EL3004-Circutios Electrónicos Analógicos

Clase No. 2: Mecánica Cuántica

Marcos Diaz

Departamento de Ingeniería Eléctrica (DIE)
Universidad de Chile

Septiembre, 2011

Repaso Clase #1

- Experimentos que mostraron las limitaciones de la mecánica clásica
  - Radiación de cuerpo negro
  - Efecto Fotoelectrico
  - Spectro del átomo de Hidrogeno
- Cuantización de la energía (Fotón) ($E = n\hbar\omega \quad n = 1, 2, 3\ldots$)
- Colapso de la luz (comportamiento de particula de la luz)

La hipótesis de Louis de Broglie.

Los experimentos y efectos descritos en las secciones anteriores demuestran que la luz tiene un comportamiento ondulatorio o corpuscular según la situación en que se observa. Para la luz se tiene

$$E = \hbar\omega \quad \text{(Postulado de Einstein)} \qquad E = pc$$

luego

$$p = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}, \tag{11}$$

donde $k = \omega/c$ es el vector de onda, $f = \omega/(2\pi)$ la frecuencia, $\lambda = c/f$ la longitud de onda y $h = 2\pi\hbar$.

En 1924 Louis de Broglie aventura la hipótesis de que una partícula material cualquiera (electrón, protón, etc.) se comporta también como onda siendo la longitud de onda

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{12}$$

en concordancia con la Ec. (11) par fotones.

$$c = f\lambda \tag{13}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{14}$$

$$c = f\lambda \tag{13}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{14}$$

Explicación: Fuerza sobre un fotón

$$dE = \mathbf{F}\,d\mathbf{x} \tag{15}$$

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \tag{16}$$

$$dE = \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{x}}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{dt}d\mathbf{p} = c\,dp \tag{17}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{18}$$

$$c = f\lambda \tag{13}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{14}$$

Explicación: Fuerza sobre un fotón

$$dE = \mathbf{F}\, d\mathbf{x} \tag{15}$$

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \tag{16}$$

$$dE = \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{x}}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} d\mathbf{p} = c\, dp \tag{17}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{18}$$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{E}{f\lambda} = \frac{hf}{f\lambda} = \frac{h}{\lambda} \tag{19}$$

$$c = f\lambda \tag{13}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{14}$$

Explicación: Fuerza sobre un fotón

$$dE = \mathbf{F}\,d\mathbf{x} \tag{15}$$

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \tag{16}$$

$$dE = \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{x}}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{dt}d\mathbf{p} = c\,dp \tag{17}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{18}$$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{E}{f\lambda} = \frac{hf}{f\lambda} = \frac{h}{\lambda} \tag{19}$$

Si $m = 0,2[\mathrm{kg}]$ y $v = 10[\mathrm{ms}^{-1}]$

$$c = f\lambda \tag{13}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{14}$$

Explicación: Fuerza sobre un fotón

$$dE = \mathbf{F}\, d\mathbf{x} \tag{15}$$

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \tag{16}$$

$$dE = \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{x}}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} d\mathbf{p} = c\, dp \tag{17}$$

$$p = \frac{E}{c} \tag{18}$$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{E}{f\lambda} = \frac{hf}{f\lambda} = \frac{h}{\lambda} \tag{19}$$

Si $m = 0,2[\text{kg}]$ y $v = 10[\text{ms}^{-1}]$

Manzana

$$p = mv = 0,2 \times 10 = 2[kg\, m\, s^{-1}] \tag{20}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,6 \times 10^{-34}}{2} \approx 10^{-34}[m] \tag{21}$$

$$c = f\lambda \quad (13)$$

$$p = \frac{E}{c} \quad (14)$$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{E}{f\lambda} = \frac{hf}{f\lambda} = \frac{h}{\lambda} \quad (19)$$

Explicación: Fuerza sobre un fotón

$$dE = \mathbf{F}\, d\mathbf{x} \quad (15)$$

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad (16)$$

$$dE = \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{x}}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} d\mathbf{p} = c\, dp \quad (17)$$

$$p = \frac{E}{c} \quad (18)$$

Si $m = 0,2[\text{kg}]$ y $v = 10[\text{ms}^{-1}]$

Manzana

$$p = mv = 0,2 \times 10 = 2[kg\, m\, s^{-1}] \quad (20)$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,6 \times 10^{-34}}{2} \approx 10^{-34}[m] \quad (21)$$

