Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Blatt 3

Übungen zur Vorlesung
Mathematik II für Studierende der Chemie und Biochemie

1. Betrachten Sie den Vektorraum $\mathbb{C}^3$ mit dem Skalarprodukt $\langle \mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle$ und der Norm $||\mathbf{x}|| = \sqrt{\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle}$. Gegeben seien $\mathbf{a_1}, \mathbf{a_2}, \mathbf{a_3}, \mathbf{a_4} \in \mathbb{C}^3$ mit deren Komponentendarstellung in einer Orthonormalbasis:
$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} \text{ und } \mathbf{a}_4 = \begin{pmatrix} 2\mathrm{i} \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}.$$
   (a) Bestimmen Sie für jeden dieser Vektoren den Betrag und normieren Sie den Vektor.
   (b) Berechnen Sie den Winkel φ_{12} zwischen den Vektoren $\mathbf{a}_1$ und $\mathbf{a}_2$.

2. Ein Vektor $\mathbf{a}$ kann in seine bezüglich des Vektors $\mathbf{b} \neq 0$ parallelen $\mathbf{a}_{\|}$ und orthogonalen Teil $\mathbf{a}_{\perp}$ gemäß
$$\mathbf{a}_{\|} = \lambda \mathbf{b}, \quad (\lambda \in \mathbb{C}), \qquad \mathbf{a}_{\perp} = \mathbf{a} - \mathbf{a}_{\|}$$
   zerlegt werden.
   (a) Bestimmen Sie den Wert von λ aus der Forderung, das $\mathbf{a}_{\perp}$ orthogonal zu $\mathbf{b}$ ist.
   (b) Betrachten Sie nun das konkrete Beispiel $\mathbf{a} = (-2, 2, 2)^T$ und $\mathbf{b} = (1, 2, 2)^T$. Bestimmen sie hierfür $\mathbf{a}_{\perp}$ und $\mathbf{a}_{\|}$.

3. Gegeben seien die linear unabhängigen Vektoren $\mathbf{v_1}, \mathbf{v_2}$ und $\mathbf{v_3} \in \mathbb{C}^4$ mit deren Komponentendarstellung in einer Orthonormalbasis:
$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und } \mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$
   Bestimmen Sie aus $\mathbf{v_1}, \mathbf{v_2}$ und $\mathbf{v_3}$ mittels des Gram–Schmidtschen Orthonormierungsverfahrens eine Orthonormalbasis für den Untervektorraum, der von $\mathbf{v_1}, \mathbf{v_2}$ und $\mathbf{v_3}$ aufgespannt wird.

4. Im Skript werden 4 Bedingungen an die Norm gestellt:

   a) $\|\mathbf{v}\| \geq 0$

   b) $\|\mathbf{v}\| = 0 \iff \mathbf{v} = \mathbf{0}$

   c) $\|\alpha\mathbf{v}\| = |\alpha|\|\mathbf{v}\|$

   d) $\|\mathbf{v} + \mathbf{w}\| \leq \|\mathbf{v}\| + \|\mathbf{w}\|$,

   wobei $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{K}^n, \alpha \in \mathbb{K}$ und $\mathbb{K}$ der zugrundeliegende Körper ist. Zeigen Sie, dass Axiom a) direkt aus den anderen Axiomen folgt. Tipp: $\mathbf{v} - \mathbf{v} = \mathbf{0}$.

Zusatzaufgaben:

5. Zeigen Sie, dass für beliebige Vektoren $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ und $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^3$ gilt:
   $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \langle \mathbf{a}|\mathbf{c} \rangle \, \mathbf{b} - \langle \mathbf{a}|\mathbf{b} \rangle \, \mathbf{c}$.

6. Im Rahmen der Hückel-Theorie lassen sich die vier π-Molekülorbitale des Cyclobutadiens durch vier orthonormale Vektoren $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^4$ darstellen. Deren k-te Komponente beschreibt den Beitrag des p_z-Orbitals am k-ten C-Atom zum Molekülorbital. Drei dieser Vektoren seien gegeben durch

$$\mathbf{x}_1 = N_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_2 = N_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_3 = N_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

   (a) Bestimmen Sie die Konstanten N_i so, dass die Vektoren $\mathbf{x}_i$ euklidisch normiert sind.

   (b) Zeigen Sie, dass die Vektoren $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ und $\mathbf{x}_3$ orthogonal sind.

   (c) Welche Bedeutung kommt den Komponenten zu?

   (d) Bestimmen Sie einen vierten Vektor $\mathbf{x}_4$, so dass $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4\}$ eine orthonormale Basis ist.

   (Hinweis: Sie können Teile des Gram–Schmidtschen Orthonormierungsverfahren und den Vektor $\mathbf{y}_4 = (1, 0, 0, 0)^T$ verwenden.)