ulm university universität uulm

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

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, N24/226

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

Übungsblatt 4, Übung am 18. 11. 2011

Aufgabe 1: *Partielle Integration*

Berechnen Sie explizit

$$\int \arctan x \, dx \ .$$

Der erste Schritt <u>muß</u> eine partielle Integration sein.

Aufgabe 2: *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 3: *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 4: *Integration: Gammafunktion*

a) Drücken Sie das Integral

$$I = \int_0^\infty e^{-x^{10}} dx$$

durch die Gammafunktion $\Gamma(x)$ aus.
b) Begründen Sie anschaulich, warum I $\approx$ 1 sein muss.
c) Es gilt

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = \sum_{k=1}^{\infty} c_k z^k$$

$$c_1 = 1$$

$$c_2 = 0.55721$$

$$c_3 = -0.656$$

Berechnen Sie damit I auf zwei Nachkommastellen genau.