Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
Andreas Steinau
Dr. Holger Euchner

Mathematik für Chemie und Wirtschaftschemie
Mi 10-12: O29/2006 und Fr 10-12: O25/H7

Übungsblatt 14, Übung am 15./17. 02. 2017

Aufgabe 1: *Frage aus der Vorlesung* **(2 Punkte)**

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.

Aufgabe 2: *Eigenwerte und Eigenvektoren* **(2 Punkte)**

Bestimmen Sie Eigenwerte und Eigenvektoren der folgenden Matrizen:

a) $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 8 & 1 \end{pmatrix}$ b) $\begin{pmatrix} 2 & 4 & 0 \\ 3 & 6 & 0 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}$ c) $\begin{pmatrix} 1 & 4 & 0 \\ 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}$

Aufgabe 3: *Eigenwertproblem: LCAO-Methode* **(2 Punkte)**

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 4: *Eigenwerte* **(2 Punkte)**

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 - λ ein Eigenwert von B ist.

Aufgabe 5: *Diagonalisieren einer Matrix* **(2 Punkte)**

Gegeben ist die Matrix A. Berechnen Sie eine orthogonale Matrix P, für die $P^T AP$ diagonal ist.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}$$

Hinweis: Die Matrix P besteht aus den normierten Eigenvektoren der Matrix A. Diese sind orthogonal, da es sich bei A um eine symmetrische Matrix handelt.

Aufgabe 6: *Gram-Schmidt-Orthogonalisierung* **(2 Punkte)**

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. D.h. Sie setzen zunächst $\vec{b}_1 = \vec{a}_1$. Danach müssen Sie eine Linearkombination aus $\vec{b}_1$ und $\vec{a}_2$ (diese spannenen eine Ebene auf) benutzen um einen Vektor $\vec{b}_2$ zu bestimmen der orthongonal zu $\vec{b}_1$ ist. Analog geht man dann für $\vec{b}_3$ vor. Dieser muss dementsprechend orthogonal zu $\vec{b}_1$ und $\vec{b}_2$ sein.