Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
Andreas Steinau
Dr. Holger Euchner

Mathematik für Chemie und Wirtschaftschemie
Mi 10-12: O29/2006 und Fr 10-12: O25/H7

Übungsblatt 5, Übung am 23./25. 11. 2016

Aufgabe 1: *Frage aus der Vorlesung* **(1 Punkt)**

Beantworten Sie die Vorlesungfrage.

Aufgabe 2: *Separationsansatz* **(3 Punkte)**

Die Schrödinger-Gleichung ist eine lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung. Zur Lösung partieller Differentialgleichungen wurde in der Vorlesung ein Separationsansatz vorgestellt.
(a) Versuchen Sie die folgende zwei dimensionale Schrödinger-Gleichung zu separieren.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e_0^2}{\sqrt{x^2+y^2}}\Psi=E\Psi$$

Hinweis: Schreiben Sie die Wellenfunktion als Produkt einer x-abhängigen Funktion und einer y-abhängigen Funktion.
(b) In Polarkoordinaten lautet die Schrödinger-Gleichung wie folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right)-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e_0^2}{r}\Psi=E\Psi$$

Wenden Sie auch hierfür einen Separationsansatz an.

Aufgabe 3: *Separationsansatz* **(2 Punkte)**

Lösen Sie die partielle Differentialgleichung mit einem Separationsansatz:

$$\frac{\partial u}{\partial x}+2\frac{\partial u}{\partial y}=y\cdot u$$

Aufgabe 4: *Doppelintegrale* **(2 Punkte)**

a) Berechnen Sie folgende Integrale unter Beachtung der vorgegebenen Reihenfolge:

$$\int_1^2\int_0^1(2xy+y^3)\,dx\,dy \qquad\qquad \int_0^1\int_1^2(2xy+y^3)\,dy\,dx$$

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 5: *Normierung der Kugelflächenfunktion* **(3 Punkte)**

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 6: *Bereichs–Integral* **(2 Punkte)**

Berechnen Sie

$$\iint_B x \, dxdy,$$

wobei B das durch zwei Kreise um den Ursprung mit Radien von 1 und 2 begrenzte Gebiet im ersten Quadranten ist.
Hinweis: Betrachten Sie das Problem in Polarkoordinaten um die Integrationsgrenzen einfach darzustellen.