Lösung des Übungsblattes 1 zur Vorlesung Theoretische Chemie I
WS 2018/19

Ebene Wellen

1. Die komplexe Funktion lautet:

$$f(x,t) = Ae^{\mathrm{i}(\omega t - kx)} \tag{1}$$

a) Die Dispersionsrelation $\omega = v_{\mathrm{ph}} k \implies$ Phasengeschwindigkeit $v_{\mathrm{ph}} = \frac{\omega}{k}$

Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{\frac{\omega}{v_{\mathrm{ph}}}} = \frac{2\pi v_{\mathrm{ph}}}{\omega}$

Frequenz $\nu = \frac{v_{\mathrm{ph}}}{\lambda} = \frac{v_{\mathrm{ph}}}{\frac{2\pi v_{\mathrm{ph}}}{\omega}} = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{v_{\mathrm{ph}} k}{2\pi}$

Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$

Periodendauer $T = \frac{1}{\nu} = \frac{2\pi}{\omega}$

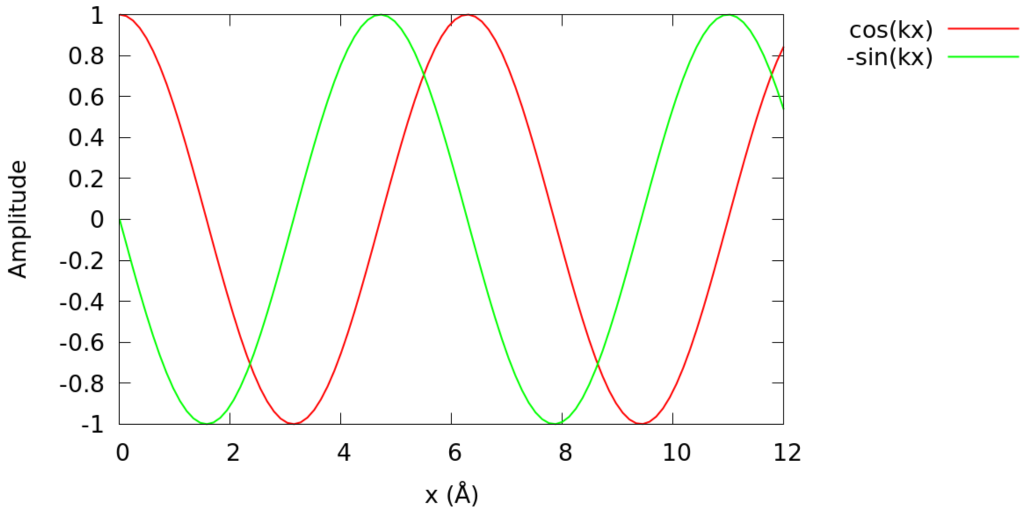
b)

$$\begin{aligned} |f(x,t)|^2 &= |A|^2 e^{\mathrm{i}(\omega t - kx)} e^{\mathrm{i}(kx - \omega t)} \\ &= |A|^2 e^{\mathrm{i}(\omega t - kx + kx - \omega t)} \\ &= |A|^2 e^{\mathrm{i}\cdot 0} = |A|^2 e^0 = |A|^2 \end{aligned} \tag{2}$$

