Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Übungen zur Vorlesung
Mathematik II für Studierende der Chemie und Biochemie

1. Betrachten Sie eine Matrix $\mathbf{A}$ mit $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}$. Welche Werte sind für $\det(\mathbf{A})$ möglich?

2. Betrachten Sie folgende Matrizen:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & a \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ b & -1 \end{pmatrix}$$

   Für welche a und b gilt $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{0}$?

3. Zeigen Sie für $n \times n$ Matrizen $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ mit $\mathbf{A}$ regulär und $\lambda \neq 0$:

   (a) $(\mathbf{A}^\dagger)^\dagger = \mathbf{A}$
   (b) $(\lambda \cdot \mathbf{A})^\dagger = \lambda^* \cdot \mathbf{A}^\dagger$
   (c) $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \cdot \mathbf{A}^\dagger$
   (d) $(\lambda \cdot \mathbf{A})^{-1} = \lambda^{-1} \cdot \mathbf{A}^{-1}$
   (e) $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^{-1} = \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A}^{-1}$
   (f) $(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}$
   (g) $(\mathbf{A}^{-1})^\dagger = (\mathbf{A}^\dagger)^{-1}$
   (h) $\det(\lambda \mathbf{A}) = \lambda^n \det(\mathbf{A})$

4. Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften der Spur.

   (a) $\mathrm{tr}\,(\mathbf{AB}) = \mathrm{tr}\,(\mathbf{BA})$ für beliebige Matrizen $\mathbf{A}, \mathbf{B}$, bei denen die Spur definiert ist,
   (b) $\mathrm{tr}\,(\mathbf{C}) = \mathrm{tr}\left(\mathbf{C}^T\right)$ für quadratische Matrizen $\mathbf{C}$,
   (c) $\mathrm{tr}\,(\mathbf{D}) \in \mathbb{R}$ für hermitesche Matrizen $\mathbf{D}$,
   (d) $\mathrm{tr}\,(\mathbf{E}) = \sum_i \lambda_i$ für unitär diagonalisierbare Matrizen $\mathbf{E}$ mit Eigenwerten λ_i,
   (e) $\mathrm{tr}\,(\mathbf{F} + \mathbf{G}) = \mathrm{tr}\,(\mathbf{F}) + \mathrm{tr}\,(\mathbf{G})$ für quadratische Matrizen $\mathbf{F}, \mathbf{G}$,
   (f) $\mathrm{tr}\,(\lambda \mathbf{H}) = \lambda \cdot \mathrm{tr}\,(\mathbf{H})$ für quadratische Matrizen $\mathbf{H}$ und $\lambda \in \mathbb{C}$.

5. Zeigen Sie, dass für quadratische $n \times n$ Matrizen $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{U}$ mit $\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle = \mathrm{tr}\left(\mathbf{A}^\dagger \mathbf{B}\right)$ gilt:
   $\langle (\mathbf{U}^{-1})^\dagger \mathbf{A} | \mathbf{U}\mathbf{B} \rangle = \langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle$

6. Gegeben seien die Matrizen

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathrm{i} & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}.$$

(a) Welche der Matrizen sind symmetrisch, welche sind selbstadjungiert?

(b) Berechnen Sie mit dem Skalarprodukt $\langle \mathbf{M}|\mathbf{N}\rangle := \mathrm{tr}(\mathbf{M}^\dagger \mathbf{N})$ folgende Skalarprodukte:

i. $\langle \mathbf{A}|\mathbf{B}\rangle$,

ii. $\langle \mathbf{A}|\mathbf{A}\rangle$,

iii. $\langle \mathbf{C}|\mathbf{C}\rangle$.

Zusatzaufgaben:

6. $\mathbf{A}$ sei eine reguläre Matrix mit $\det(\mathbf{A}) = 2$. Berechnen Sie
   (a) $\det(\mathbf{A}^2)$
   (b) $\det(\mathbf{A}^T\mathbf{A}^2)$
   (c) $\det\left[(\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{A}^3(\mathbf{A}^T)^2\right]$.
7. Prüfen Sie, ob der Rang folgender Matrizen gleich ihrer Zeilenzahl ist.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 4 \\ 2 & -6 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 4 \\ 4 & -4 & 0 \end{pmatrix}$$

8. Vereinfachen Sie folgenden Ausdruck:
   $(\mathbf{A}+\mathbf{B})^{-1}(\mathbf{A}+\mathbf{B}+\mathbf{C}) \cdot \mathbf{C}^{-1}$
9. Gegeben seien folgende Matrizen:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 4 \\ 1 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i} \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & \mathrm{i} & 1 \\ -\mathrm{i} & 4 & 5 \end{pmatrix}$$

   Berechnen Sie mit dem Skalarprodukt $\langle \mathbf{M}|\mathbf{N}\rangle := \mathrm{tr}(\mathbf{M}^\dagger\mathbf{N})$ folgende Skalarprodukte:
   (a) $\langle \mathbf{A}|\mathbf{B}\rangle$,
   (b) $\langle \mathbf{A}|\mathbf{A}\rangle$,
   (c) $\langle \mathbf{C}|\mathbf{C}\rangle$.