Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Blatt 9

Übungen zur Vorlesung
Mathematik II für Studierende der Chemie und Biochemie

1. Berechnen Sie alle partiellen Ableitungen erster Ordnung der folgenden reellen Funktionen. Bestimmen Sie, wo diese Ableitungen stetig sind.

   (a) $g(x, y, z) = x^2y^3 + xy^2 + xyz^2$

   (b) $h(x, y) = \ln(|xy|)$

   (c) $f(x, y) = x^2 \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x-y)^2}$.

2. Die Zustandsgleichung für ein ideales Gas ist gegeben durch $pV_m = RT$, wobei R eine Konstante bezeichnet. p ist der Druck, V_m ist das molare Volumen $V_m = V/n$, T die Temperatur.

   (a) Geben Sie die folgenden Funktionen an:
   $p(V_m, T)$, $T(p, V_m)$, $V_m(p, T)$

   (b) Berechnen Sie die zweiten partiellen Ableitungen $\frac{\partial}{\partial V_m}\frac{\partial}{\partial T}p$ und $\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial}{\partial V_m}p$ bei festgehaltener Molzahl n und vergleichen Sie die Ergebnisse.

   (c) Berechnen Sie die drei partiellen Ableitungen $\frac{\partial p}{\partial T}$, $\frac{\partial T}{\partial V_m}$, $\frac{\partial V_m}{\partial p}$.

   (d) Gilt $\frac{\partial p}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial V_m}\frac{\partial V_m}{\partial p} = 1$?

3. Bestimmen Sie die Werte und den Gradienten des Polynoms

   $p(x, y) = a + bx + cy + dx^2 + exy + fy^2$

   an den Punkten $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(0, 1)$.

4. Ein Teilchen bewegt sich entlang einer bekannten Trajektorie $\mathbf{x}(t)$ im $\mathbb{R}^3$. Die potentielle Energie der Teilchen ist $V = V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}k\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{x}$. Die kinetische Energie $T = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^T \cdot \mathbf{v}$ mit $\mathbf{v} = \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t}$.

   (a) Bestimmen Sie die zeitliche Änderung der potentiellen Energie $\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t}$ und der kinetischen Energie $\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}$ in Abhängigkeit von $\mathbf{x}(t)$ und $\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t}$.

   (b) Bestimmen Sie die Kraft $\mathbf{F} = -\mathrm{grad}(V)$, die zum Zeitpunkt t auf das Teilchen wirkt. Welcher Zusammenhang besteht zwischen Kraft, Geschwindigkeit und der zeitlichen Änderung von V?

Zusatzaufgaben:

5. Berechnen Sie alle partiellen Ableitungen erster Ordnung der reellen Funktionen und bestimmen Sie, wo diese Ableitungen stetig sind.

   (a) $f(x, y, z) = xy^2 + xy^2z + xz$

   (b) $f(x, y) = \sin(xy)$

   (c) $f(x, y) = xy\,\mathrm{e}^{\left(-\frac{y^2}{(x-y)^2}\right)}$

   (d) $f(x, y) = \ln\left(\frac{x^2}{|y|}\right)$

   (e) $f(x, y, z) = \sin(x^2) + z\mathrm{e}^y$

   (f) $f(x, y) = x\mathrm{e}^{\sqrt{|y|}}$

6. Das elektrostatische Potential Φ eines Punktdipols im Ursprung ist am Ort $\mathbf{r} = (x, y, z)^T$ gegeben durch $\Phi(\mathbf{r}) = \mathbf{d}^T \cdot \mathbf{r}/r^3$, wobei $\mathbf{d}$ das Dipolmoment ist und $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

   Berechnen Sie die Abhängigkeit des elektrischen Feldes $\mathbf{E} = -\mathrm{grad}(\Phi)$ von den Komponenten des Dipolmoments $\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial d_i} \quad (i = x, y, z)$.