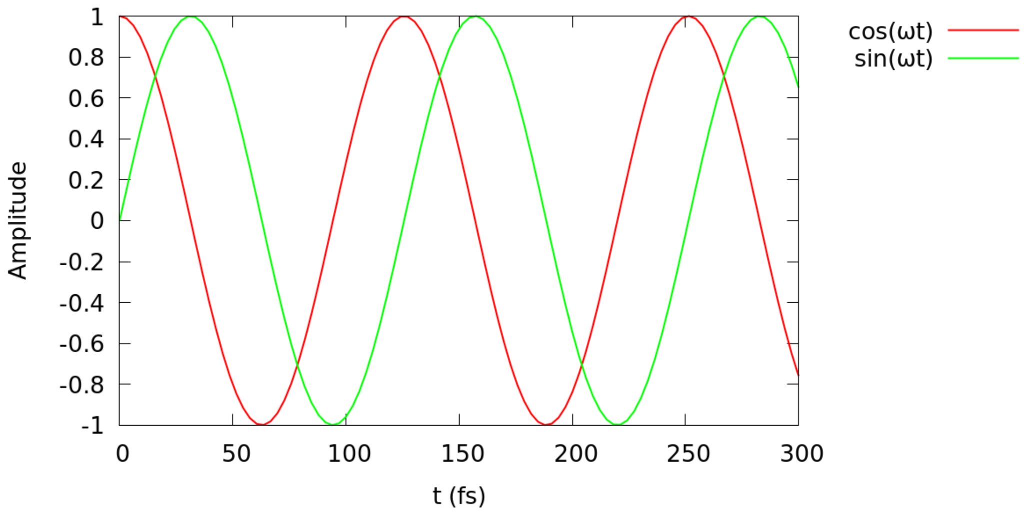
Die Intensität hängt nicht von x und/oder t ab.

c) $k = 1 \times 10^{10}\,\mathrm{m}^{-1}$ und $\omega = 5 \times 10^{13}\,\mathrm{s}^{-1}$.

$$f(x, t=0) = Ae^{-\mathrm{i}kx} = A[\cos(kx) - \mathrm{i}\sin(kx)] \tag{3}$$



$$f(x=0, t) = Ae^{\mathrm{i}\omega t} = A[\cos(\omega t) + \mathrm{i}\sin(\omega t)] \tag{4}$$



Die Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{1 \times 10^{10}\,\mathrm{m}^{-1}} = 6.28 \times 10^{-10}\,\mathrm{m} = 6.28\,\text{Å}$

Die Periodendauer $T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{5 \times 10^{13}\,\mathrm{s}^{-1}} = 1.256 \times 10^{-13}\,\mathrm{s} = 125.6 \times 10^{-15}\,\mathrm{s} \approx 125\,\mathrm{fs}$

Wiederholung der mathematischen Grundlagen

2. $z = \frac{1-\mathrm{i}}{1+\mathrm{i}}$

   a) Multiplikation von Zähler und Nenner mit $(1 - \mathrm{i})$

   $$z = \frac{(1-\mathrm{i})}{(1+\mathrm{i})} \cdot \frac{(1-\mathrm{i})}{(1-\mathrm{i})} = \frac{(1-\mathrm{i})^2}{1^2-\mathrm{i}^2} = \frac{1^2-2\mathrm{i}+\mathrm{i}^2}{1-(-1)} = \frac{1-2\mathrm{i}+(-1)}{2} = \frac{-2\mathrm{i}}{2} = -\mathrm{i} \tag{5}$$

   $\mathrm{Re}(z) = 0$ und $\mathrm{Im}(z) =$ -1

   b) Für der Betrag von z müssen wir die komplex Konjugierte von z berechnen. Die komplex Konjugierte von z ist den $z^\dagger = +\mathrm{i}$.

   $$|z| = \sqrt{zz^\dagger} = \sqrt{(-\mathrm{i})(+\mathrm{i})} = \sqrt{-\mathrm{i}^2} = \sqrt{-(-1)} = \sqrt{1} = 1 \tag{6}$$

   c) Polardarstellung $z = re^{\mathrm{i}\varphi}$. Verwenden der Euler-Formel

   $$e^{\mathrm{i}\varphi} = \cos\varphi + \mathrm{i}\sin\varphi \tag{7}$$

   $$z = re^{\mathrm{i}\varphi} = r\,(\cos\varphi + \mathrm{i}\sin\varphi) \tag{8}$$

   $$\Longrightarrow \quad -\mathrm{i} = r\cos\varphi + r\mathrm{i}\sin\varphi \tag{9}$$

   $$r = |z| = \sqrt{(-1)^2} = \sqrt{1} = 1 \tag{10}$$

   $$\varphi = \arg(z) = -\frac{\pi}{2} \tag{11}$$

   da $\mathrm{Re}(z) = 0$ und $\mathrm{Im}(z) < 0$.

