

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

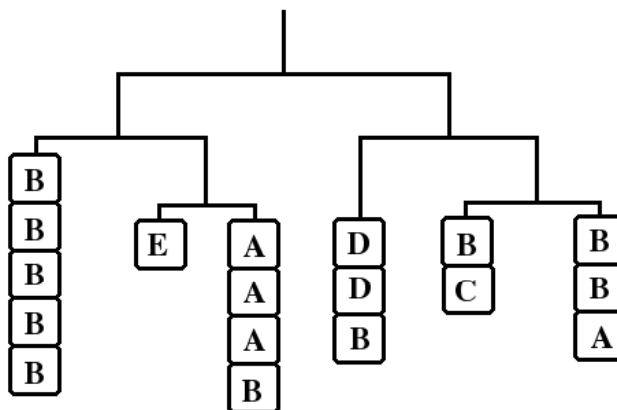
Fr. 10:15 Uhr, H9, O28/2004, O25/346

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

Übungsblatt 14, verteilt am 30. 1. 2009, Übung am 6. 2. 2009

Aufgabe 1: Lineare Gleichungssysteme

- a) Welche Methoden zur Lösung von linearen Gleichungssystemen kennen Sie?
 b) Das Mobile befindet sich im Gleichgewicht. Stellen Sie das zugehörige Gleichungssystem auf und lösen Sie es.



Die Aufhängung und die Querbalken werden als gewichtslos angenommen. Die Buchstaben stehen für unterschiedliche Gewichte (> 0).

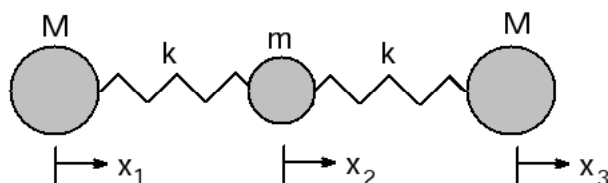
Aufgabe 2: Inverse Matrix

- a) Welche Methoden zur Berechnung inverser Matrizen kennen Sie? Erklären Sie jeweils kurz den Rechenweg. Welche Methode ist für welche Art von Matrix am besten geeignet?
 b) Berechnen Sie mit einer geeigneten Methode die Inverse der folgenden Matrix:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 3 & -2 \\ 0 & -4 & 6 \\ -5 & 0 & 14 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 3: CO_2 -Molekül

Gegeben ist das CO_2 -Molekül:



Die Sauerstoffatome (Masse M) sind mit der Kopplungskonstanten k elastisch an das Kohlenstoffatom (Masse m) gebunden. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass nur direkt benachbarte Massen miteinander koppeln und dass Bewegung nur in einer Dimension möglich ist.

a) Stellen Sie Differentialgleichungen für x_1 , x_2 und x_3 auf. Ergebnis:

$$\begin{pmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \\ \ddot{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k}{M} & -\frac{k}{M} & 0 \\ -\frac{k}{m} & \frac{2k}{m} & -\frac{k}{m} \\ 0 & -\frac{k}{M} & \frac{k}{M} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

b) Berechnen Sie das charakteristische Polynom und die Eigenwerte. Bestimmen Sie die normierten Eigenvektoren.

Aufgabe 4: Bereichsintegral

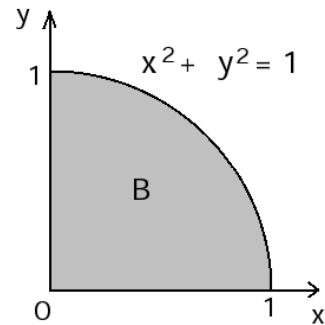
Berechnen Sie das Integral

$$\int_B \int xy \, dx \, dy$$

a) für $B = \{(x,y): 0 \leq x \leq 1, y \geq 0, x + y \leq 1\}$

Skizzieren Sie zuerst den Bereich B.

b) für den in der Skizze gezeigten Bereich.



Aufgabe 5: Linienintegral

Gegeben sei die Kurve $C_1 : s(t) = \begin{pmatrix} \cos t \\ \sin t \\ bt \end{pmatrix}$ mit $t \in [0, \frac{\pi}{2}]$.

a) Beschreiben Sie die Kurve mit Worten.

b) Bestimmen Sie b so, dass die Kurve vom Punkt $(1,0,0)$ zum Punkt $(0,1,1)$ führt.

c) Bestimmen Sie die Parameterdarstellung der Kurve C_2 die diese beiden Punkte auf einer Geraden verbindet.

d) Berechnen Sie das Kurvenintegral $\int_C \vec{K} d\vec{s}$ mit $\vec{K}(x, y, z) = \frac{1}{x^2 + y^2 + z^2} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ vom Punkt $(1,0,0)$ zum Punkt $(0,1,1)$ längs der beiden Kurven C_1 und C_2 .