Electron

$$\frac{1}{2} mv^2 = qV \quad (22)$$

$$v = \sqrt{\frac{2qV}{m}} \quad (23)$$

$$p = mv = \sqrt{2qVm} \quad (24)$$

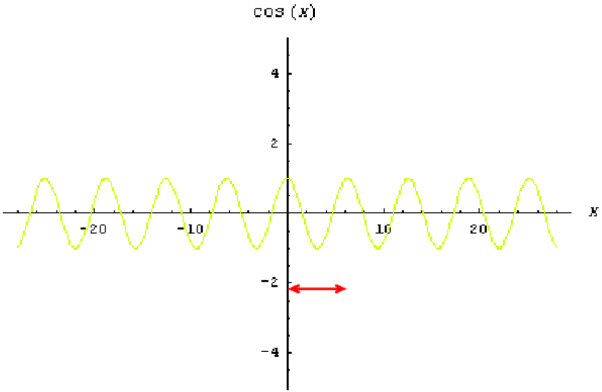
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2qVm}} = \frac{1{,}225}{\sqrt{V}}[nm] \quad (25)$$

Si $V = 50[\text{V}]$, $\lambda = 1{,}7 \times 10^{-7}[\text{mm}]$

Interpretación de la propiedad de onda de las particulas

$t = 0$

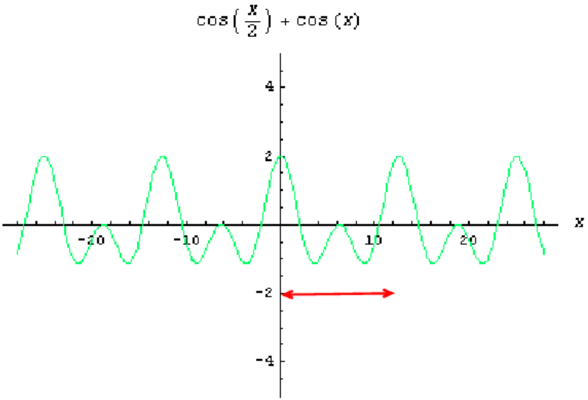
$n = 1$



Interpretación de la propiedad de onda de las particulas

$t = 0$

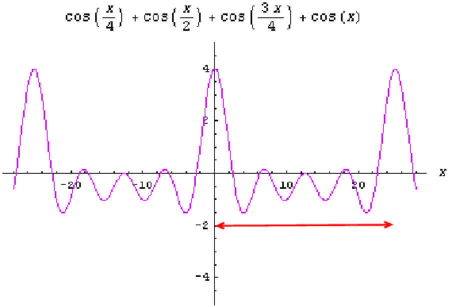
$n = 2$



Interpretación de la propiedad de onda de las particulas

t = 0

n = 4



A wavepacket is formed when $n \to \infty$

Wavepacket ≡ wave (superposition of waves) + particle (localization)

Una particula como onda
Su velocidad de fase y grupo

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= m\mathbf{v} = \frac{h}{\lambda} \\ K &= \frac{1}{2}mv^2 = hf \end{aligned} \tag{26}$$

Una particula como onda

Su velocidad de fase y grupo

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \frac{h}{\lambda}$$
$$K = \frac{1}{2}mv^2 = hf \qquad (26)$$

$$\beta = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$
$$\omega = 2\pi f = \frac{2\pi K}{h} = \frac{K}{\hbar} \qquad (27)$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Kt-px)/\hbar} \qquad (28)$$

Una particula como onda

Su velocidad de fase y grupo

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= m\mathbf{v} = \frac{h}{\lambda} \\ K &= \frac{1}{2}mv^2 = hf \end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar} \\ \omega &= 2\pi f = \frac{2\pi K}{h} = \frac{K}{\hbar} \end{aligned} \tag{27}$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Kt-px)/\hbar} \tag{28}$$

$$v_f = \frac{\omega}{\beta} = \frac{K}{p} = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{mv} = \frac{v}{2}$$

