

POVZETEK

Namen tega dela je reševanje nekaterih problemov, ki izhajajo iz kvantne kemije, prevedejo pa se na povsem matematične računske probleme v linearni algebri. Predvsem gre tu za iskanje najbližje ortonormirane baze k dani bazi končno dimenzionalnega Hilbertovega prostora oziroma za iskanje minimuma nekaterih izrazov, ki jih dobimo pri tem.

V prvem poglavju bomo najprej ponovili nekatere pojme in izreke iz linearne algebre, ki jih bomo rabili v naslednjih poglavjih.

V drugem poglavju bomo iskali najbližji sebi adjungiran operator k poljubnemu operatorju. Problem bomo rešili s pomočjo analognega problema v teoriji kompleksnih števil.

V tretjem poglavju si bomo zastavili problem, kako poiskati ortonormirano bazo, najbližjo glede na dano bazo enotskih vektorjev. Ena od posledic reševanja tega problema bo računski postopek za ortogonalizacijo baze, tako imenovan Löwdinov postopek. Löwdinov postopek bo imel nekaj lastnosti, ki jih bolj znana Gram-Schmidtova metoda nima.

V četrtem poglavju bomo problem iz četrtega poglavja nekoliko posplošili in sicer bomo iskali ortonormirano bazo, ki bo blizu neki dani bazi enotskih vektorjev hkrati pa tudi čim bližje neki drugi ortonormirani bazi.

V zadnjem poglavju bomo poskusili ugotoviti ali rešitve minimizacijskih problemov, ki smo jih dobili v prejšnjih poglavjih veljajo pri različnih normah na prostoru endomorfizmov Hilbertovega prostora.

Math. Subj. class(1991)

81V55

15A60

Key words: Löwdin
Gram-Schmidt
Minimization

Literatura

- [1] J. A. Goldstein, M. Levy: Linear Algebra and Quantum Chemistry, Amer. Math. Monthly, 98(1991), 710-718.
- [2] J.G. Aiken, J.A. Erdos, J.A. Goldstein: Unitary approximation of positive operators, II. J. Math., 24(1980) 61-72.
- [3] W. Rudin: Functional Analysis, Mc Graw Hill Book Co., 1973.