Blatt 08: Matrizen III: Unitär, Orthogonal, Diagonalisierung

Ausgabe: Mo 05.12.22 Zentralübung: Do 08.12.22 Abgabe: Do 15.12.22, 14:00
(b)[2](E/M/A) bedeutet: Aufgabe (b) zählt 2 Punkte und ist einfach/mittelschwer/anspruchsvoll
Vorschläge für Zentralübung: Beispielaufgaben 2, 5, 6.
Videos existieren für Beispielaufgaben 2 (L7.3.1), 6 (C4.5.5).

Beispielaufgabe 1: Orthogonale und unitäre Matrizen [2]
Punkte: (a)[1](E); (b)[0,5](E); (c)[0,5](E).

(a) Ist die untenstehende Matrix A orthogonal? Ist B unitär?

$$A = \begin{pmatrix} \sin\theta & \cos\theta \\ -\cos\theta & \sin\theta \end{pmatrix}, \qquad B = \frac{1}{1-\mathrm{i}} \begin{pmatrix} 2 & 1+\mathrm{i} & 0 \\ 1+\mathrm{i} & -1 & 1 \\ 0 & 2 & \mathrm{i} \end{pmatrix}$$

(b) Sei $\mathbf{x} = (1,2)^T$. Berechnen Sie $\mathbf{a} = A\mathbf{x}$ explizit, sowie die Norm von $\mathbf{x}$ und $\mathbf{a}$. Erhält die Wirkung von A auf $\mathbf{x}$ dessen Norm?

(c) Sei $\mathbf{y} = (1,2,\mathrm{i})^T$. Berechnen Sie $\mathbf{b} = B\mathbf{y}$ explizit, sowie die Norm von $\mathbf{y}$ und $\mathbf{b}$. Erhält die Wirkung von B auf $\mathbf{y}$ dessen Norm?

Beispielaufgabe 2: Matrixdiagonalisierung [4]
Punkte: (a)[1](E); (a)[1](E); (c)[2](E).

Finden Sie für jede der folgenden Matrizen die Eigenwerte λ_j, einen Satz Eigenvektoren $\mathbf{v}_j$, sowie eine Ähnlichkeitstransformation, T, und ihre Inverse, T^{-1}, für die $T^{-1}AT$ diagonal ist.

(a) $A = \begin{pmatrix} -1 & 6 \\ -2 & 6 \end{pmatrix}$, (b) $A = \begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 0 \\ 2 & \mathrm{i} \end{pmatrix}$ (c) $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2\mathrm{i} & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

[Konsistenzchecks: Erfüllen die Eigenwerte $\sum_j \lambda_j = \mathrm{Tr}\, A$ und $\prod_j \lambda_j = \det A$? Ergibt $T^{-1}AT$ eine Matrix, $D = \mathrm{diag}\{\lambda_j\}$, die die Eigenwerte auf der Diagonalen enthält, oder umgekehrt, ergibt TDT^{-1} wieder A? Welchen der letzten beiden Checks finden Sie effizienter?]

Beispielaufgabe 3: Diagonalisierung symmetrischer oder hermitescher Matrizen [4]
Punkte: (a)[1](E); (a)[1](E); (c)[2](E).

Finden Sie für jede der folgenden Matrizen die Eigenwerte λ_j, einen Satz Eigenvektoren $\mathbf{v}_j$, sowie eine Ähnlichkeitstransformation, T, und ihre Inverse, T^{-1}, für die $T^{-1}AT$ diagonal ist.

(a) $A = \begin{pmatrix} 3 & -4 \\ -4 & -3 \end{pmatrix}$, (b) $A = \begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}$, (c) $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 1 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Hinweis: Jede dieser Matrizen ist entweder symmetrisch oder hermitesch. Daher kann T orthogonal bzw. unitär gewählt werden, was die Berechnung der Inversen vereinfacht durch $T^{-1} = T^T$ bzw. $T^{-1} = T^\dagger$. Um dies zu erreichen, müssen die Spalten von T, die die Eigenvektoren $\mathbf{v}_j$ enthalten, ein Orthonormalsystem bezüglich des reellen bzw. komplexen Skalarprodukts bilden. Daher ist es sinnvoll, alle Eigenvektoren zu normieren, $\|\mathbf{v}_j\| = 1$. Bedenken Sie weiterhin, dass nicht-entartete Eigenvektoren von symmetrischen bzw. hermitschen Matrizen stets orthogonal sind.

