9) Matrizen und Determinanten

Notiztitel 06.09.2012

Definition:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & & & \vdots \\ a_{31} & & & \vdots \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & \dots & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} = (a_{ij})_{\substack{i=1\dots n \\ j=1\dots m}}$$

$n \times m$ Matrix

Zeilen (n), Spalten (m)

- quadratische Matrix $n = m$
- diagonale Matrix $a_{ij} = 0 \;\forall\, i \neq j \iff a_{ij} = \delta_{ij} a_i$

$$\begin{pmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_2 & \\ 0 & & \ddots \\ & & & a_n \end{pmatrix}$$

- Einheitsmatrix $\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}$ $e_{ij} = \delta_{ij}$

i-ter Zeilenvektor $(a_{i1}, a_{i2}, a_{i3} \dots a_{im})$ $(1 \times m)$-Matrix

j-ter Spaltenvektor $\begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ a_{3j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{pmatrix}$ $(n \times 1)$ Matrix

- Zeilenrang: Anzahl der linear unabhängigen Zeilenvektoren
- Spaltenrang: " " " " Spaltenvektoren

Es gilt Spaltenrang = Zeilenrang = Rang einer Matrix

Bsp (statt Beweis): $A = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 \\ 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ Zeilen

Zeilenrang = 2 ; denn $\alpha_1 \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = 0$ nur für $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$

Spaltenrang = 2 ; denn : $\begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix} + 2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} - 3\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} = 0$

und $\beta_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} + \beta_2 \begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} = 0$ nur für $\beta_1 = \beta_2 = 0$

9.1. Rechenregeln für Matrizen

- Skalare Multiplikation : $A = (a_{ij})$, $\lambda \in \mathbb{R}$: $\lambda \cdot A = (\lambda a_{ij})$

- Addition von Matrizen: $A = (a_{ij})$; $B = (b_{ij})$ sind $n \times m$ Matrizen

$\Rightarrow C = A + B = (c_{ij})$ mit $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$ $\quad C$ ist $n \times m$ Matrix

- Multiplikation von Matrizen: $A = (a_{ij})$ $m \times n$ Matrix

$B = (b_{ij})$ $n \times r$ Matrix

Spaltenzahl n von A = Zeilenzahl n von B

$\Rightarrow$ $C = A \cdot B = (c_{ij})$ ist eine $m \times r$ Matrix

mit $c_{ij} = a_{ik} \cdot b_{kj} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} \cdot b_{kj}$

C_{ij} ist Skalarprodukt des i-ten Zeilenvektors von A mit dem j-ten Spaltenvektor von B.

$$\begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ \\ \vdots \\ m \end{array}
\begin{pmatrix} \cdots & & & \\ \cdots & & & \\ \cdots & & & \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ \cdots & & & \\ \cdots & & & \\ \cdots & & & \end{pmatrix}
\cdot
\begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} 1 & \cdots & j & \cdots & r \end{array} \\
\begin{pmatrix} \vdots & \vdots & b_{1j} & \vdots & \vdots \\ & & b_{2j} & & \\ & & \vdots & & \\ & & b_{nj} & & \end{pmatrix} \end{array}
=
\begin{array}{cc} \begin{array}{ccccc} 1 & \cdots & i & \cdots & m \end{array} & \\
\begin{pmatrix} & & \vdots & & \\ \cdots & & c_{ij} & & \cdots \\ & & \vdots & & \end{pmatrix} & \begin{array}{c} 1 \\ \vdots \\ j \\ \vdots \\ r \end{array} \end{array}$$

Nur für quadratische Matrizen existieren $A \cdot B$ und $B \cdot A$.

Allgemein gilt $A \cdot B \neq B \cdot A$

also $$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{jk} \neq \sum_{j=1}^{n} b_{ij} a_{jk}$$

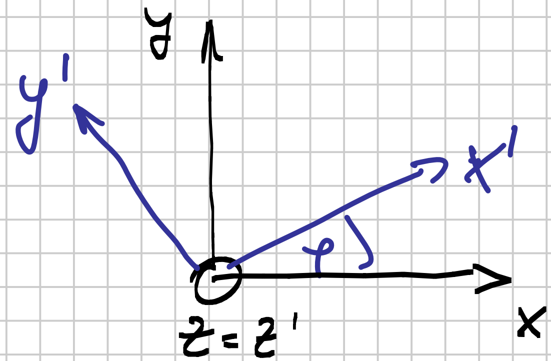
Im Folgenden werden nur noch quadratische Matrizen betrachtet.