3. a) $f(x) = a\sin\left(bx^2+c\right)$

$$f'(x) = \frac{\mathrm{d}\left[a\sin(bx^2+c)\right]}{\mathrm{d}x} = a\cos\left(bx^2+c\right)\cdot 2bx = 2abx\cos\left(bx^2+c\right) \tag{12}$$

$$f''(x) = \frac{\mathrm{d}\left[2abx\cos(bx^2+c)\right]}{\mathrm{d}x} \tag{13}$$

Verwenden der Produktregel

$$\begin{aligned} f''(x) &= 2abx\frac{\mathrm{d}\left[\cos(bx^2+c)\right]}{\mathrm{d}x} + \cos\left(bx^2+c\right)\frac{\mathrm{d}\left[2abx\right]}{\mathrm{d}x} \\ &= 2abx\left(-\sin\left(bx^2+c\right)\right)\cdot 2bx + \cos\left(bx^2+c\right)\cdot 2ab \\ &= -4ab^2x^2\sin\left(bx^2+c\right) + 2ab\cos\left(bx^2+c\right) \\ &= 2ab\left[\cos(bx^2+c) - 2bx^2\sin(bx^2+c)\right] \end{aligned} \tag{14}$$

b) $f(x) = \ln(ax+b)$

$$f'(x) = \frac{\mathrm{d}\left[\ln(ax+b)\right]}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{ax+b}\cdot a = \frac{a}{ax+b} \tag{15}$$

$$f''(x) = \frac{\mathrm{d}\left[\frac{a}{ax+b}\right]}{\mathrm{d}x} \tag{16}$$

Verwenden der Quotientenregel

$$\begin{aligned} f''(x) &= \frac{(ax+b)\frac{\mathrm{d}[a]}{\mathrm{d}x} - a\frac{\mathrm{d}[ax+b]}{\mathrm{d}x}}{(ax+b)^2} \\ &= \frac{(ax+b)\cdot 0 - a\cdot a}{(ax+b)^2} \\ &= \frac{-a^2}{(ax+b)^2} \end{aligned} \tag{17}$$

c) $f(x) = e^{\cos(ax+b)}$

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{\mathrm{d}[e^{\cos(ax+b)}]}{\mathrm{d}x} \\ &= e^{\cos(ax+b)}\cdot(-\sin(ax+b))\cdot a \\ &= -a\sin(ax+b)\,e^{\cos(ax+b)} \end{aligned} \tag{18}$$

$$f''(x) = (-a)\frac{\mathrm{d}[\sin(ax+b)\,e^{\cos(ax+b)}]}{\mathrm{d}x} \tag{19}$$

Verwenden der Produktregel

$$\begin{aligned} f''(x) &= (-a)\left[\sin(ax+b)\frac{\mathrm{d}[e^{\cos(ax+b)}]}{\mathrm{d}x} + e^{\cos(ax+b)}\frac{\mathrm{d}\left[\sin(ax+b)\right]}{\mathrm{d}x}\right] \\ &= (-a)\left[\sin(ax+b)\left(e^{\cos(ax+b)}\cdot(-\sin(ax+b)\cdot a)\right) + e^{\cos(ax+b)}\cdot(\cos(ax+b)\cdot a)\right] \\ &= a^2\left[\sin^2(ax+b)\,e^{\cos(ax+b)} - \cos(ax+b)\,e^{\cos(ax+b)}\right] \\ &= a^2e^{\cos(ax+b)}\left[\sin^2(ax+b) - \cos(ax+b)\right] \end{aligned} \tag{20}$$

