Mathematik für Chemiker 1

Dassia Egorova

Theoretische Chemie, Max-Eyth-Str. 1, E.G., Raum 4
theochem.pctc.uni-kiel.de
degorova@gmail.com

Inhälte

- Zahlen, Rechentechniken, Kombinatorik
- Funktionen
- Folgen, Reihen
- Grenzwerte
- ein- und mehrdimensionale Differentialrechnung
- ein- und mehrdimensionale Integralrechnung
- Vektorrechnung und Geometrie

Zahlen

- natürliche **N**
- ganze **Z**
- rationale **Q**
- reelle **R**
- komplexe **C**

* Menge, Gruppe, Körper

komplexe Zahlen

- grafische Darstellung
- Euler Darstellung

Funktion/Abbildung

- Polynome
- rationale Funktionen
- Potenzfunktion
- Exponentialfunktion
- Logarithmus
- trigonometrische Funktionen
- Hyperbelfunktionen

* Definitionsbereich, Wertbereich
* Umkehrfunktion
* Symmetrie (gerade/ungerade/keine Symmetrie)

Folgen, Reihen

- Konvergenz
- Grenzwerte

* Potenzreihen und Konvergenzradius

Grenzwerte von Funktionen

* Stetigkeit

Differentialrechnung

- Ableitung als Grenzwert
- Produktregel, Kettenregel
- Tayloreihe
- Ableitungen und Funktionsverhalten
  * stationäre Punkte

Integralrechnung

- Stammfunktion
- Integrationsregeln
  * partielle Integration
  * Substitution
  * rationale Funktionen über Partialbruchzerlegung
- Rimannsche Summe und das Rimannsche Integral
- Stetigkeit und Integrierbarkeit
- Uneigentliche Integrale

Integralrechnung

Drei Studenten haben die Mathematikklausur mit Bravour bestanden und wollen dies mit einer Flasche Champagner (Inhalt 750 cm^3) feiern. Sie haben drei gleiche Gläser, deren Radius r in Abhängigkeit von der Höhe durch die Funktion

$$r(h) = \sqrt{\frac{1}{\pi}\left(4.9h + \frac{1}{2}\right)} \quad [\mathrm{cm}]$$

gegeben ist. Bis zu welcher Höhe x muss jedes der Gläser gefüllt werden, um den Champagner gerecht aufzuteilen?
Hinweis: Betrachten Sie das Glas als Rotationskörper. Dann ergibt sich das Volumen bei einer Füllhöhe h_0 als Integral über Kreisflächen, die von der Höhe h abhängen:

$$V(h_0) = \int_0^{h_0} \pi r^2(h)dh$$

Vektoren

- geometrische Vektoren in R^2 und R^3
- Vektoren in R^n
- Skalarprodukt, Vektorprodukt, Spatprodukt
- Norm (Länge, Betrag)
- Geraden und Ebenen in R^2 und R^3

mehrdimensionale Differentialrechnung

- Funktionen mit Definitionsbereich R^n, $f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = f(\mathbf{x})$
- partielle Ableitungen $\frac{\partial}{\partial x_i} f(\mathbf{x})$, $\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} f(\mathbf{x})$, $\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_k} f(\mathbf{x})$, etc.
- Nabla-Operator ∇, Gradient grad$f = \nabla f$,
- Hessesche Matrix
- Richtungsableitung
- stationäre Punkte
- Taylor Entwicklung