

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: $\phi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

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

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: $(p_r^2)_{op} = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r})$

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

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

Casos Resolvidos

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

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

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

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

Coeficiente 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 $k = m \omega^2 = \text{constante de força}$

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

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

Átomo de Hidrogênio

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

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

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

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

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

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

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