

Übungen zur Vorlesung Mathematik für Chemiker 2

Lösungen

Aufgabe 1

(a)

$$\begin{array}{cc|ccc} & & 1 & 3 & 5 \\ & & 2 & 4 & 6 \\ \hline 6 & 3 & 12 & 30 & 48 \\ 5 & 2 & 9 & 23 & 37 \\ 4 & 1 & 6 & 16 & 26 \end{array}$$

(b)

$$\begin{array}{cc|ccc} & & -2 & -1 & 1 \\ & & -1 & 1 & 2 \\ \hline 1 & 2 & -4 & 1 & 5 \\ 3 & 2 & -8 & -1 & 7 \\ 1 & -1 & -1 & -2 & -1 \end{array}$$

(c)

$$\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{8} \exp(i\frac{3\pi}{4}) \\ 3 \exp(-i\frac{\pi}{2}) & \sqrt{2} \exp(i\frac{\pi}{4}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -2 + 2i \\ -3i & 1 + i \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{cc|cc} & & 1 + 2i & 1 + 3i \\ & & 3 - i & 2 + i \\ \hline 1 & -2 + 2i & 1 + 2i - 4 + 8i & 1 + 3i - 6 + 2i \\ -3i & 1 + i & 6 - 3i + 4 + 2i & 9 - 3i + 1 + 3i \end{array}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} -3 + 10i & -5 + 5i \\ 10 - i & 10 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 2

(a)

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A}^T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \neq \mathbf{A}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A} \text{ ist nicht symmetrisch,}$$

$$\mathbf{B}^T = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -\mathbf{B}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{B} \text{ ist antisymmetrisch, aber nicht symmetrisch,}$$

$$\mathbf{A}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \neq \mathbf{A}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A} \text{ ist nicht hermitesch,}$$

$$\mathbf{B}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{B}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{B} \text{ ist hermitesch,}$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \mathbf{E}_2,$$

$\Rightarrow \quad \mathbf{A}$ ist orthogonal und unitär,

$$\mathbf{B}^T \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\mathbf{E}_2 \neq \mathbf{E}_2,$$

$$\mathbf{B}^\dagger \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{E}_2,$$

$\Rightarrow \quad \mathbf{B}$ ist nicht orthogonal, aber unitär.

(b)

$$\mathbf{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i & i \\ -i & -i \end{pmatrix} \quad \mathbf{A}^T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B}^\dagger = \mathbf{B}$$

Aufgabe 3

$$\sigma_x \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow [\sigma_x, \sigma_y] &= \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x \\ &= \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = 2i\sigma_z \end{aligned}$$

Aufgabe 4

(a) Es existieren \mathbf{AB} und \mathbf{DB} .

$$\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i \cos \alpha - \sin \alpha & 0 & \cos \alpha + i \sin \alpha \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{DB} = \begin{pmatrix} \cos \alpha - \sin \alpha & -1 & \cos \alpha + \sin \alpha \end{pmatrix}$$

- (b) Weiter existieren die Produkte:
AC, BC, CD, DC, BB.

Aufgabe 5

$$\begin{aligned}
 A \text{ orthogonal} &\Leftrightarrow A^T A = \mathbb{I} \\
 A^T A &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & b \\ c & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & c \\ b & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+b^2 & b+c \\ b+c & 1+c^2 \end{pmatrix} = \mathbb{I} \\
 \Rightarrow \frac{1}{4}(1+b^2) &= 1 \Rightarrow b = \pm\sqrt{3} \\
 \Rightarrow \frac{1}{4}(1+c^2) &= 1 \Rightarrow c = \pm\sqrt{3} \\
 \Rightarrow b+c &= 0 \Rightarrow b = -c \\
 \Rightarrow b = \sqrt{3} &= -c \text{ oder } c = \sqrt{3} = -b \\
 \Rightarrow A &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix} \\
 \text{oder } A &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Aufgabe 6

Drehung um den Ursprung um den Winkel $\rho = \frac{2\pi}{3}$.

(a)

$$\begin{aligned}
 c_3 \mathbf{e}_1 &= c\mathbf{e}_1 + s\mathbf{e}_2 & c &= \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = -\frac{1}{2} \\
 & & \text{mit} & \\
 c_3 \mathbf{e}_1 &= -s\mathbf{e}_1 + c\mathbf{e}_2 & s &= \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \frac{\sqrt{3}}{2} \\
 \Rightarrow \text{Repräsentationsmatrix ist } \mathbb{C}_3 &= \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned}
 \mathbb{C}_3^2 &= \begin{pmatrix} c^2 - s^2 & -2cs \\ 2cs & c^2 - s^2 \end{pmatrix} \\
 c^2 - s^2 &= \cos^2\left(\frac{2\pi}{3}\right) - \sin^2\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \cos\left(\frac{4\pi}{3}\right) = \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = c \\
 cs &= \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \frac{1}{2} \sin\left(\frac{4\pi}{3}\right) = -\frac{1}{2} \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) = -\frac{1}{2}s \\
 \mathbb{C}_3^2 &= \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} = \mathbb{C}_3^T \\
 \mathbb{C}_3^T \mathbb{C}_3 &= \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c^2 + s^2 & 0 \\ 0 & c^2 + s^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 \mathbb{C}_3 &\text{ ist orthogonale Matrix (Drehung)}
 \end{aligned}$$

(c) Spiegelung an der x-Achse: $\sigma_1 \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_1$, $\sigma_1 \mathbf{e}_2 = -\mathbf{e}_2$.

$$\Rightarrow \sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Spiegelung an der Geraden vom Ursprung zum Punkt P_2 - anhand einer Skizze erkennt man:
 $\sigma_2 \mathbf{e}_1 = c \mathbf{e}_1 + (-s) \mathbf{e}_2$, $\sigma_2 \mathbf{e}_2 = (-s) \mathbf{e}_1 + (-c) \mathbf{e}_2$.

$$\Rightarrow \sigma_2 = \begin{pmatrix} c & -s \\ -s & -c \end{pmatrix}.$$

(d)

$$\sigma_1 \sigma_2 = \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} = \mathbb{C}_3$$

$$\sigma_2 \sigma_1 = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} = \mathbb{C}_3^2 \mathbb{C}_3^T$$

$$\sigma_2^2 = E_2$$