4. a) $\int x \sin(ax)\,\mathrm{d}x$

partielle Integration verwenden, wobei $\int f(x)g'(x)\mathrm{d}x = f(x)g(x)| - \int f'(x)g(x)\mathrm{d}x$

$$\begin{aligned}
\int \underbrace{x}_{f(x)} \underbrace{\sin(ax)}_{g'(x)}\,\mathrm{d}x &= x \int \sin(ax)\,\mathrm{d}x - \int \frac{\mathrm{d}\,[x]}{\mathrm{d}x} \cdot \int \sin(ax)\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{x}{a}\left(-\cos(ax)\right) - \int 1 \cdot \left(\frac{-\cos(ax)}{a}\right)\mathrm{d}x \\
&= -\frac{x}{a}\cos(ax) + \frac{\sin(ax)}{a^2} + C \\
&= \frac{1}{a}\left[\frac{\sin(ax)}{a} - x\cos(ax)\right] + C
\end{aligned} \tag{21}$$

b) $\int xe^{-ax^2}\,\mathrm{d}x$

Wir verwenden die Integration durch Substitution. Sei $e^{-ax^2} = u$. Dann $-2axe^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \mathrm{d}u$. Ersetzen von x

$$\int xe^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = -\frac{1}{2a}\int \mathrm{d}u = -\frac{u}{2a} + C \tag{22}$$

Ersetzen von u in Gl.(23)

$$\int xe^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = -\frac{e^{-ax^2}}{2a} + C \tag{23}$$

c) $\int x^3 e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x$

Wir verwenden die Integration durch Substitution. Sei

$$e^{-ax^2} = u \tag{24}$$

Dann

$$-2axe^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \mathrm{d}u \tag{25}$$

und den natürlich Logarithmus auf beiden Seiten von Gl.(25)

$$\ln\left(e^{-ax^2}\right) = \ln u \implies e^{\ln\left(-ax^2\right)} = \ln u \implies -ax^2 = \ln u \tag{26}$$

Aus den Gleichungen (25) und (26)

$$\begin{aligned}
\int x^3 e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x &= \int x^2 \cdot xe^{-ax^2}\,\mathrm{d}x \\
&= -\frac{1}{2a^2}\int \ln u\,\mathrm{d}u \\
&= -\frac{1}{2a^2}\left[u\ln u - u\right] + C
\end{aligned} \tag{27}$$

Jetzt ersetzen von u in Gl.(28)

$$\begin{aligned}\int x^3 e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x &= -\frac{1}{2a^2}\left[e^{-ax^2}\cdot \ln e^{-ax^2} - e^{-ax^2}\right] + C\\ &= -\frac{1}{2a^2}\left[e^{-ax^2}\cdot e^{\ln\left(-ax^2\right)} - e^{-ax^2}\right] + C\\ &= -\frac{1}{2a^2}\left[e^{-ax^2}\cdot \left(-ax^2\right) - e^{-ax^2}\right] + C\\ &= \frac{e^{-ax^2}}{2a^2}\left(ax^2+1\right) + C\end{aligned} \tag{28}$$

5. a)

$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{f(x)}{x} = 0 \tag{29}$$

Mit der Methode der Trennung von Variabeln ordnen wir Gl.(30)

$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = -\frac{f(x)}{x} \tag{30}$$

Neuanordnen und Integrieren von Gl.(10)

$$\int \frac{1}{f(x)}\,\mathrm{d}f(x) = -\int \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x \tag{31}$$

$$\ln[f(x)] + C_1 = -\ln x + C_2 \tag{32}$$

Sei $C_2 - C_1 = C$. Dann

$$\ln[f(x)] = -\ln x + C \tag{33}$$

Natürlicher Anti-Logarithmus auf beiden Seiten von Gl.(34)

$$e^{\ln[f(x)]} = e^{-\ln x + C} = e^{-\ln x}\cdot e^C \tag{34}$$

$$f(x) = \frac{1}{x}\cdot e^C \tag{35}$$

Sei $e^C = u$, wobei u eine andere Variable ist.

$$\therefore f(x) = \frac{u}{x} \tag{36}$$

b)

$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{f(x)}{x} = x^3 + 9 \tag{37}$$

