

Lothar Papula

Übungen und Anwendungen zur Mathematik für Chemiker

3., unveränderte Auflage

90 Abbildungen, 25 Tabellen



Ferdinand Enke Verlag Stuttgart 1992

Inhalt

Vorwort	III
Erster Teil. Übungen zur Mathematik für Chemiker . . .	1
I. Mengen	2
Übung I.1 bis I.8	2– 8
Übungsaufgaben	8
II. Gruppen	10
Übung II.1 bis II.11	10– 37
Übungsaufgaben	38
III. Elemente der Kombinatorik	40
Übung III.1 bis III.7	40– 46
Übungsaufgaben	47
IV. Polynome und ihre algebraischen Eigenschaften	48
Übung IV.1 bis IV.8	48– 57
Übungsaufgaben	57
V. Vektoralgebra	59
Übung V.1 bis V.12	59– 72
Übungsaufgaben	72
VI. Lineare Algebra	75
<i>A. Matrizen</i>	75
Übung VI.1 bis VI.10	75– 85
Übungsaufgaben	85
<i>B. Determinanten</i>	87
Übung VI.11 bis VI.15	87– 93
Übungsaufgaben	93
<i>C. Lineare Gleichungssysteme</i>	94
Übung VI.16 bis VI.20	94–101
Übungsaufgaben	102
<i>D. Lineare Transformationen (lineare Abbildungen)</i>	103
Übung VI.21 bis VI.24	103–111
Übungsaufgaben	111
<i>E. Matrixeigenwertprobleme</i>	112
Übung VI.25 bis VI.28	112–121
Übungsaufgaben	121

VIII

VII. Funktionen einer Veränderlichen	123
<i>A. Funktionen, Grenzwerte und Stetigkeit</i>	123
Übung VII.1 bis VII.9	123–133
Übungsaufgaben	133
<i>B. Differentiation</i>	134
Übung VII.10 bis VII.15	134–140
Übungsaufgaben	140
<i>C. Integration</i>	141
Übung VII.16 bis VII.24	141–158
Übungsaufgaben	158
<i>D. Potenzreihen</i>	162
Übung VII.25 bis VII.28	162–169
Übungsaufgaben	169
<i>E. Kurvendiskussion und Extremwertaufgaben</i>	170
Übung VII.29 bis VII.33	170–179
Übungsaufgaben	179
VIII. Funktionen mehrerer Veränderlicher	181
<i>A. Funktionen, Grenzwerte und Stetigkeit</i>	181
Übung VIII.1 bis VIII.6	181–188
Übungsaufgaben	188
<i>B. Differentiation</i>	189
Übung VIII.7 bis VIII.15	189–204
Übungsaufgaben	204
<i>C. Integration</i>	205
Übung VIII.16 bis VIII.25	205–229
Übungsaufgaben	229
<i>D. Potenzreihen</i>	232
Übung VIII.26 bis VIII.28	232–234
Übungsaufgaben	234
<i>E. Extremwerte</i>	235
Übung VIII.29 bis VIII.33	235–244
Übungsaufgaben	245
IX. Gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen	246
<i>A. Gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung</i>	246
Übung IX.1 bis IX.9	246–263
Übungsaufgaben	263

<i>B. Gewöhnliche Differentialgleichungen 2. Ordnung</i>	264
Übung IX.10 bis IX.20	264–289
Übungsaufgaben	290
<i>C. Gewöhnliche Differentialgleichungen höherer Ordnung</i> . . .	291
Übung IX.21 bis IX.25	291–298
Übungsaufgaben	298
<i>D. Systeme linearer Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung</i> . .	299
Übung IX.26 bis IX.28	299–309
Übungsaufgaben	309
<i>E. Partielle Differentialgleichungen</i>	311
Übung IX.29 bis IX.34	311–321
Übungsaufgaben	321
<i>F. Rand- und Eigenwertaufgaben</i>	322
Übung IX.35 bis IX.40	322–332
Übungsaufgaben	332
 Zweiter Teil. Anwendungen zur Mathematik für Chemiker	 334
Übersichtstabelle	336
I. Thermodynamik	339
<i>Beispiel I.1</i> Die thermodynamischen Zustandsfunktionen . . .	339
<i>Beispiel I.2</i> Die Wärmemenge ist keine thermodynamische Zustandsfunktion	346
<i>Beispiel I.3</i> Die kritischen Daten und die reduzierte Zustands- gleichung eines van der Waalsschen Gases	347
<i>Beispiel I.4</i> Der Carnotsche Kreisprozeß mit einem idealen Gas .	350
II. Statistik	354
<i>Beispiel II.1</i> Ableitung der Maxwell-Boltzmann-Statistik	354
<i>Beispiel II.2</i> Bestimmung der Konstanten β in der Maxwell- Boltzmannschen Verteilungsfunktion	359
<i>Beispiel II.3</i> Maxwell-Boltzmannsche Geschwindigkeits- verteilung für ein ideales Gas	362
<i>Beispiel II.4</i> Berechnung der mittleren Rotationsenergie eines nicht-symmetrischen diatomaren Moleküls nach der Maxwell-Boltzmann-Statistik	366

