Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
Andreas Steinau

Mathematik für Chemie und Wirtschaftschemie
Fr 10:00-12:00 Uhr: N24/H16

Übungsblatt 13, Übung am 26. 01. 2018

Aufgabe 1: *Inverse Matrix* **(2 Punkte)**

Berechnen Sie die Inversen der folgenden Matrizen. Welche dieser Matrizen ist orthogonal?

$$\text{a)}\quad \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \qquad \text{b)}\quad \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \qquad \text{c)}\quad \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -1 \end{pmatrix}$$

Hinweis: Wenn Sie hierfür eine kompakte Formel kennen, können Sie diese auch verwenden.

Aufgabe 2: *Lineares Gleichungssystem: Lösen durch inverse Matrix* **(2 Punkte)**

Bestimmen Sie die Lösung $\vec{x}$ des linearen Gleichungssystems $A\vec{x} = \vec{b}$ mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 3 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix} \qquad \vec{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie die inverse Matrix A^{-1} und bestimmen Sie damit $\vec{x}$. Prüfen Sie das Ergebnis, indem Sie AA^{-1} ausrechnen.

Aufgabe 3: *Eigenwerte und Eigenvektoren* **(2 Punkte)**

Bestimmen Sie Eigenwerte und Eigenvektoren der folgenden Matrizen:

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

Aufgabe 4: *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 5: *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.