[Konsistenzchecks: Ergeben die Summe bzw. das Produkt aller Eigenwerte $\mathrm{Tr}(A)$ bzw. $\det(A)$? Wenn D die Diagonalmatrix ist, die die Eigenwerte enthält, ergibt TDT^{-1} wieder A?]

Beispielaufgabe 4: Diagonalisierung einer Matrix, die eine Variable enthält [2]
Punkte: [2](M).

Gegeben ist die von der Variable $x \in \mathbb{R}$ abhängige Matrix $A = \begin{pmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 3-x & -1 & 3 \end{pmatrix}$. Finden Sie die Eigenwerte λ_j und die Eigenvektoren $\mathbf{v}_j \in \mathbb{R}^3$ von A als Funktionen von x, mit $j = 1, 2, 3$.
Hinweise: Einer der Eigenwerte ist $\lambda = x$. (Auch die anderen Ergebnisse können natürlich von x abhängen.) Vermeiden Sie das vollständige Ausmultiplizieren des charakteristischen Polynoms; versuchen Sie stattdessen, es direkt in eine vollständig faktorisierte Form zu bringen! [Kontrollergebnis: für $x = 4$ sind zwei der (unnormierten) Eigenvektoren durch $(1, -2, -1)^T$ und $(1, -1, -2)^T$ gegeben.]

Beispielaufgabe 5: Entartetes Eigenwertproblem [3]
Punkte: [3](A).

Finden Sie für die Matrix $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & -2 \\ 2 & -2 & 5 \end{pmatrix}$ die Eigenwerte λ_j, einen Satz *orthonormaler* Eigenvektoren $\mathbf{v}_j \in \mathbb{R}^3$ und eine Ähnlichkeitstransformation T, sowie deren Inverse, T^{-1}, für die $T^{-1}AT$ diagonal ist. *Hinweis:* Ein Eigenwert ist $\lambda_1 = 1$.
[Konsistenzchecks: Ergeben die Summe bzw. das Produkt aller Eigenwerte $\mathrm{Tr}(A)$ bzw. $\det(A)$? Wenn D die Diagonalmatrix ist, die die Eigenwerte enthält, ergibt TDT^{-1} wieder A?]

Beispielaufgabe 6: Allgemeine Gauß-Integrale [4]
Punkte: (a)[2](M); (b)[1](E); (c)[1](E).

Mehrfach-Gauß-Integrale sind Integrale der Form

$$I = \int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}x^1 ... \mathrm{d}x^n \, \mathrm{e}^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x}} \, ,$$

wobei $\mathbf{x} = (x^1, ..., x^n)^T$ und die Matrix A symmetrisch und positiv-definit ist (d.h. alle Eigenwerte von A sind > 0). Die kennzeichnende Eigenschaft dieser Klasse von Integralen ist, dass der Exponent eine 'quadratische Form', d.h. eine *quadratische* Funktion aller Integrationsvariablen ist. In der Regel enthält diese Funktion Mischterme, aber diese können mittels einer Basistransformation beseitigt werden: Sei T die Ähnlichkeitstransformation, die A diagonalisiert, sodass $D = T^{-1}AT$ diagonal ist, mit Eigenwerten $\lambda_1, ..., \lambda_n$. Da A symmetrisch ist, kann T orthogonal gewählt werden, mit $T^{-1} = T^T$ und $\det T = 1$. Sei nun $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}^1, ..., \tilde{x}^n)^T$ definiert durch $\tilde{\mathbf{x}} \equiv T^T \mathbf{x}$, dann gilt

$$\mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \mathbf{x}^T T D T^T \mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}}^T D \, \tilde{\mathbf{x}} = \sum_i \lambda_i (\tilde{x}^i)^2 \, . \tag{1}$$