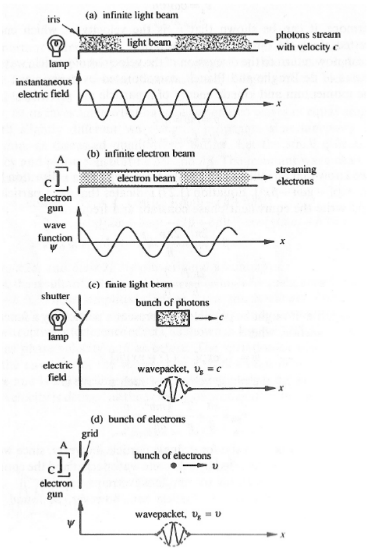
$$\partial\omega = \frac{mv}{\hbar}\partial v \quad \text{y} \quad \partial\beta = \frac{m}{\hbar}\partial v$$

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial\beta} = v \tag{29}$$

v-velocidad de la particula

Onda-particula

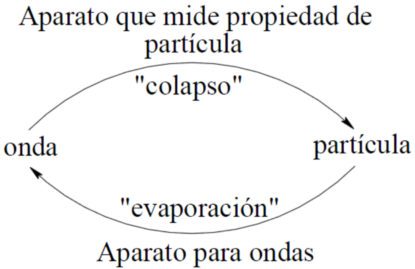
Onda y Paquete



Principicpio de Complementariedad

Dualidad onda Particula

“La materia posee naturaleza de partícula y de onda. Cuál de ellas se manifiesta en un experimento particular depende de qué propiedad es medida por el aparato”. El siguiente diagrama representa al principio de complementariedad



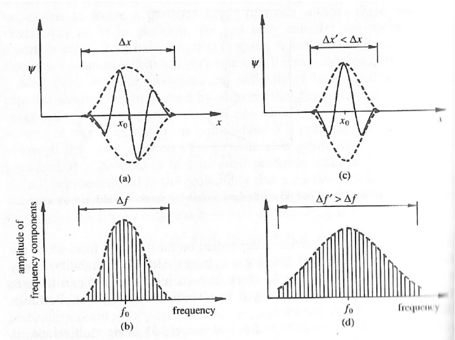
Principcipio de Correspondencia

En la óptica física, al considerar ondas electromagnéticas de longitud de onda λ mucho menor que las dimensiones típicas de los elementos con que interactúa se obtiene lo que es conocido como “óptica geométrica”. En la óptica geométrica la naturaleza ondulatoria no entra en juego y perfectamente se puede considerar a la luz de naturaleza corpuscular. De la misma forma se puede pensar que la mecánica clásica de Newton es el límite de longitudes de onda corta de la mecánica cuántica.

$$\begin{aligned} \text{óptica física} \quad &\xrightarrow{\lambda\to 0} \quad \text{óptica geométrica} \\ \text{mecánica ondulatoria} \quad &\xrightarrow{\lambda\to 0} \quad \text{mecánica clásica.} \end{aligned}$$

Recordando la relación de de Broglie ($\lambda = h/p$) se obtiene que si $h \rightarrow 0$ entonces $\lambda \rightarrow 0$.

El principio de incertidumbre
Explicación



$$\Delta x = v\Delta t \tag{30}$$

$$\Delta E \Delta t \geq h \tag{31}$$

$$\Delta E = h\Delta f = mv\Delta v = v\Delta p$$

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \tag{32}$$

Ecuación exacta.

La ecuación de onda de Schrödinger

Origen semi-clásico

$$E = \hbar\omega = K + U \qquad (33)$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Et-px)/\hbar} \qquad (34)$$

La ecuación de onda de Schrödinger
Origen semi-clásico

$$E = \hbar\omega = K + U \quad (33)$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Et - px)/\hbar} \quad (34)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial x^2} = \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (35)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{-j(\omega t - \beta x)} \quad (36)$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Origen semi-clásico

$$E = \hbar\omega = K + U \quad (33)$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Et-px)/\hbar} \quad (34)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial x^2} = \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (35)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{-j(\omega t - \beta x)} \quad (36)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{j}{\hbar} E\psi = -\frac{j}{\hbar}\left(U + \frac{1}{2}mv^2\right)\psi \quad (37)$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Origen semi-clásico

$$E = \hbar\omega = K + U \quad (33)$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Et-px)/\hbar} \quad (34)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial x^2} = \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (35)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{-j(\omega t-\beta x)} \quad (36)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{j}{\hbar} E\psi = -\frac{j}{\hbar}\left(U + \frac{1}{2}mv^2\right)\psi \quad (37)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi = -\frac{m^2 v^2}{\hbar^2}\psi \quad (38)$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Origen semi-clásico

