

Übungsblatt 7 zur "Theoretischen Chemie 1"

Molekülsymmetrie und Gruppentheorie

SS 2014 Prof. H. Köppel

Abgabetermin Dienstag 10.06.2014 (11:00)

Aufgabe 1

Bestimmen Sie die Integrale der folgenden zweidimensionalen Funktionen in den angegebenen Grenzen. Nutzen Sie dazu die Symmetrie der Funktionen aus.

$$\int_{-a}^a \int_{-b}^b xy^2 dx dy$$

$$\int_{-a}^a \int_{-b}^b e^{-x^2} \sin x dx dy$$

$$\int_{-a}^a \int_{-b}^b x \sin y dx dy$$

(3P)

Aufgabe 2

Berechnen Sie die Eigenwerte der Drehmatrix, welche die Drehung um die z-Achse um einen allgemeinen Winkel α beschreibt.

(3P)

Aufgabe 3

Gegeben ist eine Abbildungsmatrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- Sind die Zeilenvektoren von \mathbf{A} linear abhängig oder unabhängig (Begründung)?
- Berechnen Sie alle Eigenwerte dieser Matrix und den zum reellen Eigenwert gehörenden normierten Eigenvektor.

Bitte wenden.

- c) Überprüfen Sie, ob A eine Orthogonalmatrix ist und berechnen Sie deren Determinante.
- d) Die Matrix A ist ein Spezialfall der allgemeinen Drehmatrix mit beliebigem Drehwinkel. Finden Sie den zugehörigen Drehwinkel φ von A , indem Sie einen Vektor senkrecht zur Drehachse konstruieren und auf diesen die Drehmatrix anwenden. Der sich ergebende Winkel zwischen dem ursprünglichen und gedrehten Vektor ist der gesuchte Drehwinkel φ . **Hinweis:** Die Drehachse ist Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_1 = 1$.
- e) Wie geht der in d) ermittelte Drehwinkel φ in die Ausdrücke für die anderen beiden Eigenwerte λ_2 und λ_3 ein? (11P)
-