

10. Übungsblatt “Numerische Methoden in der Chemie” SoSe 2017

10. Juli 2017

1) Berechnen Sie folgende Integrale.

a)

$$\int_0^{\infty} \int_{-\infty}^0 f(x, y) dx dy$$

mit $f(x, y) = xe^{-x^2+y+6}$ in den Grenzen $0 \leq x \leq \infty$ und $-\infty \leq y \leq 0$.

b)

$$\int_0^{2\pi} dx \int_1^2 dy f(x, y)$$

mit $f(x, y) = \frac{\sin(\frac{x}{2})}{y^3}$ in den Grenzen $0 \leq x \leq 2\pi$ und

$1 \leq y \leq 2$. Bestimmen Sie zusätzlich den Mittelwert der Funktion im betrachteten Bereich.

2) Ein Teilchen wird in einen zweidimensionalen, quadratischen Kasten mit der Kantenlänge $L = \pi$ gesperrt. Innerhalb des Kastens ist die Wahrscheinlichkeit, es an dem Ort (x, y) anzutreffen $p(x, y) = \frac{4}{L^2} \sin^2(x) \sin^2(2y)$, außerhalb des Kastens ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen anzutreffen, gleich Null. Berechnen Sie den sogenannten Erwartungswert der Größe $x \cdot y$ des Teilchens, indem Sie das Integral

$$\mathbb{E}(xy) = \int_0^L \int_0^L p(x, y) \cdot x \cdot y dx dy$$

bestimmen. Hinweis: $\int \sin^2 x dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin 2x}{4} + C$

- 3) Bestimmen Sie die Fläche des Bereiches, der innerhalb von $r = 3 + 2 \sin \theta$ und außerhalb von $r = 2$ liegt.

