

Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Dipl.-Chem. Uwe Friedel
Mathematik III für Chemie und Wirtschaftschemie
Freitag, 10:00-12:00, O25/H7, O27/H21

Übungsblatt 10,* Übung am Fr, 9.1.2015

Aufgabe 1: *Vorlesungsfrage*

Beantworten Sie die Vorlesungsfrage vom 19.12.2014. (2 P)

Aufgabe 2: *Vorlesung*

Fassen Sie die Vorlesung vom 19.12.2014 in wenigen Stichworten schriftlich zusammen. (1 P)

Aufgabe 3: *Matrizenrechnung*

Sind folgende Matrizen unitär und/oder orthogonal? (Je 2 P)

$$(a) \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{8}} & \sqrt{\frac{3}{8}} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$(b) \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(1 + \sqrt{5}) & 0 & \sqrt{\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}} & 0 & \frac{1}{4}(1 + \sqrt{5}) \end{pmatrix}$$

$$(c) \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -\frac{i}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}i & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$(d) \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & -\frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

Aufgabe 4: *Matrizengleichung*

Lösen Sie die Gleichung

$$G(\mathbf{X}\mathbf{A} + 2\mathbf{X} + \mathbf{B} + \mathbf{X}^T + (\mathbf{C}\mathbf{X})^T) = \mathbf{D}$$

nach \mathbf{X} auf. \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} , \mathbf{D} , \mathbf{G} und \mathbf{X} sind reell, quadratisch und haben die gleiche Ordnung. \mathbf{X} ist symmetrisch. Alle nötigen Invertierungen sind möglich.

(2 P)

Aufgabe 5: *Inverse Matrix*

Gegeben ist die folgende Matrix:

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

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

- (a) Berechnen Sie die inverse Matrix \mathbf{A}^{-1} mit algebraischen Komplementen. Überprüfen Sie ihr Ergebnis, indem Sie $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}$ berechnen. (4 P)
- (b) Berechnen Sie die transponierte Matrix \mathbf{A}^T . (1 P)
- (c) Berechnen Sie die adjungierte (hermitisch konjugierte) Matrix \mathbf{A}^\dagger . (1 P)
- (d) Ist \mathbf{A} orthogonal, unitär oder hermitisch? (1 P)

Aufgabe 6: *Cramersche Regel*

Lösen Sie folgende Gleichungssysteme mit der Cramerschen Regel:

a)
$$\begin{aligned} 3x - 5y &= 0 \\ 4x + 10y &= 10 \end{aligned}$$
 (2 P)

b)
$$\begin{aligned} x + y + z &= 0 \\ x - 2y + 2z &= 4 \\ x + 2y - z &= 2 \end{aligned}$$
 (4 P)