Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Übungen zur Vorlesung
Mathematik II für Studierende der Chemie und Biochemie

1. Die Menge der Funktionen

$$V = \{f : [-\pi, \pi] \to \mathbb{C}; f(x) = c_1 + c_2 \sin(x) + c_3 \cos(x); c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{C}\}.$$

   bildet mit der punktweisen Addition von Funktionen und der punktweisen skalaren Multiplikation einen Vektorraum. Durch $\langle f|g\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}x f(x)^* g(x)$ ist ein Skalarprodukt auf V gegeben. Zeigen Sie, dass die Funktionen $g_1, g_2, g_3 \in V$ mit

$$g_1(x) = 1, \quad g_2(x) = (\sin(x) - \mathrm{i}\cos(x)), \quad g_3(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}, \quad x \in [-\pi, \pi]$$

   orthogonal sind und normieren Sie diese.

2. Gegeben sei die Menge $\mathbb{C}[X]_{\leq n}$ der komplexen Polynome vom Grad $\leq n$.

   (a) Zeigen Sie, dass $\langle \mathbf{p}|\mathbf{q}\rangle := \displaystyle\int_{-1}^{1} p(x)^*\, q(x)\, dx$ für alle $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{C}[X]_{\leq n}$ die Eigenschaften eines Skalarproduktes besitzt.

   (b) Für $n = 2$ bilden die Funktionen $\{1, x, x^2\}$ eine Basis. Erzeugen Sie daraus mittels Gram–Schmidt Orthonormierung unter Verwendung des Skalarproduktes aus a) eine orthonormale Basis.

3. Berechnen Sie folgende Determinanten, wobei $a, b, c, d, e, f, g \in \mathbb{C}$:

   (a) $\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 4 & 0 & 4 \\ 0 & 2 & 0 & 3 \\ 10 & 2 & 5 & 2 \end{vmatrix}$

   (b) $\begin{vmatrix} 1 & a & (b+c) \\ 1 & b & (c+a) \\ 1 & c & (a+b) \end{vmatrix}$

   (c) $\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g \\ a & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & b & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & c & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & d & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f & 1 \end{vmatrix}$

4. Gegeben seien die Vektoren $\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$.

   Wie groß ist die Fläche F des von $\boldsymbol{a}$ und $\boldsymbol{b}$ aufgespannten Parallelogramms?

Zusatzaufgaben:

5. Welche der folgenden Determinanten sind gleich Null?

   (a) $\det(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$, $\quad \mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 6 \\ -2 \end{pmatrix}$.

   (b) $\det(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$, $\quad \mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} -4 \\ -2 \end{pmatrix}$.

   (c) $\det(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3)$, $\quad \mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $\mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$.

6. Sei $\mathcal{L}^2_{[0,2\pi]}$ der $\mathbb{C}$–Vektorraum der Funktionen $f : [0, 2\pi] \to \mathbb{C}$, für die gilt, dass

   $$\int_0^{2\pi} |f\,(x)\,|^2 \mathrm{d}x < \infty,$$

   also dass sie *quadratintegrabel* sind. Auf diesem Raum ist

   $$\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle := \int_0^{2\pi} f(t)^* \, g(t) \, \mathrm{d}t$$

   ein Skalarprodukt. Sei $l \in \mathbb{N}$ und für $m \in \{-l, -l+1, \ldots, l-1, l\}$ sei

   $$f_m(\varphi) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}.$$

   Zeigen Sie, dass die f_m orthonormal zueinander sind.