科　目　名	学年	番号	学 籍 番 号	氏　　　名
量子化学　第2回（数学）	3			

全問解答し，答え合わせ（自己採点）をして提出せよ。　　　　**授業時間外の学習時間：_______時間_______分**

[1] $\boxed{\text{数学}}$　ここからは，次週の Slater 行列式型波動関数のための予習的な内容です（でも，大学初年次レベルの数学です）。

(i) 次の行列式の値を求めよ。

$$D = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ -1 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{vmatrix} \tag{1}$$

(ii) D の 2 列目を 1 列目に加えた D' の値を求め，その結果と D の値を比較せよ。

$$D' = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{vmatrix} \tag{2}$$

(iii) D の 2 行目を 1 行目に加えた D'' の値を求め，その結果と D の値を比較せよ。

$$D'' = \begin{vmatrix} 1 & 4 & 3 \\ -1 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{vmatrix} \tag{3}$$

[2] $\boxed{\text{数学}}$

(i) 前問の $D = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ -1 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{vmatrix}$ の 1 列目と 3 列目を入れ替えてその行列式を求め，得られた行列式の値を D の値と比較せよ。

(ii) 前問の D の 1 行目と 3 行目を入れ替えてその行列式を求め，得られた行列式の値を D の値と比較せよ。

[3] $\boxed{\text{数学}}$

(i) 次の行列式の値を（計算せずに）見ただけで求めよ。

$$D = \begin{vmatrix} 1 & 6 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -3 & 1 \end{vmatrix} \tag{4}$$

(ii) 次の行列式の値を（計算せずに）見ただけで求めよ。

$$D = \begin{vmatrix} 2 & 6 & 1 \\ -4 & 4 & -2 \\ 2 & -3 & 1 \end{vmatrix} \tag{5}$$

解答

---

[1] (i), (ii), (iii) は以下のとおり。(ii), (iii) では，行列式の値は D と変わらない。

$$\begin{aligned} D = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ -1 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{vmatrix} &= 2 \times \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - 1 \times \begin{vmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{vmatrix} + 1 \times \begin{vmatrix} -1 & 3 \\ 2 & 0 \end{vmatrix} \\ &= 2(3-0) - (-1-4) + (0-6) = 6 + 5 - 6 = 5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D' = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{vmatrix} &= 3 \times \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - 1 \times \begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 1 \end{vmatrix} + 1 \times \begin{vmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 0 \end{vmatrix} \\ &= 3(3-0) - (2-4) + (0-6) = 9 + 2 - 6 = 5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D'' = \begin{vmatrix} 1 & 4 & 3 \\ -1 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{vmatrix} &= 1 \times \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - 4 \times \begin{vmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{vmatrix} + 3 \times \begin{vmatrix} -1 & 3 \\ 2 & 0 \end{vmatrix} \\ &= (3-0) - 4(-1-4) + 3(0-6) = 3 + 20 - 18 = 5 \end{aligned}$$

[2]　(i)，(ii) は以下のとおり。(i)，(ii) とも D の値は -1 倍になる。

$$\begin{aligned}\begin{vmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & -1 \\ 1 & 0 & 2 \end{vmatrix} &= 1\times\begin{vmatrix} 3 & -1 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} - 1\times\begin{vmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} + 2\times\begin{vmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \\ &= (6-0)-(4+1)+2(0-3) = 6-5-6 = -5\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ -1 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \end{vmatrix} &= 2\times\begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} - 0\times\begin{vmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{vmatrix} + 1\times\begin{vmatrix} -1 & 3 \\ 2 & 1 \end{vmatrix} \\ &= 2(3-2)-0(-1-4)+(-1-6) = 2-0-7 = -5\end{aligned}$$

[3]　(i) 1 列目と 3 列目が同じだから，行列式の値は 0 となる。
問題 [5] より，1 列目から 3 列目をひいても行列式の値は変わらない。1 列目と 3 列目が同じだと，1 列目から 3 列目をひくと 1 列目は全て 0 になる。[1]，[2] では行列式を 1 行目で余因子展開したが，ここでは 1 列目で余因子展開することを考えれば，この行列式の値が 0 になることはすぐにわかる。

$$\begin{aligned}\begin{vmatrix} a & d & a \\ b & e & b \\ c & f & c \end{vmatrix} \underline{\underline{\text{1 列目}-\text{3 列目}}} \begin{vmatrix} 0 & d & a \\ 0 & e & b \\ 0 & f & c \end{vmatrix} &= 0\times\begin{vmatrix} e & b \\ f & c \end{vmatrix} - 0\times\begin{vmatrix} d & a \\ f & c \end{vmatrix} + 0\times\begin{vmatrix} d & a \\ e & b \end{vmatrix} \\ &= 0(ec-bf)-0(dc-af)+0(db-ae) = 0\end{aligned}$$

(ii) 1 列目が 3 列目の 2 倍になっているから，行列式の値は 0 となる（考え方は (i) と同じ。1 列目から 3 列目を 2 回引けば，1 列目は全て 0 になる。つまり，行列式の値を求める作業において，ある列（行）から別の列（行）をただ引くだけでなく，定数倍してから引いてもよいことがわかる）。

今日の講義でわからないことがあれば，お伝えください。また，講義に対する要望があればお書きください。感想などでも結構です。もちろん，成績等には一切関係ありません。

✎ **記述欄**