Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Benedikt Weggler

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, H21

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

Übungsblatt 8, Übung am 14. 12. 2012

Aufgabe 1: *Frage aus der Vorlesung*

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.

Aufgabe 2: *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:

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

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: *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

$$kartesische Koordinaten \rightarrow Zylinderkoordinaten$$

$$Zylinderkoordinaten \rightarrow kartesische Koordinaten$$

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 5: *Koordinatentransformation*

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.