Ausgedrückt durch die neuen Variablen $\tilde{\mathbf{x}}$ enthält der Exponent folglich keine Mischterme mehr, sodass das Gauß-Integral durch die Variablensubstitution $\mathbf{x} = T\tilde{\mathbf{x}}$ gelöst werden:

$$I = \int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}x^1 ... \mathrm{d}x^n \, \mathrm{e}^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x}} = \int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}\tilde{x}^1 ... \mathrm{d}\tilde{x}^n \, J \, \mathrm{e}^{-\sum_i^n \lambda_n (\tilde{x}^i)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_1}} ... \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_n}} = \boxed{\sqrt{\frac{\pi^n}{\det A}}} \, .$$

Dabei haben wir zwei Tatsachen genutzt: (i) Da $\partial x^i / \partial \tilde{x}^j = T^i_{\ j}$, ist die Jacobi-Determinante der Variablentransformation gleich der Determinante von T und somit gleich 1:

$$J = \left| \frac{\partial(x^1, ..., x^n)}{\partial(\tilde{x}^1, ..., \tilde{x}^n)} \right| = \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial x^1}{\partial \tilde{x}^1} & \cdots & \frac{\partial x^1}{\partial \tilde{x}^n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial x^n}{\partial \tilde{x}^1} & \cdots & \frac{\partial x^n}{\partial \tilde{x}^n} \end{pmatrix} \right| = \left| \det \begin{pmatrix} T^1_{\ 1} & \cdots & T^1_{\ n} \\ \vdots & & \vdots \\ T^n_{\ 1} & \cdots & T^n_{\ n} \end{pmatrix} \right| = |\det T| = 1 \, .$$

(ii) Das Produkt der Eigenwerte einer Matrix ist gleich ihrer Determinante, $\prod_i^n \lambda_i = \det A$.

Benutzen Sie nun obige Strategie, um folgendes Integral zu berechnen ($a > 0$):

$$I(a) = \int_{\mathbb{R}^2} \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{e}^{-\left[(a+3)x^2 + 2(a-3)xy + (a+3)y^2\right]}$$

Führen Sie alle Schritte der obigen Argumentation explizit durch:

(a) Schreiben Sie den Exponenten in der Form $-\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ mit $\mathbf{x} = (x, y)^T$ und A symmetrisch. Identifizieren und diagonalisieren Sie die Matrix A. Schreiben Sie insbesondere die Gleichung (1) für den aktuellen Fall explizit auf.

(b) Finden Sie T. Berechnen Sie die Jacobi-Determinante explizit.

(c) Was ist der Wert des Gauß-Integrals? [Kontrollergebnis: $I(1) = \frac{\pi}{2\sqrt{3}}$.]

Beispielaufgabe 7: Spin-$\frac{1}{2}$ Matrizen: Eigenwerte und Eigenvektoren [Bonus]
Punkte: [3](Bonus,E).

Zur Beschreibung quantenmechanischer Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ werden folgende Matrizen benutzt:

$$S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \qquad S_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} , \qquad S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Berechnen Sie für jede Matrix S_j ($j = x, y, z$), die zwei Eigenwerte $\lambda_{j,a}$ und normierten Eigenvektoren $\mathbf{v}_{j,a}$ ($a = 1, 2$). Wählen Sie die Phase des Eigenvektornormierungsfaktors so, dass die 1-Komponente, $v^1_{j,a}$ (oder, falls diese verschwindet, die 2-Komponente), positiv und reell ist. [Ergebniskontrolle: alle drei Matrizen haben dieselben Eigenwerte, und es gilt $\sum_{a=1}^2 \lambda_{j,a} = 0$.]

[Gesamtpunktzahl Beispielaufgaben: 19]

Hausaufgabe 1: Orthogonale und unitäre Matrizen [2]
Punkte: (a)[1](E); (b)[0,5](E); (c)[0,5](E)

(a) Entscheiden Sie bei folgenden Matrizen, ob sie jeweils orthogonal bzw. unitär sind:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad B = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ -2 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad C = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathrm{i} & 1 \\ -1 & -\mathrm{i} \end{pmatrix}$$

(b) Sei $\mathbf{x} = (1, 2, -1)^T$. Berechnen Sie $\mathbf{a} = A\mathbf{x}$ und $\mathbf{b} = B\mathbf{x}$ explizit, sowie die Norm von $\mathbf{x}$, $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$. Welche dieser Normen sollten gleich sein? Warum?

