3. Tutorium **für 29.10.2021**
(Gruppen 1-4 : Präsenz, Gruppen 5-8 : Online)

3.1 Rechenbeispiele mit Levi-Civita Symbol

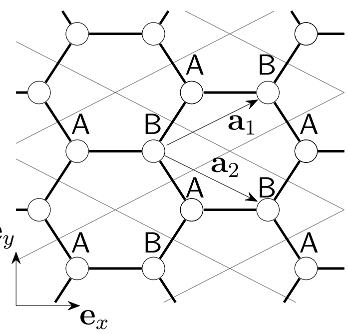
Das Levi-Civita Symbol:

$$\varepsilon_{ijk\ldots} = \begin{cases} +1 & \text{falls} \quad (i,j,k,\cdots) \text{ eine gerade Permutation von } (1,2,3,\cdots) \text{ ist,} \\ -1 & \text{falls} \quad (i,j,k,\cdots) \text{ eine ungerade Permutation von } (1,2,3,\cdots) \text{ ist,} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

a) Zeigen Sie, $\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{kij}$ für $1 \leq i,j,k \leq 3$.
b) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{3\times 3}$ eine hermitische Matrix mit $\mathbf{A} = a_{ij}$ ($\in \mathbb{C}$ complex!). Zeigen Sie, $\varepsilon_{ijk} a_{jk} \in \mathrm{i}\mathbb{R}$.
Die Zahlenmenge $\mathrm{i}\mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ *bezeichnet Zahlen auf der imaginären Achse.*
c) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ eine Matrix mit $\mathbf{A} = a_{ij}$ und seien $\mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3$ Vektoren mit $\mathbf{b} = b_j$, $\mathbf{c} = c_j$. Für $a_{ij} = \varepsilon_{ijk} b_k$, skizzieren Sie die Matrix $\mathbf{A}$ und zeigen Sie $\mathbf{Ac} = -\mathbf{b} \times \mathbf{c}$, wobei $\mathbf{b} \times \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3$ das Kreuzprodukt der Vektoren $\mathbf{b}$ und $\mathbf{c}$ bezeichnet.
d) Gegeben sei eine 3×3 Matrix $\mathbf{A} = (a_{ij})$. Schreiben Sie mit Hilfe des Levi-Civita-Symbols die Determinante $\det \mathbf{A}$ in Indexschreibweise.
e) Zeigen Sie $\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}$ durch repräsentatives Einsetzen von Zahlen in die Indizes (Einsteinsche Summenkonvention beachten).

3.2 Reziprokes Gitter

Gegeben sei ein Kristallgitter mit Basis $\mathcal{B} = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_d\} = \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \ldots, \mathbf{f}_d\}$, wobei d die Dimension des Raumes bezeichnet. Die Basisvektoren des Dualraumes $\mathcal{B}^*$ spannen ein *reziprokes* Gitter mit Basis $\{\mathbf{b}^1, \mathbf{b}^2, \ldots, \mathbf{b}^d\} = \{\mathbf{f}^1, \mathbf{f}^2, \ldots, \mathbf{f}^d\}$ auf.
a) Wir betrachten Graphen in einem 2-dimensionalen Honigwabengitter (d=2), siehe Skizze. Atome sind in der Skizze als 'A' und 'B' bezeichnet.
Für eine Einheitszelle in diesem Gitter betrachten wir jeweils Paare von Atomen 'A' und 'B' welche auf der gleichen horizontalen Linie liegen. Den Abstand zwischen zwei benachbarten Atomen bezeichnen wir mit einer Konstante a, und für eine Verbindung zwischen einem Atom 'B' und dem davon rechts oberhalb (bzw. unterhalb) liegenden Atom 'A' nehmen wir einen Winkel von $2\pi/3$ (bzw. $4\pi/3$) an. Die Einheitszellen bilden selbst ein hexagonales Gitter.



Daraus ergeben sich Basisvektoren $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$ der Einheitszellen

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 3 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 3 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix},$$

im Koordinatensystem $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y\}$ (siehe Skizze). Berechnen Sie die Basisvektoren $\mathbf{b}^1$ und $\mathbf{b}^2$ des reziproken Gitters.
b) Geben Sie das Volumen der primitiven Einheitszelle eines Kristallgitters ($d = 3$) an. (Die Einheitszelle ist das von den Basisvektoren $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ gebildete Parallelepiped.)
c) Sei $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ die Basis eines Kristallgitters ($d = 3$). Bestimmen Sie die Basisvektoren $\mathbf{b}^1$, $\mathbf{b}^2$, $\mathbf{b}^3$ des reziproken Gitters.
Hinweis : Finde zuerst einen Vektor $\mathbf{v}^i$, der orthogonal zu den beiden Vektoren $\mathbf{a}_j$ und $\mathbf{a}_k$ ($j \neq i$, $k \neq i$) steht, und nomiere dann den Vektor.

3.3 Orthogonalprojektion

a) Sei

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix},$$

definiert bezüglich dem kartesischen Koordinatensystem, und sei

$$M = \{\alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{A}\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \,:\, \alpha, \beta \in \mathbb{R}\}.$$

Die Menge M lässt sich auch als $\{p(\mathbf{A})\mathbf{x} \,:\, p \in \Pi_1\}$ schreiben, wobei Π_1 hier die Klasse der Polynome vom Grad 1 mit reelen Koeffizienten bezeichnet.
Sei V der von der Menge M aufgespannte Vektorraum im $\mathbb{R}^3$, versehen mit dem euklidischen inneren Produkt. Geben Sie eine Orthonormalbasis von V an.
b) Für den Vektorraum aus a) erhalten wir $\mathbb{R}^3 = V \oplus V^\perp$. Geben Sie eine Orthogonalprojektion auf V und $V^\perp$ in Matrixform an.
c) Sei $g(t) = 2 - t + t^2$ und sei $\mathbf{E}_V$ die Orthonormalprojektion auf V aus b). Berechnen Sie den Vektor $\mathbf{E}_V g(\mathbf{A})\mathbf{x}$. Gilt $\mathbf{E}_V g(\mathbf{A})\mathbf{x} = (2\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x}$?
d) Sei $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_n\}$ die kanonische Basis im $\mathbb{R}^n$ und $\mathbf{P}$ die Projektion $\mathbf{P} = \sum_{j=1}^{n-1} |\mathbf{e}_{j+1}\rangle\langle\mathbf{e}_j|$. Schreiben Sie $\mathbf{P}$ in Matrixform an, und zeigen Sie $\mathbf{P}^{n-1} = |\mathbf{e}_n\rangle\langle\mathbf{e}_1|$ und $\mathbf{P}^n = 0$. Wobei der hochgestellte Index von $\mathbf{P}$ als Potenz zu verstehen ist, z.b. $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}\mathbf{P}$.
e) Sei $\{\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n\}$ eine (beliebige) Orthonormalbasis von einem n-dimensionalen Vektorraum V. Für $k \leq n$ spannt $\{\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_k\}$ einen k-dimensionalen Unterraum $V_k \subset V$ auf. Für die Projektion $\mathbf{P} = \sum_{j=1}^{k} |\mathbf{e}_j\rangle\langle\mathbf{e}_j|$ zeigen Sie $\langle\mathbf{P}\mathbf{x}, \mathbf{x}\rangle = \|\mathbf{x}\|^2$ für $\mathbf{x} \in V_k$ und $\langle\mathbf{P}\mathbf{x}, \mathbf{x}\rangle < \|\mathbf{x}\|^2$ für $\mathbf{x} \in V \setminus V_k$.

Ankreuzbar: 1a-c, 1de, 2, 3a-c, 3de