

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*

VI | *Inhaltsverzeichnis*

| | | |
|----------|---|------------|
| 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 Differenzialrechnung | 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 |

VIII | *Inhaltsverzeichnis*

| | | |
|-----------|---|------------|
| 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 |

x | *Inhaltsverzeichnis*

| | | |
|-----------|---|------------|
| 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 Maschinenlernen 670
- 16.5.3 Softwarepakete 677

Antworten und Lösungen 679

Literatur 729

Weiterführende Literatur 731

Stichwortverzeichnis 735

