Als Ergänzung zu Modul 6:

Im Selbststudium: Differential- und Integralrechung

Weitere Empfehlung:

Mathe-Vorkurs: http://www.phmi.uni-mainz.de/2714.php

1. Allgemeine Bedeutung:

1.1. Differential:

Betrachtet man eine Funktion bzw. Kurve y(x), so stellt das Differential $\left(\frac{dy}{dx}\right)_{x=x_0}$ die Steigung der Tangente an die Kurve am Punkt (x_0,y_0) dar. Näherungsweise entspricht diese Steigung der Steigung der Sekanten durch 2 benachbarte Punkte der Kurve in der näheren Umgebung von (x_0,y_0):

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_{x=x_0} \approx \frac{y(x_2)-y(x_1)}{x_2-x_1} = \frac{\Delta y}{\Delta x} \qquad \text{(Gl.1)}$$

, falls $\Delta x \rightarrow 0$, d.h. für sehr kleine Werte von Δx.

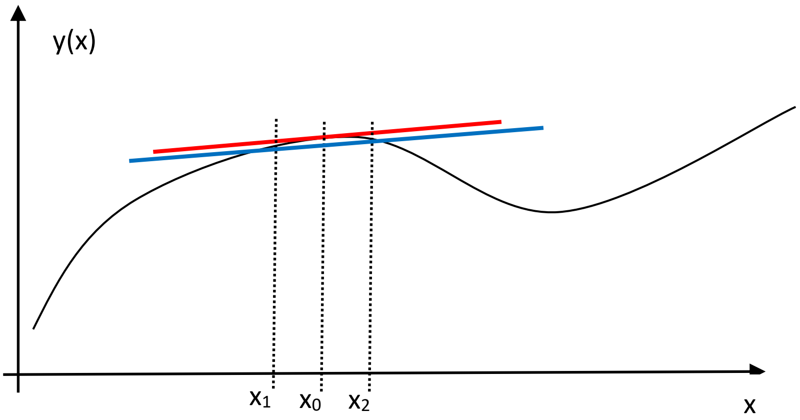

Abb.1: rot = Tangente, blau = Sekante

1.2. Integral:

Betrachtet man eine Funktion bzw. Kurve *y*(*x*), so stellt das bestimmte Integral $\int_{x_1}^{x_2} y(x)dx$ die Fläche unter der Kurve in den Grenzen x_1 bis x_2 dar. Es gilt auch:

$$\int_{x_1}^{x_2} y(x)dx = Y(x_2) - Y(x_1) \qquad \text{(Gl.2)}$$

, wobei *Y*(*x*) die sogenannte Stammfunktion der Ausgangsfunktion *y*(*x*) darstellt, mit dem sogenannten unbestimmten Integral:

$$\int y(x)dx = Y(x) + c \qquad \text{(Gl.3)}$$

, und der Integrations-konstanten *c*.

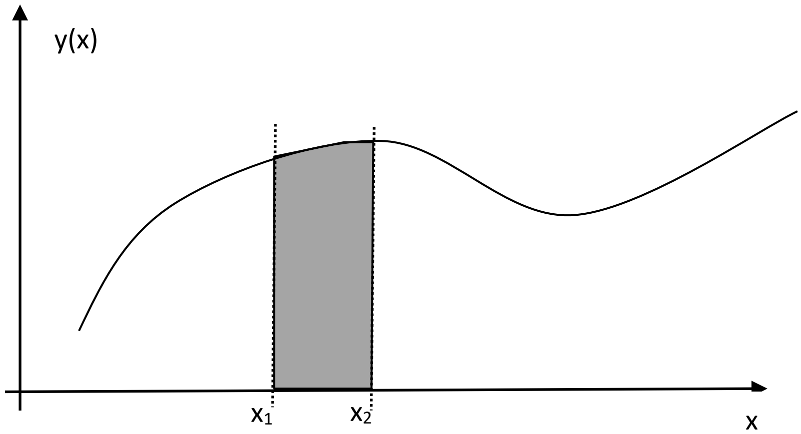

Abb.2: Zur Bedeutung des bestimmten Integrals

2. Einige Beispiele für unbestimmte Differentiale und Integrale (Stammfunktionen):

Für die Physikalische Chemie 1 benötigen Sie nur einige wenige Differentiale und Stammfunktionen, die im Folgenden als unbestimmt aufgelistet sind:

$y(x) = x^k$

$\frac{dy}{dx} = k \cdot x^{k-1}$ $\int y(x)dx = Y(x) = \frac{1}{k+1} \cdot x^{k+1} + c$ (Gl.4a)

$y(x) = \frac{1}{x} = x^{-1}$

$\frac{dy}{dx} = -x^{-2}$ $\int y(x)dx = Y(x) = ln(x) + c$ (Gl.4b)

$y(x) = \frac{1}{x^2} = x^{-2}$ (s.a. Gl.4a !)

