

Seminar 'Mathematik für Chemiker'

7. Übung: Matrizen II

Aufgabe 1: Gauß-Algorithmus und Determinante

a) Lösen Sie mittels Gauß-Algorithmus folgendes lineares Gleichungssystem in Abhängigkeit von q :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 10 & 4 & 14 \\ 0 & q^2 & q \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

b) Bestimmen Sie die Determinante $|\mathbf{A}|$ der Matrix $\mathbf{A}$ in Abhängigkeit von q . Für welche Werte von q ist $|\mathbf{A}| = 0$? Was stellen Sie im Vergleich zu Aufgabe a) fest?

Aufgabe 2: Inverse, spezielle Eigenschaften und Spur von Matrizen

- Für die Inverse $\mathbf{M}^{-1}$ zur quadratischen Matrix $\mathbf{M}$ gilt: $\mathbf{M}\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{M} = \mathbf{1}$ (Einheitsmatrix).
- Eine Matrix heißt hermitesch, wenn sie gleich ihrer Adjungierten ist (selbst-adjungiert).
- Eine Matrix heißt unitär, wenn Adjungierte und Inverse der Matrix gleich sind.
- Eine reelle, unitäre Matrix heißt orthogonal.
- Die Spur ($\text{Tr } \mathbf{M}$) einer quadratischen Matrix $\mathbf{M}$ ist die Summe aller Hauptdiagonalelemente m_{ii} .

Gegeben seien die Matrizen:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} (0+1i)^2 & 3 \\ 3 & -1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{12}{13} + \frac{5}{13}i \\ \frac{12}{13} - \frac{5}{13}i & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

- a) Bilden Sie mittels Gauß-Algorithmus die Inversen der Matrizen $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$.
- b) Welche der Matrizen ist hermitesch? Wie kann eine reelle, hermitesche Matrix bezeichnet werden?
- c) Zeigen Sie, dass für eine unitäre Matrix $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = \mathbf{1}$ und für eine orthogonale Matrix $\mathbf{M}\mathbf{M}^T = \mathbf{1}$ gilt.
- d) Welche der Matrizen ist unitär? Welche ist orthogonal?
- e) Berechnen Sie $\text{Tr}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$ und $\text{Tr}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{A})$. Welche Regel könnte man aus dem Ergebnis ableiten?
- f) Zeigen Sie mithilfe der Regel aus e), dass für zwei beliebige quadratische Matrizen $\mathbf{P}$ und $\mathbf{Q}$ ($\mathbf{Q}$ ist invertierbar) gilt:

$$\text{Tr } \mathbf{P} = \text{Tr}(\mathbf{Q}^{-1} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{Q}) \quad (3)$$

g) Stellen Sie folgende Matrix-Gleichung nach $\mathbf{X}$ um:

$$(\mathbf{X} \cdot \mathbf{P})^T = \mathbf{X}^T + \mathbf{Q} \quad (4)$$