ulm university universität uulm

Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Katrin Tonigold, Dorothee Denot

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Mi. 8:30 Uhr, H16, H21, O25/346

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

Übungsblatt 2, verteilt am 24. 10. 2008, Übung am 29. 10. 2008

Aufgabe 1: *Determinanten*

Berechnen Sie die folgenden Determinanten.

$$\text{(a)} \begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 5 & 6 & 6 \\ 3 & 1 & -1 \end{vmatrix} \qquad \text{(b)} \begin{vmatrix} 2i & 4 & 7 \\ 0 & 2 & 0 \\ 4i & 2 & 7 \end{vmatrix} \qquad \text{(c)} \begin{vmatrix} -1 & 3i & 2 \\ 0 & 2i & 0 \\ 4 & -4i & 7 \end{vmatrix}$$

Aufgabe 2: *H-Atom*

a) Schreiben Sie die Funktion $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi)$ für

$$\text{(i)} \qquad R_{2p}(r) = \tfrac{1}{2\sqrt{6a^3}}\tfrac{r}{a}\exp[-\tfrac{r}{2a}]; \qquad Y_p(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\phi$$

$$\text{(ii)} \quad R_{3d}(r) = \tfrac{4}{81\sqrt{30a^3}}(\tfrac{r}{a})^2\exp[-\tfrac{r}{3a}]; \quad Y_d(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\cos 2\phi$$

im kartesischen Koordinatensystem: $\psi(x,y,z) = \Psi(r,\theta,\phi)$

b) Berechnen Sie $\int_0^\infty r|(R_{2p}(r)|^2 r^2\,dr$ und $\int_0^\pi |(Y_d(\theta,\phi_0)|^2 \sin\theta\,d\theta$, wobei ϕ_0 eine Konstante ist.

Aufgabe 3: *Doppelintegrale*

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

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

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

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 4: *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.