



Mathematische Methoden II für Biochemie und Molekulare Medizin
Mi 13-15 N25/568 (BioChem), Mi 14-16 N24/131 (MolMed)
Übungsblatt 9, verteilt 20.6.2007, Übung 27.6.2007

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

Aufgabe 1: Matrixmultiplikation

Berechnen Sie die folgenden Matrixprodukte:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad & \begin{pmatrix} 11 & 12 & 13 \\ 21 & 22 & 23 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \pi & 0 \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{(b)} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \pi & 0 \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 11 & 12 & 13 \\ 21 & 22 & 23 \end{pmatrix} \\ \text{(c)} \quad & \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}^3 \quad \left[= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \right] \\ \text{(d)} \quad & \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \text{(e)} \quad \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}^2 \end{aligned}$$

Aufgabe 2: Matrixmultiplikation

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

Aufgabe 3: Inverse Matrix: sp^3 Hybridorbital

Die vier sp^3 Hybridorbitale $\vec{\phi}$ von z.B. Silicium, Diamant, oder den Alkanen $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ 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 Repräsentation ist $\vec{\psi} = \mathbf{A}^{-1} \vec{\phi}$. Zeigen Sie, dass $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$ (orthogonal) in diesem speziellen Fall gilt.