$$E = \hbar\omega = K + U \qquad (33)$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Et-px)/\hbar} \qquad (34)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial x^2} = \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \qquad (35)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{-j(\omega t - \beta x)} \qquad (36)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{j}{\hbar} E\psi = -\frac{j}{\hbar}\left(U + \frac{1}{2}mv^2\right)\psi \qquad (37)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi = -\frac{m^2 v^2}{\hbar^2}\psi \qquad (38)$$

$$-\frac{1}{2}mv^2\psi = -j\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} + U\psi \qquad (39)$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Origen semi-clásico

$$E = \hbar\omega = K + U \tag{33}$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Et - px)/\hbar} \tag{34}$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial x^2} = \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \tag{35}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{-j(\omega t - \beta x)} \tag{36}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{j}{\hbar} E\psi = -\frac{j}{\hbar}\left(U + \frac{1}{2} m v^2\right)\psi \tag{37}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi = -\frac{m^2 v^2}{\hbar^2}\psi \tag{38}$$

$$-\frac{1}{2} m v^2 \psi = -j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + U\psi \tag{39}$$

$$-\frac{1}{2} m v^2 \psi = \frac{1}{2m}\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \tag{40}$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Origen semi-clásico

$$E = \hbar\omega = K + U \quad (33)$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Et-px)/\hbar} \quad (34)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial x^2} = \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (35)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{-j(\omega t - \beta x)} \quad (36)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{j}{\hbar} E\psi = -\frac{j}{\hbar}\left(U + \frac{1}{2}mv^2\right)\psi \quad (37)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi = -\frac{m^2 v^2}{\hbar^2}\psi \quad (38)$$

$$-\frac{1}{2}mv^2\psi = -j\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} + U\psi \quad (39)$$

$$-\frac{1}{2}mv^2\psi = \frac{1}{2m}\hbar^2\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (40)$$

Ecuación de Schordinger en 1D

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2}U\psi + j\frac{2m}{\hbar}\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad (41)$$

La ecuación de onda de Schrödinger
Origen semi-clásico

$$E = \hbar\omega = K + U \quad (33)$$

$$\psi = A_0 e^{-j(Et-px)/\hbar} \quad (34)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial x^2} = \epsilon\mu\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (35)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{-j(\omega t-\beta x)} \quad (36)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{j}{\hbar}E\psi = -\frac{j}{\hbar}\left(U + \frac{1}{2}mv^2\right)\psi \quad (37)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi = -\frac{m^2v^2}{\hbar^2}\psi \quad (38)$$

$$-\frac{1}{2}mv^2\psi = -j\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + U\psi \quad (39)$$

$$-\frac{1}{2}mv^2\psi = \frac{1}{2m}\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \quad (40)$$

Ecuación de Schordinger en 1D

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2}U\psi + j\frac{2m}{\hbar}\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0 \quad (41)$$

Ecuación Schordinger en 3D

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} - \frac{2m}{\hbar^2}U\psi + j\frac{2m}{\hbar}\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0 \quad (42)$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Independiente del tiempo

$$\psi = \Psi(x)\Gamma(t) \tag{43}$$

La ecuación de onda de Schrödinger
Independiente del tiempo

$$\psi = \Psi(x)\Gamma(t) \tag{43}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi}\frac{d^2\Psi}{dx^2} - U = -j\frac{\hbar}{\Gamma}\frac{d\Gamma}{dt} \tag{44}$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Independiente del tiempo

$$\psi = \Psi(x)\Gamma(t) \tag{43}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi}\frac{d^2\Psi}{dx^2} - U = -j\frac{\hbar}{\Gamma}\frac{d\Gamma}{dt} \tag{44}$$

$$\frac{d\Gamma}{dt} = j\frac{C}{\hbar}\Gamma \tag{45}$$

La ecuación de onda de Schrödinger
Independiente del tiempo

$$\psi = \Psi(x)\Gamma(t) \tag{43}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi}\frac{d^2\Psi}{dx^2} - U = -j\frac{\hbar}{\Gamma}\frac{d\Gamma}{dt} \tag{44}$$

$$\frac{d\Gamma}{dt} = j\frac{C}{\hbar}\Gamma \tag{45}$$

$$\Gamma(t) = e^{jCt/\hbar}$$

Comparando con Ec. 34

$\Gamma(t) = e^{-jEt/\hbar} \Rightarrow \psi = \Psi(x)e^{-jEt/\hbar}$ Poniendo en Ec. 44