- Symmetrische Matrizen: $A = (a_{ij})$ mit $a_{ij} = a_{ji}$
- transponierte Matrix: $A = (a_{ij})$ $\quad A^T = (\tilde{a}_{ij}) = (a_{ji})$
- inverse Matrix: $A = (a_{ij})$ $\quad A^{-1} \cdot A = E = (\delta_{ij})$

Für Drehmatrizen gilt $D^{-1} = D^T \Rightarrow D^T \cdot D = E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Bsp.: Drehung um z-achse um φ:

$$D = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



D^{-1}: Drehung um $-\varphi$: $$D^{-1} = \begin{pmatrix} \cos(-\varphi) & \sin(-\varphi) & 0 \\ -\sin(-\varphi) & \cos(-\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = D^T$$

$$D^{-1} \cdot D = \begin{pmatrix} \cos^2\varphi + (-\sin\varphi)^2 & \cos\varphi\sin\varphi - \sin\varphi\cos\varphi & 0 \\ \sin\varphi\cos\varphi - \cos\varphi\sin\varphi & \sin^2\varphi + \cos^2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

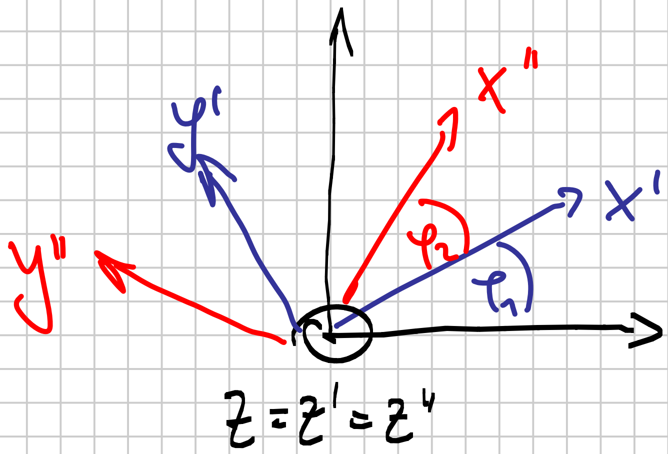
Betrachte 2 Drehungen nacheinander um φ_1 bzw φ_2 jeweils um z-Achse

$$D_1 = \begin{pmatrix} \cos\varphi_1 & \sin\varphi_1 & 0 \\ -\sin\varphi_1 & \cos\varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad D_2 = \begin{pmatrix} \cos\varphi_2 & \sin\varphi_2 & 0 \\ -\sin\varphi_2 & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Gesamtdrehung $D = D_2 \cdot D_1$

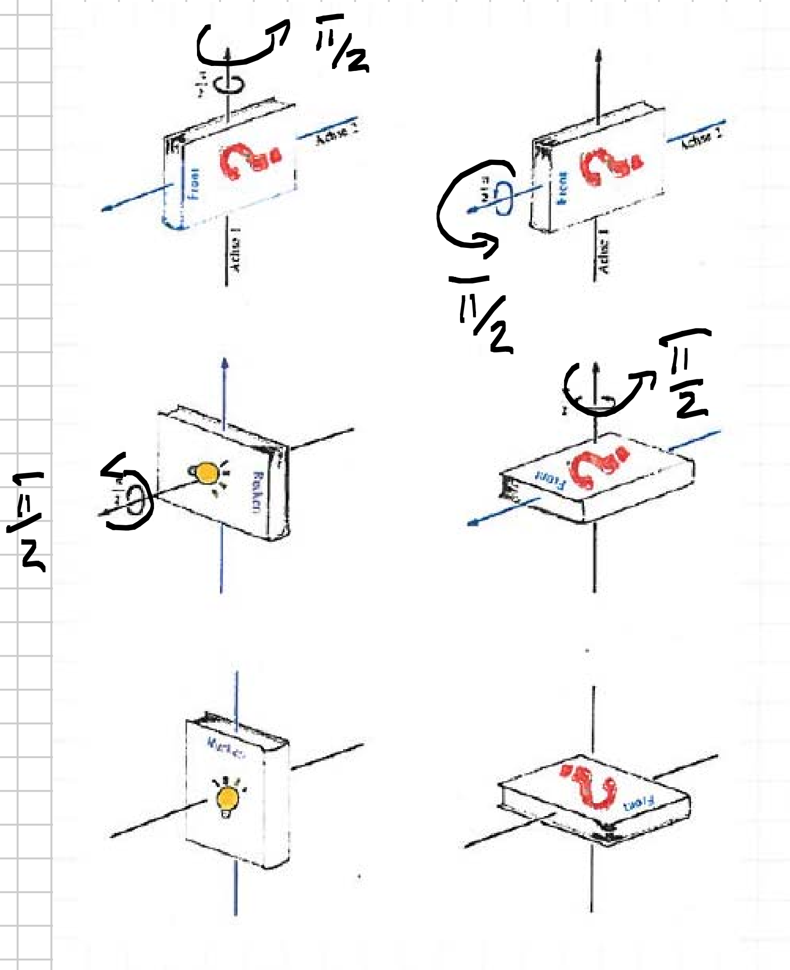
$$= \begin{pmatrix} \cos\varphi_1 \cos\varphi_1 - \sin\varphi_2 \sin\varphi_1 & \cos\varphi_2 \sin\varphi_1 + \sin\varphi_2 \cos\varphi_1 & 0 \\ -\sin\varphi_2 \cos\varphi_1 - \cos\varphi_2 \sin\varphi_1 & -\sin\varphi_2 \sin\varphi_1 + \cos\varphi_2 \cos\varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D = D_2 \circ D_1 = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_1 + \varphi_2) & \sin(\varphi_1 + \varphi_2) & 0 \\ -\sin(\varphi_1 + \varphi_2) & \cos(\varphi_1 + \varphi_2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Drehwinkel addieren sich

