Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

ulm university universität uulm

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
David Mahlberg

Mathematik II für Chemie und Wirtschaftschemie

Vorlesung: Di 10-12, H16

Seminar: Fr 8-10, H1

Das Übungsblatt wird im Seminar am 07.06.2019 als Präsenzübung bearbeitet

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

Übungsblatt 7

1. Aufgabe

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

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

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:

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

2. Aufgabe

a) Formen Sie das folgende Integral in Polarkoordinaten um:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A \exp\left[-b(x^2 + y^2)\right] dx\, dy$$

b) Formen Sie das folgende Integral in kartesische Koordinaten um:

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} r^3 (1 + \sin\phi \cos\phi) d\phi dr$$

c) Formen Sie das folgende Integral in Kugelkoordinaten um:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(x^2+y^2+z^2)}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}\, dx\, dy\, dz$$

d) Formen Sie das folgende Integral in kartesische Koordinaten um:

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^4 \sin^2\theta (\sin\theta \cos^2\phi - 2 \sin\phi \cos\theta)\, d\phi\, d\theta\, dr$$

Hinweis: Die Integrale müssen nicht gelöst werden. Berechnen Sie die benötigten Funktionaldeterminanten.

3. Aufgabe

Kugelflächenfunktionen der Form

$$Y_l^m(\theta, \phi) = N \cdot P_l^m(\cos\theta) \cdot e^{im\phi}$$

lassen sich normieren, indem N so gewählt wird, dass gilt:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) \sin\theta \, d\theta \, d\phi = 1$$

Ist $N \in \mathbb{C}$ mit dieser Gleichung eindeutig zu berechnen?
Berechnen Sie die Normierungsfaktoren N für folgende Fälle:

a) l = 0, m = 0
b) l = 1, m = 1

Hinweise:
1) Benötigte Funktionen:

$$P_0^0(\cos\theta) = 1$$

$$P_1^1(\cos\theta) = \sin\theta$$

2) Im Aufgabenteil b) empfiehlt es sich, zum Lösen des Integrals die Substitution cos x = u durchzuführen.

4. Aufgabe

Integrieren Sie die Funktion

$$f(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

über die Kugelschale, deren innerer Radius 0.5 und deren äußerer Radius 1 beträgt.

5. Aufgabe

Berechnen Sie das Dreifachintegral:
(Hinweise: Umformen in Polarkoordinaten, Integration durch Substitution und partielle Integration)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4\pi} \left| \frac{2}{\sqrt{a^3}} exp\left[-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{a} \right] \right|^2 dx \, dy \, dz$$