Mathematik Zusammenfassung: Tutorium 3

31. Oktober 2019

1 Lineare Abbildungen

In diesem Kapitel werden wir den Bergirff der (linearen) Abbildung einführen, der die Grundlage für das Verständnis von Matrizen liefert. Wir werden das außerdem das Skalarprodukt rekapitulieren - und feststellen, dass es sich bei diesem auch um eine Abbildung handelt.

Definition (Operator/Abbildung) : *Seien V und W Vektorräume über demselben Körper $\mathbb{K}$. Dann ist ein Operator $\hat{A}$ eine Vorschrift (eine Abbildung), welche einem Vektor $|v\rangle \in V$ ein neuer Vektor aus $|w\rangle \in W$ zuordnet:*

$$\hat{A}\,|v\rangle = |w\rangle$$

Ein Operator stellt nichts anderes dar als eine Arbeitsvorschrift dar - genauso wie eine Abbildung bei den Funktionen. Wir schauen uns lediglich keinen „eindimensionalen Körper“ mehr, sondern einen „mehrdimensionalen Vektorraum“ an.

Der Operator heißt *linear*, wenn die folgenden Eigenschaften erfüllt sind:

- Additivität: $\hat{A}\,(|v\rangle + |w\rangle) = \hat{A}\,|v\rangle + \hat{A}\,|w\rangle$
- Homogenität: $\hat{A}\,(\lambda\,|v\rangle) = \lambda\left(\hat{A}\,|v\rangle\right)$

Für die Verknüpfungen von Operatoren gelten Rechenregeln:

- Operatorensumme: $\left(\hat{A} + \hat{B}\right)|v\rangle = \hat{A}\,|v\rangle + \hat{B}\,|v\rangle$
- Homogenität: $\left(\hat{A}\hat{B}\right)|v\rangle = \hat{A}\left(\hat{B}\,|v\rangle\right)$ (Das bedeutet: Bei einem Operatorprpdukt wird zuerst der rechte, dann der linke Operator angewendet!)

Für lineare Operatoren stellt sich die Frage, ob die Reihenfolge ihrer Ausführung zu beachten ist oder ob sie vertauschbar sind. In der Regel gilt nämlich $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, in einigen Fällen ist eine Vertauschung jedoch möglich. Dann sagt man, dass $\hat{A}$ und $\hat{B}$ kommutieren. Um zu bestimmen, ob zwei Operatoren kommutieren, berechnet man den Kommutator $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, wobei dieser Null sein muss für Vertauschbarkeit der Operatoren.

Exkurs (EHRENFEST-Theorem):

Das EHRENFEST-Theorem stellt einen Zusammenhang zwischen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik her. Es besagt, dass bestimmte klassische Bewegungsgleichungen die Mittelwerte der Quantenmechanik voraussagen. Allgemein lautet es:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \hat{A}\right\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{A},\hat{H}\right]\right\rangle$$

Dabei ist $\hat{A}$ ein quantenmechanischen Operator und $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ der Hamiltonoperator (ein Energieoperator). Setzt man nun den Ortsoperator ein, also $\hat{A} = \hat{x}$, wird die zeitliche Änderung des Erwartungswertes des Ortes von einem Teilchen bestimmt

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{x}\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{x},\hat{H}\right]\right\rangle$$

Es wird der Kommutator berechnet:

$$\left[\hat{x},\hat{H}\right] = \left[\hat{x},\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right] = \left[\hat{x},\frac{\hat{p}^2}{2m}\right] + \left[\hat{x},V(\hat{x})\right]$$

Da $[\hat{x},V(\hat{x})]$ nur von $\hat{x}$ abhängt, kommutieren die Operatoren. Weiterhin gilt $\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right] = \left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]$. Also:

$$\left[\hat{x},\hat{H}\right] = \left[\hat{x},\frac{\hat{p}^2}{2m}\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{x},\hat{p}\hat{p}\right] = \frac{1}{2m}\left(\left[\hat{x},\hat{p}\right]\hat{p} + \hat{p}\left[\hat{x},\hat{p}\right]\right)$$