La ecuación de onda de Schrödinger

Independiente del tiempo

$$\psi = \Psi(x)\Gamma(t) \tag{43}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi}\frac{d^2\Psi}{dx^2} - U = -j\frac{\hbar}{\Gamma}\frac{d\Gamma}{dt} \tag{44}$$

$$\frac{d\Gamma}{dt} = j\frac{C}{\hbar}\Gamma \tag{45}$$

$$\Gamma(t) = e^{jCt/\hbar}$$

Comparando con Ec. 34

$$\Gamma(t) = e^{-jEt/\hbar} \Rightarrow \psi = \Psi(x)e^{-jEt/\hbar}$$ Poniendo en Ec. 44

Ecuación de Schrodinger (ES) unidimensional e independiente del tiempo

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0 \tag{46}$$

La ecuación de onda de Schr$\ddot{o}$dinger

Interpretación de Max Born de χ

- $|\Psi|^2$ es proporcional a la probabilidad de una particula de estar dentro de una unidad de volumen, centrada en el punto donde Ψ es evaluada, en el tiempo t.

La ecuación de onda de Schrödinger

Interpretación de Max Born de χ

- $|\Psi|^2$ es proporcional a la probabilidad de una particula de estar dentro de una unidad de volumen, centrada en el punto donde Ψ es evaluada, en el tiempo t.
- Probabilidad de encontrar una particula en el rango $x \rightarrow x + dx$, $y \rightarrow y + dy$ y $z \rightarrow z + dz$ es proporcional a:

$$|\Psi(x, y, z)|^2 dxdydz = \Psi\Psi^* dxdydz. \tag{47}$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Interpretación de Max Born de χ

- $|\Psi|^2$ es proporcional a la probabilidad de una particula de estar dentro de una unidad de volumen, centrada en el punto donde Ψ es evaluada, en el tiempo t.
- Probabilidad de encontrar una particula en el rango $x \rightarrow x + dx$, $y \rightarrow y + dy$ y $z \rightarrow z + dz$ es proporcional a:

$$|\Psi(x, y, z)|^2 dxdydz = \Psi\Psi^* dxdydz. \tag{47}$$

- Es conveniente tomar la constante de proporcionalidad tal que la integración sobre todo el espacio sea igual a 1.

$$\int\int\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, y, z)|^2 dxdydz = 1 \tag{48}$$

La ecuación de onda de Schrödinger

Interpretación de Max Born de χ

- $|\Psi|^2$ es proporcional a la probabilidad de una particula de estar dentro de una unidad de volumen, centrada en el punto donde Ψ es evaluada, en el tiempo t.
- Probabilidad de encontrar una particula en el rango $x \rightarrow x + dx$, $y \rightarrow y + dy$ y $z \rightarrow z + dz$ es proporcional a:

$$|\Psi(x, y, z)|^2 dxdydz = \Psi\Psi^* dxdydz. \tag{47}$$

- Es conveniente tomar la constante de proporcionalidad tal que la integración sobre todo el espacio sea igual a 1.

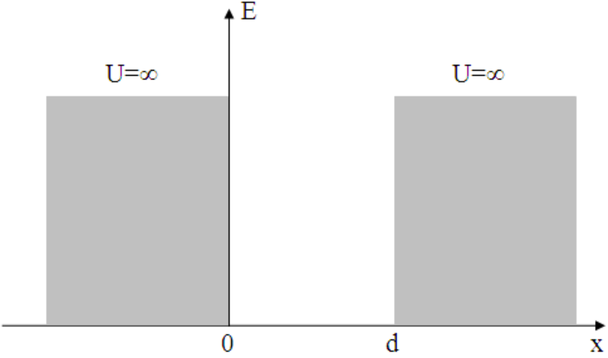
$$\int\int\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, y, z)|^2 dxdydz = 1 \tag{48}$$

- Ψ debe ser una función continua y uni-evaluada.

