Peter Zeiner
Fakultät für Mathematik

Bielefeld, 1.6.2016

Sommersemester 2016

# Mathematik II für Chemie

## Übungsblatt 8

**Aufgabe 36:** (a) Ergänzen Sie die fehlenden Einträge so, dass die folgenden Matrizen symmetrisch werden:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \star & 4-i \\ i-2 & 1 & \star \\ \star & 2 & -3 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \begin{pmatrix} \star & 1 & 2 \\ \star & 1-i & 3i-1 \\ \star & \star & 3 \end{pmatrix}.$$

(b) Ergänzen Sie die fehlenden Einträge so, dass die obigen Matrizen hermitesch werden, falls dies möglich ist. **(2+2 Punkte)**

**Aufgabe 37:** Wie muss man die reellen Zahlen $a, b, c$ wählen, damit

$$A = \begin{pmatrix} \frac{2}{c} & a \\ -\frac{1}{c} & b \end{pmatrix}$$

eine reelle orthogonale Matrix wird? **(3 Punkte)**

**Aufgabe 38:** Rechnen Sie nach, dass

$$A = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix}$$

tatsächlich eine orthogonale Matrix ist. **(2 Punkte)**

**Aufgabe 39:** Sei $A$ eine Diagonalmatrix:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

(a) Welche Bedingungen müssen die $a_{ii} \in \mathbb{C}$ erfüllen, damit $A$ symmetrisch ist? Braucht man überhaupt Bedingungen?

(b) Unter welchen Bedingungen für die $a_{ii} \in \mathbb{C}$ ist $A$ hermitesch?

(c) Für welche Werte von $a_{ii} \in \mathbb{C}$ ist $A$ orthogonal?

(d) Welche Bedingungen müssen die $a_{ii} \in \mathbb{C}$ erfüllen, damit $A$ unitär ist?

**(1+1+1+1 Punkte)**

(bitte wenden)

**Aufgabe 40:** Wir betrachten den Vektorraum aller beliebig oft stetig differenzierbaren Funktionen $f$ auf dem Intervall $[a,b]$, die zusätzlich die Eigenschaft $f(a) = f(b) = 0$ erfüllen. Das innere Produkt sei definiert als

$$\langle u, v\rangle := \int_a^b \bar{u}(x)v(x)\,dx.$$

$H$ sei definiert durch $H(u) = -\frac{1}{2}u''$.

(a) Für hermitesche Matrizen $A$ gilt $\langle u, Av\rangle = \langle Au, v\rangle$. Zeigen Sie, dass analog für die obige lineare Abbildung $H$ die Gleichung $\langle u, H(v)\rangle = \langle H(u), v\rangle$ gilt.

*Hinweis:* Sie müssen also zeigen, dass hier

$$-\frac{1}{2}\int_a^b \bar{u}(x)v''(x)\,dx = -\frac{1}{2}\int_a^b \bar{u}''(x)v(x)\,dx$$

gilt.

(b) Zeigen Sie, dass $\langle u, H(u)\rangle \geq 0$ gilt. (Die kinetische Energie ist positiv.)

**(2+1 Punkte)**

*Bemerkung:* Die lineare Abbildung $H(u) = -\frac{1}{2}u''$ beschreibt in der Quantenmechanik die kinetische Energie eines Teilchens in einer Dimension. Die Bedingung $f(a) = f(b) = 0$ entspricht einem Teilchen in einem unendlich tiefen Kastenpotential. Der Einfachheit halber haben wir hier aber einen etwas vereinfachten Funktionenraum betrachtet.

**Abgabe bis zum 8.6.2016!**