Prof. Martin Schütz
Uni Regensburg
WS 2013/14

Mathematik ist das Alphabet, mit dessen Hilfe Gott das Universum beschrieben hat
Galileo Galilei

Aufgabe 1: Eigenwerte und Eigenvektoren

Gegeben sei die folgende *symmetrische* Matrix:

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \tag{1}$$

a) Finden Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von $\mathbf{F}$.

Man kann generell eine hermitesche Matrix durch eine Unitärtransformation diagonalisieren. Die Diagonalelemente sind dann die Eigenwerte der Matrix.

Im Falle einer reellen hermiteschen Matrix kann man sie als *symmetrisch* bezeichnen. Die diagonalisierende Transformation heißt dann *orthogonal*.

Den Diagonalisierungsvorgang können wir i.A. folgendermaßen darstellen:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} U_{11} & U_{21} \\ U_{12} & U_{22} \end{pmatrix}}_{\mathbf{U}^\dagger} \underbrace{\begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{12} & O_{22} \end{pmatrix}}_{\mathbf{O}} \underbrace{\begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix}}_{\mathbf{U}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & \omega_2 \end{pmatrix}}_{\mathbf{o}} \tag{2}$$

In unserem Fall habe die $\mathbf{U}$-Matrix folgende Form:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{3}$$

Sie wird auch "Rotationsmatrix" genannt.

b) Bilden Sie das Produkt $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{O}\mathbf{U}$.

c) Zeigen Sie nun, dass die Matrix $\mathbf{O}$ nur dann durch $\mathbf{U}$ diagonalisiert werden kann, wenn gilt:

$$\frac{1}{2}(O_{11} - O_{22})\sin(2\theta) - O_{12}\cos 2\theta = 0 \tag{4}$$

d) Berechnen Sie θ_0, die Lösung der Gleichung (4), als Funktion von O_{11},O_{12} und O_{22}.

e) Benutzen Sie dieses Ergebnis um die Matrix $\mathbf{F}$ zu diagonalisieren.
Wir wollen die somit diagonalisierte Matrix analog $\mathbf{f}$ nennen.

f) Zeigen Sie, dass man aus $\mathbf{f^2}$ durch unitäre Transformation $\mathbf{F^2}$ erhält.
Tipp: Beachten Sie Gleichung (12) aus dem ersten Übungsblatt.

Aufgabe 2: Inhomogenes lineares Gleichungsystem

Ziel: Man möchte das (inhomogene) lineare Gleichungssystem,

$$\mathbf{Q}^\omega \, \vec{x} = \vec{c} \tag{5}$$

mit $\mathbf{Q}^\omega = (\mathbf{A} - \omega \mathbf{1})$, $\vec{x} =$ Lösung, $\vec{c} =$ Inhomogenität und vorgegebenem ω lösen.

Um dies zu erreichen, kann man das Gleichungssystem von links mit

$$\mathbf{G}^\omega = (\mathbf{Q}^\omega)^{-1} = (\mathbf{A} - \omega \mathbf{1})^{-1} \tag{6}$$

multiplizieren, und kann die Komponenten x_i der Lösung leicht aus dem Produkt

$$x_i = \sum_j \mathbf{G}^\omega_{ij} c_j \tag{7}$$

bestimmen.

- Zeigen Sie, dass gilt:

$$(\mathbf{G}^\omega)_{ij} = \sum_k \frac{U_{ik} U^*_{jk}}{a_k - \omega} \tag{8}$$

  Dabei sind a_k die Eigenwerte der Matrix $\mathbf{A}$ und $\mathbf{U}$ ist die (unitäre) Matrix der Eigenvektoren von $\mathbf{Q}^\omega$.

Hinweis: Um $\mathbf{G}^\omega$ zu erhalten diagonalisieren Sie zuerst $\mathbf{Q}^\omega := (\mathbf{G}^\omega)^{-1}$ mit Hilfe von $\mathbf{U}$. Die so erhaltene Matrix können Sie dann invertieren und anschließend wieder mit $\mathbf{U}$ rücktransformieren (s. dazu auch Aufgabe 6, Blatt 1).

Aufgabe 3: Taylorreihe

Eine ∞-fach differenzierbare Funktion $f(x)$ lässt sich durch eine Taylorreihe,

$$f(x) = f(a) + (x-a)\Big[\frac{d}{dx} f(x)\Big]_{x=a} + \frac{(x-a)^2}{2!}\Big[\frac{d^2}{dx^2} f(x)\Big]_{x=a} + \cdots \tag{9}$$

$$\Rightarrow f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x-a)^n}{n!}\Big[\frac{d^n}{dx^n} f(x)\Big]_{x=a}, \tag{10}$$

um $x = a$ entwickeln.

Entwickeln Sie folgenden Funktion bis zur 4.Ordnung um $a = 0$:

a) $f(x) = \cos(x)$ um $a = 0$

b) $f(x) = \exp(-x)$ um $a = 0$

Aufgabe 4: Lagrange Multiplikatoren (Optimierung mit Nebenbedingungen)

Mit Hilfe der Methode der Lagrange Multiplikatoren kann das Extremum einer Funktion bestimmt werden, deren Variablen durch Nebenbedingungen voneinander abhängen. Dies findet z.B. später in der Vorlesung bei der Hartree-Fock Methode Anwendung. Hier wird die Energie unter der Nebenbedingung der Orthogonalität der Orbitale minimiert.
Die Extremwerte der Funktion $u = f(x, y)$ mit der Nebenbedingung $\phi(x, y) = 0$ werden aus den drei Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\left[f(x,y) + \lambda\phi(x,y)\right] &= 0, && (11) \\ \frac{\partial}{\partial y}\left[f(x,y) + \lambda\phi(x,y)\right] &= 0, && (12) \\ \frac{\partial}{\partial \lambda}\left[f(x,y) + \lambda\phi(x,y)\right] = \phi(x,y) &= 0, && (13) \end{aligned}$$

mit den Unbekannten x, y, λ bestimmt (λ sind die Lagrange Multiplikatoren).
Optimieren Sie nun die Funktion

$$f(x, y) = x^2 + 2y^2 \tag{14}$$

unter der Nebenbedingung

$$x + y = 3. \tag{15}$$