Physikalische Chemie 2/ Theoretische Chemie 1

Übungsblatt Nr. 1

WS 2011/12

Aufgabe 1 - Summen und Produkte (max. 1 Pkt.)

a) Schreiben Sie folgende Ausdrücke aus:

$$\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{3}\prod_{l=1}^{2} a_{jkl} \qquad \sum_{k=1}^{3} a_{ik}b_{kj} \qquad \frac{\sum_{i=1}^{2} a_i}{\sum_{i=1}^{3} b_i}$$

b) Vergewissern Sie sich, dass die allgemeine Gleichung

$$\sum_{i=n_0}^{n} a_i \sum_{j=m_0}^{m} b_j = \sum_{i=n_0}^{n}\sum_{j=m_0}^{m} a_i b_j$$

für ein selbst gewähltes Beispiel gilt.

Aufgabe 2 - Differenzieren (max. 2 Pkt.)

Berechnen Sie die erste Ableitung von f(x) und nennen Sie die zugrundeliegenden Ableitungsregeln.

a) $f(x) = e^{4x+2}$ b) $f(x) = sin(x)$ c) $f(x) = ax^2 + bx + c$

d) $f(x) = (x - A)^l e^{-\alpha(x-A_x)^2}$ e) $f(x) = x^2cos(x)$ f) $f(x) = ln(x)$

g) $f(x) = a^x$ h) $f(x) = \frac{e^x}{x^2}$

Aufgabe 3 - Integrieren (max. 2 Pkt.)

Berechnen Sie die folgenden Integrale und nennen Sie die zugrundeliegenden Integrationsregeln.

a) $\int_\alpha^\beta (ax^2 + bx + c)dx$ b) $\int_1^4 \frac{2}{x}dx$ c) $\int_0^{\frac{\pi}{k}} Asin(kx)dx$

d) $\int_2^3 \frac{x}{x^2+1}dx$ e) $\int_0^\infty xe^{-x}dx$

Aufgabe 4 - Polarkoordinaten und komplexe Zahlen (max. 2 Pkt.)

a) Veranschaulichen Sie die Polarkoordinaten r und ϕ eines Punktes im zweidimensionalen Koordinatensystem.

b) Rechnen Sie die kartesischen Koordinaten eines Punkts mit den Polarkoordinaten $r = \sqrt{2}$, $\phi = \frac{\pi}{4}$ aus.

c) Veranschaulichen Sie die reele Zahl 1, die imaginäre Einheit i sowie die komplexe Zahl z_1= 1 + i in der komplexen Ebene (2-dimensionales Koordinatensystem durch Imaginär- und Realteil aufgespannt).

d) Geben Sie von z die polare Darstellung sowie die Eulersche Darstellung an.

e) Geben Sie allgemeine Gleichungen zur Umrechnung von Polarkoordinaten in kartesische Koordinaten und umgekehrt für den dreidimensionalen Fall an.

Aufgabe 5 - Operatoren und Eigenwertgleichungen (max. 2 Pkt.)

Ein Operator $\widehat{O}$ führt mit einer Funktion f eine bestimmte Rechenoperation durch. Er steht vor der Funktion, auf die er wirken soll, das Ergebnis ist im Allgemeinen eine andere Funktion g.

Beispiele	$\widehat{O}$	f	$\widehat{O}f = g$
Multipliziere mit x	$x\cdot$	x^2	$x \cdot x^2 = x^3$
Differenziere nach x	$\frac{d}{dx}$	$sin(x)$	$\frac{d}{dx}sin(x) = cos(x)$
Integriere über r	$\int dr$	$2r + 3$	$\int dr(2r + 3) = r^2 + 3r + C$

Mit Hilfe der Eigenwertgleichung, $\widehat{O}f = of$, sucht man Funktionen, die sich unter dem Einfluss des Operators in ihrer Form nicht ändern, außer dass sie mit einem konstanten Faktor o multipliziert werden. Solche Funktionen heißen Eigenfunktionen des Operators $\widehat{O}$, die zugehörigen konstanten Faktoren o heißen Eigenwerte.

Überprüfen Sie, ob folgende Funktionen Eigenfunktionen zum Operator der kinetischen Energie $\widehat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ sind. Geben sie, wenn möglich, die Eigenfunktionen und Eigenwerte von $\widehat{T}$ explizit an: $\Psi_1(x) = x^2$ $\quad \Psi_2(x) = A \cdot sin(kx)$ $\quad \Psi_3(x) = e^{ikx}$

Aufgabe 6 - Skalar, Vektor, Matrix (max. 2 Pkt.)

a) Was versteht man unter einem *Skalar*, einem *Vektor* und einer *Matrix*?

b) Berechnen Sie für die beiden Vektoren $\vec{a} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$ und $\vec{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ das Skalarprodukt und das Kreuzprodukt(Vektorprodukt).

c) Der Nabla-Operator $\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$ ist ein Vektor von Operatoren. Das Quadrat $\Delta = \vec{\nabla}^2 = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$, der Laplace-Operator, ist für die Quantenchemie von Bedeutung (z. B. im Hamilton-Operator für Moleküle). Bestimmen Sie den Laplace-Operator.

d) Gegeben seien die quadratischen Matrizen:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 7 & 2 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4 & 25 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie $\mathbf{A}-2\mathbf{B}$, $det(\mathbf{A})$, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ sowie $tr(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$ ($det(\mathbf{M})$ ist die Determinante und $tr(\mathbf{M})$ die *Spur* von $\mathbf{M}$). Gilt das Kommutativgesetz für Matrixmultiplikationen?