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

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, O25/346

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

Übungsblatt 9, Übung am 18. 12. 2009

Aufgabe 1: *Determinanten*

Überprüfen Sie, ob die folgenden Determinanten den Wert Null haben, ohne sie explizit zu berechnen.

$$\text{(a)} \begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 2 \\ 3 & 6 & 1 \end{vmatrix} \qquad \text{(b)} \begin{vmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 4 \\ 2 & 0 & 1 \end{vmatrix} \qquad \text{(c)} \begin{vmatrix} i & -2i & 3 \\ 2 & 4 & 2 \\ 2 & -4 & -6i \end{vmatrix} \qquad \text{(d)} \begin{vmatrix} i & 2 & 3i \\ 2i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Aufgabe 2: *Inverse Matrix*

a) Es seien A, B $(n \times n)$-Matrizen. Zeigen Sie, dass AB nicht invertierbar ist, wenn A singulär ist.

b) Zeigen Sie: Sind A^{-1} und B^{-1} die inversen Matrizen von A und B, dann ist $B^{-1}A^{-1}$ die inverse Matrix von AB.

Aufgabe 3: *Inverse Matrix*

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 ihe Ergebnis, indem Sie $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}$ 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: *Inverse Matrix: sp^3 Hybridorbital*

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.