<i>Beispiel II.5</i>	Ableitung des Wienschen Verschiebungsgesetzes und des Stefan-Boltzmannschen Gesetzes aus der Planckschen Strahlungsformel	369
<i>Beispiel II.6</i>	Berechnung der Molwärme C_V einatomiger Festkörper nach dem Einsteinschen Modell	374
<i>Beispiel II.7</i>	Berechnung der Molwärme C_V einatomiger Festkörper nach dem Debyeschen Modell	377
III. Reaktionskinetik		381
<i>Beispiel III.1</i>	Die Rohrzuckerinversion als Beispiel für eine chemische Reaktion 1. Ordnung	381
<i>Beispiel III.2</i>	Bimolekulare chemische Reaktion vom Typ $A + B \rightarrow AB$ (Reaktion 2. Ordnung)	382
<i>Beispiel III.3</i>	Chemische Reaktion 3. Ordnung vom Typ $2A + B \rightarrow A_2B$	387
<i>Beispiel III.4</i>	2-stufige chemische Reaktion vom Typ $X \rightarrow Y \rightarrow Z$	388
IV. Molekülschwingungen		393
<i>Beispiel IV.1</i>	Normalschwingungen eines linearen Moleküls vom Typ AB_2	393
V. Quantenmechanik		399
<i>Beispiel V.1</i>	Eindimensionale Bewegung eines Teilchens in einem rechteckigen Potential mit unendlich hohen Wänden (eindimensionaler Reflexionsoszillator)	399
<i>Beispiel V.2</i>	Eigenwerte und Eigenfunktionen der z-Komponente \hat{L}_z des Einteilchen-Drehimpulsoperators \hat{L}	402
<i>Beispiel V.3</i>	Eigenwerte und Eigenfunktionen des Operators des Betragsquadrates des Einteilchen-Drehimpulses $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$	404
<i>Beispiel V.4</i>	Eigenwerte und Eigenfunktionen der Paulischen Spinmatrizen	409
<i>Beispiel V.5</i>	Berechnung der Energie des Grundzustandes des Wasserstoff-Atoms mit dem Variationsansatz $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = e^{-ar}$	414
<i>Beispiel V.6</i>	Energieeigenwerte und Eigenfunktionen wasserstoffähnlicher atomarer Systeme	418
<i>Beispiel V.7</i>	Der Rotator mit raumfreier Achse als Modell eines rotierenden diatomaren Moleküls	431

Beispiel V.8	Der lineare harmonische Oszillator	434
Beispiel V.9	Berechnung einiger quantenmechanischer Mittelwerte (Erwartungswerte) für das Wasserstoff-Atom im Grundzustand	441
Beispiel V.10	Berechnung der Energie des Helium-Atoms im Grundzustand mit dem Variationsansatz $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{-ar_1} \cdot e^{-ar_2}$	446
Beispiel V.11	Berechnung der Energie des Helium-Atoms im Grundzustand mit Hilfe der Störungsrechnung 1. Ordnung	454
Beispiel V.12	Berechnung des Energiegrundzustandes des H_2^+ -Ions nach der LCAO-MO-Methode	459
Beispiel V.13	Erlaubte und verbotene Dipolübergänge beim linearen harmonischen Oszillator	477
Beispiel V.14	Behandlung des π -Elektronensystems des Benzolrings C_6H_6 nach der Hückelschen MO-Theorie	483
Anhang. Lösungen der Übungsaufgaben aus dem ersten Teil . . .		491
Register		551