

Química Teórica & Estrutural

Departamento de Química, Universidade de Coimbra

2012/2013

Aula 3 (adicionais)

1. Verifique quais dos seguintes conjuntos de funções são linearmente independentes: (a) $f(x) = 4$, $g(x) = x^2$, $h(x) = e^{2x}$; (b) $f(x) = x$, $g(x) = x^2$, $h(x) = x^3$; (c) $f(x) = x$, $g(x) = 5x$, $h(x) = x^2$; (d) $f(x) = 2 + x^2$, $g(x) = 3 - x + 4x^3$, $h(x) = 2x + 3x^2 - 8x^3$.
2. Quais dos seguintes vectores são linearmente independentes: (a) $\vec{A} = (3, 0, 0)$, $\vec{B} = (0, -2, 0)$, $\vec{C} = (0, 0, -1)$; (b) $\vec{A} = (6, -9, 0)$, $\vec{B} = (-2, 3, 0)$; (c) $\vec{A} = (2, 3, -1)$, $\vec{B} = (0, 1, 2)$, $\vec{C} = (0, 0, -5)$; (d) $\vec{A} = (1, -2, 3)$, $\vec{B} = (-4, 1, 7)$, $\vec{C} = (0, 10, 11)$, $\vec{D} = (14, 3, -4)$
3. Considere os estados $|\psi\rangle = 3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle$ e $|\chi\rangle = -1|\phi_1\rangle + 2i|\phi_2\rangle$, com ϕ_1 e ϕ_2 ortonormais. Calcule $|\psi + \chi\rangle$ e $\langle\psi + \chi|$.
4. Considere a matriz operador $\hat{A}$, o ket $|\psi\rangle$ e o bra $\langle\phi|$:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix}, \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} -1+i \\ 3 \\ 2+3i \end{pmatrix}, \quad \langle\phi| = (6 \quad -i \quad 5)$$

Determine as quantidades $\hat{A}|\psi\rangle$, $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$ e $|\psi\rangle\langle\phi|$.

5. Sabendo que um operador matricial $\hat{H}$ é definido por

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Será

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} i \\ 7i \\ -2 \end{pmatrix}$$

valor próprio de $\hat{H}$?

6. Considere as seguintes matrizes:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(a) Calcule os comutadores $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$, $[\mathbf{B}, \mathbf{A}]$ e $[\mathbf{C}, \mathbf{A}]$; (b) Mostre que $\mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2 + \mathbf{C}^2 = 4\mathbf{1}$, com $\mathbf{1}$ a matriz unitária.

7. Considere as seguintes funções de onda:

$$\psi(x, y) = \sin(2x) \cos(5x) \quad \psi(x, y) = \exp[-2(x^2 + y^2)] \quad \psi(x, y) = \exp[-i(x + y)]$$

(a) Verifique se algumas das funções de onda é função própria do operador $\hat{A} = \partial/\partial x + \partial/\partial y$. (b) Verifique se algumas das funções de onda é função própria do operador $\hat{B} = \partial^2/\partial^2 x + \partial^2/\partial^2 y + 1$. (c) Para as funções apresentadas determine $\hat{A}\hat{B}$ e $\hat{B}\hat{A}$. O que concluí sobre $[\hat{A}, \hat{B}]$.