



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 13, Übung am 01. 02. 2013

Aufgabe 1: Frage aus der Vorlesung

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.

Aufgabe 2: Determinanten & Matrizen-Multiplikation

Gegeben seien die Matrizen A und B :

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 1 & 5 & 3 \\ 1 & 6 & 1 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

- Berechnen Sie die Produkte AB und BA . Ist die Matrizen-Multiplikation kommutativ?
- Berechnen Sie die Determinanten $|A|$, $|B|$, $|AB|$ und $|BA|$.

Aufgabe 3: 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 4: Inverse Matrix

Berechnen Sie die Inversen der folgenden Matrizen. Welche dieser Matrizen ist orthogonal ($A^T = A^{-1}$)? Können alle inversen Matrizen berechnet werden?

$$\text{a) } \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{b) } \begin{pmatrix} \sin \theta & -\cos \theta \\ \cos \theta & \sin \theta \end{pmatrix} \quad \text{c) } \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 6 & 6 \end{pmatrix}$$

Hinweis: Wenn Sie hierfür eine kompakte Formel kennen, können Sie diese auch verwenden.

Aufgabe 5: Inverse Matrix

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

Aufgabe 6: 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 .