Quantum Chemie, Werkcollege week 1

Vraag 1: Inproducten

Gebruik de definitie van het inproduct om te laten zien dat de stelling van Cauchy-Schwarz geldt:

$$|\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle| \leq |\vec{x}||\vec{y}|$$

1a. Expliciet voor het euclidisch inproduct in $\mathbb{R}^2$.

1b. Door het inproduct van $\vec{x} + \lambda\vec{y}$ met zichzelf te bekijken, met een gunstige keuze voor λ zodanig dat $\vec{x} + \lambda\vec{y} \perp \vec{y}$.

Gegeven twee vectoren $\vec{a}, \vec{b}$ met lengte 1

1c. Laat zien dat $\langle \vec{a}, \vec{b} \rangle = 1 \Longleftrightarrow \vec{a} = \vec{b}$.

Vraag 2: Vectorruimten

Gebruik de definitie van lineaire onafhankelijkheid van de set $\{\vec{v_i} | i = 1, 2, ..., n\}$:

$$\sum_{i=1}^{n} c_i \vec{v_i} = 0 \Longleftrightarrow c_i = 0,\ i = 1, 2, ..., n.$$

2a. Laat zien dat de ontbinding van een vector $\vec{x}$ in een lineair onafhankelijke basis uniek is.

2b. Laat zien dat deze ontbinding altijd bestaat.

2c. Laat zien dat een, de nulvector bevattende, verzameling $\{\vec{v_1}, \vec{v_2}, ..., 0, ...\vec{v_n}\}$ lineair afhankelijk is.

2d. Laat zien dat de verzameling $\{..., \vec{a}, ..., \lambda\vec{a}, ...\}$ lineair afhankelijk is.

2e. Laat zien dat de verzameling $\{..., \vec{a}, ...\}$ lineair afhankelijk is, dan en slechts dan, als de verzameling $\{..., \lambda\vec{a}, ...\}$ lineair afhankelijk

2f. Laat zien dat de verzameling $\{..., \vec{a_i}, ..., \vec{a_j}, ...\}$ lineair afhankelijk is, dan en slechts dan, als de verzameling $\{..., \vec{a_j}, ..., \vec{a_i}, ...\}$ lineair afhankelijk is.

Vraag 3: Determinanten

Zij $\phi : V, V, ..., V \rightarrow k$ een multi-lineaire vorm, gedefinieerd door de volgende eigenschappen:

$$\phi(..., \vec{x}, \vec{y}, ...) = \phi(..., \vec{x}, \vec{x} + \vec{y}, ...) \tag{1}$$

$$\phi(..., \lambda\vec{x}, ...) = \lambda\phi(..., \vec{x}, ...) \tag{2}$$

$$\phi(\hat{A}\vec{v_1}, \hat{A}\vec{v_2}, ..., \hat{A}\vec{v_n}) = \det(\mathbf{A})\phi(\vec{v_1}, \vec{v_2}, ..., \vec{v_n}) \tag{3}$$

3a. Laat zien dat elke multi-lineaire vorm $\phi(v_1, v_2, ..., v_n) = 0$ als $\{v_1, v_2, ..., v_n\}$ lineair afhankelijk is.

3b. Laat zien dat de determinant door vergelijking 3 alleen gedefinieerd is voor vierkante matrices.

3c. Laat zien dat geldt $\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{A})\det(\mathbf{B})$.

3d. Laat zien dat $\det(\mathbb{1}) = 1$.

Laat $\mathbf{A} = [\mathbf{a_1 a_2 ... a_n}]$ de matrix voorstellen die is opgespannen door de kolommen $\{\mathbf{a_1 a_2 ... a_n}\}$. De matrix elementen van de matrix $\mathbf{A}$ behorende bij operator $\hat{A}$ zijn zodanig dat $\hat{A}\vec{v_j} = \sum_i \vec{v_i} A_{ji}$.

3e. Laat zien dat $\det([\mathbf{a_1}...\lambda\mathbf{a_i}...\mathbf{a_n}]) = \lambda \det([\mathbf{a_1}...\mathbf{a_i}...\mathbf{a_n}])$.

3f. Laat zien dat $\det([\mathbf{a_1}...\mathbf{a_i} + \mathbf{b_i}...\mathbf{a_n}]) = \det([\mathbf{a_1}...\mathbf{a_i}...\mathbf{a_n}]) + \det([\mathbf{a_1}...\mathbf{b_i}...\mathbf{a_n}])$.

3g. Laat zien dat $\det([\mathbf{a_1}...\mathbf{a_i}, \mathbf{a_j}...\mathbf{a_n}]) = -\det([\mathbf{a_1}...\mathbf{a_j}, \mathbf{a_i}...\mathbf{a_n}])$.