王德民
许振华
黎乐民
叶学其
朱芝仙

量子化学

基本原理和从头计算法

题解

科学出版社

内 容 简 介

本书是《量子化学——基本原理和从头计算法》一书的习题和解答，包括线性代数基础、量子力学基本原理、群论基础知识及其应用、原子电子结构的多重态理论以及原子和分子电子结构的从头计算法等方面内容的习题近300个．对每个习题都给出详细的解法．习题中的大部分是为读者进行基本训练而设置的，一小部分可作为对原书的补充材料来阅读．

本书可供高等学校化学系高年级学生、研究生和有关教师及科研人员参考．

量 子 化 学

基本原理和从头计算法

题 解

黎乐民 王德民 许振华 叶学其 朱芝仙

责任编辑 白明珠

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1987年7月第一版 开本：850×1168 1/32

1987年7月第一次印刷 印张：14 7/8

印数：0001—5,300 字数：394,000

统一书号：13031·3532

本社书号：4661·13—4

定价：4.50元

序　　言

本书是《量子化学——基本原理和从头计算法》一书习题的题解，其中大部分习题曾用作研究生课程的课外作业. 完成这些习题，作为量子化学研究生的基本训练是很必要的. 自学该书的读者也需要认真做好习题才能真正掌握该书的内容. 不少读者向我们反映希望有一本习题解答，以便核对自己的答案，因此我们编写了这本习题题解. 第一到四章由王德民、许振华和叶学其同志编写；第五、六、九、十和十三章由王德民、许振华同志编写和王德民同志校核；第七和八章由黎乐民、许振华和叶学其同志编写；第十一和十二章由朱芝仙同志编写；第十四章由黎乐民同志编写. 第七、八和第十一到十四章由黎乐民同志校核.

本书的习题实际上可分为两类. 一类是为进行基本训练而设置的. 这部分习题难度不大，但完成它所需的时间可能不少，因为类似的和重复的计算要反复进行. 这是必要的，因为基本训练必需重复进行才能达到熟练掌握的目的. 如果有些读者时间有限，类似性的题目中只选做一部分也可以. 另一类习题则是为了提高或作为原书的补充材料编进来的，包括原书中一些重要公式的详细推导以及一些有意义而该书不便于详细介绍的内容. 我们相信这些材料对于帮助读者掌握该书内容是有益的. 一些读者不能独立完成这类题目是自然的事情，不必因此而影响自己的学习情绪.

由于我们的水平有限，时间也较紧，来不及反复推敲，不妥乃至错误之处在所难免，更谈不上我们提供的解题方法是最优的了. 如果读者来信指出我们的错误或向我们建议更好的解题方法，我们将不胜感谢.

本书的编写自始至终都得到徐光宪教授的支持、关心和指导，我们特在此表示衷心的感谢.

编者

目　　录

第一章 矩　阵

§1.1—§1.3 矩阵的运算方法

1. 如

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}-6 & -4 & -2\\ -9 & -6 & -3\\ 3 & 2 & 1\end{bmatrix},\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}0 & 1 & -2\\ -1 & 0 & 3\\ 2 & -3 & 0\end{bmatrix}$$

试求 **AB** 和 **BA**

解:

$$\mathbf{AB}=\begin{bmatrix}-6 & -4 & -2\\ -9 & -6 & -3\\ 3 & 2 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1 & -2\\ -1 & 0 & 3\\ 2 & -3 & 0\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{BA}=\begin{bmatrix}0 & 1 & -2\\ -1 & 0 & 3\\ 2 & -3 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-6 & -4 & -2\\ -9 & -6 & -3\\ 3 & 2 & 1\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}-15 & -10 & -5\\ 15 & 10 & 5\\ 15 & 10 & 5\end{bmatrix}=5\begin{bmatrix}-3 & -2 & -1\\ 3 & 2 & 1\\ 3 & 2 & 1\end{bmatrix}$$

2. 如

$$\mathbf{R}(\theta)=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}$$

试证 $\mathbf{R}(\theta_1)\mathbf{R}(\theta_2)=\mathbf{R}(\theta_2)\mathbf{R}(\theta_1)=\mathbf{R}(\theta_1+\theta_2)$

