

Theoretische Physik I

Mathematische Grundlagen

http://www.tu-chemnitz.de/physik/THUS/lehre/MM2_SS13.php

Dr. P. Cain

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

F. Günther

florian.guenther@s2008.tu-chemnitz.de
Raum 2/P312, Telefon 531-32334

Übung 25(18.07.2013)

–Arbeiten mit Mathematica–

- 25/1 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 14/2, 14/3 und 15/1.
 - b) Stellen Sie die Flächen aus den Aufgaben 16/3 und 23/3 dar.
 - c) Wählen Sie sich einen Vektor aus Aufgabe 16/5 und stellen Sie die Komponenten der verschiedenen Koordinatensysteme dar.
 - d) Plotten Sie die Bahnkurven der Aufgaben 19/2, 19/3, 20/3, 22/2 und 22/3. Zeichnen Sie jeweils das begleitende Dreibein an ausgewählten Punkten mit ein.
 - e) Lösen Sie die Integrale zur Bestimmung der Bogenlängen der Aufgaben 21/1a), 22/3d und 23/1b) sowie die Arbeitsintegrale aus 22/1, 22/2, 22/2 und 22/3e).
 - f) Stellen Sie die Kraftfelder aus 23/2 graphisch dar. Plotten Sie für die konservativen Felder auch die Niveauflächen des Potentials.
 - g) Berechnen Sie die Ausdrücke aus 24/1.
- 25/2 Für das Wasserstoffatom H kann man analytisch die Wellenfunktionen und die Orbitale des Elektrons berechnen. Für die als 2p-Orbitale bezeichneten Wellenfunktion ergibt sich in Kugelkoordinaten

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

- a) Stellen Sie die Isoflächen der Wellenfunktionen graphisch dar.
- b) Das Wasserstoffmolekülion 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.