Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

ulm university universität ulm

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
David Mahlberg

Mathematik II für Chemie und Wirtschaftschemie

Vorlesung: Di 10-12, H16

Seminar: Fr 8-10, H1

Das Übungsblatt wird im Seminar am 19.07.2019 als Präsenzübung bearbeitet

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

Übungsblatt 13

Aufgabe 1

Gegeben ist

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & a & c \\ 2 & 4 & 7 \\ 0 & b & 6 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{AB} = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 5 \end{pmatrix} \boldsymbol{B} = \boldsymbol{E}$$

a) Finden sie a, b, und c damit die Matrix $\boldsymbol{A}$ symmetrisch wird
b) Finden sie die Matrix $\boldsymbol{B}$

Aufgabe 2

Die vier sp^3 Hybridorbitale $\vec{\phi}$ von z.B. Silizium, Diamant, oder den Alkane C_nH_{2n+2} können mittels linearer Superposition der s und p Orbitale $\vec{\psi}$ repräsentiert werden:

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = \vec{\phi} = \boldsymbol{A}\vec{\psi} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_s \\ \psi_{p_x} \\ \psi_{p_y} \\ \psi_{p_z} \end{pmatrix}$$

Die inverse Repräsentation ist $\vec{\psi} = \boldsymbol{A}^{-1}\vec{\phi}$. Zeigen Sie, dass in diesem speziellen Fall $\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^T$ (orthogonal) gilt.

Aufgabe 3

Gegeben ist die folgende Matrix:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

(a) Berechnen Sie die inverse Matrix $\boldsymbol{A}^{-1}$ mit algebraischen Komplementen. Überprüfen Sie ihr Ergebnis, indem Sie $\boldsymbol{AA}^{-1}$ berechnen.
(b) Berechnen Sie die transponierte Matrix $\boldsymbol{A}^T$.
(c) Berechnen Sie die adjungierte (hermitisch konjugierte) Matrix $\boldsymbol{A}^\dagger$.
(d) Ist $\boldsymbol{A}$ orthogonal, unitär oder hermitisch?

Aufgabe 4

Zeigen Sie, dass die inverse Matrix einer symmetrischen Matrix (falls sie existiert) auch symmetrisch ist.

Aufgabe 5

Lösen Sie folgende Gleichungssysteme:

a)
$$\begin{aligned} x+y+z &= 0 \\ 2x+2y+5z &= 0 \\ 3x+2y+4z &= 0 \end{aligned}$$

b)
$$\begin{aligned} x-4y+5z-4t &= 12 \\ x-y+z-2t &= 0 \\ 2x+y+2z+3t &= 52 \\ 2x-3y+2z-t &= 4 \end{aligned}$$

Verwenden Sie dazu einmal die Cramer'sche Regel und einmal das Gauss'sche Eliminationsverfahren.