



Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Katrin Tonigold

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, O25/346

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

Übungsblatt 2, Übung am 30. 10. 2009

Aufgabe 1: *Fourierreihe*

a) Die Funktion

$$f(x) = \begin{cases} 0 & (-\pi \leq x \leq 0) \\ \sin x & (0 \leq x \leq \pi) \end{cases}$$

soll in eine Fourierreihe entwickelt werden.

Hinweise:

$$\sin ax \sin bx = \frac{1}{2} [\cos((a-b)x) - \cos((a+b)x)]$$

$$\sin ax \cos bx = \frac{1}{2} [\sin((a-b)x) + \sin((a+b)x)]$$

$$\int \sin x \cos x \, dx = \frac{1}{2} \sin^2 x$$

$$\int \sin^2 x \, dx = \frac{1}{2} x - \frac{1}{4} \sin 2x$$

b) Berechnen und zeichnen Sie das Amplitudenspektrum bis $n=5$.

Aufgabe 2: *Reelle und komplexe Fourierreihe*

Gegeben ist die Funktion $y = x^2$ für $-\pi \leq x \leq \pi$, die für die übrigen x -Werte periodisch fortgesetzt wird.

a) Entwickeln Sie die Funktion in eine reelle Fourierreihe.

b) Entwickeln Sie die Funktion in eine komplexe Fourierreihe.

c) Überprüfen Sie ihr Ergebnis, indem Sie die komplexe in die reelle Fourierreihe überführen.

Aufgabe 3: *Doppelintegrale*

a) Berechnen Sie folgende Integrale unter Beachtung der vorgegebenen Reihenfolge:

$$\int_1^2 \int_0^1 (2xy + y^3) \, dx \, dy$$

$$\int_0^1 \int_1^2 (2xy + y^3) \, dy \, dx$$

b) Berechnen Sie das angegebene Integral.

Beachten Sie die angegebene Reihenfolge:

$$\int_1^2 \int_0^\pi (y \cdot \sin x) \, dx \, dy$$

Berechnen Sie das Integral auch als Produkt zweier Integrale:

$$\int_1^2 y \, dy \int_0^\pi \sin x \, dx$$

Aufgabe 4: *Zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung*

Mit der kinetischen Gastheorie wird die Bewegung der Moleküle in einem Gas beschrieben. Im eindimensionalen Fall wird folgende Geschwindigkeitsverteilung erhalten:

$$w_1(v_x) = N_1 \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2k_B T}\right)$$

- Wie lautet der Ansatz für die Verteilung der Geschwindigkeitsvektoren im zweidimensionalen Fall?
- Normieren Sie die Geschwindigkeitsverteilung $w_2(\vec{v})$ aus a).
- Formen Sie $w_2(\vec{v}) dv_x dv_y$ in ebene Polarkoordinaten um und berechnen Sie die Verteilung $w_2(v) dv$ der Geschwindigkeitsbeträge.
- Berechnen Sie die mittlere Geschwindigkeit \bar{v} .

Hinweise:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$I = \int_0^{\infty} x^2 \cdot e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4}$$