QFL - 5608:
Métodos Ab Initio Multiconfiguracionais::
Introdução e Aplicações Recentes
Lista de Exercícios I

Antonio Carlos Borin
Universidade de São Paulo - Instituto de Química

20/03/2018

1. Resolver uma equação de autovalores $\hat{L}\psi = \lambda\psi$ implica em determinar as autofunções ψ que satisfazem e cumprem certos pré-requisitos, bem como os autovalores correspondentes λ. Resolva as seguintes equações de autovalores:
   (a) $\hat{L}_a = id/dx$, com a condição de que $\psi(x) = \psi(x + a)$; ou seja, ψ é períoda e o período é a
   (b) $\hat{L}_b = d/dx$, sendo ψ finita.
   (c) $\hat{L}_c$ tal que $\hat{L}_c\psi(x) = \psi(-x)$.

2. Três autofunções (ψ_1, ψ_2, ψ_3) de um operador são linearmente independentes e degeneradas, mas não necessariamente ortogonais. Construa, a partir delas, três combinações linerares que são ortogonais e normalizadas. As novas funções continuam sendo autofunções? continuam degeneradas? Resolva este exercício empregando o método de Gram-Schmidt.

3. Para o problema de uma partícula dentro de uma caixa unidimensional, com paredes rígidas infinitas, o sistema encontra-se em um estado estacionário. Calcule o valor médio de x e x^2, em função da energia. Calcule, também, $\sigma_x^2 = \overline{(x - x^2)^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2$.

4. Considere um conjunto de partículas que se movem em um poço de potencial de largura a e paredes infinitas. Escreva a função de onda $\psi(x,t)$ que descreve este sistema, para o caso no qual para o tempo $t = 0$ a probabilidade de que a energia do sistema seja E_1 ou E_2 seja igual a 1/2. Determine, mesmo assim, $|\psi(x,t)|^2$ e o valor médio de x.

5. Prove que operadores hermitianos possuem autovalores reais. Prove, também, que suas autofunções são ortonormais, supondo o caso não degenerado.

6. Demostre que o operador hermitiano $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(x)$ é hermitiano somente se o potencial for real. Quais condições de integração as autofunções de $\hat{H}$ devem satisfazer para que os resultados sejam corretos?