

# Hochschultext



Karl Jug

# Mathematik in der Chemie

Mit 57 Abbildungen

Springer-Verlag  
Berlin Heidelberg New York 1981

Professor Dr. K. Jug  
Theoretische Chemie der Universität Hannover  
Callinstraße 3 A  
D-3000 Hannover 1

CIP-Kurztitelaufnahme der Deutschen Bibliothek

Jug, Karl:  
Mathematik in der Chemie / Karl Jug. – Berlin, Heidelberg, New York :  
Springer, 1981.  
(Hochschultext)

ISBN-13: 978-3-540-10413-1 e-ISBN-13: 978-3-642-96601-9  
DOI: 10.1007/978-3-642-96601-9

Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdruckes, der Entnahme von Abbildungen, der Funksendung, der Wiedergabe auf photomechanischem oder ähnlichem Wege und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Bei Vervielfältigungen für gewerbliche Zwecke ist gemäß § 54 UrhG eine Vergütung an den Verlag zu zahlen, deren Höhe mit dem Verlag zu vereinbaren ist.

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1981

Gesamtherstellung: Beltz Offsetdruck, Hemsbach/Bergstr.  
2152/3140-543210

## Vorwort

Dieses Buch ist für Chemiestudenten nach dem Diplomvorexamen geschrieben (ab dem 5. Semester). Es soll ihnen jene Gebiete der Mathematik vermitteln, die in den verschiedenen Sparten der Chemie, nicht zuletzt Technischer und Theoretischer Chemie, gebraucht werden. Der Inhalt des Buches basiert auf Vorlesungen, die ich seit 1970 in St.Louis und Hannover gehalten habe. Er wendet sich an Studenten, die in einer einsemestrigen zwei- bis dreistündigen Fortgeschrittenen-Vorlesung mit Übungen oder im Selbststudium einen Überblick über mathematische Techniken gewinnen wollen. Als Voraussetzung wird eine Grundvorlesung in Mathematik erwartet, in der unendliche Reihen, sowie Differential- und Integralrechnung behandelt worden sind.

Das Buch ist in drei Teilgebiete

Vektoren und Matrizen,  
Gruppentheorie,  
Differentialgleichungen

gegliedert. Die Kapitel können fast unabhängig voneinander studiert werden. Diese Reihenfolge bietet die Möglichkeit, Matrizen in der Gruppentheorie und krummlinige Koordinaten in Differentialgleichungen anzuwenden.

Die Grundlagen für jedes Kapitel werden in kurzen Zügen fixiert. Die folgenden Unterabschnitte sind aufeinander aufbauend entwickelt. Dabei werden mathematische Beweise auf ein Minimum reduziert. Ebenso wird auf eine detaillierte Anwendung in der Chemie verzichtet, weil die Erfahrung zeigt, daß dem Studenten eine Trennung von mathematischen, physikalischen und chemischen Zusammenhängen oft nicht einwandfrei gelingt. Einige von den zahlreichen Beispielen, die Gelegenheit zur Übung geben, sind aus Physik und Chemie gewählt. Schließlich ist am Ende jedes Kapitels eine Aufgabensammlung enthalten.

Für die kritische Durchsicht des Manuskripts und wertvolle Anregungen danke ich meinen Kollegen Prof. J. Hinze, Prof. E.A. Reinsch und Prof. E.O. Steinborn. Meine Mitarbeiter G. Hahn, P. Müller und G. Nowak ha-

ben zahlreiche Fehler und Mängel beseitigen geholfen. Danken möchte ich nicht zuletzt meiner Frau, deren verständnisvolle Unterstützung dieses Buch möglich gemacht hat.

Hannover, im Oktober 1980

Karl Jug

# Inhaltsverzeichnis

<u>I. Vektoren und Matrizen</u> . . . . .	1
A. Vektoren . . . . .	1
1. Vektoralgebra . . . . .	1
1.1. Vektoraddition . . . . .	1
1.2. Vektormultiplikation . . . . .	3
2. Vektoranalysis . . . . .	6
2.1. Vektordifferentiation . . . . .	6
2.2. Vektorintegration . . . . .	12
3. Krümmungslinige Koordinaten . . . . .	16
B. Matrizen . . . . .	22
4. Typen von Matrizen . . . . .	22
5. Determinanten . . . . .	27
6. Rang einer Matrix . . . . .	31
6.1. Elementare Transformationen . . . . .	31
6.2. Inverse Matrix . . . . .	33
6.3. Lineare Abhängigkeit . . . . .	35
7. Lineare Gleichungen . . . . .	37
7.1. Inhomogene Gleichungen . . . . .	39
7.2. Homogene Gleichungen . . . . .	40
8. Vektorräume . . . . .	41
8.1. Dimension eines Vektorraums . . . . .	41
8.2. Basis und Koordinaten . . . . .	42
9. Lineare Transformationen . . . . .	44
9.1. Vektor- und Basistransformation . . . . .	44
9.2. Äquivalenztransformationen . . . . .	46
9.3. Vektoren über reelle und komplexe Felder . . . . .	47
10. Eigenwertgleichungen . . . . .	49
10.1. Eigenwerte und Eigenvektoren . . . . .	49
10.2. Ähnlichkeit mit einer Diagonalmatrix . . . . .	51
11. Anwendung: Hückel-Methode . . . . .	52

