Exercices pour Maple. TD3

G. Marcou, P. Jost

5 octobre 2009

Exercices portant sur la manipulation des vecteurs et des matrices. Les paquets `LinearAlgebra` et `VectorCalculus` seront d'une aide précieuse.

Exercice 1

Ecrire la matrice de rotation autour de Oz d'angle θ.

Calculer les valeurs propres, les vecteurs propres et diagonaliser cette matrice.

Interprétez géométriquement les valeurs propres de cette matrice.

Exercice 2

Ecrire les matrices de rotation $C_{3,1}$ et $C_{3,2}$ autour de Oz.

Montrez que le produit $C_{3,1}.C_{3,2}$ correspond à l'identité.

Calculer les traces de ces matrices.

Généraliser aux axes d'ordre n ($n < 15$).

Exercice 3

Trouvez une relation vectorielle permettant de déterminer les coordonnées des sommets d'un tétraèdre régulier connaissant les coordonnées de son centre et de deux de ses sommets.

Pour simplifier, choisir le centre $O = (0,0,0)$*, le sommet* $S_1 = (-1,-1,-1)$*, le sommet* $S_2 = (1,1,-1)$*.*

Exercice 4

Utilisez le résultats précédents pour calculer les coordonnées des atomes de carbone d'une chaîne de polyéthylène. (la longueur des liaisons C-C est de 1.56 Å et celle des liaisons C-H est de 0.96 Å.

Exercice 5

Les dimensions de la maille cristalline de la glycine sont de $\|\vec{e}_1\| = 5.1$ Å, $\|\vec{e}_2\| = 11.96$ Å et $\|\vec{e}_3\| = 5.45$ Å2. Les angles $(\vec{e}_2, \vec{e}_3)$ et $(\vec{e}_2, \vec{e}_1)$ valent 90°. L'angle $(\vec{e}_1, \vec{e}_3)$ est de $111°38'$. Dans ce repère non orthonormé, les coordonnées des différents atomes sont :

$$\begin{array}{lll} N : (0.8, 0.41, 0.245) & C : (0.565, 0.365, 0.28) & C' : (0.575, 0.38, 0.56) \\ O : (0.36, 0.36, 0.61) & O' : (0.805, 0.41, 0.74) & \end{array}$$

Calculez les longueurs des liaisons NC, CC', CO et CO'.

Exercice 6

Les vecteurs suivants interviennent dans le calcul des orbitales moléculaires du benzène. Ils représentent les combinaisons linéaires d'orbitales atomiques.

$$\begin{array}{lll} \phi_1 = (1, 1, 1, 1, 1, 1) & \phi_2 = (2, 1, -1, -2, -1, 1) & \phi_3' = (1, 2, 1, -1, -2, -1) \\ \phi_4 = (2, -1, -1, 2, -1, -1) & \phi_5' = (-1, 2, -1, -1, 2, -1) & \phi_6 = (1, -1, 1, -1, 1, -1) \end{array}$$

Montrez que ϕ_1 et ϕ_6 sont orthogonaux à tous les autres vecteurs.

Montrez que ϕ_2 et ϕ_3' sont orthognaux à tous les autres vecteurs mais pas entre eux.

Construire un vecteur ϕ_3 combinaison linéaire de ϕ_2 et ϕ_3' et perpendiculaire à ϕ_2.

Construire un vecteur ϕ_5 combinaison linéaire de ϕ_4 et ϕ'_5 et perpendiculaire à ϕ_4.

Normalisez ces vecteurs. Démontrez que l'ensemble des vecteurs $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4, \phi_5, \phi_6$ base obtenue est orthonormale.

Exercice 7

Les matrices de Pauli sont définis comme suit :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Etudiez la structure de groupe de ces matrices.