Nun wird $[\hat{x},\hat{p}]$ gesondert betrachtet. Mit $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}d_x$ erhält man:

$$[\hat{x},\hat{p}]\Psi(x) = x\left\{\frac{\hbar}{i}d_x\Psi(x)\right\} - \frac{\hbar}{i}d_x\left\{x\Psi(x)\right\} = \frac{\hbar}{i}\left(x\Psi'(x) + \{x\Psi(x)\}'\right)$$

Mit der Produktregel $(x\Psi)' = \Psi + x\Psi' \Leftrightarrow x\Psi' - (x\Psi)' = -\Psi$ folgt:

$$[\hat{x},\hat{p}] = -\frac{\hbar}{i} = i\hbar$$

Einsetzen liefert:

$$\left[\hat{x},\hat{H}\right] = \frac{1}{2m}\left(i\hbar\hat{p} + \hat{p}i\hbar\right) = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}$$

Nun wird der Kommutator $\left[\hat{x},\hat{H}\right]$ in dem Ehrenfest-Theorem ausgeschrieben:

$$d_t\langle\hat{x}\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{x},\hat{H}\right]\right\rangle = d_t\langle\hat{x}\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\frac{i\hbar}{m}\hat{p}\right\rangle = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}$$

Klassisch würde man für die Ortsänderung $d_t x(t) = \dot{x} = v(t) = \frac{mv(t)}{m} = \frac{p(v)}{m}$ erwarten, d.h. der quantenmechanische Erwartungswert deckt sich mit der klassischen Lösung. □

Nun wollen wir das vielleicht wichtigste Produkt von zweier Vektoren formal einführen: das Skalarprodukt.

Zur Wiederholung: Warum heißt das so? Nun ja, dieses Produkt stellt eine mathematische Verknüpfung von zwei Vektoren dar, die als Ergebnis ein Skalar (eine Zahl) haben. Es handelt sich also wieder um nichts anderes als eine Abbildung, die allerdings nicht die Eigenschaften der Linearität, sondern einige andere Eigenschaften erfüllen muss. In mathematisch:

Definition (Skalarprodukt): *Das Skalarprodukt (innere Produkt) ist eine lineare Abbildung $V \times V \to \mathbb{C}$, welche einem Zahlenpaar $|u\rangle, |v\rangle, |w\rangle \in V$ ein Skalar $\langle v|w\rangle$ aus $\mathbb{C}$ zuordnet, sodass die folgenden Eigenschaften erfüllt sind:*

- *Hermizität:* $\langle v|w\rangle = \langle v|w\rangle^*$.
- *Linearität:* $\langle u|v+w\rangle = \langle u|v\rangle + \langle u|w\rangle$ *und* $\langle v|\lambda w\rangle = \lambda \langle v|w\rangle$.
- *positive Definitheit:* $\langle v|v\rangle \geq 0$. *Sofern* $\langle v|v\rangle = 0$ *folgt* $v = 0$.

Das klingt erstmal anders als das Skalarprodukt, dass wir in der Schule kennengelernt haben. Ist es aber nicht! Wir haben schon herausgefunden, dass wir Skalarprodukte für abstrakte Räume definieren können. Das „Schul-Skalarprodukt" ist das Standardskalarprodukt für den Anschauungsraum. Es gibt aber noch weitere relevante Skalarprodukte, die wir beherrschen müssen.

Beispiel (Skalarprodukte):

i) Das Standardskalarprodukt ist das Skalarprodukt über dem endlich-dimensionalen $\mathbb{R}^n$ oder $\mathbb{C}^n$-Vektorraum. Für zwei Vektoren $|v\rangle, |w\rangle$ eines solchen Raumes ist das Standardskalarprodukt:

$$\langle v|w\rangle = \begin{pmatrix} \cdots & v_i & \ldots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ w_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} v_i w_i = \lambda$$

Das Standardskalarprodukt mit $|v\rangle, |w\rangle \in \mathbb{R}^3$ entspricht dem bereits in mehrfach angesprochenem „Schul-Skalarprodukt" $\langle v|w\rangle = \sum_{i=1}^{3} v_i w_i = \vec{v} \cdot \vec{w}$.

