarstellung von Funktionen	197
6.1	Gammafunktion	197
6.2	Fehlerfunktion	198
7.	Spezielle Funktionen aus Differentialgleichungen	200
7.1	Hypergeometrische Differentialgleichung	200

7.1.1	Legendresche Polynome	201
7.1.2	Zugeordnete Legendresche Funktionen	205
7.2	Kummersche Differentialgleichung	206
7.2.1	Hermitesche Polynome und Funktionen	208
7.2.2	Laguerresche Polynome und Funktionen	210
7.2.3	Besselfunktionen	212
C.	Partielle Differentialgleichungen	215
8.	Eigenschaften	215
8.1	Separation von Variablen	216
8.2	Substitution von Variablen	217
8.3	Doppelreihenentwicklung	218
9.	Spezielle partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung	219
9.1	Laplacegleichung	219
9.2	Wellengleichung	220
9.3	Diffusionsgleichung	221
9.4	Schrödingergleichung	223
10.	Rand- und Eigenwertprobleme	224
11.	Anwendungen	228
11.1	Reaktorsysteme	228
11.2	Wellenbewegung	231
11.3	Wärmeleitung	233
11.4	Harmonischer Oszillator	236
D.	Aufgaben	237
IV.	Anhang	243
1.	Komplexe Zahlen und Funktionen	243
1.1	Komplexe Zahlen	243
1.2	Komplexe Funktionen	244
2.	Charaktertabellen von Punktgruppen	250
2.1	Die Gruppen C_n	250
2.2	Die Gruppen C_{nv}	251
2.3	Die Gruppen C_{nh}	252
2.4	Die Gruppen S_n	254
2.5	Die Gruppen D_n	255
2.6	Die Gruppen D_{nd}	256
2.7	Die Gruppen D_{nh}	258
2.8	Die Tetraeder- und Oktaedergruppen	260
2.9	Die Ikosaedergruppen	262
2.10	Die Gruppen linearer Moleküle	263
3.	Korrelationstabellen von Punktgruppen	264
3.1	Die Gruppen C_n	264
3.2	Die Gruppen C_{nv}	264
3.3	Die Gruppen C_{nh}	265
3.4	Die Gruppen S_n	265
3.5	Die Gruppen D_n	265

3.6	Die Gruppen D_{nd}	266
3.7	Die Gruppen D_{nh}	267
3.8	Die Tetraeder- und Oktaedergruppen	268
4.	Laplacetransformierte	269
5.	Aufgabenlösungen	271
5.1	Lösungen zu Kapitel I	271
5.2	Lösungen zu Kapitel II	280
5.3	Lösungen zu Kapitel III	286
Literaturverzeichnis		298
Symbolverzeichnis		300
Sachverzeichnis		304