EL3004-Circuitos Electrónicos Analógicos

Clase No. 3: Mecánica Cuántica-Cont.

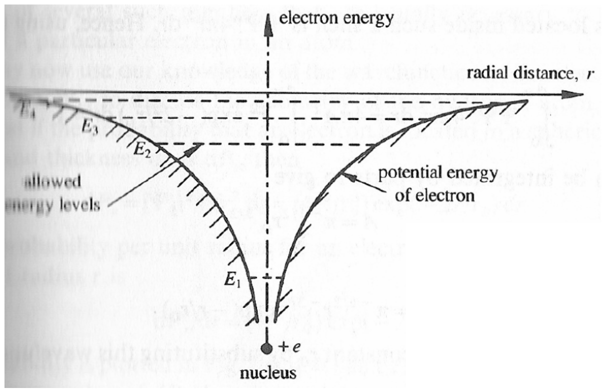
Marcos Diaz

Departamento de Ingeniería Eléctrica (DIE)
Universidad de Chile

4 de agosto de 2009

Repaso Clase #2

- La ecuación de Schrodinger
- Interpretación de la función de onda
- El Principio de Incertidumbre
- Estructura electronica de los átomos
  - Particula en un pozo potencial unidimensional



Con Energía Potencial:

$$U = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (67)$$

Resolviendo la ES en coordenadas esfericas:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2 sin\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\Psi=0 \quad (68)$$

Asumiendo simetria en θ y ϕ

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\Psi=0 \quad (69)$$

La forma de la solución a esta ecuación es:

$$\Psi_1=Ae^{-r/r_0} \quad (70)$$

Recordando que la probabilidad de encontrar el electron en todo ele espacio es igual a 1,

$$\int_0^\infty \Psi\Psi^* 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2\int_0^\infty r^2 e^{-2r/r_0}dr=1 \quad (71)$$

$$A=\pi^{-1/2}r_0^{-3/2}$$

$$\Psi_1=\pi^{-1/2}r_0^{-3/2}e^{-r/r_0} \quad (72)$$

Incertando Eq. 72 en Eq. 69:

$$\frac{1}{r_0}-\frac{2}{rr_0}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)=0 \quad (73)$$

Resolviendo para r_0:

$$\frac{2}{rr_0}=\frac{2mq^2}{4\pi\hbar^2\epsilon_0 r}$$

$$r_0=\frac{4\pi\hbar^2\epsilon_0}{mq^2}=\frac{\hbar^2\epsilon_0}{\pi q^2 m}=0 \quad (74)$$

$$E_1=-\frac{\hbar^2}{2mr_0^2}=-\frac{mq^4}{8h^2\epsilon_0^2}=0 \quad (75)$$

$$E_n=\frac{E_1}{n^2}=-\frac{1}{n^2}\frac{mq^4}{8h^2\epsilon_0^2}=0 \quad (76)$$

Probabilidad de encontrar e$^-$ en una cascara de espesor *dr*:

$$dP_r=|\Psi_1|^2 4\pi r^2 dr=\left(\frac{4r^2}{r_0^3}\right)e^{-2r/r_0}dr \quad (77)$$

$$\frac{dP_r}{dr}=\left(\frac{4r^2}{r_0^3}\right)e^{-2r/r_0} \quad (78)$$

Asi la densidad de carga es:

$$\rho_1(r)=|\Psi_1|^2(-q)=-\left(\frac{q}{\pi r_0^3}\right)e^{-2r/r_0} \quad (79)$$

La carga:

$$\frac{q_r}{dr}=-\left(\frac{4qr^2}{r_0^3}\right)e^{-2r/r_0} \quad (80)$$

Modelo más preciso

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\underbrace{\Theta(\theta)\Phi(\phi)}_{Y(\theta,\phi)} \tag{81}$$

Con algo de algebra y una elección conveniente de constantes

$$\begin{aligned}
\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E] &= l(l+1) \\
\frac{1}{\Theta}\left[sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right] + l(l+1)sin^2\theta &= m^2 \\
\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} &= -m^2
\end{aligned} \tag{82}$$

$$\Psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!)]^3}}\, e^{-r/na}\left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_l^m(\theta,\phi) \tag{83}$$

