

# Theoretische Physik I

## Mathematische Grundlagen

[http://www.tu-chemnitz.de/physik/THUS/  
lehre/MM2\\_SS14.php](http://www.tu-chemnitz.de/physik/THUS/lehre/MM2_SS14.php)

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

**F. Günther**  
florian.guenther@s2008.tu-chemnitz.de

## Übung 22

–Arbeiten mit Mathematica–

22 /1 Lösen Sie die ausgewählten Aufgaben der vorangegangenen Übungsblätter mit Mathematica. Verwenden Sie möglichst bereits implementierte Funktionen. Definieren Sie gegebenen falls neue Funktionen.

- a) Lösen Sie die Aufgaben 11/2, 11/3 und 12/1.
- b) Stellen Sie die Isoflächen aus den Aufgaben 13/3 und 13/4 dar.
- c) Wählen Sie sich einen Vektor aus Aufgabe 14/3 und stellen Sie die Komponenten der verschiedenen Koordinatensysteme dar.
- d) Plotten Sie die Bahnkurven der Aufgaben 17/3, 17/4, 18/2 und 19/1. Zeichnen Sie jeweils das begleitende Dreibein an ausgewählten Punkten mit ein.
- e) Lösen Sie die Integrale zur Bestimmung der Bogenlängen der Aufgaben 17/3, 18/2 und 19/1 sowie die Arbeitsintegrale aus 20/1, 20/2 und 20/3.
- f) Stellen Sie die Kraftfelder aus 20/4 graphisch dar. Plotten Sie für die konservativen Felder auch die Niveaumassen des Potentials.
- g) Berechnen Sie die Ausdrücke aus 21/1.

22 /2 Für das Wasserstoffatom H kann man analytisch die Wellenfunktionen und die Orbitale des Elektrons berechnen. Für die als 2p-Orbitale bezeichneten Wellenfunktionen 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 Atombahnwellenfunktionen linear miteinander kombiniert werden. Die Beeinflussung eines Orbitals durch ein anderes Atom wird dabei vernachlässigt. Stellen Sie die LCAO-Orbitale graphisch dar.