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 9, Übung am 21. 12. 2012

Aufgabe 1: *Frage aus der Vorlesung*

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.

Aufgabe 2: *Zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung*

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

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

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:

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

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

Aufgabe 3: *Funktionaldeterminante*

Bei der Ableitung der Funktionaldeterminante für die Umwandlung von kartesische in Polarkoordinaten wird die 3×3-Determinante A durch Entwickeln nach dem Element $\vec{e}_z$ in eine 2×2-Determinante überführt. Überprüfen Sie diesen Rechenschritt, indem Sie sowohl die 3×3 als auch die 2×2-Determinante mit anderen Methoden berechnen und die Ergebnisse vergleichen.

$$A = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \frac{\partial x}{\partial v} dv & \frac{\partial y}{\partial v} dv & 0 \\ \frac{\partial x}{\partial u} du & \frac{\partial y}{\partial u} du & 0 \end{vmatrix} = \vec{e}_z\ dv\ du \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} \\ \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} \end{vmatrix}$$

Aufgabe 4: *Tripelintegrale*

Berechnen Sie:
a)

$$\int_1^4 \int_1^3 \int_0^2 (x^2 - 2yz)\, dx\, dy\, dz$$

b)

$$\int_0^3 \int_0^{\pi/2} \int_1^{e^2} \left(\frac{x}{z} \sin(xy)\right)\, dz\, dy\, dx$$

Aufgabe 5: *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 6: *Tripelintegral*

Berechnen Sie:

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