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 3, verteilt am 29. 10. 2008, Übung am 5. 11. 2008

Aufgabe 1: *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 2: *Funktionaldeterminante*

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

$$x = a\cosh(u)\cos(v)$$
$$y = a\sinh(u)\sin(v)$$
$$z = w$$

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

Aufgabe 3: *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.

Aufgabe 4: *Tripelintegral*

a) Berechnen Sie das Dreifachintegral:
(Hinweise: Umformen in Polarkoordinaten, Integration durch Substitution und partielle Integration)

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4\pi}\left|\frac{2}{\sqrt{a^3}} exp\left[-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{a}\right]\right|^2 dx\,dy\,dz$$