$\frac{dy}{dx} = -2 \cdot x^{-3}$ $\int y(x)dx = Y(x) = -\frac{1}{x} + c$ (Gl.4c)

$y(x) = e^{-kx}$

$\frac{dy}{dx} = -k \cdot e^{-kx}$ $\int y(x)dx = Y(x) = -\frac{1}{k} \cdot e^{-kx} + c$ (Gl.4d)

$y(x) = sin(x)$

$\frac{dy}{dx} = cos(x)$ $\int y(x)dx = Y(x) = -cos(x)$ (Gl.4e)

3. Funktionen mehrerer Veränderlicher – das totale Differential:

In der Praxis hängen viele Größen von mehreren Veränderlichen/Parametern ab. Betrachten wir als einfaches Beispiel eine allgemeine Funktion $z(x,y)$, die sich im kartesischen Koordinatensystem als gekrümmte Fläche darstellen lässt. Zur Illustration folgendes Analogon: *z* sei die Höhe einer Landschaft auf der nördlichen Erdhalbkugel relativ zum Meeresniveau, dann entspräche die *x*-Achse der West-Ost-Richtung, die y-Achse der Süd-Nord-Richtung. Das Differential am Punkt (x_0, y_0) ist jetzt durch den folgenden, auch totales Differential genannten, Ausdruck gegeben:

$$dz(x_0, y_0) = \left(\frac{dz}{dx}\right)_{y,x=x_0} dx + \left(\frac{dz}{dy}\right)_{x,y=y_0} dy \qquad \text{(Gl.5)}$$

Der Ausdruck $\left(\frac{dz}{dx}\right)_{y,x=x_0}$ bedeutet hierbei: *y* bleibt konstant, die Funktion wird dann lediglich an der Position $x = x_0$ nach der Variablen *x* abgeleitet. Entsprechend unsrem Analogon: Die Gesamtsteigung an der Position (x_0, y_0) ergibt sich, indem wir erst nach Osten blicken (*x* – Richtung) und die betreffende Steigung bestimmen, und dann analog nach Norden (*y* – Richtung). Im totalen Differential bedeuten dann: *dz* einen verschwindend geringen (d.h. differentiellen) Höhenunterschied, *dx* einen verschwindend geringen Schritt nach Osten, sowie *dy* einen verschwindend geringen Schritt nach Norden. Für sehr kleine messbare Schrittlängen kann man auch schreiben:

$$\Delta z = \left(\frac{dz}{dx}\right)_{y,x=x_0} \Delta x + \left(\frac{dz}{dy}\right)_{x,y=y_0} \Delta y \qquad \text{(Gl.6)}$$

Zur weiteren Illustration abschließend noch ein reales Beispiel aus der Thermodynamik: die Innere Energie stellt eine Zustandsfunktion dar, die als molare Größe und für reine Stoffe lediglich von 2 Parametern bzw. Variablen abhängt, der Temperatur T sowie dem Volumen V. Somit ergibt sich für das totale Differential analog zu Gl.5 :

$$dU = \left(\frac{dU}{dT}\right)_V dT + \left(\frac{dU}{dV}\right)_T dV \qquad \text{(Gl.7)}$$

Die Differentialquotienten haben hierbei jeweils eine bestimmte physikalische Bedeutung. So ist $\left(\frac{dU}{dT}\right)_V$, d.h. die Änderung der inneren Energie bei konstantem Volumen, gleich der Wärmekapazität bei konstantem Volumen, und es gilt:

$$\Delta U_V = U(T) - U(T_0) = \left(\frac{dU}{dT}\right)_{V,T=T_0} \cdot (T - T_0) = c_V(T_0) \cdot \Delta T = Q_V \qquad \text{(Gl.8)}$$

, d.h. die Änderung der inneren Energie bei einem isochor (= konst. Volumen) geführten Prozess entspricht der Wärmekapazität mal Temperaturänderung, oder auch der isochor mit der Umgebung ausgetauschten Wärmemenge. Bitte beachten Sie hierbei, dass Gl.8 nur gilt, falls im untersuchten Temperaturintervall $\left(\frac{dU}{dT}\right)_V = c_V$ konstant ist, d.h. die gekrümmte Fläche $U(T,V)$ in *T*-Richtung konstant ansteigt. Dies gilt im Allgemeinen für kleine Temperaturveränderungen $\Delta T = T - T_0$, für größere Temperaturveränderungen muss man explizit die Funktion $c_V(T)$ integrieren, d.h.:

$$dU_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_V (T)dT = c_V(T)dT \quad \Rightarrow \quad \Delta U_V = \int_{T_0}^{T} c_V(T)dT \qquad \text{(Gl.9)}$$