

## Constantes úteis

$$\pi = 3,14159$$

$$e = 2,71828$$

$$\text{Velocidade da luz no vácuo: } c = 2,9979 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$\text{Permissividade do vácuo: } \epsilon_0 = 8,85419 \cdot 10^{-12} \frac{\text{F}}{\text{m}}$$

$$\text{Permeabilidade do vácuo: } \mu_0 = 1,2566 \cdot 10^{-6} \frac{\text{N}}{\text{A}^2}$$

$$\text{Massa do elétron: } m_e = 9,10939 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\text{Massa do próton: } m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\text{Massa do nêutron: } m_n = 1,6749 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\text{Carga elementar: } e = 1,602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\text{Constante de Stefan: } \sigma = 5,6705 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}^4}$$

$$\text{Constante de Boltzmann: } k = 1,380658 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

$$\text{Constante de Planck: } h = 6,626076 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\text{Constante de Planck normalizada: } \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05457 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$\text{Constante de Rydberg: } R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$$\text{Raio de Bohr: } a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

$$\text{Energia de Bohr: } E_0 = \frac{m_e e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

## Fórmulas úteis

$$\text{Relações de de Broglie: } E = pc = h\nu$$

$$\text{Princípios de indeterminação: } \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar, \quad \Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2}\hbar$$

$$\text{Equação de Schrödinger: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

$$\text{Equação de Schrödinger independente do tempo: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\text{Variação com o tempo de } \Psi \text{ para um potencial independente do tempo: } \phi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\text{Condição de normalização: } \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

$$\text{Valor esperado para uma função } f(x): \langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)f(x)\psi(x)dx$$

$$\text{para uma grandeza representada por um operador } f_{op}: \langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)f_{op}\psi(x)dx$$

$$\text{Equação de Schrödinger em três dimensões: } -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{d^2 \psi}{dy^2} + \frac{d^2 \psi}{dz^2} \right) + V\psi = E\psi$$

## Operadores

$$\text{Momento linear: } p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\text{Hamiltoniano independente do tempo: } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$$\text{Hamiltoniano dependente do tempo: } H = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\text{Quadrado da componente } r \text{ do momento: } (p_r^2)_{op} = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

$$\text{Quadrado do momento angular: } (L^2)_{op} = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

$$\text{Componente } z \text{ do momento angular: } L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

## Casos Resolvidos

$\psi$  para uma região com potencial constante ( $E > V_0$ ):  $\psi = e^{\pm ikx}$ , onde  $k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

$\psi$  para uma região com potencial constante ( $E < V_0$ ):  $\psi = e^{\pm\alpha x}$ , onde  $\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

Poço quadrado infinito (largura  $L$ ):  $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \text{sen } k_n x$ ,  $k_n = \frac{n\pi}{L}$ ,  $E_n = \sqrt{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}}$

Coefficiente de Transmissão de uma barreira de potencial (tunelamento):  $T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2\alpha a}$

Oscilador Harmônico: Potencial:  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ , onde  $k =$  constante de força

Funções de onda:  $\psi_n(x) = C_n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n(x)$ ,  $H_n(x)$  = polinômio de Hermite de grau  $n$

Níveis de energia:  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ,  $n = 0, 1, \dots$

## Átomo de Hidrogênio

Potencial:  $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Funções de onda:  $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = Y_{lm_l}(\theta, \phi) R_{nl}(r) = f_{lm_l}(\theta) g_{m_l}(\phi) R_{nl}(r)$

Relações entre os números quânticos:  $n = 1, 2, \dots$ ;  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ;

$$m_l = -l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$$

Código para  $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ : s, p, d, f, g, h, ...

Código para camadas com  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ : K, L, M, N, ...

Regras de seleção:  $\Delta l = \pm 1$ ;  $\Delta m_l = 0$  ou  $\pm 1$

Níveis de energia:  $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} E_0$

Momento angular orbital:  $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$

Componente  $z$  do momento angular orbital:  $L_z = m_l\hbar$

Spin do elétron:  $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ , onde  $s = \frac{1}{2}$

Componente  $z$  do spin:  $S_z = m_s\hbar$ , onde  $m_s = \pm \frac{1}{2}$

Ordem dos orbitais em átomos com mais de um elétron:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p

## Moléculas: Teoria da Ligação de Valência

Hibridizações dos orbitais do nível 2 do átomo de carbono:

$$sp: h_1 = s + p_z, h_2 = s - p_z$$

$$sp^2: h_1 = s + \sqrt{2}p_y, h_2 = s + \sqrt{\frac{3}{2}}p_x - \sqrt{\frac{1}{2}}p_y, h_3 = s - \sqrt{\frac{3}{2}}p_x - \sqrt{\frac{1}{2}}p_y$$

$$sp^3: h_1 = s + p_x + p_y + p_z, h_2 = s - p_x - p_y + p_z, h_3 = s - p_x + p_y - p_z, h_4 = s + p_x - p_y - p_z$$

## Moléculas: Teoria do Orbital Molecular

### Moléculas diatômicas homonucleares

Orbitais de moléculas diatômicas homonucleares do segundo período (átomos A e B):

$$1\sigma_g = c_{1\sigma_g}(2s_A + 2s_B), 1\sigma_u = c_{1\sigma_u}(2s_A - 2s_B), 2\sigma_g = c_{2\sigma_g}(2p_{z,A} + 2p_{z,B}),$$

$$2\sigma_u = c_{2\sigma_u}(2p_{z,A} - 2p_{z,B}), 1\pi_u = c_{1\pi_u}(2p_{x/y,A} + 2p_{x/y,B}), 1\pi_g = c_{1\pi_g}(2p_{x/y,A} - 2p_{x/y,B})$$

Ordem dos orbitais:  $\text{Li}_2\text{-N}_2$  ( $Z = 3, \dots, 7$ ):  $1\sigma_g, 1\sigma_u, 1\pi_u, 2\sigma_g, 1\pi_g, 2\sigma_u$

$$\text{O}_2\text{-"Ne}_2"$$
 ( $Z = 8, 9, 10$ ):  $1\sigma_g, 1\sigma_u, 2\sigma_g, 1\pi_u, 1\pi_g, 2\sigma_u$

Ordem de ligação:  $b = \frac{1}{2}(n - n^*)$ ,

onde  $n =$  no. de  $e^-$  em orbitais ligantes,  $n^* =$  no. de  $e^-$  em orbitais antiligantes

Espectroscopia de fotoelétrons:  $I_i = -\epsilon_i = E_\nu - E_{cin,e^-} = h\nu - \frac{m_e v^2}{2} = h\nu - \frac{reE}{2}$