LC209 - TP3 : Vecteurs, Déterminants et Matrices avec *Mathematica*

UPMC, Paris. (Johannes Richardi, johannes.richardi@upmc.fr)

Exercices

Exercice 1 : Etude de la géométrie de la molécule d'eau

Dans un repère à deux dimensions les positions des atomes d'une molécule d'eau sont les suivantes :
oxygène: (0,5 ; -0,5), hydrogène 1: (0,5 ; 0,45), hydrogène 2: (1,422 ; -0,729).

1) Après avoir défini les vecteurs qui correspondent aux positions atomiques, représenter ces points dans un repère en utilisant **`ListPlot`**. (Il faut utiliser les options **`AspectRatio`** et **`PlotRange`** pour obtenir une représentation aux bonnes échelles.)

2) Calculer les vecteurs qui lient les atomes O, H_1 et O, H_2. Déterminer la longueur de liaison OH_1 et OH_2.

3) Calculer l'angle entre les deux liaisons OH_1 et OH_2. Pourquoi ne trouve-t-on pas l'angle 109°28' d'un tétraèdre parfait ?

4) Définir la matrice de rotation (2D) autour du centre du repère d'un angle quelconque. Appliquer la rotation aux positions des trois atomes.

5) Calculer les nouvelles positions en utilisant un angle de rotation de 180°. Représenter les nouvelles positions en utilisant **`ListPlot`** et comparer avec la graphique de 1).

Exercice 2 : Méthode de Hückel

Nous avons vu en TD n° 4 que la méthode de Hückel permet de déterminer les énergies orbitalaires d'un système d'électrons π. Nous allons reprendre le même exercice et refaire les calculs en utilisant *Mathematica*. C'est une démarche souvant utilisée dans la recherche pour vérifier des calculs faits précédemment à la main.

1) Définir la matrice (ceci correspond au cation allyle CH_2=CH- CH_2*) :

$$\begin{pmatrix} \alpha-\lambda & \beta & 0 \\ \beta & \alpha-\lambda & \beta \\ 0 & \beta & \alpha-\lambda \end{pmatrix}$$

2) Calculer le détermiant D de cette matrice.

3) Essayer de simplifier l'expression de D en utilisant **`Expand`**, **`Simplify`**, **`Factor`**.

4) Resoudre l'équation D=0 ce qui amène aux trois énergies orbitalaires λ en fonction de α et β.

Exercice 3 : Inversion d'une matrice

En TD n° 6 nous avons vu deux méthodes pour déterminer l'inverse d'une matrice. Ici nous allons utiliser une "troisième" méthode très confortable: *Mathematica.*
1) Définir deux matrices :

$$B = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ et } A = \begin{pmatrix} 1 & I & 0 \\ 2 & 0 & -I \\ 0 & 1-I & -I \end{pmatrix}$$

avec $I = \sqrt{-1}$

2) Inverser ces matrices.

3) Vérifier les relations $BB^{-1} = AA^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

4) Les matrices A et B sont-elles Hermitiennes ? Calculer les matrices adjointes pour repondre à cette question.

Exercice 4 : Valeurs et vecteurs propres

Si vous avez aimé l'inversion d'une matrice avec Mathematica, vous allez adorer calculer des valeurs et vecteurs propres. On reprend l'exercice III du TD n°6.

1) Définir la matrice Hermitienne :

$$H = \begin{pmatrix} 4 & 1+i \\ 1-i & 3 \end{pmatrix}$$

2) Déterminer son déterminant. Pourquoi peut-on savoir sans calcul qu'il sera réel ?

3) Calculer les valeurs propres. Vérifier qu'ils sont réels. Pourquoi ?

4) Déterminer les vecteurs propres. Montrer qu'ils sont orthogonaux.

4) Vérifier que la matrice composée des vecteurs propres (`T=Transpose[Eigenvectors[H]]`) transforme la matrice H en une matrice diagonale par $T^{-1} H T$.

Exercice 5 : Rotations sucessives dans l'espace tridimensionnel et produit vectoriel

Les matrices de rotation dans l'espace tridimensionnel autour des axes x, y et z sont

$$D_x(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}; \quad D_y(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & -\sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\alpha & 0 & \cos\alpha \end{pmatrix}; \quad D_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Vérifier qu'une rotation autour de x, suivie d'une rotation autour de y est différente d'une rotation d'abord autour de y et ensuite autour de x.
- Trouver l'inverse de $D_x(\alpha)$. Aurait-on deviné l'inverse sans calcul ?

Dans l'espace tridimensionnel le produit vectoriel est défini comme

$$a \times b = \begin{pmatrix} a_y\, b_z - a_z\, b_y \\ a_z\, b_x - a_x\, b_z \\ a_x\, b_y - a_y\, b_x \end{pmatrix}$$

Le produit vectoriel de deux vecteurs donne un vecteur. Avec deux vecteurs au hasard (par exemple {1,2,3} et {6,7,1}) vérifier que le produit est bien orthogonal aux vecteurs d'origine, et que la longueur du vecteur produit correspond au produit des longueurs de a et b, multiplié par le sinus de l'angle entre les vecteurs a et b.