Drehungen um verschiedene Achsen:



- Ergebnis unterschiedlich

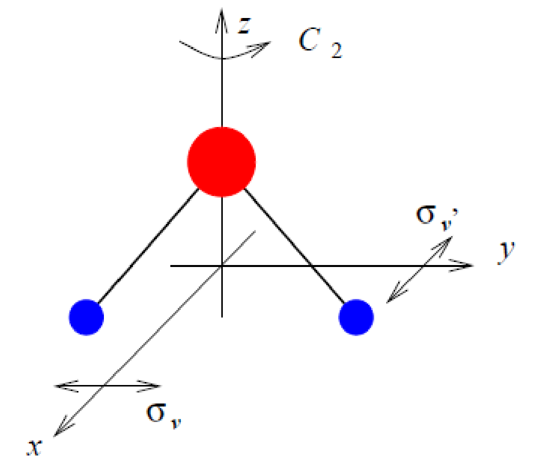
„2 nach 1"

$$D_{gesamt} = D_2 \cdot D_1$$

$$D_2 \cdot D_1 \neq D_1 \cdot D_2$$

- Reihenfolge der Drehungen beachten

Beispiel aus der Wissenschaft:



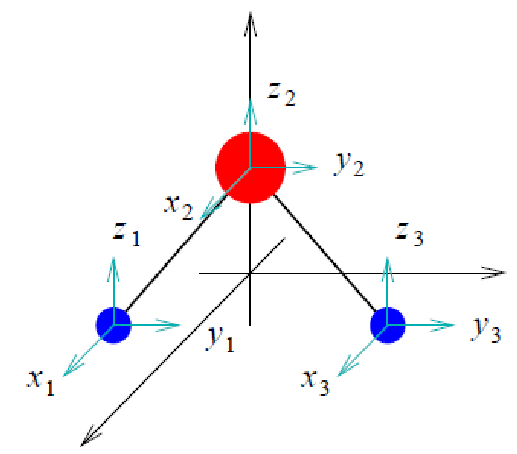
4 Symmetrieoperationen für H_2O - Molekül:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}, \quad C_2 = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_v = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_v' = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

Identität — Drehung $\frac{360}{2}$ — Spiegelung 1 — Spiegelung 2

Nacheinanderausführen von Symmetrieoperationen:

$$\sigma_v C_2 = C_2 \sigma_v = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} = \sigma_v'$$



Multiplikationstabelle

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'
E	E	C_2	σ_v	σ_v'
C_2	C_2	E	σ_v'	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	E	C_2
σ_v'	σ_v'	σ_v	C_2	E

Gruppe

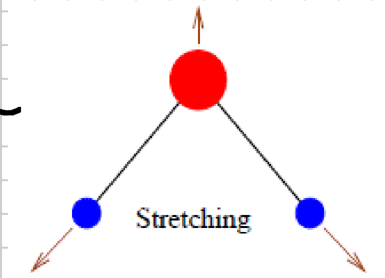
(mathematisches Objekt)

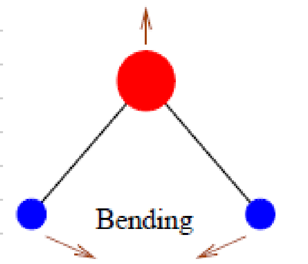
3N-Koordinaten (Freiheitsgrade) für Bewegung der $N=3$ Atome

wie H_2O: 9 Freiheitsgrade

Symmetrische

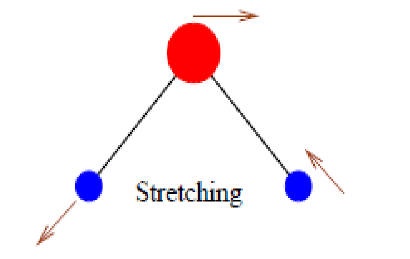
A_1





Antisymmetrische

B_2



Translation: 3

Rotation: 3

Schwingung: $3N-6 = 3$

Symmetrieoperationen

Mögliche Symmetrien der Gruppe

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ'_v	
A_1	1	1	1	1	z
A_2	1	1	-1	-1	R_z
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x
$\Gamma_{x,y,z}$	3	-1	1	1	

Koordinaten der Bewegung

Charaktertafel für C_{2v} - Gruppe

$$\left(\begin{array}{c} \text{irreduzibele} \\ \text{Darstellungen} \end{array} \right)$$