Mathematische Grundlagen

Physikalische Chemie I - Teil I — Wintersemester 2012/13

Aufgabe 1

In der Thermodynamik benötigen wir Funktionen, die von mehreren Variablen abhängen $f(x_1, x_2 ... x_N)$.

- Die Änderung der Funktion in Richtung einer Variablen, während die anderen Variablen festgehalten werden, bezeichnet man als partielles Differential. Man erhält N partielle Differentiale
$$\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial f}{\partial x_N}$$
- Die Änderung der Funktion bei simultaner Änderung aller Variablen bezeichnet man als totales Differential
$$df = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_{x_{i \neq j}} dx_i$$

a Bilden Sie die ersten partiellen Ableitungen folgender Funktionen:

$$z = x^3 y^2 \quad , \quad z = \frac{x^3}{y^2} \quad , \quad z = y \ln x$$

b Bilden Sie das vollständige (totale) Differential

$$z = xy, \qquad z = xy^2, \qquad z = \frac{x^2}{y}$$

Aufgabe 2

Nach dem Satz von Schwarz müssen für ein totales Differential die gemischten zweiten Ableitungen gleich sein. (D.h. es ist egal, ob man zuerst nach x und dann nach y differenziert oder umgekehrt, das Ergebnis bleibt davon unberührt)

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_y \right]_x = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_x \right]_y$$

a Welche der folgenden Differentiale sind totale Differentiale?

$$df = (x^2 y^2/4)dx + (x^3 y/4)dy, \qquad dg = (x^2 y^2/2)dx + (x^3 y/3)dy$$

b Überprüfen Sie die Weg(un)abhängigkeit der Änderung von f bzw g zwischen (0,0) und (1,2), indem Sie die Änderung entlang der Wege

a) (0,0) → (1,2) auf direktem Wege
b) (0,0) → (1,0) → (1,2) auf jeweils geradem Weg
c) (0,0) → (1,2) entlang $y = 2\sqrt{x}$

berechnen.

c Welcher Schluss lässt sich daraus unter Berücksichtigung des Resultats von a) ziehen?

d Geben Sie je ein Anwendungsbeispiel für eine wegabhängige und eine wegunabhängige Funktion.

Aufgabe 3

Eine Zustandsfunktion beschreibt den gegenwärtigen Zustand eines thermodynamischen Systems, unabhängig davon, auf welchem Weg das System dorthin gelangt ist.
Ist das Volumen im Falle eines idealen Gases eine Zustandsfunktion? Das Volumen ist durch

$$V(T,p) = nR\frac{T}{p}$$

gegeben.