Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

ulm university universität ulm

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
David Mahlberg

Mathematik II für BC, MM und LA

Vorlesung: Mo 14-16, H3

Seminar: Mi 12-16, H7 (Biochemie), Mi 14-16, H1 (MolMed),

Fr 12-14, N24/252 (Lehramt)

Das Übungsblatt wird in den Seminaren ab 28.06.2019 als Präsenzübung bearbeitet

Die Übungsblätter können von `http://www.uni-ulm.de/nawi/nawi-theochemie/lehre/` heruntergeladen werden.

Übungsblatt 9

Aufgabe 1

Berechnen Sie den Kommutator $[A, B]$

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} 2 & 2 & -1 \\ 2 & -2 & 3 \\ 4 & -4 & 4 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{B} = \begin{pmatrix} -4 & -2 & 4 \\ 1 & 2 & 0 \\ 3 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 2

Die folgenden Matrizen seien gegeben:

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

(a) Berechnen Sie $\boldsymbol{C} = [\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}] = \boldsymbol{AB} - \boldsymbol{BA}$.
(b) Ist $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$ oder $\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA}$?
(c) Berechnen Sie $\boldsymbol{A}^2$, $\boldsymbol{B}^2$, und $(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B})(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B})$.

Aufgabe 3

Die folgenden Matrizen seien gegeben:

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

(a) Berechnen Sie $\boldsymbol{C} = [\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}] = \boldsymbol{AB} - \boldsymbol{BA}$.
(b) Ist $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$ oder $\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA}$?
(c) Berechnen Sie $\boldsymbol{A}^2$, $\boldsymbol{B}^2$, und $(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B})(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B})$.

Aufgabe 4

Die vier sp^3 Hybridorbitale $\vec{\phi}$ von z.B. Silizium, Diamant, oder den Alkane C_nH_{2n+2} können mittels linearer Superposition der s und p Orbitale $\vec{\psi}$ repräsentiert werden:

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = \vec{\phi} = \boldsymbol{A}\vec{\psi} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_s \\ \psi_{p_x} \\ \psi_{p_y} \\ \psi_{p_z} \end{pmatrix}$$

Die inverse Repräsentation ist $\vec{\psi} = \boldsymbol{A}^{-1}\vec{\phi}$. Zeigen Sie, dass in diesem speziellen Fall $\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^T$ (orthogonal) gilt.

Aufgabe 5

Berechnen Sie, wenn möglich, die Inversen der folgenden Matrizen:

a) $\begin{pmatrix} -2 & -3 & 1 \\ 7 & 17 & 3 \\ 1 & -1 & -3 \end{pmatrix}$ b) $\begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 & -2 \\ 1 & 4 & -1 & 1 \\ -2 & 4 & 1 & -1 \\ -6 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$