

Química Computacional (2022-2023)

Trabalho Prático 2a: Revisão Matemática

Aplicações simples: vetores, matrizes e transformações unitárias (ortogonais)

1) Considere os seguintes vetores: $\vec{a} = (1.1 ; 0 ; 2.3)$ $\vec{b} = (1 ; 1 ; 2.5)$ $\vec{c} = (0 ; 2.5 ; -1)$.

Calcule:

- Os módulos de \vec{a} , \vec{b} e \vec{c} ;
- O produto interno dos vetores $\vec{a} \cdot \vec{b}$, $\vec{a} \cdot \vec{c}$, e $\vec{b} \cdot \vec{c}$;
- Verifique quais destes vetores são ortogonais entre si.

2) Considere as seguintes matrizes:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

Calcule o produto matricial $\mathbf{C} = \mathbf{AB}$.

3) Considere as seguintes matrizes:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad \mathbf{O} = \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{12} & O_{22} \end{pmatrix}$$

a) Verifique que $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, ou seja, que \mathbf{U} é unitária.

b) Calcule a seguinte transformação unitária: $\mathbf{\Omega} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{U}$.

c) Verifique que, para que $\mathbf{\Omega}$ seja diagonal, o ângulo θ deve ser dado por:

$$\theta = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{2O_{12}}{O_{11} - O_{22}}$$

d) Verifique que os valores próprios ω_1 e ω_2 de \mathbf{O} , obtidos através da transformação unitária 3b, ou seja:

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{U} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{12} & O_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & \omega_2 \end{pmatrix}$$

são dados por:

$$\omega_1 = O_{11} \cos^2 \theta + O_{22} \sin^2 \theta + O_{12} \sin(2\theta)$$

$$\omega_2 = O_{11}\sin^2\theta + O_{22}\cos^2\theta - O_{12}\sin(2\theta)$$

4) Do exercício anterior temos que os vetores próprios de \mathbf{O} são dados por:

$$\begin{pmatrix} c_1^1 \\ c_2^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} c_1^2 \\ c_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\theta \\ -\cos\theta \end{pmatrix}$$

ou seja

$$\begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{12} & O_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^1 \\ c_2^1 \end{pmatrix} = \omega_1 \begin{pmatrix} c_1^1 \\ c_2^1 \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{12} & O_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^2 \\ c_2^2 \end{pmatrix} = \omega_2 \begin{pmatrix} c_1^2 \\ c_2^2 \end{pmatrix} \quad (\mathbf{I})$$

Considere a matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

- Calcule, utilizando o método das transformações unitárias, os valores e vetores próprios de \mathbf{A} .
- Verifique a equação de valores próprios (\mathbf{I}) para a matriz \mathbf{A} .

Relações úteis:

$$\sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$$

$$\cos(2\theta) = \cos^2\theta - \sin^2\theta$$

$$\sin(2\theta) = 2 \cdot \cos\theta \cdot \sin\theta$$

$$\tan\theta = \frac{\sin\theta}{\cos\theta}$$

$$\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) = \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\tan^{-1}(+\infty) = \frac{\pi}{2}$$