FU Berlin: WiSe 2019/20 (Mathematik 2, Weber)

Übungszettel Nr. 11, Abgabe 21.01.2020 um 8:00 Uhr

Lernziele: Koordinatentransformation; Oberflächen- und Kurvenintegrale

Aufgabe 1: (Transformationsformel, mittlerer Atomabstand eines Elektrons)

Wir wollen den mittleren Atomabstand A eines Elektrons berechnen. Die Wellenfunktion des Elektrons sei: $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-|x|/a}$ (a ist der erste Bohrsche Radius und x ein dreidimensionaler Vektor $x = (x_1, x_2, x_3)$). Die "Wahrscheinlichkeit", ein Elektron am Ort x anzutreffen, beträgt demnach $\psi^*\psi$, also $\frac{1}{\pi a^3} e^{-2|x|/a}$. Um den Mittelwert des Abstands $r = |x|$ zu bestimmen, müssen wir also folgendes Integral rechnen:

$$A = \int_{\mathbb{R}^3} |x| \frac{1}{\pi a^3} e^{-2|x|/a}\, dx = \frac{1}{\pi a^3} \int_{\mathbb{R}^3} |x| e^{-2|x|/a}\, dx.$$

a) Um das Bereichsintegral gut rechnen zu können, führen wir eine Koordinatentransformation in Kugelkoordinaten durch. Die allgemeine Transformationsformel lautet:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2, x_3)\, dx_1 dx_2 dx_3 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} f(r, \vartheta, \varphi) \left| \frac{d(x_1, x_2, x_3)}{d(r, \vartheta, \varphi)} \right| dr\, d\vartheta\, d\varphi$$

Zeigen Sie (insbesondere durch Ausrechnen der Determinante der Jacobi-Matrix), dass sich damit das obige Integral A schreiben lässt als:

$$A = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} r e^{-2r/a}\, r^2 \sin(\vartheta)\, dr\, d\vartheta\, d\varphi\ .$$

Hinweis: Mit einer solchen Berechnung kann man auch die folgenden Transformationsformeln für die Umrechnung von kartesischen Koordinaten auf verschiedene gebräuchliche Koordinatensysteme herleiten:

Polarkoordinaten: $x = r\cos(\varphi), y = r\sin(\varphi),\ dx\, dy = r\, dr\, d\varphi$

Zylinderkoordinaten: $x = \varrho\cos(\varphi), y = \varrho\sin(\varphi),\ z = z,\ dx\, dy\, dz = \varrho\, d\varrho\, d\varphi\, dz$

Kugelkoordinaten: $x = r\sin(\vartheta)\cos(\varphi), y = r\sin(\vartheta)\sin(\varphi)$

$z = r\cos(\vartheta),\ dx\, dy\, dz = r^2 \sin(\vartheta)\, dr\, d\vartheta\, d\varphi$

b) Berechnen Sie das Integral aus Teilaufgabe a). Wählen Sie dazu eine schlaue Reihenfolge der Integrationsvariablen $dr\, d\vartheta\, d\varphi$.

Aufgabe 2: (Berechnung einer Oberfläche)

Die allgemeine Formel zur Berechnung einer zweidimensionalen Oberfläche O über einem Bereich B (in den Variablen x und y) führt zu folgendem Bereichsintegral:

$$O = \int_B \sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}\, d(x, y),$$

wobei f_x und f_y die entsprechenden partiellen Ableitungen von $f(x, y)$ sind.

Sei nun B ein Kreis um den Ursprung mit Radius a und $f(x, y) = \sqrt{a^2 - (x^2 + y^2)}$.

a) Berechnen Sie die partiellen Ableitungen von f. Hinweis: Kettenregel und $\sqrt{z} = z^{1/2}$.

b) Berechnen Sie die Oberfläche gemäß obiger Formel. Hinweis: Die Lösung wird wesentlich einfacher, wenn man das Integral auf Polarkoordinaten transformiert (siehe Aufgabe 1, Hinweis). Hierin gilt: $r^2 = x^2 + y^2$. Die Polarkoordinaten laufen in den Intervallgrenzen: $r = 0..a$, $\varphi = 0..2\pi$. Danach muss man noch Substitution $u = a^2 - r^2$ verwenden.

c) Machen Sie sich geometrisch klar, dass Sie im Teil b) die Oberfläche einer Halbkugel gerechnet haben!

Viel Erfolg!