

# Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 1, Quantenmechanik (Modul A8)

## Blatt 1

**Aufgabe 1:** Einfaches Differenzieren.

Differenzieren Sie folgende Funktionen  $f(x)$  nach  $x$ :

a)

$$f(x) = \sqrt{x}$$

b)

$$f(x) = 2 \ln(x)$$

c)

$$f(x) = 5x^2 \ln(x) \sin(x)$$

d)

$$f(x) = xe^{\alpha x}$$

e)

$$f(x) = x / \cos(x)$$

f)

$$f(x) = 2x \sin(x) + 4\sqrt{x^3} \frac{x^2}{\cos(x)}$$

**Aufgabe 2:** Taylorreihen-Entwicklung.

Entwickeln Sie die "Morsefunktion"  $V(x) = D_e[1 - e^{-\alpha x}]^2$  in eine Taylorreihe um  $x = 0$  bis zur zweiten Ordnung:

$$V(x) \approx \sum_{n=0}^2 \frac{d^n V(x)}{dx^n} \Big|_{x=0} \frac{x^n}{n!} \quad (1)$$

**Aufgabe 3:** Partielles Differenzieren.

Gegeben seien die Funktionen zweier Variabler  $x, y$

$$z(x, y) = \ln(xy) + x\sqrt{xy + y} \quad (2)$$

$$z(x, y) = x \sin(y) + ye^x \quad (3)$$

1. Berechnen Sie die partiellen Ableitungen  $z_x(x, y) = \frac{\partial z}{\partial x}(x, y)$  und  $z_y(x, y) = \frac{\partial z}{\partial y}(x, y)$  für beide Fälle.
2. Zeigen Sie, dass für die gemischten partiellen Ableitungen  $z_{xy} = z_{yx}$  gilt (*Satz von Schwarz*).

**Aufgabe 4:** Gewöhnliche Differentialgleichungen.

1. Zeigen Sie, dass die Differentialgleichung

$$m\ddot{x} = -Dx \quad (4)$$

die allgemeine Lösung

$$x(t) = C_1 \sin(\omega t) + C_2 \cos(\omega t) \quad (5)$$

besitzt. Was ist  $\omega$ , ausgedrückt durch  $D, m$ ?

2. Was ergibt sich für die Konstanten  $C_1$  und  $C_2$ , wenn die Anfangsbedingungen  $x(0) = 0$  und  $\dot{x}(0) = v_0$  gewählt werden?