



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 4, Übung am 19. 11. 2010

Aufgabe 1: Funktionaldeterminante

Um die Schrödinger-Gleichung für das H_2^+ -Ion analytisch zu lösen ist eine Transformation in elliptische Koordinaten notwendig.

In zylindrischen elliptischen Koordinaten ist:

$$x = a \cosh(u) \cos(v)$$

$$y = a \sinh(u) \sin(v)$$

$$z = w$$

Berechnen Sie die Funktionaldeterminante $\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(u,v,w)}$.

Aufgabe 2: Zylinderkoordinaten

In Zylinderkoordinaten wird ein Punkt $P(x_0, y_0, z_0)$ beschrieben durch:

$\vec{\rho}$: die Projektion des Ortsvektors des Punktes auf die x-y-Ebene

ϕ : den Winkel zwischen der positiven x-Achse und $\vec{\rho}$

ζ : seine z-Koordinate z_0

a) Stellen Sie die Zylinderkoordinaten graphisch dar und geben Sie die Transformationen

kartesischeKoordinaten \rightarrow *Zylinderkoordinaten*

Zylinderkoordinaten \rightarrow *kartesischeKoordinaten*

an.

b) Was ändert sich, wenn die Integration

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y, z) dx dy dz$$

in Zylinderkoordinaten ausgeführt werden soll?

Aufgabe 3: 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 4: Tripelintegral

Berechnen Sie:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \frac{3}{4\pi} \left| \frac{z}{2\sqrt{6}a^5} \exp \left[-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{2a} \right] \right|^2 dx dy dz$$