Resumé der Mathematik für Chemiker

1. Differentialgleichungen

Wir haben in der Vorlesung zur Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom den Laplace-Operator (∇) kennen gelernt. Der Laplace-Operator – wenn auf eine Funktion angewendet – leitet diese nach den Raumkoordinaten (*x*, *y*, *z*) oder nach allen Polarkoordinaten (*r*, θ, ϕ) ab, wie folgt (für die drei Dimensionen, *x*, *y*, und *z*):

$$\nabla = \left(\frac{\delta}{\delta x}, \frac{\delta}{\delta y}, \frac{\delta}{\delta z}\right) \text{ oder auch } \nabla^2 = \left(\frac{\delta^2}{dx^2}, \frac{\delta^2}{dy^2}, \frac{\delta^2}{dz^2}\right)$$

Hier einige Übungsaufgaben zum Umgang mit solchen Operatoren:

Übung 1.1: Lösen Sie nach *y* auf:

(a) $\frac{d^2y}{dx^2} = -m^2y,$ (b) $\frac{dy}{dx} = -xy$

Übung 1.2: Folgende Gleichung gilt für *y*(*r*, φ):

$$\frac{1}{r}\frac{\delta}{\delta r} r \frac{\delta y}{\delta r} + \frac{1}{r^2}\frac{\delta^2}{\delta\varphi^2} = 0$$

Zeigen Sie, dass *y*(*r*, φ) = *R*(*r*) exp(i*m*φ) eine mögliche Lösung dieser Gleichung ist, wenn $R(r) = r^k$. Was muss für *k* und *m* gelten, damit die Gleichung stimmt? (**TIP:** Diese Gleichung ist die Laplace Gleichung in 2D Polarkoordinaten, die wir zum Berechnen des effektiven Potentials, *V* in der Vorlesung verwendet haben.)

Kleine Formelsammlung:

$$e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm \sin\theta \qquad (1.1)$$

(Diese Schreibweise bedeutet, dass wir entweder + oder – durchgehend verwenden.) Dem folgt:

$$\cos\theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\theta} + e^{-i\theta}\right), \sin\theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\theta} + e^{-i\theta}\right) \qquad (1.2)$$

2. Polarkoordinaten

Die Polarkoordinaten und ihr Bezug zum kartesischen Koordinatensystem sind im ***Data Book 2014*** definiert (s. 5; URL: http://bojdyslab.org/teaching/). Für viele Rechenoperationen in der Chemie ist es wichtig, zwischen kartesischen und Polarkoordination schalten zu können.

Übung 2.1: (a) Ein Punkt hat die kartesischen Koordinaten $x = y = z = a$. Finden Sie seine zugehörigen Polarkoordinaten (r, θ, φ).

(b) Ein Punkt hat die Polarkoordinaten (r, θ, φ). Welche Polarkoordinaten hat derjenige Punkt, den man bei Inversion durch den Ursprung erhält? (Im kartesischen Koordinatensystem bringt uns die Inversion durch den Ursprung von (x, y, z) nach ($-x$, $-y$, $-z$).