Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Benedikt Weggler, Daniel Gaissmaier

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, H21

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

Übungsblatt 12, Übung am 25. 01. 2013

Aufgabe 1: *Frage aus der Vorlesung*

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.

Aufgabe 2: *Matrizen: Grundbegriffe*

Gegeben ist die folgende Matrix

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 1 & -2 \\ 0 & -3 & i & 0 \\ -1 & -i & 2 & -i \\ 2 & 0 & i & 5 \end{pmatrix}$$

a) Geben Sie $\boldsymbol{A}^T$ und $\boldsymbol{A}^\dagger$ an.
b) Ist $\boldsymbol{A}$ symmetrisch, schiefsymmetrisch oder hermitisch?
c) Berechnen Sie die Spur $\mathrm{Sp}(\boldsymbol{A})$.

Aufgabe 3: *Matrixmultiplikation*

Berechnen Sie die folgenden Matrixprodukte:

(a) $\begin{pmatrix} 7 & 6 \\ 5 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$ (b) $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 5 & 2 & 3 \\ 0 & 4 & 6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & 0 & 3 \\ 0 & 8 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$

(c) $\begin{pmatrix} 9 & 5 & 1 \\ 8 & 3 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ (d) $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 9 & 5 & 1 \\ 8 & 3 & 0 \end{pmatrix}$

Aufgabe 4: *Matrixmultiplikation*

Die folgenden Matrizen seien gegeben:

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

(a) Berechnen Sie $\boldsymbol{C} = [\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}] = \boldsymbol{AB} - \boldsymbol{BA}$.
(b) Ist $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$ oder $\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA}$?
(c) Berechnen Sie $\boldsymbol{A}^2$, $\boldsymbol{B}^2$, und $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})$.

Aufgabe 5: *Matrixmultiplikation & Inverse Matrix*

(a) Bestimmen Sie a, b, c und d in folgender Matrizen-Gleichung:

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 6 & 5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

(b) Versuchen Sie, auch hier a, b, c und d zu bestimmen:

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 6 & 6 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$