解:

$$\mathbf{R}(\theta_1)\mathbf{R}(\theta_2)=\begin{bmatrix}\cos\theta_1 & -\sin\theta_1\\ \sin\theta_1 & \cos\theta_1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\theta_2 & -\sin\theta_2\\ \sin\theta_2 & \cos\theta_2\end{bmatrix}$$

$$
=\begin{bmatrix} \cos\theta_1 \cos\theta_2 - \sin\theta_1 \sin\theta_2 & -\cos\theta_1 \sin\theta_2 - \sin\theta_1 \cos\theta_2 \\ \sin\theta_1 \cos\theta_2 + \cos\theta_1 \sin\theta_2 & -\sin\theta_1 \sin\theta_2 + \cos\theta_1 \cos\theta_2 \end{bmatrix}
$$

$$
=\begin{bmatrix} \cos(\theta_1+\theta_2) & -\sin(\theta_1+\theta_2) \\ \sin(\theta_1+\theta_2) & \cos(\theta_1+\theta_2) \end{bmatrix}
$$

$$
=\mathbf{R}(\theta_1+\theta_2)
$$

同理

$$
\mathbf{R}(\theta_2)\mathbf{R}(\theta_1)=\mathbf{R}(\theta_1+\theta_2)
$$

故

$$
\mathbf{R}(\theta_1)\mathbf{R}(\theta_2)=\mathbf{R}(\theta_2)\mathbf{R}(\theta_1)=\mathbf{R}(\theta_1+\theta_2)
$$

3. 设 $\mathbf{S}_x$，$\mathbf{S}_y$，$\mathbf{S}_z$ 为表示电子自旋算符的三个矩阵，即

$$
\mathbf{S}_x=\frac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}
$$

$$
\mathbf{S}_y=\frac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}
$$

$$
\mathbf{S}_z=\frac{1}{2}\hbar\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}
$$

上式中 $\hbar=h/2\pi$，h 为 Planck 常数，试证

(a) $\mathbf{S}_x\mathbf{S}_y+\mathbf{S}_y\mathbf{S}_x=0$

(b) $\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j+\mathbf{S}_j\mathbf{S}_i=\dfrac{1}{2}\hbar^2\delta_{ij}\mathbf{I}$

上式中 $\mathbf{I}$ 表示(2×2)单位矩阵，δ_{ij} 为 Kronecker δ，$i=x$，y，z；$j=x$，y，z。

(c) $[\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y]\equiv\dfrac{1}{i\hbar}(\mathbf{S}_x\mathbf{S}_y-\mathbf{S}_y\mathbf{S}_x)=\mathbf{S}_z$

$[\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y]$ 称为量子 Poisson 括号.

解:

$$
\mathbf{S}_x\mathbf{S}_y=\left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}
$$

$$= \left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2 \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{S}_y\mathbf{S}_x = -\left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2 \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}$$

故

$$\mathbf{S}_x\mathbf{S}_y + \mathbf{S}_y\mathbf{S}_x = 0, \quad \mathbf{S}_x\mathbf{S}_x + \mathbf{S}_x\mathbf{S}_x = \frac{1}{2}\hbar^2\mathbf{I}$$

同理

$$\mathbf{S}_y\mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z\mathbf{S}_y = 0, \quad \mathbf{S}_y\mathbf{S}_y + \mathbf{S}_y\mathbf{S}_y = \frac{1}{2}\hbar^2\mathbf{I}$$

$$\mathbf{S}_z\mathbf{S}_x + \mathbf{S}_x\mathbf{S}_z = 0, \quad \mathbf{S}_z\mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z\mathbf{S}_z = \frac{1}{2}\hbar^2\mathbf{I}$$

故

$$\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j + \mathbf{S}_j\mathbf{S}_i = \frac{1}{2}\hbar^2\delta_{ij}\mathbf{I}$$

$$[\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y] = \frac{1}{i\hbar}(\mathbf{S}_x\mathbf{S}_y - \mathbf{S}_y\mathbf{S}_x) = \mathbf{S}_z$$

4. 如用方矩阵表示复数

$$a + bi \equiv \begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix}, \qquad c + di \equiv \begin{bmatrix} c & d \\ -d & c \end{bmatrix}$$

试证复数相乘的规则与矩阵相乘的规则一致，即

$$(a + bi)(c + di) = \begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & d \\ -d & c \end{bmatrix}$$

试求表示 $(a+bi)^{-1}$ 的矩阵.

