

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I

WS 2018/19 – Übungsblatt 1

Ausgabe: Dienstag 16. Oktober, Besprechung: Freitag 19. Oktober

Ebene Wellen

1. Gegeben sei die komplexe Funktion

$$f(x, t) = A \exp(i(\omega t - kx))$$

Hierbei seien A , ω und k reelle Konstanten, t die Zeit und x der Ort. Die Funktion $f(x, t)$ stellt eine ebene Welle in einer Dimension dar.

- Verwenden Sie die Dispersionsrelation $\omega = v_{\text{ph}} k$, wobei v_{ph} die Phasengeschwindigkeit ist. Wie lautet die Wellenlänge λ als Funktion von k bzw. ω ? Wie lauten die Frequenz, Kreisfrequenz und Periodendauer?
- Berechnen Sie die Intensität $|f(x, t)|^2$. Wie hängt diese von x und/oder t ab?
- Nehmen Sie an, dass gelte $k = 1 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$ und $\omega = 5 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$. Visualisieren Sie den Real- und den Imaginärteil von $f(x, t)$ für festgehaltenes $t = 0$ als Funktion von x , sowie für festgehaltenes $x = 0$ als Funktion von t . Berechnen Sie für den gegebenen Spezialfall die Wellenlänge und die Periodendauer. Erinnern Sie diese Werte an Größenordnungen aus der Grundvorlesung?

Wiederholung der mathematischen Grundlagen

2. Gegeben sei die komplexe Zahl $z = \frac{1-i}{1+i}$. Berechnen Sie
- den Real- und den Imaginärteil von z ,
 - den Betrag von z ,
 - die Größen r und φ der Polardarstellung $z = r \exp(i\varphi)$.
3. Berechnen Sie die erste und die zweite Ableitung der folgenden Funktionen:
- $f(x) = a \sin(bx^2 + c)$
 - $f(x) = \ln(ax + b)$
 - $f(x) = \exp(\cos(ax + b))$

Fortsetzung auf der Rückseite!

4. Bestimmen Sie die folgenden Integrale:

a) $\int x \sin(ax) \, dx$

b) $\int x \exp(-ax^2) \, dx$

c) $\int x^3 \exp(-ax^2) \, dx$

5. Gegeben seien die folgenden beiden Differentialgleichungen

a) $\frac{df(x)}{dx} + \frac{f(x)}{x} = 0$

b) $\frac{df(x)}{dx} + \frac{f(x)}{x} = x^3 + 9$

Bestimmen Sie jeweils $f(x)$.

6. Gegeben seien die dreidimensionalen Vektoren

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ -7 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Normieren Sie beide Vektoren und bilden Sie das Skalarprodukt $\vec{a} \cdot \vec{b}$.

7. Sei

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

eine Matrix.

a) Berechnen Sie die Determinante von $\mathbf{M}$.

b) Berechnen Sie Eigenwerte und Eigenvektoren von $\mathbf{M}$.

c) Diagonalisieren Sie $\mathbf{M}$.

d) Berechnen Sie $\exp(\mathbf{M})$.

8. Zwei beliebig gewählte Matrizen $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ kommutieren im Allgemeinen nicht, d.h. $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$. Berechnen Sie den *Kommutator* $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$ für folgende Matrizen:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$