ii) Der Raum der quadratintegrablen Funktionen $L^2(a,b)$ ist Menge aller Funktionen f_i im Intervall $[a,b]$, welche $\int_a^b f_i^* f_i \, dV < \infty$ erfüllen. So spielt etwa $L^2(\mathbb{C})$ eine besondere Rolle in der Quantenmechanik, den hier sind die Funktionen mit $\int_a^b f_i^* f_i \, dV < \infty$ die Wellenfunktionen $f_i = \Psi_i \in \mathbb{C}$. Alle Wellenfunktion müssen quadratintegrabel sein, damit sie die Normierungsbedingung $|\Psi_i| = 1$ erfüllen können.

Wir sehen hier, dass es durchaus wichtig ist, Funktionen als Vekoren auffassen zu dürfen.

2 Matrizen

Die Einführung von Matrizen ist nützlich, weil man durch sie lineare Abbildungen beschreiben kann. Sie spielen in der linearen Algebra eine Schlüsselrolle und werden später vielfach Anwendung finden (z. B.

bei der Berechnung von linearen Gleichungssystemen oder Eigenwerten). Wir werden in diesem Kapitel - nachdem wir den grundlgegenden Umgang mit Matrizen kennengelernt haben - sehen, dass man durch Matrixmultiplikation im Anschauungsraum Drehungen oder Spiegelungen vermitteln kann.

2.1 Matrizenrechnung

Definition (Matrix): *Eine rechteckige Anordnung von $m \times n$ Elementen a_{ij} in einer einer Tabelle der Form*

$$\underline{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

heißt (m,n)-Matrix über dem Körper $\mathbb{K}$. Die waagerechten Reihen heißen Zeilen der Matrix mit Zeilenindex $i = 1,\ldots,m$. Die senkrechten Reihen heißen Spalten der Matrix mit Zeilenindex $j = 1,\ldots,n$. Die Matrixeinträge werden mit $(a)_{ij}$ bezeichnet.

Wir sehen, dass Vektoren lediglich den Spezialfall einer Matrix mit $n = 1$ darstellen. Matrizen können durch zwei Operationen mit anderen mathematischen Objekten verknüpft werden: Addition und Multiplikation.

i) Addition: Zwei Matrizen $\underline{\mathrm{A}}$ und $\underline{\mathrm{B}}$ werden addiert, indem ihre Matrixeinträge $(a)_{ij}$ und $(b)_{ij}$ addiert werden. Vorsicht: Es dürgen lediglich Matrizen vom gleichen Typ (m,n) addiert werden!

Beispiel (Matrixaddition):

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 2 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 4 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 2 & 4 \\ 5 & 2 & 4 \\ 5 & 5 & 3 \end{pmatrix}$$

ii) Multiplikation

a) Multiplikation mit einem Skalar: Die Multiplikation einer Matrix $\underline{\mathrm{A}}$ mit einem Skalar λ erfolgt, indem jeder Matrixeintrag $(a)_{ij}$ mit λ multipliziert wird. Wir sehen, dass also jeder Typ von Matrix mit einem Skalar multipliziert werden darf.

Beispiel (Multiplikation mit einem Skalar):

$$2 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 2 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 6 \\ 4 & 2 & 4 \\ 6 & 4 & 2 \end{pmatrix}$$

b) Multiplikation zweier Matrizen: Die Multiplikation zweier Matrizen $\underline{\mathrm{A}}$ mit Matrixeinträgen $(a)_{ik}$ und $\underline{\mathrm{B}}$ mit Matrixeinträgen $(b)_{kj}$ (wobei $k = 1,\ldots,p$) erfolgt, indem komponentenweise i-te Zeile von $\underline{\mathrm{A}}$ mit der k-ten Spalte von $\underline{\mathrm{B}}$ multipliziert und die Produkte summiert werden. In Deutsch: Wir rechnen „Zeile mal Spalte“ und zählen alles zusammen.