解：(一)按复数乘法规则，有

$$(a + bi)(c + di) = (ac - bd) + (bc + ad)i$$

$$= \begin{bmatrix} ac - bd & bc + ad \\ -(bc + ad) & ac - bd \end{bmatrix}$$

而用矩阵乘法，有

$$\begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & d \\ -d & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ac - bd & bc + ad \\ -(bc + ad) & ac - bd \end{bmatrix}$$

故二者的乘法规则一致。

（二）求 $(a+bi)^{-1}$。由复数算法得

$$\frac{1}{a+bi}=\frac{a-bi}{(a+bi)(a-bi)}=\frac{a}{a^2+b^2}+\frac{b}{a^2+b^2}i$$

$$=\begin{bmatrix}\frac{a}{a^2+b^2} & \frac{b}{a^2+b^2}\\ -\frac{b}{a^2+b^2} & \frac{a}{a^2+b^2}\end{bmatrix}$$

5. 核自旋量子数 $I=1$ 的自旋算符的矩阵表示为

$$\mathbf{I}_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_z=\hbar\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

(a) 试求

$$[\mathbf{I}_i,\ \mathbf{I}_j]=\frac{1}{i\hbar}(\mathbf{I}_i\mathbf{I}_j-\mathbf{I}_j\mathbf{I}_i)\quad(i,j=x,\ y,\ z;\ i\neq j)$$

(b) 试证

$$\mathbf{I}_x^2+\mathbf{I}_y^2+\mathbf{I}_z^2=2\hbar^2\mathbf{I}$$

此处 $\mathbf{I}$ 为(3×3)单位矩阵。

解：(a)

$$\mathbf{I}_x\mathbf{I}_y=\frac{\hbar^2}{2}\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{bmatrix}$$

$$=\frac{\hbar^2}{2}\begin{bmatrix}i & 0 & -i\\ 0 & 0 & 0\\ i & 0 & -i\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_y\mathbf{I}_x = \frac{\hbar^2}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2}\begin{bmatrix} -i & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & i \end{bmatrix}$$

故

$$[\mathbf{I}_x,\ \mathbf{I}_y] = \frac{1}{i\hbar}(\mathbf{I}_x\mathbf{I}_y - \mathbf{I}_y\mathbf{I}_x) = \mathbf{I}_z$$

同理,可求得

$$[\mathbf{I}_y,\ \mathbf{I}_z] = \mathbf{I}_x, \quad [\mathbf{I}_z,\ \mathbf{I}_x] = \mathbf{I}_y$$

(b)

$$\mathbf{I}_x^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_y^2 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_z^2 = \hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

故

$$\mathbf{I}_x^2 + \mathbf{I}_y^2 + \mathbf{I}_z^2 = 2\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = 2\hbar^2\mathbf{I}$$

6. 如 $\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$ 为 n 维实矢量空间中的两个列矢,试证

(a) $\|\mathbf{X}\pm\mathbf{Y}\|^2 = \|\mathbf{X}\|^2 \pm 2\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} + \|\mathbf{Y}\|^2$

(b) Cauchy-Schwarz 不等式,即

$$\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} \leqslant \|\mathbf{X}\|\|\mathbf{Y}\|$$

(c) 三角不等式,即

$$\|\mathbf{X}+\mathbf{Y}\| \leqslant \|\mathbf{X}\|+\|\mathbf{Y}\|$$

如 $\mathbf{X},\mathbf{Y}$ 为三维实矢量空间 V_3 中的两个列矢，即 $\mathbf{X},\ \mathbf{Y}\in V_3$，试讨论三角不等式的几何意义。

解：(a) 由定义

$$\begin{aligned}\|\mathbf{X}\pm\mathbf{Y}\|^2 &= (\mathbf{X}\pm\mathbf{Y})^{\mathrm{T}}(\mathbf{X}\pm\mathbf{Y}) = \|\mathbf{X}\|^2 \pm \mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} \pm \mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} + \|\mathbf{Y}\|^2 \\ &= \|\mathbf{X}\|^2 \pm 2\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} + \|\mathbf{Y}\|^2\end{aligned}$$

其中最后的等式是因为

$$\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} = [x_1,\ x_2,\cdots,\ x_n]\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_ny_n$$

$$\mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} = [y_1,\ y_2,\cdots,\ y_n]\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_ny_n$$

故

$$\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y} = \mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$$

(b) 设

$$\mathbf{R} = \lambda\mathbf{X} - \mathbf{Y}$$

其中 λ 为实数，$\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{Y}$ 为实矢量．则

$$f(\lambda) \equiv \|\mathbf{R}\|^2 = \|\lambda\mathbf{X}-\mathbf{Y}\|^2 = \lambda^2\|\mathbf{X}\|^2 - 2\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y}\lambda + \|\mathbf{Y}\|^2 \geqslant 0$$

将 λ 看作未知数，又令

$$a \equiv \|\mathbf{X}\|^2,\quad b = -2\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{Y},\quad c = \|\mathbf{Y}\|^2$$

因而有方程

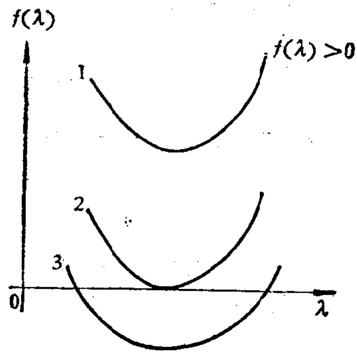
$$f(\lambda) = a\lambda^2 + b\lambda + c \geqslant 0$$

现在的问题是 λ 在什么条件下能保证 $f(\lambda) \geqslant 0$?

