

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 14,\* Übung am Fr, 6.2.2015

**Aufgabe 1:** *Vorlesungsfrage*

Beantworten Sie die Vorlesungsfrage vom 30.1.2015.

**Aufgabe 2:** *Vorlesung*

Fassen Sie die Vorlesung vom 30.1.2015 in wenigen Stichworten schriftlich zusammen.

**Aufgabe 3:** *Matrizenrechnung*

Bestimmen Sie Eigenvektoren und Eigenwerte der folgenden Matrizen. Orthogonalisieren Sie Eigenvektoren zu entarteten Eigenwerten.

(a)  $\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$

(b)  $\begin{pmatrix} 1 & -3 & 3 \\ 3 & -5 & 3 \\ 6 & -6 & 4 \end{pmatrix}$  (siehe Blatt 12)

**Aufgabe 4:** *Eigenwerte und Eigenvektoren*

Gegeben seien die Vektoren

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \vec{c} = \begin{pmatrix} 6 \\ 1 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Orthogonalisieren Sie diese Vektoren nach Gram-Schmidt *in der gegebenen Reihenfolge*  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ .

**Aufgabe 5:** *Cayley-Hamilton-Methode: Berechnen der inversen Matrix*

Berechnen Sie die Inverse der folgenden Matrix mit der Cayley-Hamilton-Methode.

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

---

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

**Aufgabe 6:** *Gerschgorin*

Wenden Sie auf die Matrix  $\mathbf{A}$  den Satz von Gerschgorin an.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & 7 \end{pmatrix}$$

Welche Aussagen können Sie über die Eigenwerte von  $\mathbf{A}$  machen? Kann man ohne weitere Rechnung sagen, ob  $\mathbf{A}$  regulär ist?