Theoretische Chemie I
Wichtige Grundlagen der linearen Algebra
Übungen (Teil 1)

Prof. Martin Schütz
Uni Regensburg
WS 2013/14

Necesse est maximorum minima esse initia
(Notwendigerweise sind die kleinsten Dinge die Anfänge der größten)
Publius Syrus

Grundlagen:

Eine (r x c) Matrix $\mathbf{M}$ besteht aus r Zeilen und c Spalten,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & ... & m_{1c} \\ m_{21} & m_{22} & ... & m_{2c} \\ ... & ... & ... & ... \\ m_{r1} & m_{r2} & ... & m_{rc} \end{pmatrix} \tag{1}$$

Die Multiplikation einer (r_a x c_a) Matrix $\mathbf{A}$ und einer (r_b x c_b) Matrix $\mathbf{B}$, wobei gelten muss $c_a = r_b$, ergibt eine (r_a x c_b) Matrix $\mathbf{D}$ mit den Matrixelementen

$$D_{ij} = \sum_{k=1}^{c_a} a_{ik} b_{kj} \ . \tag{2}$$

n-dimensionale Vektoren können wie (n x 1) Matrizen behandelt werden. Das Skalarprodukt zweier n-dimensionaler Vektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{k=1}^{n} a_k b_k \ , \tag{3}$$

kann auch beschrieben werden als Multiplikation zweier (n x 1) Matrizen $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$, wobei die Adjungierte $\mathbf{A}^\dagger$ der Matrix $\mathbf{A}$ gebildet werden muss,

$$(a)^\dagger_{ij} = a^*_{ji} \ , \tag{4}$$

die für reelle Matrizen ($a^*_{ji} = a_{ji}$) der Transponierten entspricht. Das Ergebnis der Multiplikation ist dann eine (1 x 1) Matrix

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \mathbf{A}^\dagger \mathbf{B} \ , \\ c_{11} &= \sum_{k=1}^{n} a_{1k} b_{k1} \ . \end{aligned} \tag{5}$$

Aufgabe 1: Basissatz

Jeder Vektor $\mathbf{a}$ kann durch Angabe von Einheitsvektoren (Basisvektoren) $\mathbf{e_i}$ und den jeweiligen Koeffizienten a_i dargestellt werden:

$$\vec{a} = \mathbf{a} = a_1 \vec{e}_1 + a_2 \vec{e}_2 + a_3 \vec{e}_3 = \sum_i^3 a_i \vec{e}_i \tag{6}$$

Wählen Sie einen *einfachen* Satz von Basisvektoren und geben Sie die Koeffizienten a_i des Vektors

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

in dieser Basis an!

Aufgabe 2: Matrizendarstellung

Orthonormale Basisvektoren haben die Eigenschaft:

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \vec{e}_i^{\,\dagger} \vec{e}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } i = j \\ 0 & \text{wenn } i \neq j \end{cases} \tag{7}$$

Eine Matrix O kann, wie ein Vektor auch, aus den Basisvektoren durch Angabe von Einheitsvektoren und Koeffizienten dargestellt werden.

Zeigen Sie, dass für eine beliebige Matrix $\mathbf{O}$ in dieser Basis

$$\mathbf{O} = \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & O_{13} \\ O_{21} & O_{22} & O_{23} \\ O_{31} & O_{32} & O_{33} \end{pmatrix} \tag{8}$$

gilt:

a) $\vec{e}_i^{\,\dagger} \mathbf{O} \vec{e}_j = O_{ij}$,

b) wenn $\mathbf{O}\,\mathbf{a} = \mathbf{b} \Rightarrow b_i = \sum_j O_{ij} a_j$.

Aufgabe 3: Kommutatoren

Der Kommutator zweier Matrizen $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ ist gegeben durch:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \tag{9}$$

Berechnen Sie den Kommutator für:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{10}$$

Aufgabe 4: Adjungierte und hermitesche Matrizen

a) Zeigen Sie, dass gilt:

$$(\mathbf{A}\,\mathbf{B})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger \tag{11}$$

<u>Hinweis!</u>: Definition der Matrizenmultiplikation

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B} \quad \Longrightarrow \quad C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj} \tag{12}$$

Eine selbstadjungierte Matrix nennt man *hermitesch*: $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$

b) Zeigen Sie, falls das Produkt zweier hermiteschen Matrizen $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ auch hermitesch ist, dass $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ kommutieren (d.h. $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$)!

Aufgabe 5: Spur

Die *Spur* (eng.: trace) einer quadratischen Matrix ist gegeben durch

$$\mathrm{Tr}\mathbf{A} = \sum_i A_{ii} \tag{13}$$

und ist damit die Summe der Diagonalelemente dieser Matrix.

Beweisen Sie:

$$\mathrm{Tr}\,(\mathbf{A}\,\mathbf{B}) = \mathrm{Tr}\,(\mathbf{B}\,\mathbf{A}) \tag{14}$$

$$\mathrm{Tr}\,(\mathbf{A}\,\mathbf{B}\,\mathbf{C}) = \mathrm{Tr}\,(\mathbf{C}\,\mathbf{A}\,\mathbf{B}) = \mathrm{Tr}\,(\mathbf{B}\,\mathbf{C}\,\mathbf{A}) \tag{15}$$

Aufgabe 6: Unitäre Transformation

Mit einer *unitären Transformation* $\mathbf{U}$ kann man eine (quadratische) Matrix (z.B. $\mathbf{A}$) in eine andere Matrix (z.B. $\mathbf{B}$) umwandeln:

$$\mathbf{A} \xrightarrow{U} \mathbf{B} \;\text{ mit }\; \mathbf{B} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{A}\,\mathbf{U} \tag{16}$$

Diese Transformation hat die Eigenschaft:

$$\mathbf{U}^\dagger\,\mathbf{U} = \mathbf{U}\,\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1} \tag{17}$$

a) Wie kann man $\mathbf{B}$ zu $\mathbf{A}$ transformieren?

b) Zeigen Sie, dass die Determinanten der beiden Matrizen gleich sind!

<u>Hinweis!</u> Es gilt: $\det(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \det\mathbf{A} \cdot \det\mathbf{B}$

c) Zeigen Sie, dass sogar die Spuren der beiden Matrizen gleich sind!