参看下页图，对于曲线 2，$f(\lambda)$只有一个零点 $f(\lambda)=0$，对应的

$$\lambda = \frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

式中必有



$$b^2 - 4ac = 0$$

对于曲线 3，$f(\lambda)$ 出现负值，同时具有两个零点，对应的

$$\lambda = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

其中必有

$$b^2 - 4ac > 0$$

这种情况是我们不要的，因为前述 $f(\lambda) \geqslant 0$。

最后，对于曲线 1，没有实根，只能有虚根，故

$$b^2 - 4ac < 0$$

总之，$f(\lambda) \geqslant 0$，必然有

$$b^2 - 4ac \leqslant 0$$

即

$$(-2\mathbf{X}^T\mathbf{Y})^2 - 4\|\mathbf{X}\|^2\|\mathbf{Y}\|^2 \leqslant 0$$

于是

$$\mathbf{X}^T\mathbf{Y} \leqslant \|\mathbf{X}\|\|\mathbf{Y}\|$$

(c) $$\|\mathbf{X}+\mathbf{Y}\|^2 = \|\mathbf{X}\|^2 + \|\mathbf{Y}\|^2 + 2\mathbf{X}^T\mathbf{Y} \leqslant \|\mathbf{X}\|^2 + \|\mathbf{Y}\|^2 + 2\|\mathbf{X}\|\|\mathbf{Y}\| = [\|\mathbf{X}\| + \|\mathbf{Y}\|]^2$$

故

$$\|\mathbf{X}+\mathbf{Y}\| \leqslant \|\mathbf{X}\| + \|\mathbf{Y}\|$$

这表明两个矢量和的长度小于或等于两个矢量长度的和；并且只

有当两个矢量同向平行时，上式等号才成立.

7. 如

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{bmatrix},\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{bmatrix}$$

试证

$$\mathbf{V}=\begin{bmatrix}a_2b_3-a_3b_2\\a_3b_1-a_1b_3\\a_1b_2-a_2b_1\end{bmatrix}$$

与 **A** 及 **B** 都正交.

解:

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{V}&=[a_1a_2a_3]\begin{bmatrix}a_2b_3-a_3b_2\\a_3b_1-a_1b_3\\a_1b_2-a_2b_1\end{bmatrix}\\&=a_1(a_2b_3-a_3b_2)+a_2(a_3b_1-a_1b_3)\\&\quad+a_3(a_1b_2-a_2b_1)=0\\\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{V}&=[b_1b_2b_3]\begin{bmatrix}a_2b_3-a_3b_2\\a_3b_1-a_1b_3\\a_1b_2-a_2b_1\end{bmatrix}\\&=b_1(a_2b_3-a_3b_2)+b_2(a_3b_1-a_1b_3)\\&\quad+b_3(a_1b_2-a_2b_1)=0\end{aligned}$$

故 **A** 及 **B** 都与 **V** 正交

8. 用数学归纳法求下列方阵的 n 次方:

(a) $\begin{bmatrix}1&1\\0&1\end{bmatrix}^n$ (b) $\begin{bmatrix}0&1&0\\0&0&1\\0&0&0\end{bmatrix}^n$

(c) $\begin{bmatrix}1&-1&-1&-1\\-1&1&-1&-1\\-1&-1&1&-1\\-1&-1&-1&1\end{bmatrix}^n$

(d) $\begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}^n$ (e) $\begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}^n$

解：(a)

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^3 = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \cdots,$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{n-1} = \begin{bmatrix} 1 & n-1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

故

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^n = \begin{bmatrix} 1 & n \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

(b) $$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^3 = [0]$$

故

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^n = [0], \quad n \geqslant 3$$

(c)

$$\mathbf{A}^4 \equiv \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}^2$$

$$= \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} = 2^2\mathbf{I}$$

$$\mathbf{A}^3 = 2^2\mathbf{I}\mathbf{A} = 2^2\mathbf{A}$$

$$\mathbf{A}^4 = 2^2\mathbf{A}^2 = 2^4\mathbf{I}$$

$$\mathbf{A}^5 = 2^4\mathbf{I}\mathbf{A} = 2^4\mathbf{A}$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{A}^n = \begin{cases} 2^n \quad \mathbf{I} & n \text{ 为偶数} \\ 2^{n-1}\,\mathbf{A} & n \text{ 为奇数} \end{cases}$$

