

Theoretische Physik I

Mathematische Grundlagen

[http://www.tu-chemnitz.de/physik/THUS/
de/lehre/MM2_WS1415.php](http://www.tu-chemnitz.de/physik/THUS/de/lehre/MM2_WS1415.php)

Dr. P. Cain

cain@physik.tu-chemnitz.de
Raum 2/P310, Telefon 531-33144

F. Teichert

fabian.teichert@physik.tu-chemnitz.de
Raum 2/W449, Telefon 531-32314

Übung 24 (05.02.2015)

– Arbeiten mit Mathematica –

- 24/1 Lösen Sie die ausgewählten Aufgaben der vorangegangenen Übungsblätter mit Mathematica. Verwenden Sie möglichst bereits implementierte Funktionen. Definieren Sie gegebenenfalls neue Funktionen.
- a) Lösen Sie die Aufgaben 13/2 und 13/3.
 - b) Lösen Sie die Aufgaben 13/4, 14/1 und 14/3.
 - c) Stellen Sie die Isoflächen aus 15/2 und 15/3 dar.
 - d) Lösen Sie die Aufgabe 16/2.
 - e) Bestimmen Sie die Bogenlänge aus 19/3.
 - f) Plotten Sie die Bahnkurven aus 19/3 und 21/1. Zeichnen Sie jeweils das begleitende Dreibein an ausgewählten Punkten ein.
 - g) Lösen Sie die Arbeitsintegrale aus 22/1, 22/2 und 22/3.
 - h) Stellen Sie die Kraftfelder aus 22/4 graphisch dar.
 - i) Berechnen Sie die Ausdrücke aus 23/1.
- 24/2 Für das Wasserstoffatom H kann man analytisch die Wellenfunktionen und die Orbitale des Elektrons berechnen. Für die als 2p-Orbital bezeichnete Wellenfunktion ergibt sich in Kugelkoordinaten

$$p_x \propto e^{-r} \sin \vartheta \cos \varphi \quad p_y \propto e^{-r} \sin \vartheta \sin \varphi \quad p_z \propto e^{-r} \cos \vartheta$$

- a) Stellen Sie die Isoflächen der Wellenfunktion graphisch dar.
- b) Das Wasserstoffmolekül-Ion H_2^+ lässt sich analytisch nicht mehr exakt behandeln. Ein Ansatz für die Behandlung des Problems ist die LCAO-Näherung (LCAO: *linear combination of atomic orbitals*), bei dem die Atomorbitale linear miteinander kombiniert werden. Die Beeinflussung eines Orbitals durch ein anderes Atom wird dabei vernachlässigt. Stellen Sie die LCAO-Orbitale graphisch dar.