Verwenden der Methode der Variation der Konstanten, da dies eine inhomogene Gleichung ist. Die homogene Gleichung ist bereits in Aufgabe 5(a) gelöst. Um nun für $f(x)$ in die inhomogene Differentialgleichung aufzulösen, haben wir bereits in Aufgabe 5(a) eine Annahme gemacht, dass $f(x) = \frac{u}{x}$, wobei u eine andere Variable ist. Dann $\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{xu'-u}{x^2} = \frac{u'}{x} - \frac{u}{x^2}$. Wiedereinsetzung in Gl.(37)

$$\frac{u'}{x} - \frac{u}{x^2} + \frac{u}{x^2} = x^3 + 9 \tag{38}$$

$$u' = x^4 + 9x \tag{39}$$

$$\int \mathrm{d}u = \int \left(x^4 + 9x\right) \mathrm{d}x \tag{40}$$

$$u = \frac{x^5}{5} + \frac{9x^2}{2} + C \tag{41}$$

$$\therefore f(x) = \frac{u}{x} = \frac{x^4}{5} + \frac{9x}{2} + \frac{C}{x} \tag{42}$$

6.

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ -7 \end{pmatrix} \quad , \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{43}$$

$a_1 = 4, a_2 = 3, a_3 = -7, b_1 = -1, b_2 = 1, b_3 = -1.$

Um einen Vektor zu normieren, berechnen wir zuerst den Betrag des Vektors.

$$\begin{aligned} |\vec{a}| &= \sqrt{a_1 \cdot a_1 + a_2 \cdot a_2 + a_3 \cdot a_3} = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2} \\ &= \sqrt{4^2 + 3^2 + (-7)^2} = \sqrt{16 + 9 + 49} = \sqrt{74} \end{aligned} \tag{44}$$

$$\begin{aligned} |\vec{b}| &= \sqrt{b_1 \cdot b_1 + b_2 \cdot b_2 + b_3 \cdot b_3} = \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2} \\ &= \sqrt{(-1)^2 + 1^2 + (-1)^2} = \sqrt{1 + 1 + 1} = \sqrt{3} \end{aligned} \tag{45}$$

Um nun den Vektor zu normieren, teilen wir jede Komponente des Vektors durch seinen Betrag.

$\vec{a}_{\text{norm}} = \frac{\vec{a}}{|\vec{a}|} = \begin{pmatrix} \frac{4}{\sqrt{74}} \\ \frac{3}{\sqrt{74}} \\ \frac{-7}{\sqrt{74}} \end{pmatrix} \quad , \quad \vec{b}_{\text{norm}} = \frac{\vec{b}}{|\vec{b}|} = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$

Das Skalarprodukt

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_1 \cdot b_1 + a_2 \cdot b_2 + a_3 \cdot b_3 = 4 \cdot (-1) + 3 \cdot 1 + (-7) \cdot (-1) = -4 + 3 + 7 = 6 \tag{46}$$

7.

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{47}$$

a)

$$\det(\mathbf{M}) = 0 \cdot 0 - 1 \cdot 1 = -1 \tag{48}$$

b) Um die Eigenwerte und Eigenvektoren zu finden, muss das charakteristische polynom $det\,(\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I}) = 0$ gelöst werden.

$$\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{49}$$

$$\det(\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I}) = 0 \tag{50}$$

$$\begin{vmatrix} 0 - \lambda & 1 \\ 1 & 0 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{51}$$

$$(0-\lambda)\cdot(0-\lambda)-1\cdot 1=0 \tag{52}$$

$$\lambda^2-1=0 \tag{53}$$

$$\lambda^2=1 \implies \lambda=\pm 1 \tag{54}$$

Deshalb Eigenwerte $\lambda_1=+1, \lambda_2=-1$. Eigenvektoren: Für $\lambda_1=1$:

$$(\mathbf{M}-\lambda_1\mathbf{I_2})\cdot(v_1)=0 \tag{55}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{56}$$

Somit haben wir $v_{11}=v_{21}$ und den ersten Eigenvektor $v_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ nach der Normalisierung. Für $\lambda_2=-1$:

$$(\mathbf{M}-\lambda_2\mathbf{I_2})\cdot(v_2)=0 \tag{57}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{58}$$

