



Mathematik für Chemie und Wirtschaftschemie
Fr 10:00-12:00 Uhr: N24/H16
Übungsblatt 5, Übung am 17. 11. 2017

Aufgabe 1: Koordinatentransformation (3 Punkte)

a) Formen Sie das folgende Integral in Polarkoordinaten um:

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

b) Formen Sie das folgende Integral in kartesische Koordinaten um:

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

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.

Aufgabe 2: Funktionaldeterminante (2 Punkte)

Um die Schrödinger-Gleichung für das H_2^+ -Ion analytisch zu lösen ist eine Transformation in elliptische Koordinaten notwendig.

In zylindrischen elliptischen Koordinaten ist:

$$\begin{aligned}x &= a \cosh(u) \cos(v) \\y &= a \sinh(u) \sin(v) \\z &= w\end{aligned}$$

Berechnen Sie die Funktionaldeterminante $\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(u,v,w)}$.

Aufgabe 3: Integration mittels Koordinatentransformation (2 Punkte)

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.