



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 3, Übung am 06. 11. 2009

Aufgabe 1: Normierung der Kugelflächenfunktion

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.

Aufgabe 2: Integration mit Kugelkoordinaten

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.

Aufgabe 3: Tripelintegral

Berechnen Sie das Dreifachintegral:

(Hinweise: Umformen in Polarkoordinaten, Integration durch Substitution und partielle Integration)

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

Aufgabe 4: Bereichsintegral

Berechnen Sie das Bereichsintegral

$$\iint xy \, dx \, dy$$

über das vom Kreis $x^2 + y^2 = 4$ und der Hyperbel $x \cdot y = 1$ eingeschlossene, im 1. Quadranten liegende Gebiet.