Prof. Dr. D. Egorova

SoSe 2013
Blatt 4
ab 15.5.2013

Übungen zur Vorlesung
Mathematik für Chemiker 2

Ankündigungen

Übungsblätter & Aktuelles: `http://theochem.pctc.uni-kiel.de/`
Vorlesungsskript Prof. Hartke: `http://ravel.pctc.uni-kiel.de/`

(*)-Aufgaben dienen als freiwillige Zusatz- bzw. Hausaufgaben (Korrektur auf Wunsch möglich) und können nach Vereinbarung mit den Assistenten in der Übung bzw. in der Zusatzübung besprochen werden.

Übungen

Determinanten

1. Berechnen Sie folgende Determinanten:

   a) $\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 2 & 4 \\ 0 & 2 & 0 & 3 \\ 5 & 2 & 10 & 2 \end{vmatrix}$ b) $\begin{vmatrix} 1 & a & (b+c) \\ 1 & b & (c+a) \\ 1 & c & (a+b) \end{vmatrix}$ c) $\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix}$

   Um sich die Arbeit zu erleichtern, entwickeln Sie, wenn nötig, nach einer geeigneten Zeile oder Spalte.

2. (*) Berechnen Sie folgende Determinanten:

   a) $\begin{vmatrix} 8 & 2 & 3 \\ 8 & 4 & 3 \\ 16 & 6 & 9 \end{vmatrix}$ b) $\begin{vmatrix} 1 & 1 & 2 \\ t & 2t & 0 \\ 3a & a & a^2 \end{vmatrix}$ c) $\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 2 \\ 2 & 4 & 4 & 2 \\ 5 & 2 & 10 & 2 \end{vmatrix}$

3. $\mathbf{A}$ sei eine reguläre Matrix mit $\det(\mathbf{A}) = 2$. Berechnen Sie

   $$\det(\mathbf{A}^2),\ \det(\mathbf{A}^T\mathbf{A}^2) \text{ und } \det\left[(\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{A}^3(\mathbf{A}^T)^2\right].$$

4. (*) Gegeben sei die Matrix

   $$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \alpha & 1 & 2 \\ \alpha & \alpha & 3 \\ \alpha & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

   Für welche Werte von α ist die Matrix $\mathbf{B}$ invertierbar? Zur Beantwortung dieser Frage überführen Sie die Matrix in eine obere Dreiecksmatrix.

Lineare Gleichungssysteme (LGS)

5. Gegeben sei das lineare Gleichungssystem (LGS)

$$\begin{array}{rcrcrcrcr} x_1 & + & & & 2x_3 & - & x_4 & = & 2 \\ -x_1 & + & x_2 & - & 3x_3 & + & 2x_4 & = & -4 \\ 2x_1 & - & 2x_2 & + & x_3 & + & x_4 & = & 3 \\ -2x_1 & - & x_2 & & & + & (t-3)x_4 & = & t \end{array}$$

   (a) Schreiben Sie das LGS in Matrizenform, $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, und formen Sie es dann mit Hilfe des Gaußschen-Eliminationsverfahrens so weit um, dass $\mathbf{A}$ in eine obere Dreiecksmatrix übergeht.

   (b) Für welche Werte von t hat das ensprechende homogene LGS, $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$, nichttriviale Lösungen? Geben Sie in diesen Fällen die Lösungsmengen an.

   (c) Stellen Sie fest, für welche Werte $t \in \mathbb{R}$ das inhomogene LGS eindeutig lösbar ist, und geben Sie für diese t-Werte die Lösungen an.

   (d) Für welche Werte von t ist das inhomogene LGS noch lösbar? Bestimmen Sie in diesen Fällen die allgemeine Lösungsmenge.

   (e) Zeigen Sie, dass sich die allgemeine Lösungsmenge des inhomogenen LGS als Summe der allgemeinen Lösungsmenge des homogenen LGS und einer speziellen Lösung des inhomogenen LGS darstellen lässt.

