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

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H9, O28/2004, O25/346

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

Übungsblatt 12, verteilt am 16. 1. 2009, Übung am 23. 1. 2009

Aufgabe 1: *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 2: *Eigenwerte*

Es seien $A \in M(n\,x\,n, K)$ und B := E$_n$ - A, wobei E$_n$ die Einheitsmatrix ist. Zeigen Sie, dass $\lambda \in K$ genau dann ein Eigenwert von A ist, wenn 1 - λ ein Eigenwert von B ist.

Aufgabe 3: *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.

Aufgabe 4: *Gram-Schmidt-Orthogonalisierung*

Gesucht ist eine Orthonormalbasis für den von den Vektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ aufgespannten Unterraum des $\mathbb{C}^4$:

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

Hinweise:
1.) Eine Basis eines (Unter-)Vektorraums ist eine Menge linear unabhängigen Vektoren, mit denen jeder beliebige Vektor dieses Vektorraums erzeugt werden kann.
2.) Da es sich um komplexe Vektoren handelt, muss man die komplexe Form des Skalarprodukts verwenden: $\alpha_{ij} = \vec{y}_j^\dagger \vec{x}_i$

Aufgabe 5: *Lineare Algera*

a) Welche der Aussagen über Determinanten sind richtig?

- Determinanten sind nur für quadratische Matrizen definiert.
- Ist $det(A) = 0$, so ist die Matrix A invertierbar.
- Bei zwei Matrizen A und B gilt: $det(A + B) = det(A) + det(B)$
- Bei zwei Matrizen A und B gilt: $det(AB) = det(A) \cdot det(B)$
- Jede beliebige Determinante kann mit der Sarrus-Regel berechnet werden.
- Matrix B entsteht aus A durch Vertauschen zweier Zeilen oder Spalten. Es gilt: $det(B) = -det(A)$
- Matrix B entsteht aus A durch Vertauschen zweier Zeilen oder Spalten. Es gilt: $det(B) = (-1)^{i+j} det(A)$

b) Welche Aussagen über lineare Gleichungssysteme (LGS) sind richtig?

- Ein homogenes LGS A$\vec{x} = 0$ mit mehr Unbekannten als Gleichungen besitzt nur die triviale Lösung.
- Wenn $det(A) = 0$, so hat das homogene lineare Gleichungssystem A$\vec{x} = 0$ nur die triviale Lösung.
- Wenn $det(A) \neq 0$, so ist das lineare Gleichungssystem A$\vec{x} =\vec{b}$ eindeutig lösbar.
- Die Cramersche Regel eignet sich eher für kleinere LGS, die Gaußsche Eliminierung eher für größere.
- Die Cramersche Regel eignet sich eher für größere LGS, die Gaußsche Eliminierung eher für kleinere.

c) λ ist ein Eigenwert zur reellen (n x n)-Matrix A. Welche Aussagen dazu sind äquivalent?

- Das Gleichunggssystem $(A - \lambda E)\vec{x} = 0$ hat nichttriviale Lösungen.
- Das Gleichunggssystem $(A - \lambda E)\vec{x} = 0$ hat nur die triviale Lösung.
- λ ist die Lösung der charakteristischen Gleichung $det(A - \vec{x}E) = 0$.
- Es gibt einen von Null verschiedenen Vektor $\vec{x}$ mit $\lambda A = \lambda\vec{x}$.
- Es gibt einen von Null verschiedenen Vektor $\vec{x}$ mit $A\vec{x} = \lambda\vec{x}$.
- Es gibt einen von Null verschiedenen Vektor $\vec{x}$ mit $A = \lambda\vec{x}$.

d) Gegeben sind die beiden Vektoren $\vec{x}$ und $\vec{y}$ (in einem unitären bzw. euklidischen Vektorraum). Welche Aussagen bezüglich ihrer Orthogonalität sind richtig?

- $\vec{x} \perp \vec{y}$, wenn y = 0.
- $\vec{x} \perp \vec{y}$, wenn $< \vec{x}, \vec{y} > = 0$.
- $\vec{x} \perp \vec{y}$, wenn $< \vec{x}, \vec{y} > = 1$.