Estructura electronica de los átomos

Particula en un pozo potencial unidimencional

Un átomo de hidrogeno, el cual está formado por un protón, un neutrón (ambos en el núcleo) y un electrón ("orbitando el núcleo") puede modelarse, en primera aproximación, como un pozo potencial, donde $U = 0$ para $0 \leq x \leq$ y $U = \infty$ para $x > d$ y $x < 0$ (Ver Figura). Usando esta aproximación y la ecuación de Schoridenger (ES) se desea calcular los posibles estados energéticos del electrón y sus funciones de onda.



Estructura electronica de los átomos

Particula en un pozo potencial unidimencional

Usando la ES unidemensional e independiente del tiempo, Ec. (41), dentro del pozo donde $U = 0$ $(0 \leq x \leq d)$, se tiene

$$\frac{d\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \underbrace{U}_{0})\Psi = 0 \Rightarrow \frac{d\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0$$

Estructura electronica de los átomos
Particula en un pozo potencial unidimencional

Usando la ES unidemensional e independiente del tiempo, Ec. (41), dentro del pozo donde $U = 0$ $(0 \leq x \leq d)$, se tiene

$$\frac{d\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \underbrace{U}_{0})\Psi = 0 \Rightarrow \frac{d\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0$$

$$\Rightarrow \Psi = Ae^{j\beta x} + Be^{-j\beta x} \quad \text{con} \quad \beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

Dado que el potencial es infinito fuera del pozo, el electrón no puede estar fuera del pozo lo que implica que $Psi = 0$ fuera de este.

Como $\Psi = 0$ en $x = 0$, $\Rightarrow B = -A$. Como $\Psi = 0$ en $x = d$,

$\Rightarrow A(e^{j\beta d} - e^{-j\beta d}) = 0 \Rightarrow sin(\beta d) = 0.$

$$\Rightarrow \beta d = \left[\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right] d = n\pi \quad \text{donde} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Estructura electronica de los átomos
Particula en un pozo potencial unidimencional

$$\Psi = C\, sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$$

Estructura electronica de los átomos

Particula en un pozo potencial unidimencional

$$\Psi = C\, sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$$

$$\begin{aligned} \int_0^d \Psi\Psi^* dx &= 1 \\ \int_0^d C^2 sin^2\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx &= 1 \end{aligned}$$

Estructura electronica de los átomos

Particula en un pozo potencial unidimencional

$$\Psi = C\, sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$$

$$\begin{aligned} \int_0^d \Psi\Psi^* dx &= 1 \\ \int_0^d C^2 sin^2\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx &= 1 \end{aligned}$$

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{d}} sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \quad n = 1, 2, 3 \ldots$$

Estructura electronica de los átomos
Particula en un pozo potencial unidimencional

$$\Psi = C\, sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right)$$

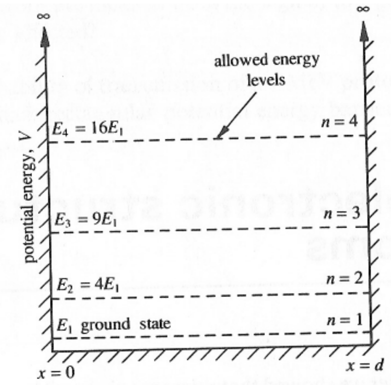
$$\begin{aligned} \int_0^d \Psi\Psi^* dx &= 1 \\ \int_0^d C^2 sin^2\left(\frac{n\pi x}{d}\right) dx &= 1 \end{aligned}$$

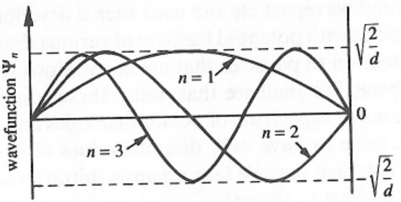
$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{d}}\, sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \quad n = 1, 2, 3 \ldots$$

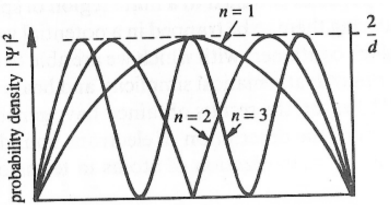
$$E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_e d^2} = \frac{n^2 h^2}{8m_e d^2} \quad n = 1, 2, 3 \ldots$$