(d)

$$\mathbf{A}^2 \equiv \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} \cos 2\phi & -\sin 2\phi \\ \sin 2\phi & \cos 2\phi \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{A}^n = \begin{bmatrix} \cos n\phi & -\sin n\phi \\ \sin n\phi & \cos n\phi \end{bmatrix}$$

(e)

$$\mathbf{A}^2 \equiv \begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 2\lambda & 1 \\ 0 & \lambda^2 & 2\lambda \\ 0 & 0 & \lambda^2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^3 = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 2\lambda & 1 \\ 0 & \lambda^2 & 2\lambda \\ 0 & 0 & \lambda^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda^3 & 3\lambda^2 & 3\lambda \\ 0 & \lambda^3 & 3\lambda^2 \\ 0 & 0 & \lambda^3 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda^3 & 3\lambda^2 & \frac{1}{2}\cdot 3\cdot 2\lambda \\ 0 & \lambda^3 & 3\lambda^2 \\ 0 & 0 & \lambda^3 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^4 = \begin{bmatrix} \lambda^3 & 3\lambda^2 & 3\lambda \\ 0 & \lambda^3 & 3\lambda^2 \\ 0 & 0 & \lambda^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda^4 & 4\lambda^3 & 6\lambda^2 \\ 0 & \lambda^4 & 4\lambda^3 \\ 0 & 0 & \lambda^4 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda^4 & 4\lambda^3 & \frac{1}{2}\cdot 4\cdot 3\cdot \lambda^2 \\ 0 & \lambda^4 & 4\lambda^3 \\ 0 & 0 & \lambda^4 \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{A}^n = \begin{bmatrix} \lambda^n & n\lambda^{n-1} & \frac{1}{2}n(n-1)\lambda^{n-2} \\ 0 & \lambda^n & n\lambda^{n-1} \\ 0 & 0 & \lambda^n \end{bmatrix}$$

9. 如果 $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$，矩阵 $\mathbf{B}$ 就称为与 $\mathbf{A}$ 可交换，设

$$\text{(a)}\quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{(b)}\quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 3 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\text{(c)}\quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

求所有与 $\mathbf{A}$ 可交换的矩阵。

解：(a) 设

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{bmatrix}$$

如果 $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$

则应有

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

即

$$\begin{bmatrix} x_1 + x_2 & y_1 + y_2 \\ x_2 & y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_1 + y_1 \\ x_2 & x_2 + y_2 \end{bmatrix}$$

比较左右矩阵的对应矩阵元，得

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = x_1 \\ y_1 + y_2 = x_1 + y_1 \\ x_2 = x_2 \\ y_2 = x_2 + y_2 \end{cases}$$

解之，得

$$x_1 = x_1, \quad y_1 = y_1, \quad x_2 = 0, \quad y_2 = x_1$$

于是

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 \\ 0 & x_1 \end{bmatrix}$$

(b) 用上述步骤可求得

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} x_1 & 0 & 0 \\ x_2 & x_1 + \frac{1}{3}x_2 & \frac{2}{3}x_3 \\ x_3 & \frac{1}{3}x_3 & x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_3 \end{bmatrix}$$

(c)

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ 0 & a_1 & b_1 \\ 0 & 0 & a_1 \end{bmatrix}$$

10. 验证

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

是正交阵。

解：

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A} =$$

$$
\begin{bmatrix}
\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\
\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\
0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\
0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\
0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\
\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\
\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{bmatrix}
$$

$$
=\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}
$$

故 $\mathbf{A}$ 是正交阵.

§1.4 行列式求值和矩阵求逆

11. 求下列行列式之值

(a) $\begin{vmatrix} 4 & 1 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 10 & 5 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 7 \end{vmatrix}$ (b) $\begin{vmatrix} a & 1 & 0 & 0 \\ -1 & b & 1 & 0 \\ 0 & -1 & c & 1 \\ 0 & 0 & -1 & d \end{vmatrix}$

(c) $\begin{vmatrix} a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f & b & 0 & 0 & 0 \\ g & h & c & 0 & 0 \\ i & j & k & d & 0 \\ l & m & n & p & e \end{vmatrix}$

解:

(a) $\begin{vmatrix} 4 & 1 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 10 & 5 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 7 \end{vmatrix} = 4\begin{vmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 7 \end{vmatrix}$