Spin y el principio de exclusión

- Existe otro número cuántico, ademas de n, l y m, que describe un electron de un átomo: este numero es el **Spin**, s. Este número repesenta la rotación del electron sobre su propio eje. Este se obtiene resolviendo la ecuación de Schrodinger reletivista.
- Por lo tanto un electrón en un átomo esta completamente definido por 4 numeros cuánticos:

$$(n,l,m,s)$$

- El principio de exclusión dice que no hay 2 electrones con valores cuánticos iguales.

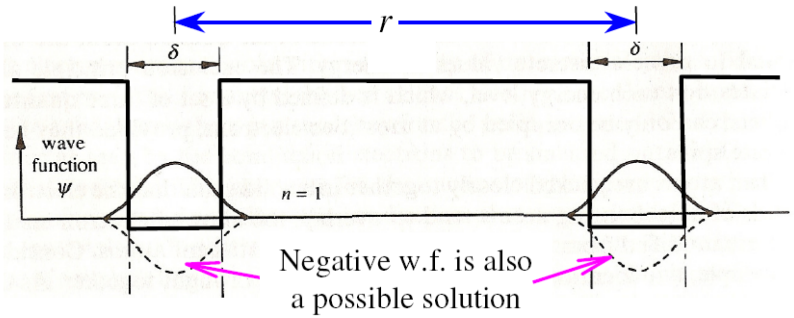
principio de exclusión

Element	Principal quantum number, n	Azimuthal quantum number, $l=0,1,\ldots,n-1$	Magnetic quantum number, $m=-l,\ldots,+l$	Spectroscopic designation
H	1	0	0	$1s$
He	1	0	0	$1s^2$
Li	2	0	0	$1s^22s$
Be	2	0	0	$1s^22s^2$
B	2	1	−1	$1s^22s^22p$
C	2	1	−1	$1s^22s^22p^2$
N	2	1	0	$1s^22s^22p^3$
O	2	1	0	$1s^22s^22p^4$
F	2	1	1	$1s^22s^22p^5$
Ne	2	1	1	$1s^22s^22p^6$
Na	3	0	0	$1s^22s^22p^63s$
Mg	3	0	0	$1s^22s^22p^63s^2$
Al	3	1	−1	$1s^22s^22p^63s^23p$
Si	3	1	−1	$1s^22s^22p^63s^23p^2$
P	3	1	0	$1s^22s^22p^63s^23p^3$
etc.				

l	State or subshell
0	s
1	p
2	d
3	f
	etc.

Electrones en solidos

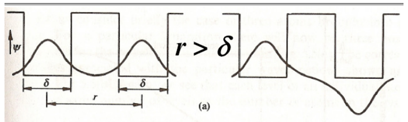
Dos átomos separados una distancia r modelados por pozos potenciales. Si r es suficientemente grande la función de onda de cada átomo permanece inalterada.



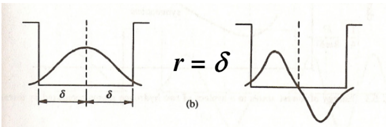
$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2md^2} = \frac{n^2\hbar}{8md^2} \qquad E_1 = \frac{h^2}{8m\delta^2} \tag{84}$$

Electrones en solidos

Ahora los átomos son acercados.



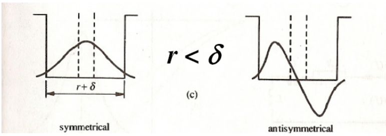
$$E_{1,\text{sim}} = \frac{h^2}{8m(2\delta)^2} = \frac{1}{4}\frac{h^2}{8m\delta^2}$$



$$E_{1,\text{anti}} = \frac{2^2 h^2}{8m(2\delta)^2} = \frac{h^2}{8m\delta^2}$$

pozo con $n = 2$

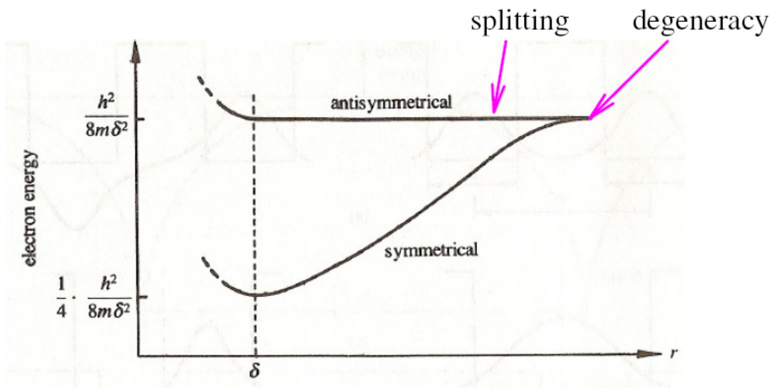
$E_{1,\text{sim}} = \frac{h^2}{8m(r+\delta)^2}$



$E_{1,\text{anti}} = \frac{2^2 h^2}{8m(r+\delta)^2}$

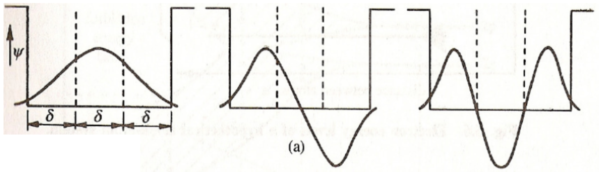
Electrones en solidos

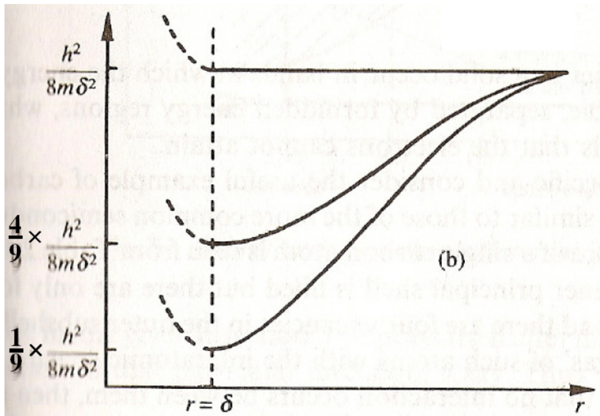
Dos átomos separados una distancia r modelados por pozos potenciales



Electrones en solidos

Tres átomos separados una distancia r modelados por pozos potenciales

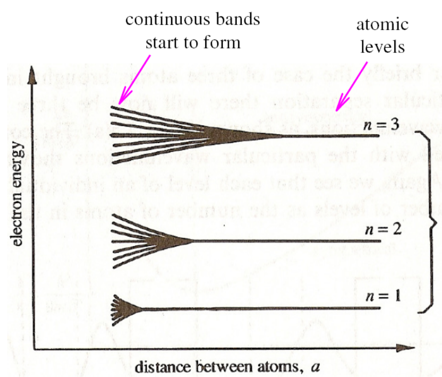




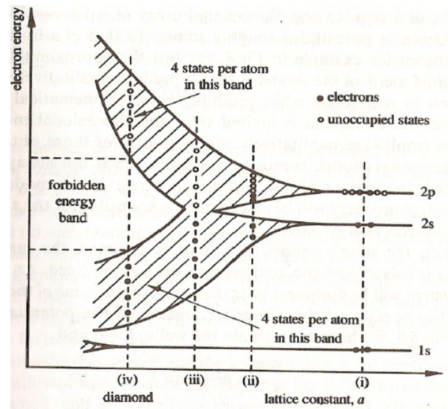
Electrones en solidos

Bandas de Energías permitidas

Más átomos son puestos adyacentes



Ejemplo: Carbono



Resumen Clase #3

- Estructura electronica de los átomos
  - El átomo de Hidrogeno
  - Spin y el principio de exclusión
- Electrones en solidos: Teoría de bandas