



Universidade Federal do Rio de Janeiro

Programa de Engenharia Química - PEQ/COPPE

COQ 875 - Química Quântica de Moléculas e Sólidos | 2026.2



Lista 01 - Fundamentos da Mecânica Quântica

Prof. Elvis Soares

Data de Entrega: 22/7/26

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

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & -2 & 0 \\ -i & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

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

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

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 os operadores de spin $\hat{S}_z$ e hamiltoniano $\hat{H}$ podem ser escritos em notação de Dirac em termos dos auto-vetores de $\hat{S}_z$, denominados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, como sendo

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle \langle\uparrow| - |\downarrow\rangle \langle\downarrow|)$$

e

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega (|\downarrow\rangle \langle\uparrow| + |\uparrow\rangle \langle\downarrow|)$$

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