



Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Katrin Tonigold

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, O25/346

Die Übungsblätter können von <http://www.uni-ulm.de/nawi/nawi-theochemie/lehre> heruntergeladen werden.

Übungsblatt 12, Übung am 4. 2. 2011

Aufgabe 1: Eigenwerte und Eigenvektoren

Bestimmen Sie Eigenwerte und Eigenvektoren der folgenden Matrizen:

$$\text{a) } \begin{pmatrix} 1 & 4 & 2 \\ 2 & 6 & 4 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \quad \text{b) } \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 5 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 2: Eigenwertproblem: LCAO-Methode

Gemäß der LCAO-Methode ("linear combination of atomic orbitals") kann man die Energie der Grenzorbitale (π -Orbitale) des Acetylen-Moleküls durch folgende Gleichung berechnen:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 & 0 & -t & 0 \\ 0 & \epsilon_0 & 0 & -t \\ -t & 0 & \epsilon_0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}$$

Hierbei ist ϵ_0 die Elektronenenergie der isolierten Atome und t (> 0) das Transferintegral, das die Elektronenwechselwirkung beschreibt. Berechnen Sie die Energieeigenwerte E .

Aufgabe 3: Eigenwerte

Es sei A eine quadratische ($n \times n$) Matrix und $B := E_n - A$, wobei E_n die Einheitsmatrix ist. Zeigen Sie, dass λ genau dann ein Eigenwert von A ist, wenn $1 - \lambda$ ein Eigenwert von B ist.

Aufgabe 4: Gram-Schmidt-Orthogonalisierung

Gegeben sind folgende Vektoren des \mathbb{R}^4 :

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Orthonormalisieren Sie $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ mit Hilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens.