

# Formulario 2º parcial

## Operadores:

$$\hat{r} = r$$

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

$$\hat{V} = (\pm) \frac{k(q_i)(q_j)}{|r_i - r_j|}$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

## Ecuación de Schrödinger:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi d\tau}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi d\tau}$$

## Partícula en una caja:

$$\Psi_{II}(x) = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{l}\right)$$

$$E = \frac{n^2 h^2}{8ml^2}$$

## Átomo de hidrógeno:

$$\hat{H}\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi)$$

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{kZe^2}{r}$$

$$E = -\frac{1}{2} \frac{kZ^2 e^2}{n^2 a_o}$$

## Teorema de Koopmans:

$$EI_i = -\varepsilon_i$$

## Reglas de Slater:

1. Escribir la configuración electrónica en el siguiente orden y agrupamiento:  
(1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p) ...

Para electrones en orbitales en  $ns$  o  $np$ :

2. Los  $e^-$  a la derecha de un grupo ( $ns$ ,  $np$ ) no contribuyen
3. Cada  $e^-$  en el grupo ( $ns$ ,  $np$ ) contribuye 0.35
4. Cada  $e^-$  en grupos  $n-1$  contribuye 0.85
5. Cada  $e^-$  en grupos  $n-2$  contribuye 1.0

Para electrones en orbitales en  $nd$  o  $nf$ :

6. Los  $e^-$  a la derecha de un grupo ( $nd$ ) o ( $nf$ ) no contribuyen
7. Cada  $e^-$  en el grupo ( $nd$ ) o ( $nf$ ) contribuye 0.35
8. Cada  $e^-$  en grupos a la izquierda contribuye 1.0

$n$	$n^*$
1	1
2	2
3	3
4	3.6
5	4.0
6	4.2