



Institut für Theoretische Chemie:  
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Dipl.-Chem. Uwe Friedel

## Mathematische Methoden für Lehramt Chemie/Biologie

Mo. 8:00-10:00 Uhr, O25/H1

Übungsblatt 14,\* Übung am 11.2.2013

### Aufgabe 1: *Newton-Raphson-Verfahren*

Berechnen Sie analytisch die Nullstellen der Funktion

$$y = x^2 + x - 1$$

Eine der Nullstellen ist positiv. Berechnen Sie den numerischen Wert dieser Nullstelle  $x_2 > 0$  mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Hinweis: Verwenden Sie einen Taschenrechner.

Berechnen Sie aus diesem Wert ohne größere Rechnung – ein Taschenrechner ist dazu nicht nötig – den numerischen Wert für  $\sqrt{5}$ .

### Aufgabe 2: *Newton-Raphson-Verfahren*

Berechnen Sie  $\pi$  mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Hinweis: Benutzen Sie  $\sin x$  und verwenden Sie einen Taschenrechner.

### Aufgabe 3: *Zerlegung von Funktionen*

Eine Funktion  $f(x)$ , die für  $x \in \mathbb{R}$  definiert ist, lässt sich als Summe einer geraden Funktion  $g(x) = \frac{1}{2} [f(x) + f(-x)]$  und einer ungeraden Funktion  $u(x) = \frac{1}{2} [f(x) - f(-x)]$  schreiben:

$$f(x) = g(x) + u(x) = \frac{1}{2} [f(x) + f(-x)] + \frac{1}{2} [f(x) - f(-x)]$$

Zerlegen Sie folgende Funktionen in geraden und ungeraden Anteil:

- (a)  $f(x) = x^5 - x^3 + 2x^2 - 1$
- (b)  $g(x) = \sin^2 x + \sin x + \cos\left(x + \frac{\pi}{2}\right) + \tan \frac{\pi}{2}$
- (c)  $h(x) = \sqrt{1 - x^2}$
- (d)  $k(x) = \sqrt{x + 2}$

Lässt sich  $k(x)$  tatsächlich in einen geraden und ungeraden Anteil zerlegen? Skizzieren Sie  $k(x)$  und die beiden berechneten Teilfunktionen. Begründen Sie Ihre Antwort anhand der Skizzen.

$f(x)$  hat eine Nullstelle in der Nähe von  $x = -1$ . Berechnen Sie diese Nullstelle näherungsweise.

### Aufgabe 4: *Vorlesung*

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.

---

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