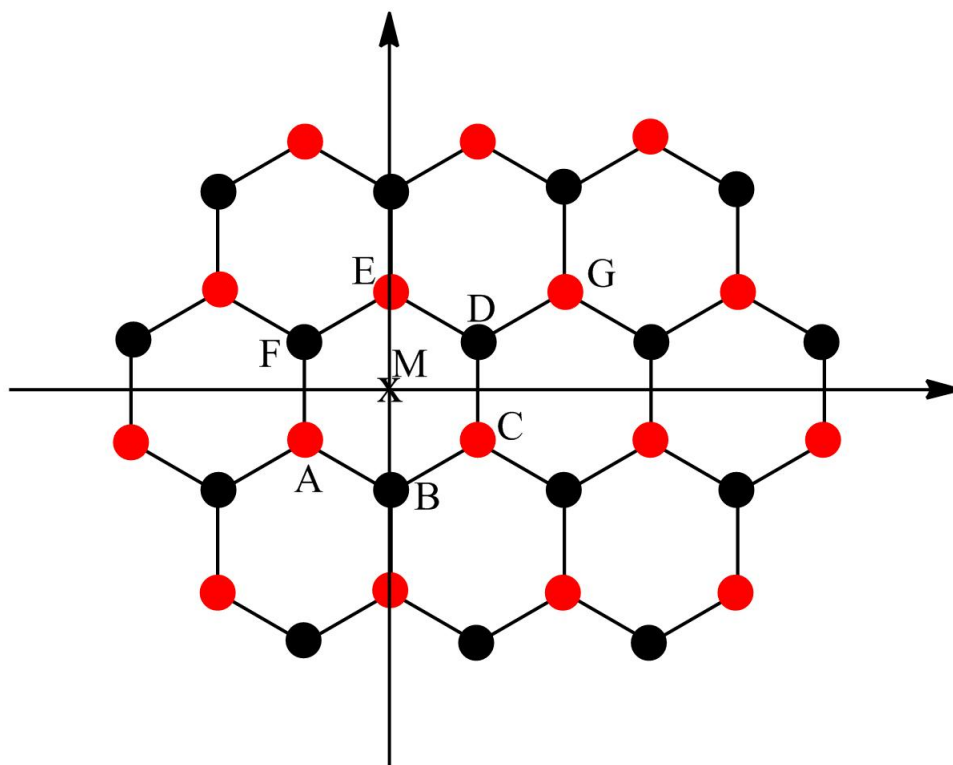


8.Übung: Lineare Abbildungen - Symmetrie und Eigenwertprobleme

Aufgabe 1: Symmetrieeoperatoren

Bei linearen Abbildungen wird ein Vektor (Punkt) $\vec{v}$ mithilfe einer Abbildungsmatrix $\mathbf{A}$ auf einen anderen Vektor (Punkt) $\vec{v}'$ wie folgt abgebildet:

$$\vec{v}' = \mathbf{A} \cdot \vec{v} \quad (1)$$



Eine ideale Graphen-Schicht (siehe Abbildung) wird durch zwei versetzt angeordnete, hexagonale 2D-Gitter (rot und schwarz) beschrieben.

a) Wir schneiden zunächst gedanklich aus dem Graphen das Sechseck ABCDEF aus und sättigen die C-Atome mit je einem H-Atom ab. Im erhaltenen Benzol-Molekül sind C(1,23|-0,71) und M(0|0).

