



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 12. 11. 2010

Aufgabe 1: *Fourierreihe*

Die Funktion $f(x)$ ist im Bereich $-\pi \leq x \leq \pi$ wie folgt definiert und wird für die übrigen x -Werte periodisch fortgesetzt:

$$f(t) = \begin{cases} 2 & (-\frac{\pi}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2}) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Entwickeln Sie $f(x)$ in eine Fourierreihe.

Aufgabe 2: *Fourierreihe*

Gegeben ist die Funktion $y = x^2$ für

a) $-\pi \leq x \leq \pi$

b) $0 < x < 2\pi$

Setzen Sie die Funktion jeweils für die übrigen x -Werte periodisch fort und entwickeln Sie die Funktion in eine Fourierreihe.

Aufgabe 3: *Doppelintegrale*

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

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

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

b) Berechnen Sie das angegebene Integral.

Beachten Sie die angegebene Reihenfolge:

$$\int_{-1}^0 \int_1^2 (y \cdot e^x) dy dx$$

Berechnen Sie das Integral auch als Produkt zweier Integrale:

$$\int_1^2 y dy \int_{-1}^0 e^x dx$$

c) Integrieren Sie über ϕ :

$$N^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi P_l^m(\cos(\theta)) P_l^{m*}(\cos(\theta)) \sin\theta d\theta d\phi$$

Aufgabe 4: *Zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung*

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

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

a) Wie lautet der Ansatz für die Verteilung der Geschwindigkeitsvektoren im zweidimensionalen Fall?

b) Normieren Sie die Geschwindigkeitsverteilung $w_2(\vec{v})$ aus a).

c) 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.

d) Berechnen Sie die mittlere Geschwindigkeit \bar{v} .

Hinweise:

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

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