Beispiel (Multiplikation zweier Matrizen gleichen Typs):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\cdot 4+0\cdot 1 & 1\cdot 2+0\cdot 2 \\ 3\cdot 4+2\cdot 2 & 3\cdot 1+2\cdot 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 16 & 7 \end{pmatrix}$$

Wir erkennen, dass die Multiplikation Matrizen beliebigen Typs nicht immer funktionieren kann, dennoch sind Matrixprodukte für einen speziellen Fall definiert. Die Spaltenanzahl von $\underline{A}$ muss gleich der Zeilenanzahl von $\underline{B}$ sein muss, damit die Matrizen multipliziert werden können. Allgemein gilt

$$\underline{AB} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & a_{1p} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & \cdots & a_{mp} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{p1} & \cdots & b_{pn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m1} & \cdots & c_{mn} \end{pmatrix}$$

Ein Beispiel macht sicherlich vieles klarer.

Beispiel (Multiplikation zweier Matrizen ungleichen Typs):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\cdot 1+0\cdot 2 & 1\cdot 3+0\cdot 2 & 1\cdot 2+0\cdot 2 \\ 3\cdot 1+2\cdot 2 & 3\cdot 3+2\cdot 2 & 3\cdot 2+2\cdot 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 7 & 13 & 8 \end{pmatrix}$$

Wir sehen, dass die Multiplikation einer $(2,2)$- mit einer $(2,3)$- Matrix eine $(2,3)$- Matrix ergibt. Das farblich hervorgehobene Muster gilt allgemein.

c) Multiplikation einer Matrix mit einem Vektor: Die Multiplikation der Matrix $\underline{A}$ mit einem Vektor $|v\rangle$ erfolgt nach dem eben beschriebenen Schema, wobei der Vektor als $(m,1)$-Matrix aufgefasst wird.

Beispiel (Multiplikation einer Matrix mit einem Vektor):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\cdot 2+0\cdot 0 \\ 3\cdot 2+2\cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Anmerkungen:

i) Die Matrizenmultiplikation ist i.d.R. nicht kommutativ, d.h. $\underline{AB} \neq \underline{BA}$!

ii) Aus $\underline{AB} = \underline{0}$ ($\underline{0}$ steht für die Nullmatrix, in der alle Einträge gleich Null sind) darf nicht geschlossen werden, dass $\underline{A}$ oder $\underline{B}$ gleich der Nullmatrix ist. Ein Gegenbeispiel ist schnell gefunden:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\cdot 1+0\cdot 2 & 1\cdot 3+0\cdot 2 & 1\cdot 2+0\cdot 2 \\ 3\cdot 1+2\cdot 2 & 3\cdot 3+2\cdot 2 & 3\cdot 2+2\cdot 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 7 & 13 & 8 \end{pmatrix}$$

2.2 Eigenschaften von Matrizen

Definition (quadratische Matrix): *Eine quadratische Matrix hat genauso viele Zeilen wie Spalten.*

Hah, das war doch mal einfach ;-). Diese quadratischen Matrizen sind allerdings speziell und finden in Vergleich zu ihren Kollgen vermehrt Anwendung. Deshalb klassifiziert man quadratische Matrizen bezüglich ihrer Eigeenschaften:

- Eine Diagonalmatrix $\underline{\mathrm{D}}$ ist eine quadratische Matrix, deren Elemente 0 sind bis auf die Hauptdiagonale, z. B.
$$\underline{\mathrm{D}} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 42 \end{pmatrix}$$

- Eine Einheitsmatrix $\underline{\mathrm{E}}$ ist eine Diagonalmatrix , deren Hauptdiagonaleinträge ausschließlich 1 sind, z. B.
$$\underline{\mathrm{E}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Die Transponierte $\underline{\mathrm{A}}^T$ einer quadratischen Matrix $\underline{\mathrm{A}}$ entsteht durch das Tauschen der Zeilen und Spalten von $\underline{\mathrm{A}}$, d.h. $(a)_{ij} \to (a)_{ji}$. Ein Beispiel ist:
$$\underline{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \underline{\mathrm{A}}^T \to \underline{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- Eine quadratische Matrix $\underline{\mathrm{A}}$ heißt symmetrisch, wenn $\underline{\mathrm{A}} = \underline{\mathrm{A}}^T$ ist, z. B.
$$\underline{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 4 & 3 & 8 \\ 6 & 8 & 1 \end{pmatrix} = \underline{\mathrm{A}}^T$$

