

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

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

para uma grandeza representada por um operador  $f_{\text{op}}$  (onde  $f_{\text{op}} \psi(x) = f(x) \psi(x)$ ):

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) f_{\text{op}} \psi(x) dx$$

Condição para regra de seleção  $n \rightarrow m$ :  $\int \psi_n(x)^* x \psi_m(x) dx \neq 0$

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

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

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

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

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

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

Componente  $z$  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  $\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

Coefficiente de Reflexão de um degrau de potencial:  $R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$

Coefficiente de Transmissão de um degrau de potencial:  $T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$

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

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:  $E_n = (n + \frac{1}{2}) \cdot \hbar \omega$ ,  $n = 0, 1, \dots$  Regra de seleção:  $\Delta n = \pm 1$

## 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, ...

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  $\pm 1$

Spin do elétron:  $S = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar$ ,  $s = \frac{1}{2}$ ; comp.  $z$ :  $S_z = m_s \cdot \hbar$ ,  $m_s = \pm \frac{1}{2}$

Ordem das camadas: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p