

Fundação Universidade Federal de Pelotas  
Cursos de Bach. em Química e Bach. em Química industrial  
Disciplina de Álgebra linear e Geometria analítica  
Prof. Dr. Maurício Zahn

Lista A4 de Exercícios - Aplicações na Química - Autovalores e autovetores

1. A matriz Hamiltoniana de Hünckel do butadieno é dada por

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

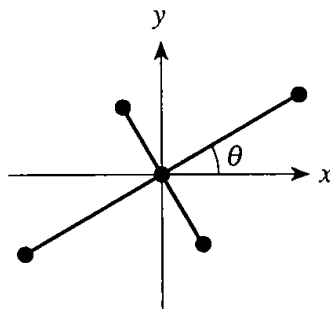
Encontre os autovalores dessa matriz em termos de  $\alpha$  e  $\beta$ .

2. A matriz Hamiltoniana de Hünckel do ciclopropano é

$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Mostre que os autovalores são  $E_1 = \alpha + 2\beta$ ,  $E_2 = E_3 = \alpha\beta$ .

3. O momento de inércia pode ser obtido através de um problema de autovalores. Para simplificar, consideremos um problema em duas dimensões. Considere a “molécula” representada abaixo,



onde as massas são unitárias e os comprimentos longo e curto são, respectivamente, 2 e 1. Pelas informações acima, os momentos de inércia  $I_{ij}$  serão dados por

$$I_{xx} = 2 \cos^2 \theta + 8 \sin^2 \theta$$

$$I_{yy} = 8 \cos^2 \theta + 2 \sin^2 \theta$$

$$I_{xy} = -6 \cos \theta \sin \theta.$$

(a) Se alinharmos a “molécula” com o sistema de coordenadas tal que  $\theta = 90^\circ$ , verifique que  $I_{xx} = 8$  e  $I_{yy} = 2$ .

(b) Determine os autovalores da matriz  $\begin{bmatrix} I_{xx} & I_{xy} \\ I_{xy} & I_{yy} \end{bmatrix}$ .