Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Katrin Tonigold

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, N24/226

Die Übungsblätter können von `http://www.uni-ulm.de/nawi/nawi-theochemie/lehre` *heruntergeladen werden.*

Übungsblatt 1, Übung am 28. 10. 2011

Aufgabe 1: *Differentialgleichungen zweiter Ordnung*

Lösen Sie folgende Differentialgleichungen zweiter Ordnung jeweils ohne/mit Anfangsbedingung:

$$\begin{aligned} y'' + 3y' - 10y &= 0 \\ y'' + 25y &= 0 \quad ; \quad y\left(\frac{\pi}{5}\right) = 1 \quad ; \quad y\left(\frac{\pi}{10}\right) = 1 \end{aligned}$$

Aufgabe 2: *Lineare gewöhnliche inhomogene Differentialgleichungen zweiter Ordnung*

Bestimmen Sie die allgemeine Lösung $y(x)$ folgender linearer Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} &\text{(a)} \qquad y'' - 2y' + 2y = e^{-3x} \\ &\text{(b)} \qquad y'' + 4y' + 4y = 9e^{-2x} \\ &\text{(c)} \qquad y'' + 4y' + 4y = 9xe^{-2x} \end{aligned}$$

Aufgabe 3: *Differentialgleichungen zweiter Ordnung*

Lösen Sie folgende Differentialgleichung mittels Potenzreihenansatz (analog Skript 11.4).

$$(x-1)y'' - xy' + y = 0 \qquad\qquad y(0) = 1; \quad y'(0) = 1$$

Hinweis:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \qquad y' = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) a_{n+1} x^n \qquad y'' = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) a_{n+2} x^n$$

einsetzen, Summen zusammenfassen. Die Koeffizienten müssen 0 werden. Umgeformt nach a_{n+2} erhält man daraus eine Gleichung mit a_n, a_{n+1} und a_{n+2}, die man rekursiv lösen muss. a_0 und a_1 ergeben sich aus den Anfangsbedingungen. Wenn man daraus a_2, a_3 und a_4 ausgerechnet hat, erkennt man die Reihe. Als Lösung müssen Sie $y = e^x$ erhalten.

Aufgabe 4: *Separationsansatz*

Die Schrödinger-Gleichung ist eine lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung. Zur Lösung partieller Differentialgleichungen wurde in der Vorlesung ein Separationsansatz vorgestellt.
(a) Versuchen Sie die folgende zwei dimensionale Schrödinger-Gleichung zu separieren.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e_0^2}{\sqrt{x^2+y^2}}\Psi = E\Psi$$

Hinweis: Schreiben Sie die Wellenfunktion als Produkt einer x-abhängigen Funktion und einer y-abhängigen Funktion.
(b) In Polarkoordinaten lautet die Schrödinger-Gleichung wie folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2}\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e_0^2}{r}\Psi = E\Psi$$

Wenden Sie auch hierfür einen Separationsansatz an.