



Mathematik für Chemiker II

Übungsblatt Nr. 7 Fr. 15.06.2007 ab 11:00

Die Übungsblätter können von <http://www.uni-ulm.de/theochem/lehre> heruntergeladen werden.

Aufgabe 1: Matrixmultiplikation III

[4pt]

Die folgenden Matrizen seien gegeben:

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

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

Aufgabe 2: Inverse Matrix I: sp^3 Hybridorbital

[3pt]

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

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

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

Aufgabe 3: Inverse Matrix II

[3pt]

Berechnen Sie die inverse Matrix zu den folgenden Matrizen:

a) $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$ b) $\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ c) $\begin{pmatrix} \cos^2 \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -1 \end{pmatrix}$

Aufgabe 4: Wiederholung zur 1. Klausur: Differentialgleichung

[3pt]

Lösen Sie die folgende Differentialgleichung:

$$u''(x) + k^2 u(x) = 2 \sin^2 \frac{kx}{2}$$

Hinweis: $\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x$