



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 10, Übung am 21. 1. 2011

#### Aufgabe 1: 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:

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

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

#### Aufgabe 2: Inverse Matrix

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

Berechnen Sie, wenn möglich, die Inversen der folgenden Matrizen:

$$\text{a) } \begin{pmatrix} -2 & -3 & 1 \\ 7 & 17 & 3 \\ 1 & -1 & -3 \end{pmatrix} \quad \text{b) } \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 & -2 \\ 1 & 4 & -1 & 1 \\ -2 & 4 & 1 & -1 \\ -6 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

#### Aufgabe 4: Lineare Gleichungssysteme

Lösen Sie folgende Gleichungssysteme:

$$\begin{array}{l} \text{a) } \begin{array}{l} x + y + z = 0 \\ 2x + 2y + 5z = 0 \\ 3x + 2y + 4z = 0 \end{array} \\ \text{b) } \begin{array}{l} x - 4y + 5z - 4t = 12 \\ x - y + z - 2t = 0 \\ 2x + y + 2z + 3t = 52 \\ 2x - 3y + 2z - t = 4 \end{array} \end{array}$$

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