Universidade Federal do Rio de Janeiro

Programa de Engenharia Química - PEQ/COPPE

COQ 875 - Química Quântica de Moléculas e Sólidos | 2025.2

Lista 01 - Fundamentos da Mecânica Quântica

Prof. Elvis Soares

Data de Entrega: 24/7/25

1. **Autovalores e autovetores:** Considere a matriz

$$A = \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{2}/2 & 0 \\ \sqrt{2}/2 & 2 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & 2 \end{pmatrix},$$

em uma certa base.

(a) Essa matriz é hermitiana?

(b) Determine os autovalores da matriz A.

(c) Determine os autovetores normalizados da matriz A. Eles são ortogonais entre si?

(d) Verifique que $U^\dagger A U$ é diagonal, com U sendo a matriz de autovetores de A.

2. **Spin e matrizes de Pauli:** Os operadores de spin para partículas de spin 1/2 podem ser escritos como

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$$

onde σ_i são denominadas as matrizes de Pauli, que numa determinada base podem ser escritas como

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(a) Mostre que $\sigma_i^2 = 1$.

(b) Mostre que o comutador $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$.

(c) Determine os autovalores e autovetores normalizados de $\hat{S}_z$;

(d) Escreva os autovetores normalizados de $\hat{S}_x$ e $\hat{S}_y$ em termos dos autovetores da matriz $\hat{S}_z$.

(e) Determine os autovalores e autovetores de $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$;

3. **Sistema de dois níveis:** O hamiltoniano de um sistema de dois níveis é dado por

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

como escrito na base do operador $\hat{S}_z$.

(a) Determine o comutador entre $\hat{H}$ e $\hat{S}_z$. Qual sua conclusão sobre as bases vetoriais utilizadas a partir dessa relação?

(b) Determine os autovalores e autovetores normalizados de $\hat{H}$ acima.

(c) Sabendo que a condição inicial do vetor de estado seja representada por

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

determine o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ para qualquer instante de tempo posterior.

(d) Determine a probabilidade de se medir um dos autoestados de $\hat{H}$ para qualquer instante de tempo $t > 0$. Faça um gráfico da probabilidade como função do tempo para cada autoestado do hamiltoniano $\hat{H}$.

(e) Agora, determine a probabilidade de se medir um dos autoestados do operador $\hat{S}_z$ para qualquer instante de tempo $t > 0$. Faça um gráfico da probabilidade como função do tempo para cada autoestado de $\hat{S}_z$.

(*Desafio*) Mostre que o hamiltoniano $\hat{H}$ e o operador de spin $\hat{S}_z$ podem ser escritos em notação de Dirac como sendo

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(|\beta_z\rangle \langle\alpha_z| + |\alpha_z\rangle \langle\beta_z| \right)$$

e

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \left(|\alpha_z\rangle \langle\alpha_z| - |\beta_z\rangle \langle\beta_z| \right)$$

e re-escreva os autovetores de $\hat{H}$ nessa notação.

4. **Partícula na caixa unidimensional: (Seção 3-4 McQuarrie)** Consideremos o pro-

blema unidimensional de uma partícula confinada em um potencial do tipo

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq L \\ \infty, & x > L \end{cases}$$

Assumindo que os autoestados de energia desse sistema sejam dados pelas funções de onda

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ A_n \operatorname{sen}(k_n x), & 0 \leq x \leq L \\ 0, & x > L \end{cases}$$

onde $n = 1, 2, \ldots, \infty$.

(a) Usando as condições de contorno para $\psi_n(x)$, determine as constantes k_n;

(b) Usando a condição de normalização para $\psi_n(x)$, determine as constantes A_n.

(c) Usando a equação de Schrodinger, determine os autovalores de energia E_n.

(d) Mostre que os autoestados de energias distintas são ortogonais entre si, ou seja, $\displaystyle\int_0^a \psi_n^*(x)\psi_m(x)\mathrm{d}x = \delta_{nm}$.

(e) Determine os seguintes valores esperados $\langle x \rangle$, $\left\langle x^2 \right\rangle$, $\langle p \rangle$ e $\left\langle p^2 \right\rangle$.