- Die Inverse $\underline{\mathrm{A}}^{-1}$einer quadratischen Matrix $\underline{\mathrm{A}}$ ist diejenige Matrix, welche $\underline{\mathrm{A}}\,\underline{\mathrm{A}}^{-1} = \underline{\mathrm{A}}^{-1}\underline{\mathrm{A}} = \underline{\mathrm{E}}$ erfüllt. Nicht jede quadratische Matrix besitzt eine Inverse. Falls $\underline{\mathrm{A}}^{-1}$ existiert, heißt $\underline{\mathrm{A}}$ regulär, ansonsten singulär. Hierzu lernen wir später noch mehr.

- Die Adjungierte $\underline{\mathrm{A}}^\dagger$ einer quadratischen Matrix $\underline{\mathrm{A}}$ ist das Transponierte und komplex konjugierte von $\underline{\mathrm{A}}$, also $\underline{\mathrm{A}}^\dagger = \left(\underline{\mathrm{A}}^T\right)^* = \left(\underline{\mathrm{A}}^*\right)^T$, z. B.
$$\underline{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3i \\ 2 & 1 & 2 \\ 3i & 2 & 1 \end{pmatrix} = \underline{\mathrm{A}}^\dagger$$

- Eine quadratische Matrix $\underline{A}$ heißt hermitesch, wenn $\underline{A} = \underline{A}^{\dagger}$ ist, wie etwa

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \underline{A}^{\dagger}$$

- Eine quadratische Matrix $\underline{A}$ heißt unitär, wenn $\underline{A}^{\dagger}\underline{A}^{-1} = \underline{E}$ ist. Überzeugt Euch durch einfache Multiplikation, dass die folgende Matrix unitär ist:

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

2.3 Transformationsmatrizen

Wie bereits erwähnt, können Matrizen ineare Operation zwischen zwei (endlich-dimensionalen) Vektorräumen vermitteln. Man Spricht daher von der *Matrixdarstellung* eines Operators oder einer *Transformationsmatrix* $\underline{T}$ eines Vektors $\overrightarrow{v} \in V$ auf einen Vektor $\overrightarrow{w} \in W$. Ist $\dim(V)$ und $\dim(W)$ gleich zwei oder drei, so handelt es sich bei diesen Abbildungen um geometrisch interpretierbare Aktionen, etwa Drehungen.

Anmerkung:

Man unterscheidet zwischen aktiven und passiven geometrischen Aktionen. Bei der aktiven Transformation wird der Vektor bewegt, das Koordinatensystem hingegen bleibt wie es ist. Andererseits wird der passiven Transformation das Koordinatensystem gedreht und Vektor bleibt unangetastet, es handelt sich bei ihnen also um sogenannte Basistransformationen. Im Folgenden werden die wichtigsten aktiven Transformationen beschrieben. Die Idee der - zugegebenermaßen etwas komplizierteren - Basistransformation wird hier nicht weiter erläutert.

Matrixdarstellung von Operatoren im $\mathbb{R}^3$

Man betrachte einen Vektor $\vec{r} = (x, y, z)^T$ in einem kartesischem Koordinatensystem mit der Basis $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$. Dann drehen die (elementaren) Drehmatrizen $\underline{D}$ einen Vektor $\vec{r}$ um den Winkel φ um eine der drei Koordinatenachsen. Dreht man um die $\vec{e}_z$-Achse, so nennt man häufig $\underline{D} = \underline{C}$. (Grund: In der Symmetrie-Lehre werden Drehachsen, je nach Drehwinkel $\varphi = \frac{2\pi}{i}$, mit $\underline{C}_i$ bezeichnet. Dort bildet die $\vec{e}_z$-Achse die sog. Hautdrehachse). Die Drehmatrizen haben die Folgende Darstellung:

$$\underline{D}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ 0 & \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix}; \underline{D}_y = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & 0 & \sin(\varphi) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\varphi) & 0 & \cos(\varphi) \end{pmatrix}$$

$$\underline{D}_z = \underline{C}_i = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Die Spiegelungsmatrizen $\underline{S}$, bzw. in der Chemie zumeist $\underline{\sigma}$, spiegeln einen Vektor $\vec{r}$ an entweder an einem

