Prof. Dr. D. Egorova

SoSe 2013
Blatt 3
24.04–8.05.2013

Übungen zur Vorlesung Mathematik für Chemiker 2

Ankündigungen

Übungsblätter & Aktuelles: `http://theochem.pctc.uni-kiel.de/`
Vorlesungsskript Prof. Hartke: `http://ravel.pctc.uni-kiel.de/`

(*)-Aufgaben dienen als freiwillige Zusatz- bzw. Hausaufgaben (Korrektur auf Wunsch möglich) und können nach Vereinbarung mit den Assistenten in der Übung bzw. in der Zusatzübung besprochen werden.

Übungen

Lineare Algebra: Matritzen und Operatoren

1. Berechnen Sie

   (a) $\begin{pmatrix} 6 & 3 \\ 5 & 2 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 6 \end{pmatrix}.$

   (b) * $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 2 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$

   (c) $\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{8}\mathrm{e}^{3i\pi/4} \\ 3\mathrm{e}^{-i\pi/2} & \sqrt{2}\mathrm{e}^{i\pi/4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+2i & 1+3i \\ 3-i & 2+i \end{pmatrix}.$

2. Gegeben seien die Matrizen

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

   (a) Welche der Matrizen sind symmetrisch, hermitesch, orthogonal oder unitär?

   (b) Bestimmen Sie die folgenden Matrizen : $\mathbf{AB}, \mathbf{A}^T, \mathbf{B}^\dagger$

3. Zeigen Sie, dass die Pauli-Spinmatrizen $\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ und $\boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ die Kommutatorrelation $[\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y] = 2i\, \boldsymbol{\sigma}_z$ erfüllen.

4. Gegeben seien die Matrizen

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha \end{pmatrix} \quad ,$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{D} = (1, -1, 1) \quad .$$

   (a) Welche der Produkte **AA**, **AB**, **AD**, **BD**, **DB**, **DD** sind definiert?

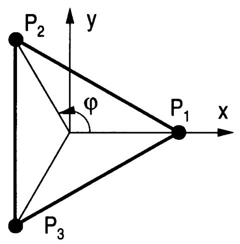
   (b) Welche weiteren Produkte zwischen den obigen Matrizen sind definiert?

   (c) * Berechnen Sie die definierten Produkte.

5. (*) Gegeben sei die Matrix $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & c \\ b & 1 \end{pmatrix}$. Bestimmen Sie $b, c \in \mathbb{R}$ so, dass die Spaltenvektoren von $\mathbf{A}$ ein Orthonormalsystem bilden.

6. Das NO_3 Molekül lässt sich durch folgende Operationen in der $\mathbb{R}^2$ Ebene auf sich selbst abbilden:

   C_3: Drehung um den Ursprung um den Winkel $\varphi = 2\pi/3$,
   σ_1: Spiegelung an der x-Achse,
   σ_2: Spiegelung an der Geraden vom Ursprung zum Punkt $\mathrm{P}_2 = C_3\mathbf{e}_1$.



   Diese bilden die Gruppe der Symmetrie-Operationen des Moleküls und definieren lineare Operatoren in $\mathbb{R}^2$.

   (a) Geben Sie die zur Standardbasis $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ des $\mathbb{R}^2$ gehörige Darstellungsmatrix $\mathbf{C}_3$ der linearen Abbildung C_3 an. Verwenden Sie dabei folgende Abkürzungen: $c := \cos(2\pi/3) = -1/2$, $s := \sin(2\pi/3) = \sqrt{3}/2$.

   (b) Berechnen Sie ${\mathbf{C}_3}^2$ und ${\mathbf{C}_3}^T\mathbf{C}_3$.

   (c) Geben Sie die zur Standardbasis des $\mathbb{R}^2$ gehörigen Darstellungsmatrizen $\boldsymbol{\sigma}_1$ und $\boldsymbol{\sigma}_2$ von σ_1 bzw. σ_2 an.

   (d) Berechnen Sie $\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1$ und ${\boldsymbol{\sigma}_2}^2$.