(c) Sei $\mathbf{y} = (1, \mathrm{i})^T$. Berechnen Sie $\mathbf{c} = C\mathbf{y}$ explizit, sowie die Norm von $\mathbf{y}$ und $\mathbf{c}$. Sollten die Normen gleich sein? Warum?

Hausaufgabe 2: Matrixdiagonalisierung [4]
Punkte: (a)[1](E); (a)[1](E); (c)[2](E).

Finden Sie für jede der folgenden Matrizen die Eigenwerte λ_j und einen Satz Eigenvektoren $\mathbf{v}_j$. Wählen Sie das erste Element jedes Eigenvektors gleich eins, $\mathbf{v}^1_j = 1$. Finden Sie außerdem eine Ähnlichkeitstransformation, T, und ihre Inverse, T^{-1}, für die $T^{-1}AT$ diagonal ist.

(a) $A = \begin{pmatrix} 4 & -6 \\ 3 & -5 \end{pmatrix}$, (b) $A = \begin{pmatrix} 2-\mathrm{i} & 1+\mathrm{i} \\ 2+2\mathrm{i} & -1+2\mathrm{i} \end{pmatrix}$ (c) $A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 3 & -1 & 2 \end{pmatrix}$.

[Konsistenzchecks: Ergeben die Summe bzw. das Produkt aller Eigenwerte $\mathrm{Tr}(A)$ bzw. $\det(A)$? Wenn D die Diagonalmatrix ist, die die Eigenwerte enthält, ergibt TDT^{-1} wieder A?]

Hausaufgabe 3: Diagonalisierung symmetrischer oder hermitescher Matrizen [4]
Punkte: (a)[1](E); (a)[1](E); (c)[2](E).

Finden Sie für jede der folgenden Matrizen die Eigenwerte λ_j, einen Satz Eigenvektoren $\mathbf{v}_j$, sowie eine Ähnlichkeitstransformation, T, und ihre Inverse, T^{-1}, für die $T^{-1}AT$ diagonal ist.

(a) $A = \frac{1}{10}\begin{pmatrix} -19 & 3 \\ 3 & -11 \end{pmatrix}$, (b) $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, (c) $A = \begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i} & 0 \\ -\mathrm{i} & 2 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}$.

[Konsistenzchecks: Ergeben die Summe bzw. das Produkt aller Eigenwerte $\mathrm{Tr}(A)$ bzw. $\det(A)$? Wenn D die Diagonalmatrix ist, die die Eigenwerte enthält, ergibt TDT^{-1} wieder A?]

Hausaufgabe 4: Diagonalisierung einer Matrix, die zwei Variablen enthält: Qubit [3]
Punkte: (a)[1](M); (b)[2](M)

Ein Qubit (für "Quantenbit" = Quantenversion eines klassischen Bits) ist ein manipulierbares Zweizustands-Quantensystem (`http://de.wikipedia.org/wiki/Qubit`). Die einfachste Version eines Qubits wird durch die Matrix $H = \begin{pmatrix} B & \overline{\Delta} \\ \Delta & -B \end{pmatrix}$ beschrieben, mit $B \in \mathbb{R}$ und $\Delta \in \mathbb{C}$.

(a) Berechnen Sie die Eigenwerte E_j (wählen Sie $E_1 < E_2$) und normierten Eigenvektoren $\mathbf{v}_1$ und $\mathbf{v}_2$ von H als Funktionen von B, Δ und $X \equiv [B^2 + |\Delta|^2]^{1/2}$.

(b) Zeigen Sie, dass die Eigenvektoren in die Form $\mathbf{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -\sqrt{1-Y} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sqrt{1+Y} \end{pmatrix}$ und $\mathbf{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \sqrt{1+Y} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sqrt{1-Y} \end{pmatrix}$ gebracht werden können, wobei $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$ der Phasenfaktor von $\Delta \equiv |\Delta|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$ ist. Wie lautet Y als Funktion von B und X? Skizzieren Sie, als Funktion von $B/|\Delta| \in \{-\infty, \infty\}$ bei festem $|\Delta|$, erstens E_1 und E_2, zweitens $|v^1_1|^2$ und $|v^2_1|^2$, die betragsquadrierten Komponenten des Eigenvektors $\mathbf{v}_1$, und drittens $|v^1_2|^2$ und $|v^2_2|^2$, die betragsquadrierten Komponenten des Eigenvektors $\mathbf{v}_2$, auf drei untereinander angeordneten Skizzen mit jeweils zwei Kurven.