C. Aufgaben . . . . .	54
<u>II. Gruppentheorie</u> . . . . .	60
A. Abstrakte Gruppen . . . . .	60
1. Grundlagen . . . . .	60
1.1. Mengen . . . . .	60
1.2. Abbildungen . . . . .	61
1.3. Binäroperationen . . . . .	62
2. Gruppen . . . . .	63
2.1. Eigenschaften von Gruppen . . . . .	63
2.2. Konstruktion von Gruppen . . . . .	66
3. Untergruppen . . . . .	70
4. Konjugierte Elemente . . . . .	73
4.1. Klassen . . . . .	73
4.2. Invariante Untergruppen . . . . .	75
5. Homomorphismus und Isomorphismus . . . . .	76
5.1 Homomorphismus . . . . .	76
5.2. Isomorphismus . . . . .	78
B. Molekülsymmetrie . . . . .	79
6. Symmetrieoperationen . . . . .	79
6.1. Symmetrieoperationen und Permutationen . . . . .	79
6.2 Bestimmung von Symmetrieoperationen . . . . .	81
6.3. Koordinatensysteme . . . . .	83
6.4. Successive Symmetrieoperationen . . . . .	84
7. Punktgruppen . . . . .	85
C. Darstellungstheorie . . . . .	93
8. Matrixdarstellung von Punktgruppen . . . . .	93
8.1. Lagevektoren und Koordinaten . . . . .	93
8.2. Darstellung endlicher Gruppen . . . . .	95
9. Reduzible und irreduzible Darstellungen . . . . .	99
10. Eigenschaften irreduzibler Darstellungen . . . . .	104
10.1. Charakter einer Darstellung . . . . .	104
10.2. Orthogonalität und Entwicklung . . . . .	106
10.3. Direkte Produkte . . . . .	108
11. Anwendung . . . . .	111
11.1. Molekülorbitaltheorie . . . . .	111
11.2. Übergangsmetallkomplexe . . . . .	115

D.	Aufgaben . . . . .	118
<u>III. Differentialgleichungen und spezielle Funktionen . . . . .</u>		124
A.	Gewöhnliche Differentialgleichungen . . . . .	124
1.	Einführung . . . . .	124
2.	Differentialgleichungen erster Ordnung . . . . .	127
2.1.	Separation von Variablen . . . . .	127
2.2.	Exakte Differentialgleichungen . . . . .	128
2.3.	Homogene Differentialgleichungen . . . . .	129
2.4.	Variation von Konstanten . . . . .	130
3.	Differentialgleichungen höherer Ordnung . . . . .	131
3.1.	Operatorenmethode . . . . .	131
3.2.	Potenzreihenentwicklung . . . . .	135
3.3.	Fourierreihen . . . . .	138
4.	Integraltransformationen . . . . .	140
4.1.	Fouriertransformation . . . . .	140
4.2.	Laplace-Transformation . . . . .	147
B.	Spezielle Funktionen . . . . .	144
5.	Hypergeometrische und konfluente hypergeometrische Funktionen . . . . .	147
5.1.	Gammafunktion . . . . .	149
5.2.	Legendresche Polynome . . . . .	151
5.3.	Hermite'sche Polynome . . . . .	155
5.4.	Laguerresche Polynome . . . . .	156
5.5.	Besselfunktionen . . . . .	158
C.	Partielle Differentialgleichungen . . . . .	161
6.	Eigenschaften . . . . .	161
7.	Spezielle partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung . . . . .	164
7.1.	Laplacegleichung . . . . .	164
7.2.	Wellengleichung . . . . .	166
8.	Rand- und Eigenwertprobleme . . . . .	167
9.	Anwendungen . . . . .	169
9.1.	Wellenbewegung . . . . .	169
9.2.	Wärmeleitung . . . . .	172
D.	Aufgaben . . . . .	174



<u>IV. Anhang</u>	180
1. Komplexe Zahlen und Funktionen	180
1.1. Komplexe Zahlen	180
1.2. Komplexe Funktionen	181
2. Charaktertabellen von Punktgruppen	188
2.1 Die Gruppen $C_n$	188
2.2. Die Gruppen $C_{nv}$	189
2.3. Die Gruppen $C_{nh}$	190
2.4. Die Gruppen $S_n$	191
2.5. Die Gruppen $D_n$	192
2.6. Die Gruppen $D_{nd}$	193
2.7. Die Gruppen $D_{nh}$	194
2.8. Die kubischen Gruppen	195
2.9. Die Gruppen linearer Moleküle	195
3. Aufgabenlösungen	196
<u>Literaturverzeichnis</u>	201
<u>Sachverzeichnis</u>	203