

# Kvantová chemie

## Cvičení 5

Přibližné metody I  
Variační metoda

## Problém 1 (Hejtman)

Dokažte rovnosti  $\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{k=0}^{+\infty} |c_k|^2 = 1$  a  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{k=0}^{+\infty} E_k |c_k|^2$  z „důkazu“ Ritzova variačního principu.

## Problém 2 (Toběrný)

Dokažte, že  $|\psi(\tau)\rangle = \sum_{k=0}^{+\infty} c_{k0} e^{-\frac{E_k \tau}{\hbar}} |\varphi_k\rangle$ , je za předpokladu  $\hat{H}|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle$  řešením rovnice  $\hat{H}|\psi(\tau)\rangle = -\hbar \frac{\partial |\psi(\tau)\rangle}{\partial \tau}$ .