6. Gegeben seien die Matrizen $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & -1 \\ 2 & 5 & -1 \\ 0 & 4 & -3 \end{pmatrix}$, $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 1 & 4 & 3 \\ 2 & 3 & -4 \end{pmatrix}$

   (a) Untersuchen Sie, ob die Matrizen invertierbar sind und bestimmen Sie gegebenenfalls die inverse Matrix $\mathbf{A}^{-1}$ bzw. $\mathbf{B}^{-1}$.

   (b) Bestimmen Sie die 3×3-Matrix $\mathbf{X}$, welche die folgende Matrixgleichung löst: $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$.

7. (*) Gegeben sei das lineare Gleichungssystem (LGS):

$$\begin{aligned} \mathrm{x}_1 + 2\mathrm{x}_2 + \mathrm{x}_3 &= 2 \\ 3\mathrm{x}_1 + \mathrm{x}_2 - 2\mathrm{x}_3 &= 1 \\ 4\mathrm{x}_1 - 3\mathrm{x}_2 - \mathrm{x}_3 &= 3. \end{aligned}$$

   a) Schreiben Sie dieses LGS in der Form $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$.

   b) Lösen Sie dieses LGS mit Hilfe des Gaußschen-Eliminationsverfahrens.

Eigenwertproblem

8. Berechnen Sie die Eigenwerte und die dazugehörigen Eigenvektoren der Matrix $\mathbf{M}$ (Hückel-Problem für das Allyl-Radikal):

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

   Prüfen Sie anhand dieses Beispiels nach, dass für eine n-reihige reelle, symmetrische Matrix gilt:

(a) Alle n Eigenwerte sind reell.

(b) Eigenvektoren, die zu verschiedenen Eigenwerten gehören, sind orthogonal.

(c) Die zugehörigen Eigenvektoren sind linear unabhängig.

9. Gegeben sei die Matrix $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.

   (a) Bestimmen Sie die Eigenwerte $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ von $\mathbf{M}$.

   (b) Bestimmen Sie die normierten Eigenvektoren $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ von $\mathbf{M}$.

   Betrachten Sie nun die Matrix $\mathbf{U}$, welche die normierten Eigenvektoren von $\mathbf{M}$ als Spaltenvektoren hat, d.h. $\mathbf{U} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3)$.

   (c) Zeigen Sie, dass $\mathbf{U}$ eine unitäre Matrix ist.

   (d) Zeigen Sie weiterhin, dass $\mathbf{U}$ die Matrix $\mathbf{M}$ auf Diagonalform transformiert, d.h., dass gilt $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{M} \mathbf{U} = \mathbf{D}$. Dabei bezeichnet $\mathbf{D}$ die von den Eigenwerten von $\mathbf{M}$ gebildete Diagonalmatrix, d.h.

$$\mathbf{D} \quad = \quad \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}.$$

10. (*) Im Rahmen der Hückel-Theorie entsprechen den Energien der π-Molekülorbitale des Cyclobutadiens die Eigenwerte der Matrix

$$\mathbf{M} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

   (a) Bestimmen Sie alle Eigenwerte λ_j $(j = 1, \ldots, 4)$ von $\mathbf{M}$.

   (b) Geben Sie die zugehörigen Eigenvektoren an.

   (c) Bestimmen Sie ein orthonormales System von Eigenvektoren.

   (d) Demonstrieren Sie anhand der Matrix $\mathbf{M}$, dass Spur und Determinante übereinstimmen mit Summe und Produkt der Eigenwerte, d.h.

$$\mathrm{tr}\,(\mathbf{M}) = \sum_{j=1}^{4} \lambda_j \quad \text{und} \quad \det\,(\mathbf{M}) = \prod_{j=1}^{4} \lambda_j .$$

Als zusätzliche (*)-Aufgaben sind auch die Aufgaben 6-7 vom Übungsblatt 3 vom SS 2009 (on-line verfügbar) zu betrachten.