Estructura electronica de los átomos

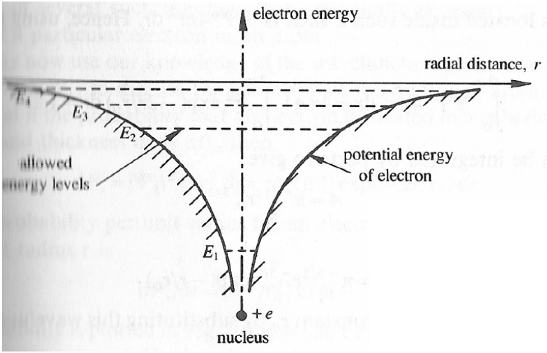
Particula en un pozo potencial unidimencional







El átomo de hidrogeno
Potencial más real



Con Energía Potencial:

$$U = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{49}$$

El átomo de hidrogeno
Potencial más real

Resolviendo la ES en coordenadas esfericas:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\Psi=0 \quad (50)$$

Asumiendo simetria en θ y ϕ

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\Psi=0 \quad (51)$$

La forma de la solución a esta ecuación es:

$$\Psi_1 = Ae^{-r/r_0} \quad (52)$$

El átomo de hidrogeno

Potencial más real

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

$$\int_0^\infty \Psi\Psi^* 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2r/r_0} dr = 1 \tag{53}$$

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

$$\Psi_1 = \pi^{-1/2} r_0^{-3/2} e^{-r/r_0} \tag{54}$$

Incertando Eq. 54 en Eq. 51:

$$\frac{1}{r_0} - \frac{2}{rr_0} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) = 0 \tag{55}$$

El átomo de hidrogeno
Potencial más real

Resolviendo para r_0:

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

$$r_0 = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_0}{mq^2} \tag{56}$$

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_e r_0^2} = -\frac{m_e q^4}{8h^2\epsilon_0^2} \tag{57}$$

El supuesto de simetria simplifica demasiado y sólo encontramos una aproximación de la energía del primer nivel. La energía puede ser obtenida apropiadamente obviando el supuesto de simetría y es:

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{1}{n^2}\frac{m_e q^4}{8h^2\epsilon_0^2} \tag{58}$$

El átomo de hidrogeno
Potencial más real

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

$$dP_r = |\Psi_1|^2 4\pi r^2 dr = \left(\frac{4r^2}{r_0^3}\right) e^{-2r/r_0} dr \tag{59}$$

$$\frac{dP_r}{dr} = \left(\frac{4r^2}{r_0^3}\right) e^{-2r/r_0} \tag{60}$$

Asi la densidad de carga es:

$$\rho_1(r) = |\Psi_1|^2(-q) = -\left(\frac{q}{\pi r_0^3}\right) e^{-2r/r_0} \tag{61}$$

La carga:

$$\frac{q_r}{dr} = -\left(\frac{4qr^2}{r_0^3}\right) e^{-2r/r_0} \tag{62}$$

El átomo de hidrogeno
Modelo más preciso

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\underbrace{\Theta(\theta)\Phi(\phi)}_{Y(\theta,\phi)} \tag{63}$$

Con algo de algebra y una elección conveniente de constantes

$$\begin{aligned}
\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{2m\,r^2}{\hbar^2}[V(r)-E] &= l(l+1) \\
\frac{1}{\Theta}\left[sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right] + l(l+1)sin^2\theta &= m^2 \\
\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} &= -m^2
\end{aligned} \tag{64}$$

$$\Psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!)]^3}}\,e^{-r/na}\left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{65}$$

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 reperesenta 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.

Spin y el 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	$1s^2 2s$
Be	2	0	0	$1s^2 2s^2$
B	2	1	−1	$1s^2 2s^2 2p$
C	2	1	−1	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	2	1	0	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	2	1	0	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	2	1	1	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	2	1	1	$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	3	0	0	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$
Mg	3	0	0	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Al	3	1	−1	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$
Si	3	1	−1	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
P	3	1	0	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
etc.				

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

Resumen Clase #2

- Dualidad onda particula
  - Una onda-particula puede ser representada por una superposición infinita de ondas.
  - El comportamiento de onda le da una velocidad de fase (puede ser mayor que c).
  - Como es una superposición de ondas también existe la velocidad de grupo (velocidad de la información)
- Principios de Complementariedad y Correspondencia.
- 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
  - El átomo de Hidrogeno
  - Spin y el principio de exclusión