- Erklären Sie die Symmetrieeoperationen Identität, Inversion, Rotation. Welche liegen im Benzol vor?
- Wie sehen die Abbildungsmatrizen für die Identität und die Inversion (Inversionszentrum (0|0)) aus?
- Berechnen Sie die Punkte A und E durch Rotation des Punktes C um den jeweiligen Winkel φ mit der Abbildungsmatrix $\mathbf{A}$ der Rotation (Gl. 2). Berechnen Sie die Punkte B und F durch Inversion.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \quad (2)$$

- Welche weiteren Symmetrieeoperationen gibt es in Molekülen?
- **Zusatz:** Leiten Sie die 2D-Rotationsmatrix $\mathbf{A}$ her. (Hinweis: Transformieren (rotieren) Sie die kanonischen Basisvektoren des Koordinatensystems.)

b) Nun wenden wir uns den Kristallgittern zu. Betrachten Sie zunächst nur das rote Gitter.

- Welche Art von Symmetrie liegt in einer idealen periodischen Kristallstruktur stets vor?
- Wie können alle diese Gitterpunkte in einer Ebene mathematisch beschrieben werden? Ist die Symmetrioperation für die Periodizität nach dieser Beschreibung eine lineare Abbildung?
- Geben Sie diese Beschreibung explizit für das gegebene Beispiel an (A als "Ausgangspunkt").
- Was würde sich an der allgemeinen Beschreibung ändern, wenn statt eines 2D- ein 3D-Gitter vorläge?

c) Jetzt nehmen wir auch das schwarze Gitter hinzu.

- Tragen Sie, basierend auf den Überlegungen aus b), die Elementarzelle des Graphen-Gitters ein.
- Wie viele Atome enthält eine einzelne Elementarzelle?
- Ermitteln Sie die Koordinaten der Punkte G und D.
- Geben Sie auch die mathematische Beschreibung des schwarzen Gitters an ("Ausgangspunkt" D).

Aufgabe 2: Eigenwerte, Eigenvektoren und Diagonalisierung einer Matrix

Soll bei der linearen Abbildung eines Vektors $\vec{v}$ mit der Matrix $\mathbf{A}$ ein Vielfaches dieses Vektors gebildet werden, so spricht man von einem Eigenwertproblem (Gl. 3). Dann ist $\vec{v}$ ein Eigenvektor und λ ein Eigenwert zur Abbildungsmatrix $\mathbf{A}$.

$$\mathbf{A} \cdot \vec{v} = \lambda \cdot \vec{v} \quad (3)$$

$$(\mathbf{A} - \lambda \cdot \mathbf{1}) \cdot \vec{x} = 0 \quad (4)$$

Letztere Gleichung ist ein homogenes LGS, das nur die Nulllösung ($\vec{x} = \vec{0}$) besitzt, wenn die Determinante von $(\mathbf{A} - \lambda \cdot \mathbf{1})$ ungleich 0 ist. Damit das LGS aber von $\vec{0}$ verschiedene Lösungen besitzt, muss gelten:

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \cdot \mathbf{1}) = 0 \quad (5)$$

Die Eigenwerte erhält man durch Lösen von Gl. 5. Zu jedem Eigenwert kann dann durch Lösen der Eigenwertgleichung (Gl. 3), die ebenfalls ein LGS ist, ein Eigenvektor bestimmt werden.

Eigenwertprobleme spielen auch in den Methoden der Computerchemie eine wichtige Rolle. Dabei ist oft die Diagonalmatrix $\mathbf{D}$ der Eigenwerte einer Matrix $\mathbf{A}$ sowie die Transformationsmatrix $\mathbf{T}$, deren Spalten die Eigenvektoren von $\mathbf{A}$ sind, gesucht. Es gilt dann folgende Transformationsgleichung:

$$\mathbf{D} = \mathbf{T}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{T} \quad (6)$$

a) Berechnen Sie zur Matrix $\mathbf{A}$ die Eigenwerte und Eigenvektoren.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 5 & -8 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} \quad (7)$$

b) Weisen Sie nach, dass die obige Transformationsgleichung (Gl. 6) für Matrix $\mathbf{A}$ erfüllt ist.

c) Weisen Sie allgemein nach, dass diese Transformationsgleichung (Gl. 6) äquivalent ist zu:

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{T}^{-1} \quad (8)$$