Punkt, einer der drei Koordinatenachsen oder Koordinatenebenen. Es handelt sich um Diagonalmatrizen. Spiegelt man an einem Punkt, findet man drei negative Vorzeichen, bei Spiegelung an den Koordinatenachsen zwei und an Koordinatenebenen ein negatives Vorzeichen. Die Spiegelmatrizen haben die folgende Darstellung:

$$\underline{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \underline{\sigma}_y = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \underline{\sigma}_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\sigma}_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \underline{\sigma}_{xz} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \underline{\sigma}_{yz} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Anmerkung:

In der Darstellungstheorie werden Moleküle nach sogenannten Punktgruppen charakterisiert. Punktgruppen bestehen aus der Menge aller Symmetrieoperationen (Transformationsmatrizen!), welche die Atome eines Moleküls auf sich selbst abbilden. Solche Symmetrieoperationen sind im Wesentlichen Drehen, Spiegeln und Invertieren (Punktspiegeln).

Es gibt noch eine weitere wichtige Transformationsmatrix im $\mathbb{R}^3$, nämlich die Streckungsmatrix $\underline{\lambda} = \underline{C}$. Sie bewirkt eine Streckung um α in Richtung der $\vec{e}_x$-Achse, um β in Richtung der $\vec{e}_y$-Achse und um γ in Richtung der $\vec{e}_z$-Achse. Sie hat die folgende Darstellung:

$$\underline{\lambda} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}$$

Exkurs: Wie findet man die Matrixdarstellung von Operatoren?

Hier wird das Vorgehen beispielhaft gezeigt für den Operator, der (i) $\vec{r}$ um den Winkel $\varphi = \frac{\pi}{2}$ entgegen des Uhrzeigesinns um die $\vec{e}_z$-Achse dreht sowie (ii) für den Operator, der $\vec{r}$ an der $\vec{e}_x\vec{e}_y$-Ebene spiegelt. Um die Matrixdarstellung der Operatoren zu finden, betrachten wir die Darstellung der gedrehten Koordinatenachsen $\vec{e}_i'$ des ursprünglichen kartesischen Koordinatensystems $\vec{e}_i$.

i) Für $\hat{C}_4 : \vec{r} \longrightarrow \underline{C}_4\vec{r} = \vec{r}'$ finden wir:

$$\begin{aligned} \vec{e}_x \longrightarrow \vec{e}_x' &= (\cos(\varphi)\, x, \sin(\varphi)\, y, 0 \cdot z)^T \\ \vec{e}_y \longrightarrow \vec{e}_y' &= \left(\sin\left(\varphi + \tfrac{\pi}{2}\right) x, \cos\left(\varphi + \tfrac{\pi}{2}\right) y, 0 \cdot z\right)^T \\ \vec{e}_z \longrightarrow \vec{e}_z' &= (0 \cdot x, 0 \cdot y, 1 \cdot z)^T \end{aligned}$$

$$\curvearrowright \vec{r}' = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots \\ \vec{e}'_x & \vec{e}'_y & \vec{e}'_z \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

mit $\varphi = \frac{\pi}{2}$

$$\underline{C}_4 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ii) Für $\underline{\sigma}_{xy} : \vec{e} \longrightarrow \hat{\sigma}_{xy}\vec{e} = \vec{e}'$ finden wir:

$$\begin{array}{c} \vec{e}_x \longrightarrow \vec{e}'_x = (1\cdot x, 0\cdot y, 0\cdot z)^T \\ \vec{e}_y \longrightarrow \vec{e}'_y = (0\cdot x, 1\cdot y, 0\cdot z)^T \\ \vec{e}_z \longrightarrow \vec{e}'_z = (0\cdot x, 0\cdot y, -1\cdot z)^T \end{array} \quad \curvearrowright \underline{\sigma}_{xy} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots \\ \vec{e}'_x & \vec{e}'_y & \vec{e}'_z \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Exkurs Ende :-). □