Função de onda, Equação de Schrödinger

Distr. de prob. da função de onda $\Psi(x,t)$: $P(x,t)\,dx = |\Psi(x,t)|^2\,dx = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)\,dx$
Independente do tempo $\psi(x)$: $P(x)\,dx = |\psi(x)|^2\,dx = \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx$
Probabilidade de estadia entre $x=a$ e $x=b$: $P_{a\to b} = \int_a^b P(x(,t))\,dx = 1$
Condição de normalização: $\int_{-\infty}^{\infty} P(x(,t))\,dx = 1$
Equação de Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$
Equação de Schrödinger independente do tempo: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$
Variação com o tempo de Ψ para um potencial independente do tempo: $\phi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$
EdS em três dimensões: $-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2\psi + V\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2}\right) + V(x,y,z)\psi = E\psi$
Em coord. esf.: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(sen\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}) + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right] + V(r,\theta,\phi)\psi = E\psi$

Operadores

Posição: $x_{\text{op}} = x\cdot$, $y_{\text{op}} = y\cdot$, $z_{\text{op}} = z\cdot$
Momento linear: $p_{x,\text{op}} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, $\quad p_{y,\text{op}} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$, $\quad p_{z,\text{op}} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$; $\quad (p_x^2)_{\text{op}} = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
$\vec{p}_{\text{op}} = \frac{\hbar}{i}\cdot\nabla$
Hamiltoniano independente do tempo: $H_{\text{op}} = \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$
3D: $H_{\text{op}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)$
Hamiltoniano dependente do tempo: $H_{\text{op}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
Quadrado do momento angular: $(L^2)_{\text{op}} = -\hbar^2\left[\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(sen\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$
Componente z do momento angular: $L_{z,\text{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$
Valor esperado para uma função $f(x)$: $\langle f(x)\rangle$ ou $\bar{f} = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)f(x)\psi(x)\,dx$
para uma grandeza representada por um operador f_{op} (onde $f_{\text{op}}\psi(x) = f(x)\psi(x)$):
$\langle f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)f_{\text{op}}\psi(x)\,dx$

Casos Resolvidos

ψ para uma região com potencial constante ($E > V_0$): $\psi = A\cdot e^{+ikx} + B\cdot e^{-ikx}$
ou $A\cdot \text{sen}kx + B\cdot\cos kx$, onde $k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$
ψ para uma região com potencial constante ($E < V_0$): $\psi = A\cdot e^{+\alpha x} + B\cdot e^{-\alpha x}$,
onde $\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$
Coeficiente de Reflexão de um degrau de potencial ($E > V_0$): $R = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2 = \left(\frac{1-\sqrt{1-V_0/E}}{1+\sqrt{1-V_0/E}}\right)^2$,
onde $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$
Coeficiente de Transmissão de um degrau de potencial ($E > V_0$): $T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$
de uma barreira de potencial ($E < V_0$, tunelamento): $T \approx 16\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)e^{-2\alpha a}$
Poço quadrado infinito (tamanho a, ponto 0 no centro do poço):
$\psi_n(x) = B_n\cos k_nx$ (n impar), $\psi_n(x) = A_n\text{sen}\,k_nx$ (n par), onde $k_n = \frac{n\pi}{a}$
$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}$

Oscilador Harmônico

Potencial: $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, onde $k = m\omega^2$ = constante de força (de Hooke)
Funções de onda: $\psi_n(x) = C_n e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$, H_n = polinômio de Hermite de grau n
Níveis de energia: $E_n = (n+\frac{1}{2}) \cdot \hbar\omega$, $n = 0,\ 1, ...$ Regra de seleção: $\Delta n = \pm 1$

Átomo de Hidrogênio

Potencial: $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$
Funções de onda: $\psi_{nlm_l}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\phi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)$,
onde $R_{nl}(r) = e^{-Zr/a_0 n}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^l G_{nl}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)$, G_{nl} = polinômios de Laguerre,
$\Theta_{lm_l}(\theta) = \text{sen}^{|m|}\theta\, F_{l|m|}(\cos\theta)$, $F_{l|m|}$ = funções de Legendre associadas, $\Phi_{m_l}(\phi) = e^{im\phi}$
Relações entre os números quânticos: $n = 1, 2, ..;$ $l = 0, 1, 2, ..., n-1;$
$m_l = -l, -(l-1), .., -1, 0, 1, .., l-1, l$
Código para $l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5, ...$: s, p, d, f, g, h,...
Código para camadas com $n = 1,\ 2,\ 3,\ 4, ...$: K, L, M, N,...
Níveis de energia: $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot E_0$
Momento angular orbital: $L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$; comp. z: $L_z = m_l \cdot \hbar$
Regras de seleção: $\Delta l = \pm 1$; $\Delta m_l = 0$ ou ± 1
Valor esperado pra distância núcleo-elétron: $\langle r_{nl} \rangle = \frac{n^2 a_0}{Z}\left\{1 + \frac{1}{2}\left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2}\right]\right\}$

Momentos de Dipolo Magnético, Spin

Mom. mag. orbital de um elétron: $\vec{\mu_l} = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar}\vec{L}$, onde $g_l = 1$ = fator g orbital
Módulo: $\mu_l = g_l \mu_B \sqrt{l(l+1)}$, Componente z: $\mu_{l_z} = -g_l \mu_B m_l$
Energia pot. devida a um cp. mg. externo $\vec{B}$: $\Delta E = -\vec{\mu_l} \cdot \vec{B}$
Frequência de Larmor: $\omega = \frac{g_l \mu_B}{\hbar} B$
Comp. z média da força devido a um campo magnético *não-uniforme*: $\langle F_z \rangle = \frac{\partial B_z}{\partial z}\mu_{l_z}$
Spin do elétron: $S = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar$, $s = \frac{1}{2}$; comp. z: $S_z = m_s \cdot \hbar$, $m_s = \pm\frac{1}{2}$
Momento magnético de spin de um elétron: $\vec{\mu_s} = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar}\vec{S}$, onde $g_s = 2$ = fator g de spin
Componente z: $\mu_{s_z} = -g_s \mu_B m_s$
Energia pot. devida a um cp. mg. externo $\vec{B}$: $\Delta E = -\vec{\mu_s} \cdot \vec{B} = -\mu_{s_z} B = \pm\frac{1}{2} g_s \mu_B B$

Momento angular total: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
$J = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar$, $J_z = m_j \cdot \hbar$, onde $m_j = -j, -(j-1), .., j-1, j$
$J_z = L_z + S_z$, $m_j = m_l + m_s = |m_l \pm \frac{1}{2}|$; Regra de seleção: $\Delta j = 0,\ \pm 1$
Energia de interação spin-órbita: $\Delta E = \frac{g_s \mu_B}{2 e m_e c^2 \hbar}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2m_e^2 c^2 \hbar}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\vec{S} \cdot \vec{L}$
$= \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}$
Níveis de energia do átomo de H ($V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$): $E = -\frac{\mu e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right)\right]$

Ordem das sub-camadas em átomos multi-eletrônicos: $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, $4s$, $3d$, $4p$, $5s$, $4d$, $5p$, $6s$, $4f$, $5d$, $6p$