



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  $\sigma_i$  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  $\hat{S}_z$ .

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

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

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

- (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,  
$$\int_0^a \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \delta_{nm}.$$
- (e) Determine os seguintes valores esperados  $\langle x \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p \rangle$  e  $\langle p^2 \rangle$ .