Química Computacional (2019-2020)

Trabalho Prático 1: Introdução a uma linguagem de programação (PYTHON)

Aplicações simples: somatórios, soma e multiplicação de matrizes; 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).
Escreva um programa em PYTHON que permita calcular:
   a) Os módulos de $\vec{a}$, $\vec{b}$ e $\vec{c}$;
   b) O produto interno dos vetores $\vec{a}\cdot\vec{b}$, $\vec{a}\cdot\vec{c}$, e $\vec{b}\cdot\vec{c}$;
   c) Verifique quais destes vetores são ortogonais entre si.

2) Considere as seguintes matrizes:

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

   a) Calcule o produto matricial **C = AB**.
   b) Escreva um programa em PYTHON para o cálculo do produto de matrizes, e verifique com o programa, o resultado anterior.

3) Considere as seguintes matrizes:

$$\mathbf{U}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \mathrm{sen}\theta\\ \mathrm{sen}\theta & -\cos\theta\end{pmatrix} \qquad \mathbf{O}=\begin{pmatrix}O_{11} & O_{12}\\ O_{12} & O_{22}\end{pmatrix}$$

   a) Verifique que $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}=1=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$, ou seja, que **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 **O**, obtidos através da transformação unitária 4b, ou seja:

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

são dados por:

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

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

Note que os vetores próprios de **O** são dados por:

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

ou seja

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

4) Considere a matriz:

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

a) Calcule, utilizando o método das transformações unitárias, os valores e vetores próprios de **A**.
b) Verifique a equação de valores próprios (**I**) para a matriz **A**.
c) Escreva um programa em PYTHON que implemente o cálculo realizado em 4a.

Relações úteis:

$$\text{sen}^2\theta + \cos^2\theta = 1$$

$$\cos(2\theta) = \cos^2\theta - \text{sen}^2\theta \qquad\qquad \text{sen}(2\theta) = 2\cdot\cos\theta\cdot\text{sen}\theta$$

$$\tan\theta = \frac{\text{sen}\theta}{\cos\theta}$$