

Lothar Papula

# Übungen und Anwendungen zur Mathematik für Chemiker

3., unveränderte Auflage

90 Abbildungen, 25 Tabellen



Ferdinand Enke Verlag Stuttgart 1992

# Inhalt

<b>Vorwort</b>	III
<b>Erster Teil. Übungen zur Mathematik für Chemiker</b>	1
<b>I. Mengen</b>	2
Übung I.1 bis I.8	2 – 8
Übungsaufgaben	8
<b>II. Gruppen</b>	10
Übung II.1 bis II.11	10 – 37
Übungsaufgaben	38
<b>III. Elemente der Kombinatorik</b>	40
Übung III.1 bis III.7	40 – 46
Übungsaufgaben	47
<b>IV. Polynome und ihre algebraischen Eigenschaften</b>	48
Übung IV.1 bis IV.8	48 – 57
Übungsaufgaben	57
<b>V. Vektoralgebra</b>	59
Übung V.1 bis V.12	59 – 72
Übungsaufgaben	72
<b>VI. Lineare Algebra</b>	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

<b>VII. Funktionen einer Veränderlichen</b>	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
<b>VIII. Funktionen mehrerer Veränderlicher</b>	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
<b>IX. Gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen</b>	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
<b>Zweiter Teil. Anwendungen zur Mathematik für Chemiker</b>	334
<b>Übersichtstabelle</b>	336
<b>I. Thermodynamik</b>	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 Zustandsgleichung eines van der Waalsschen Gases	347
<i>Beispiel I.4</i> Der Carnotsche Kreisprozeß mit einem idealen Gas	350
<b>II. Statistik</b>	354
<i>Beispiel II.1</i> Ableitung der Maxwell-Boltzmann-Statistik	354
<i>Beispiel II.2</i> Bestimmung der Konstanten $\beta$ in der Maxwell-Boltzmannschen Verteilungsfunktion	359
<i>Beispiel II.3</i> Maxwell-Boltzmannsche Geschwindigkeitsverteilung 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
<b>III. Reaktionskinetik</b>	. . . . .	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
<b>IV. Molekülschwingungen</b>	. . . . .	393
<i>Beispiel IV.1</i>	Normalschwingungen eines linearen Moleküls vom Typ $AB_2$ . . . . .	393
<b>V. Quantenmechanik</b>	. . . . .	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

9	<i>Beispiel V.8</i>	Der lineare harmonische Oszillator . . . . .	434
4	<i>Beispiel V.9</i>	Berechnung einiger quantenmechanischer Mittelwerte (Erwartungswerte) für das Wasserstoff-Atom im Grundzustand . . . . .	441
7	<i>Beispiel V.10</i>	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
1	<i>Beispiel V.11</i>	Berechnung der Energie des Helium-Atoms im Grundzustand mit Hilfe der Störungsrechnung 1. Ordnung . . . . .	454
2	<i>Beispiel V.12</i>	Berechnung des Energiegrundzustandes des $H_2^+$ -Ions nach der LCAO-MO-Methode . . . . .	459
7	<i>Beispiel V.13</i>	Erlaubte und verbotene Dipolübergänge beim linearen harmonischen Oszillator . . . . .	477
8	<i>Beispiel V.14</i>	Behandlung des $\pi$ -Elektronensystems des Benzolrings $C_6H_6$ nach der Hückelschen MO-Theorie . . . . .	483
3	<b>Anhang. Lösungen der Übungsaufgaben aus dem ersten Teil</b>	491	
3	<b>Register</b>	551	