Somit haben wir $-v_{11}=v_{21}$ und den zweiten Eigenvektor $v_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ nach der Normalisierung.

c) Die diagonalisierte Matrix D von M ist eine diagonale Matrix mit den Eigenwerten als diagonale Elemente.
$\therefore \mathbf{D}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ und $\mathbf{P}=\mathbf{P^{-1}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$
nach Normalisierung von Eigenvektoren und auch P ist hier eine orthogonale Matrix.
Überprüfung der Gültigkeit von $\mathbf{P^{-1}MP}=\mathbf{D}$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P^{-1}MP} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1\cdot 0+1\cdot 1 & 1\cdot 1+1\cdot 0 \\ 1\cdot 0+(-1)\cdot 1 & 1\cdot 1+(-1)\cdot 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1\cdot 1+1\cdot 1 & 1\cdot 1+1\cdot(-1) \\ (-1)\cdot 1+1\cdot 1 & (-1)\cdot 1+(-1)\cdot(-1) \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=\mathbf{D}
\end{aligned} \tag{59}$$

d) $e^{\mathbf{M}}=\mathbf{P^{-1}}e^{\mathbf{D}}\mathbf{P}$

$$e^{\mathbf{D}}=\begin{pmatrix} e^1 & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix} \tag{60}$$

$$
\begin{aligned}
e^{\mathbf{M}} = \mathbf{P^{-1}}e^{\mathbf{D}}\mathbf{P} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^1 & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 & e^1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) \\ 0 \cdot 1 + e^{-1} \cdot (1) & 0 \cdot 1 + e^{-1} \cdot (-1) \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^1 & e^1 \\ e^{-1} & -e^{-1} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \cdot e^1 + 1 \cdot e^{-1} & 1 \cdot e^1 + 1 \cdot (-e^{-1}) \\ 1 \cdot e^1 + (-1) \cdot e^{-1} & 1 \cdot e^1 + (-1)(-e^{-1}) \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^1 + e^{-1} & e^1 - e^{-1} \\ e^1 - e^{-1} & e^1 + e^{-1} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cosh(1) & \sinh(1) \\ \sinh(1) & \cosh(1) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{61}
$$

8.

$$
\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{62}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{AB} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 + 1 \cdot (-1) + 0 \cdot 1 & 1 \cdot (-1) + 1 \cdot 0 + 0 \cdot 0 & 1 \cdot 1 + 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 \\ 1 \cdot 1 + 2 \cdot (-1) + 2 \cdot 1 & 1 \cdot (-1) + 2 \cdot 0 + 2 \cdot 0 & 1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 + 2 \cdot 1 \\ 0 \cdot 1 + 2 \cdot (-1) + (-1) \cdot 1 & 0 \cdot (-1) + 2 \cdot 0 + (-1) \cdot 0 & 0 \cdot 1 + 2 \cdot 0 + (-1) \cdot 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 3 \\ -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{63}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{BA} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 + (-1) \cdot 1 + 1 \cdot 0 & 1 \cdot 1 + (-1) \cdot 2 + 1 \cdot 2 & 1 \cdot 0 + (-1) \cdot 2 + 1 \cdot (-1) \\ (-1) \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 0 & (-1) \cdot 1 + 0 \cdot 2 + 0 \cdot 2 & (-1) \cdot 0 + 0 \cdot 2 + 0 \cdot (-1) \\ 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 & 1 \cdot 1 + 0 \cdot 2 + 1 \cdot 2 & 1 \cdot 0 + 0 \cdot 2 + 1 \cdot (-1) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 0 \\ 1 & 3 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{64}
$$

$$
\begin{aligned}
[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 3 \\ -3 & 0 & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 0 \\ 1 & 3 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0-0 & -1-1 & 1-(-3) \\ 1-(-1) & -1-(-1) & 3-0 \\ -3-1 & 0-3 & -1-1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & -2 & 4 \\ 2 & 0 & 3 \\ -4 & -3 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{65}
$$