Chemia kwantowa B – zadania domowe

Zestaw 1. – odpowiedzi

Zadanie 1. Sprawdzić, czy zbiór P wielomianów stopnia n tworzy przestrzeń liniową. Jeśli tak, jaki jest jej wymiar?

Rozwiązanie 1. Oczywiście nie. Niech np. $n \geqslant 2$ i

$$P_1(x) = x^n + x + 1 \tag{1.1}$$

oraz

$$P_2(x) = -x^n + x^2. \tag{1.2}$$

Zachodzi $P_1 \subset P$ i $P_2 \subset P$. Tymczasem wielomian

$$P_3(x) = P_1(x) + P_2(x) = x^2 + x + 1 \tag{1.3}$$

nie należy do zbioru P. Tak więc zbiór P nie jest przestrzenią liniową.

Zadanie 2. Mając daną macierz

$$\mathbb{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 2 & -4 & 2 \end{bmatrix} \tag{2.1}$$

znaleźć macierz diagonalizującą $\mathbb{A}$, tzn. taką macierz $\mathbb{P}$, by macierz

$$\mathbb{D} = \mathbb{P}^{-1}\mathbb{A}\mathbb{P} \tag{2.2}$$

była diagonalna.

Rozwiązanie 2. Macierz $\mathbb{P}$ tworzymy z wektorów własnych macierzy $\mathbb{A}$. W tym celu znajdujemy najpierw jej wartości własne:

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 2 & 0 \\ 0 & 3-\lambda & 0 \\ 2 & -4 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (\lambda-1)(\lambda-2)(\lambda-3) = 0, \tag{2.3}$$

skąd

$$\begin{cases} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = 2 \\ \lambda_3 = 3 \end{cases}. \tag{2.4}$$

Wektory własne $\mathbf{v}_i = \begin{bmatrix} x_{1i} \\ x_{2i} \\ x_{3i} \end{bmatrix}$ odpowiadające poszczególnym wartościom własnym znajdujemy z zależności

$$\mathbb{A}\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i. \tag{2.5}$$

I tak np. dla λ_1 otrzymujemy

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 2 & -4 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1i} \\ x_{2i} \\ x_{3i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1i} \\ x_{2i} \\ x_{3i} \end{bmatrix}, \tag{2.6}$$

skąd po przyjęciu $x_{11} = 1$ (szukamy bowiem kierunków własnych) otrzymujemy

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix}. \tag{2.7}$$

Podobnie znajdujemy

$$\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{2.8}$$

i

$$\mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix}. \tag{2.9}$$

Teraz już możemy skonstruować macierz $\mathbb{P}$:

$$\mathbb{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \mathbf{v}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ -2 & 1 & -2 \end{bmatrix}. \tag{2.10}$$

Łatwo można sprawdzić, że

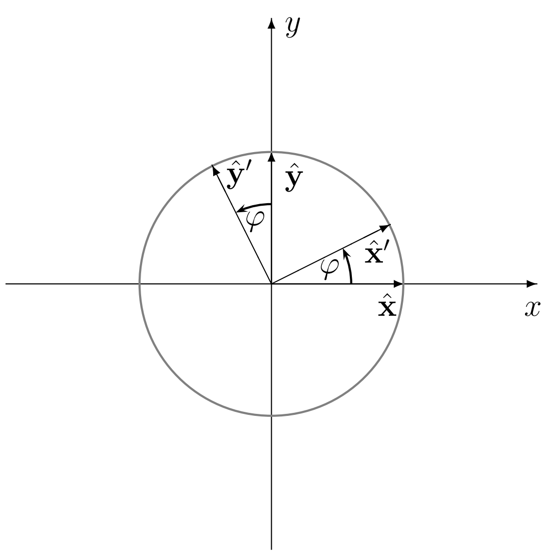
$$\mathbb{D} = \mathbb{P}^{-1}\mathbb{A}\mathbb{P} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}. \tag{2.11}$$

Zadanie 3. Znaleźć macierz operatora obrotu $R_z(\varphi)$ wokół osi z o kąt φ liczony w kierunku od osi x ku osi y, w bazie złożonej z wersorów kartezjańskich $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$ i $\hat{\mathbf{z}}$.

Rozwiązanie 3. Musimy znaleźć wynik działania operatora $\hat{R}_z(\varphi)$ na poszczególne wersory osi układu współrzędnych. Ponieważ obrót zachodzi wokół osi z, oczywiste jest, że

$$\hat{R}_z(\varphi)\hat{\mathbf{z}} = \hat{\mathbf{z}}. \tag{3.1}$$

Aby znaleźć wynik działania tego operatora na dwa pozostałe wersory, posłużymy się rysunkiem.



Jak widać na powyższym rysunku,

$$\hat{R}_z(\varphi)\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}' = \begin{bmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.2}$$

oraz

$$\hat{R}_z(\varphi)\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{y}}' = \begin{bmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{3.3}$$

Elementy szukanej macierzy znajdujemy z zależności

$$[\hat{\mathbb{R}}_z(\varphi)]_{ij} = \langle \hat{\mathbf{e}}_i | \hat{R}_z(\varphi) | \hat{\mathbf{e}}_j \rangle \,, \tag{3.4}$$

gdzie $\{\hat{\mathbf{e}}_1; \hat{\mathbf{e}}_2; \hat{\mathbf{e}}_3\} = \{\hat{\mathbf{x}}; \hat{\mathbf{y}}; \hat{\mathbf{z}}\}$. Ostatecznie,

$$\hat{\mathbb{R}}_z(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{3.5}$$