



Mathematik für Chemiker II

Übungsblatt Nr. 10 Fr. 13.07.2007 ab 11:00

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

Aufgabe 1: Eigenwertproblem I [4pt]

Bestimmen Sie die Eigenwerte und die Eigenvektoren der folgenden Matrizen:

$$\text{a) } \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{b) } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 2: Eigenwertproblem II [4pt]

Bestimmen Sie die Eigenwerte und die Eigenvektoren der folgenden Matrizen:

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

Aufgabe 3: Eigenwertproblem III: LCAO Molekülorbital Methode [5pt]

- a) Gemäß der “linear combination of atomic orbitals” (LCAO) Molekülorbital Methode kann man die Energie der Molekülorbitale E für H_2 durch die folgenden Gleichung berechnen:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{1s} & -t \\ -t & \varepsilon_{1s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Hierbei sind ε_{1s} die $1s$ Elektronenenergie der isolierten H Atome und $t(>0)$ das Transferintegral, das die Elektronenwechselwirkung beschreibt. Die Molekülorbitale ϕ_i sind aus der LCAO entstanden, d.h. $\phi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, wobei ψ_i die Atomorbitale sind. Berechnen Sie die Eigenwerte E und die normierten Eigenvektoren \vec{c} .

- b) Lösen Sie das gleiche Problem für vier Frontierorbitale (π Orbitale) des Cyclobutadien Moleküles C_4H_4 :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 & -t & 0 & -t \\ -t & \varepsilon_0 & -t & 0 \\ 0 & -t & \varepsilon_0 & -t \\ -t & 0 & -t & \varepsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}$$

Es genügt, nur die Energieeigenwerte E zu bestimmen.

- c) Lösen Sie das gleiche Problem für vier Frontierorbitale (π Orbitale) des Butadien Moleküles $\text{CH}_2\text{CHCHCH}_2$:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 & -t & 0 & 0 \\ -t & \varepsilon_0 & -t & 0 \\ 0 & -t & \varepsilon_0 & -t \\ 0 & 0 & -t & \varepsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}$$

Es genügt, nur die Energieeigenwerte E zu bestimmen.