Fakultät für Mathematik
Universität Bielefeld

Prof. Dr. Christopher Voll
Wintersemester 2017/18

**Mathematik 1 für Chemie**
**Präsenzübungsblatt 14**

**Aufgabe 1** (Teilchen in einer 1-dimensionalen Kiste)**.** Die Wellenfunktion $\Psi(x)$ eines Partikels der Masse $m$ in einer "1-dimensionalen Kiste", dargestellt als Intervall $[0, l]$, auf das keine zusätzliche Kraft wirkt, ist eine Lösung des folgenden Randwertproblems:

(1)
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) - E\Psi(x) = 0$$
$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0$$
$$\int_0^l |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

Hierbei bezeichne $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum und $E > 0$ die Gesamtenergie.

(1) Bestimmen Sie die allgemeine Lösung der homogenen Differentialgleichung (1).
(2) Zeigen Sie, dass die Randwertbedingungen $\Psi(0) = 0 = \Psi(l)$ nur dann (nicht-trivial) erfüllbar sind, wenn
$$E \in \left\{ n^2 \frac{h^2}{8ml^2} \mid n \in \mathbb{N} \right\}$$
gilt.
(3) Beweisen Sie die Formel
$$\int \sin^2(x)dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{2}\sin(x)\cos(x) + C.$$
(4) Berechnen Sie schliesslich für jede mögliche Gesamtenergie $E_n := n^2 \frac{h^2}{8ml^2}$, die eindeutige Lösung $\Psi_n(x)$ des Randwertproblems.

**Aufgabe 2.** Berechnen Sie die folgenden Integrale:

(1)
$$\int \frac{1}{x\ln(x)}dx,$$
(2)
$$\int \frac{x}{3x^2+1}dx,$$
(3)
$$\int x^2\cos(x)dx,$$
(4)
$$\int \frac{1}{(x-2)(x-4)}dx$$
Hinweis: Partialbruchzerlegung.