Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Blatt 12

Übungen zur Vorlesung
Mathematik II für Studierende der Chemie und Biochemie

1. Berechnen Sie die folgenden Integrale, sofern sie existieren.

   (a) $\iint\limits_K \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{e}^{-y^2}\mathrm{d}x\mathrm{d}y, \quad$ wobei $K:$ Kreis mit Radius R um $(0,0)$.

   (b) $\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{e}^{-y^2}$

   (c) $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-x^2}$.

2. Gegeben sei eine radiale Dichteverteilung $\rho(x,y,z) = \rho_0 \cdot \frac{1}{\sqrt[4]{x^2+y^2+z^2}^5}$ mit $\rho_0 \in \mathbb{R}^+$.
   Betrachten Sie das folgende Integral über diese Dichteverteilung:

   $$\iiint\limits_\Omega \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\,\rho(x,y,z),$$

   wobei Ω eine Kugel mit Radius R um $(0,0,0)$ sei.

   Kugelkoordinaten seien gegeben durch

   $$\begin{aligned} x =& \quad r\cdot\sin(\theta)\cdot\cos(\phi) \\ y =& \quad r\cdot\sin(\theta)\cdot\sin(\phi) \\ z =& \qquad r\cdot\cos(\theta), \end{aligned}$$

   mit $r \in [0,\infty[$, $\phi \in [0,2\pi]$ und $\theta \in [0,\pi]$.

   (a) Zeigen Sie, dass $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$.

   (b) Stellen Sie die Jacobi-Matrix für Kugelkoordinaten auf und berechnen Sie deren Determinante.

   (c) Stellen Sie das Integral sowie den Integranden in Abhängigkeit der Kugelkoordinaten dar und lösen Sie das Integral.

3. Berechnen Sie, sofern sie existieren, folgende Integrale oder stellen Sie deren Nichtexistenz fest.

   (a) $\lim_{y \to 1} \frac{\partial}{\partial y} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} dx \frac{\cos(xy^2)}{x}$

   (b) $\int_1^3 dx \int_0^{\frac{\pi}{2}} dy \int_0^{\cos y} dz \frac{1}{x}$

4. Gegeben sei die reelle Vektorfunktion $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (x^n, y^n)^T, \quad \mathbf{x} := (x, y)^T$.

   (a) Berechnen Sie das Kurvenintegral $\int \mathrm{d}\mathbf{x} f(x, y)$ entlang $(\mathrm{e}^{\lambda\vartheta}, e^{\mu\vartheta})^T$ mit $\vartheta \in [0, 1]$ in Abhängigkeit von λ, μ für beliebiges $n \in \mathbb{N}$.

   (b) Für welche n ist das Interal wegunanbängig?

5. Welche der folgende Funktionen haben wegunabhängige Integrale?

   (a) $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = ((x^2 - y^2)\mathrm{e}^{-x^2+y^2}, (x^2 - y^2)\mathrm{e}^{x^2+y^2}), \quad \mathbf{x} := (x, y)$

   (b) $\mathbf{f}(x, y) = \frac{1}{x^2 + y^2} \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix}$

6. Nach dem Satz von Stokes kann der Inhalt eines einfach zusammenhängenden, ebenen Gebietes über ein Integral entlang der das Gebiet umschließenden Kurve berechnet werden. Berechnen Sie den Flächeninhalt A einer Ellipse (Achsenlängen a und b) durch das Kurvenintegral

$$A = \frac{1}{2} \int_C \mathrm{d}\mathbf{x}\, \mathbf{f}(\mathbf{x}),$$

   wobei $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix}$ und die Ellipsenkurve C durch $\mathbf{x}(\tau) = \begin{pmatrix} a\cos\tau \\ b\sin\tau \end{pmatrix}$ gegeben ist und τ von 0 bis 2π läuft.