Universität Potsdam
Theoretische Chemie
Prof. Dr. Peter Saalfrank

SoSe 2019

# 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:

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

**Aufgabe 3:** Partielles Differenzieren.

Gegeben seien die Funktionen zweier Variabler $x, y$

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

$$z(x,y) = x\sin(y) + ye^x \tag{3}$$

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

   $$m\ddot{x} = -Dx \tag{4}$$

   die allgemeine Lösung

   $$x(t) = C_1\sin(\omega t) + C_2\cos(\omega t) \tag{5}$$

   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?