Hintergrundinformation: Die erste Skizze zeigt einen sogenannten "vermiedenen Schnittpunkt" ("avoided crossing"), eines der typischen Merkmale eines Quantenbits. Die zweiten und dritten Skizzen zeigen, dass die Eigenvektoren ihre "Rollen tauschen", wenn B/Δ von $-\infty$ nach $+\infty$ durchgefahren wird. Beide Eigenschaften sind mittlerweile in vielen Experimenten nachgewiesen worden. (Siehe z.B. `http://www.sciencemag.org/content/299/5614/1869.abstract`, Fig. 2A und 2B.)

Hausaufgabe 5: Entartetes Eigenwertproblem [3]
Punkte: (a)[3](A); (b)[3](A,Bonus)

Finden Sie für die beiden folgenden Matrizen die Eigenwerte λ_j, einen Satz *orthonormaler* Eigenvektoren $\mathbf{v}_j$, sowie eine Ähnlichkeitstransformation, T, und ihre Inverse, T^{-1}, für die $T^{-1}AT$ diagonal ist.

(a) $A = \begin{pmatrix} 15 & 6 & -3 \\ 6 & 6 & 6 \\ -3 & 6 & 15 \end{pmatrix}$, (b) $A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 2\mathrm{i} \\ 0 & 7 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 0 \\ -2\mathrm{i} & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$.

Hinweis: Beide Matrizen haben ein Paar von entarteten Eigenwerten. Nennen Sie diese $\lambda_2 = \lambda_3$. Einer der zugehörigen Eigenvektoren ist $\mathbf{v}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)^T$ für (a) und $\mathbf{v}_3 = \frac{1}{\sqrt{5}}(0,1,-2,0)^T$ für (b).
[Konsistenzchecks: Ergeben die Summe bzw. das Produkt aller Eigenwerte $\mathrm{Tr}(A)$ bzw. $\det(A)$? Wenn D die Diagonalmatrix ist, die die Eigenwerte enthält, ergibt TDT^{-1} wieder A?]

Hausaufgabe 6: Dreidimensionales Gauß-Integral mit Mischtermen im Exponenten [3]
Punkte: (a)[1](M); (b)[1](M); (c)[1](M)

Berechnen Sie folgendes dreifach-Gauß-Integral ($a > 0$):

$$I(a) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\,\mathrm{e}^{-\left[(a+2)x^2+(a+2)y^2+(a+2)z^2+2(a-1)xy+2(a-1)yz+2(a-1)xz\right]}$$

(a) Bringen Sie den Exponenten in die Form $-\mathbf{x}^T A\mathbf{x}$, mit $\mathbf{x} = (x,y,z)^T$ und A symmetrisch.

(b) Diagonalisieren Sie die Matrix A. Sie brauchen die zugehörige Ähnlichkeitstransformation nicht explizit zu berechnen.

(c) Berechnen Sie $I(a)$, indem Sie es als Produkt dreier einfacher Gauß-Integrale ausdrücken. [Kontrollergebnis: $I(3) = \frac{1}{9}\sqrt{\pi^3}$.]

Hausaufgabe 7: Spin-1 Matrizen: Eigenwerte und Eigenvektoren [Bonus]
Punkte: [3](Bonus,E).

Zur Beschreibung quantenmechanischer Teilchen mit Spin 1 werden folgende Matrizen benutzt:

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Berechnen Sie für jede Matrix S_j ($j = x,y,z$), die drei Eigenwerte $\lambda_{j,a}$ und normierten Eigenvektoren $\mathbf{v}_{j,a}$ ($a = 1,2,3$). Wählen Sie die Phase des Eigenvektornormierungsfaktors so, dass die

1-Komponente, $v^1_{j,a}$ (oder, falls diese verschwindet, die 2- oder 3-Komponente), positiv und reell ist.
[Ergebniskontrolle: alle drei Matrizen haben dieselben Eigenwerte, und es gilt $\sum_{a=1}^{3} \lambda_{j,a} = 0$.]

[Gesamtpunktzahl Hausaufgaben: 19]
