



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

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, N24/226

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

Übungsblatt 11, Übung am 20. 01. 2012

Aufgabe 1: Funktionaldeterminante

Um die Schrödinger-Gleichung für das H_2^+ -Ion analytisch zu lösen ist eine Transformation in elliptische Koordinaten notwendig.

In zylindrischen elliptischen Koordinaten ist:

$$x = a \cosh(u) \cos(v)$$

$$y = a \sinh(u) \sin(v)$$

$$z = w$$

Berechnen Sie die Funktionaldeterminante $\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(u,v,w)}$.

Aufgabe 2: Determinanten

Berechnen Sie die folgenden Determinanten.

$$(a) \begin{vmatrix} 2 & 1 & 8 \\ 7 & 8 & 3 \\ 1 & 2 & 2 \end{vmatrix} \quad (b) \begin{vmatrix} 2 & 7 & 1 \\ 1 & 8 & 2 \\ 8 & 3 & 7 \end{vmatrix} \quad (c) \begin{vmatrix} 2 & 8 & 1 \\ 7 & 3 & 8 \\ 1 & 2 & 2 \end{vmatrix} \quad (d) \begin{vmatrix} 2 & 8 & 1 \\ 5/3 & 3/2 & 9 \\ 1 & 4 & 1/2 \end{vmatrix} \quad (e) \begin{vmatrix} 2 & 21 & 1 \\ 1 & 24 & 2 \\ 8 & 9 & 2 \end{vmatrix}$$

Aufgabe 3: Determinanten

Berechnen Sie die folgende Determinante.

$$\begin{vmatrix} -4 & 0 & 2 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & 4 & 3 & -2 \\ 4 & -2 & -2 & 0 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & -1 & 1 & 3 & 2 \\ -1 & 0 & 1 & 2 & -3 & 0 \\ -2 & -1 & 0 & 2 & 2 & 2 \end{vmatrix}$$

Aufgabe 4: Inverse Matrix

Gegeben ist die folgende Matrix A:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie die inverse Matrix von A, die inverse Matrix ihrer Transponierten und die inverse Matrix des Produkts von A und ihrer Transponierten. Ist A orthogonal?

Aufgabe 5: Matrizen: Grundbegriffe

Welche der folgenden Aussagen über Matrizen und Determinanten sind richtig, welche falsch?

- Eine symmetrische Matrix ist immer auch hermitisch.
- Zu einer singulären Matrix gibt es immer eine Inverse.

- c) Ist eine Matrix A invertierbar, so ist auch ihre transponierte Matrix invertierbar.
- d) Eine reguläre Matrix kann invertiert werden, da ihre Determinante Null ist.
- e) Eine 3×3 -Determinante kann mit dem Satz von Sarrus berechnet werden.
- f) Für eine quadratische Matrix $B = \lambda A$ gilt $\det(B) = \lambda \det(A)$.
- g) Ist in einer Matrix A eine Zeile gleich dem λ -fachen einer anderen Zeile, dann ist $\det(A) = 0$.
- h) Bei jeder Matrix gilt: Aus $AB = 0$ folgt $A = 0$ oder $B = 0$.