Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

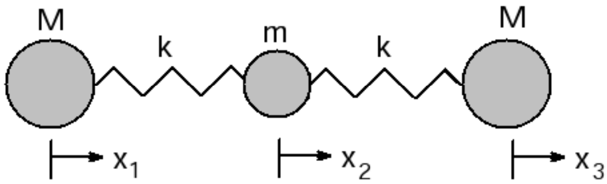
Prof. Dr. Gerhard Taubmann
Andreas Steinau

Mathematik für Chemie und Wirtschaftschemie
Fr 10:00-12:00 Uhr: N24/H16

Übungsblatt 15, Übung am 09. 02. 2018

Aufgabe 1: *CO_2-Molekül* **(3 Punkte)**

Gegeben ist das CO_2-Molekül:



Die Sauerstoffatome (Masse M) sind mit der Kopplungskonstanten k elastisch an das Kohlenstoffatom (Masse m) gebunden. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass nur direkt benachbarte Massen miteinander koppeln und dass Bewegung nur in einer Dimension möglich ist.
a) Stellen Sie Differentialgleichungen für x_1, x_2 und x_3 auf. Ergebnis:

$$\begin{pmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \\ \ddot{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k}{M} & -\frac{k}{M} & 0 \\ -\frac{k}{m} & \frac{2k}{m} & -\frac{k}{m} \\ 0 & -\frac{k}{M} & \frac{k}{M} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

b) Berechnen Sie das charakteristische Polynom und die Eigenwerte. Bestimmen Sie die normierten Eigenvektoren.

Aufgabe 2: *Diagonalisieren einer Matrix* **(2 Punkte)**

Gegeben ist die Matrix A. Berechnen Sie eine orthogonale Matrix P, für die P^TAP diagonal ist.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}$$

Hinweis: Die Matrix P besteht aus den normierten Eigenvektoren der Matrix A (d.h. jede Spalte der Matrix P entspricht einem Eigenvektor). Diese sind orthogonal, da es sich bei A um eine symmetrische Matrix handelt. Zeigen Sie dass P^TAP diagonal ist. Warum ist das so?

Aufgabe 3: *Matrix-Diagonalisierung* **(2 Punkte)**

Es sei

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Geben Sie eine (reelle) orthogonale Matrix P an, für die P^TAP diagonal ist.

Aufgabe 4: *Gram-Schmidt-Orthogonalisierung* **(2 Punkte)**

Gegeben sind folgende Vektoren des $\mathbb{R}^4$:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Orthonormalisieren Sie $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ mit Hilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens. D.h. Sie setzen zunächst $\vec{b}_1 = \vec{a}_1$. Danach müssen Sie eine Linearkombination aus $\vec{b}_1$ und $\vec{a}_2$ (diese spannenen eine Ebene auf) benutzen um einen Vektor $\vec{b}_2$ zu bestimmen der orthongonal zu $\vec{b}_1$ ist. Analog geht man dann für $\vec{b}_3$ vor. Dieser muss dementsprechend orthogonal zu $\vec{b}_1$ und $\vec{b}_2$ sein.