Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Benedikt Weggler

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, H21

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

Übungsblatt 5, Übung am 23. 11. 2012

Aufgabe 1: *Frage aus der Vorlesung*

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.

Aufgabe 2: *Separationsansatz*

Lösen Sie die partielle Differentialgleichung mit einem Separationsansatz:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + 2\frac{\partial u}{\partial y} = y \cdot u$$

Aufgabe 3: *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.

Aufgabe 4: *Eigenwerte und Eigenvektoren*

Bestimmen Sie Eigenwerte und Eigenvektoren der folgenden Matrizen:

a) $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 8 & 1 \end{pmatrix}$ b) $\begin{pmatrix} 2 & 4 & 0 \\ 3 & 6 & 0 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}$ c) $\begin{pmatrix} 1 & 4 & 0 \\ 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}$