

Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Dipl.-Chem. Uwe Friedel
Mathematik III für Chemie und Wirtschaftschemie
Freitag, 10:00-12:00, O25/H7, O27/H21

Übungsblatt 5,* Übung am Fr, 20.11.2015

Aufgabe 1: *Vorlesungsfrage*

Beantworten Sie die Vorlesungsfrage vom 13. 11. 2015. (2 P.)

Aufgabe 2: *Koordinatentransformation*

a) Formen Sie das folgende Integral in Polarkoordinaten um (2 P.):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A \exp[-b(x^2 + y^2)] dx dy$$

b) Formen Sie das folgende Integral in kartesische Koordinaten um (3 P.):

$$\int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} r^3 (1 + \sin \phi \cos \phi) d\phi dr$$

c) Formen Sie das folgende Integral in Kugelkoordinaten um (3 P.):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(x^2+y^2+z^2)}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx dy dz$$

d) Formen Sie das folgende Integral in kartesische Koordinaten um (4 P.):

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r^4 \sin^2 \theta (\sin \theta \cos^2 \phi - 2 \sin \phi \cos \theta) d\phi d\theta dr$$

Hinweis: Die Integrale müssen nicht gelöst werden. Berechnen Sie die benötigten Funktionaldeterminanten, falls nötig.

Aufgabe 3: *Dreifachintegral*

Berechnen Sie das Integral I in Kugelkoordinaten. (2 P.)

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(x^2+y^2+z^2)}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx dy dz$$

Aufgabe 4: *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. (2 P.)

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

Aufgabe 5: *Dreifachintegral*

- (a) Zwischen Zylinderkoordinaten und kartesischen Koordinaten gilt folgender Zusammenhang:

$$x = r \cos \varphi \quad y = r \sin \varphi \quad z = \zeta$$

Dabei ist $r \in [0; \infty)$, $\varphi \in [0; 2\pi)$ und $\zeta \in (-\infty; \infty)$. Berechnen Sie die Jakobideterminante $\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\varphi,\zeta)}$. (2 P.)

- (b) Integrieren Sie die Funktion $f(x, y, z) = e^{-x^2-y^2-z^2}$ in Zylinderkoordinaten über den ganzen Raum. (4 P.)