



Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Katrin Tonigold, Dorothee Denot
Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H9, 028/2004, O25/346

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

Übungsblatt 9, verteilt am 12. 12. 2008, Übung am 19. 12. 2008

Aufgabe 1: 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 2: Inverse Matrix

Berechnen Sie, wenn möglich, die Inversen der folgenden Matrizen:

$$\text{a) } \begin{pmatrix} 2 & 2 & -2 & 3 \\ 0 & 4 & -2 & 4 \\ 1 & 0 & 2 & 6 \\ -2 & -2 & 4 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{b) } \begin{pmatrix} 2 & 4 & -4 & 5 \\ -2 & 3 & 4 & -4 \\ -3 & 13 & 6 & -7 \\ -1 & 1 & 2 & -3 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 3: Inverse Matrix

Gegeben ist die folgende Matrix:

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

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

Aufgabe 4: Cramersche Regel

Lösen Sie folgende Gleichungssysteme mit der Cramerschen Regel:

$$\text{a) } \begin{aligned} 3x - 5y &= 0 \\ 4x + 10y &= 10 \end{aligned} \quad \text{b) } \begin{aligned} x + y + z &= 0 \\ x - 2y + 2z &= 4 \\ x + 2y - z &= 2 \end{aligned}$$

Aufgabe 5: Lineare Gleichungssysteme

Lösen Sie folgende Gleichungssysteme:

$$\text{a) } \begin{aligned} x + y + z &= 0 \\ 2x + 2y + 5z &= 0 \\ 3x + 2y + 4z &= 0 \end{aligned} \quad \text{b) } \begin{aligned} x - 4y + 5z - 4t &= 12 \\ x - y + z - 2t &= 0 \\ 2x + y + 2z + 3t &= 52 \\ 2x - 3y + 2z - t &= 4 \end{aligned}$$

Verwenden Sie dazu einmal die Cramer'sche Regel und einmal das Gauss'sche Eliminationsverfahren.