Quantum Chemie, Werkcollege week 2

Vraag 1: Determinanten deel 2

1a. Laat zien dat $\det([...\mathbf{a},\mathbf{a}...]) = 0$, uitgaande van $\det([...\mathbf{a},\mathbf{b}...]) = -\det([...\mathbf{b},\mathbf{a}...]$.

1b. Laat zien dat $\det([...\mathbf{a},\mathbf{b}...]) = -\det([...\mathbf{b},\mathbf{a}...]$, uitgaande van $\det([...\mathbf{a},\mathbf{b}...]) = \det([...\mathbf{a},\mathbf{a}+\mathbf{b}...])$ en $\det([...\lambda\mathbf{a}...] = \lambda\det([...\mathbf{a}...])$.

1c. Laat zien dat $\det([...\mathbf{a}+\mathbf{b},\mathbf{c}...]) = \det([...\mathbf{a},\mathbf{c}...])+\det([...\mathbf{b},\mathbf{c}...])$ uit $\det([...\lambda\mathbf{a}...] = \lambda\det([...\mathbf{a}...])$, $\det([...\mathbf{a},\mathbf{b}...]) = \det([...\mathbf{a},\mathbf{a}+\mathbf{b}...])$ en $\det([...\mathbf{a},\mathbf{a}...]) = 0$.

Vraag 2: Uitproduct

2a. Ga na dat het uitproduct in $\mathbb{R}^3$ gegeven wordt door

$$(\vec{x}\times\vec{y})_i = \sum_{j,k}\epsilon_{ijk}\ x_j\ y_k.$$

2b. Ga na dat het volume opgespannen door $\vec{x}$, $\vec{y}$ en $\vec{z}$ gegeven wordt door

$$(\vec{x}\times\vec{y})\cdot\vec{z}$$

Vraag 3: Determinanten deel 3

3a. Laat zien dat $\det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{A}^{\mathbf{T}})$.

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

3c. Laat zien dat $|\det(\mathbf{U})| = 1$ voor $\mathbf{U} = \mathbf{U}^{\dagger^{-1}}$.

3d. Laat zien dat de determinant van een diagonaal matrix wordt gegeven door het product van diagonaal elementen: $\det(\mathbf{A}) = \mathbf{A}_{11}\mathbf{A}_{22}...\mathbf{A}_{nn}$ met

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathbf{A}_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{A}_{nn} \end{bmatrix}.$$

3e. Laat zien dat $\det(\mathbf{A}) = A_{nn}\det(\mathbf{A}')$ met:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}' & \mathbf{a_n} \\ \mathbf{0} & A_{nn} \end{bmatrix}$$

3f. Laat zien dat de determinant van een driehoeks matrix wordt gegeven door het product van diagonaal elementen: $\det(\mathbf{A}) = \mathbf{A}_{11}\mathbf{A}_{22}...\mathbf{A}_{nn}$ met

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \cdots & \mathbf{A}_{1n} \\ 0 & \mathbf{A}_{22} & \cdots & \mathbf{A}_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{A}_{nn} \end{bmatrix}.$$

Vraag 4: Permutaties

4a. Ga in S_{10} na dat de permutatie gegeven door:

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \\ 3 & 5 & 7 & 1 & 2 & 8 & 4 & 10 & 9 & 6 \end{pmatrix}.$$

te ontbinden is in niet overlappende cycles en geef de pariteit van σ.

Laat zien dat de pariteit van een permutatie in het algemeen verandert door vermenigvuldiging met een verwisseling door de volgende twee gevallen te bekijken.

4b. De verwisseling verwisselt twee objecten uit niet-overlappende cycles.

4c. De verwisseling verwisselt twee objecten uit overlappende cycles.