Pontificia Universidad Católica de Chile
Escuela de Ingenieria / Facultad de Física
IEE1133/FIZ1433 Materiales Eléctricos
Profesor: Roberto Rodriguez

Ayudantía 3: Mecánica Cuántica

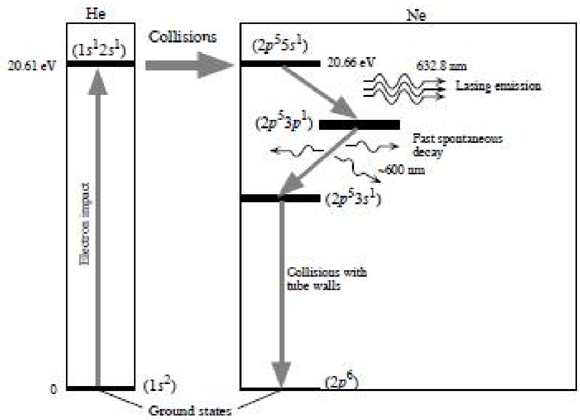
Joaquín Arancibia: jiaranci@puc.cl
Fabián Cádiz: facadiz@puc.cl

0.0.1. Problema 1

1. Un electrón de energía cinética 12,2 eV colisiona con un átomo de hidrógeno en un tubo de descarga. Encuentre el nivel de energía al cual el electrón del hidrógeno será excitado.

2. Calcule las posibles longitudes de onda que podrán ser emitidas por el hidrógeno excitado al volver el electrón al estado fundamental. ¿Cuál de estas longitudes de onda estará en el espectro visible?

3. En los tubos de neón se aceleran electrones gracias a la diferencia de potencial establecida, ellos impactan sobre átomos de Ne excitando algunos de ellos al estado $2p^5 3p^1$. ¿Cuál es la longitud de onda de la emisión? ¿ Puede el átomo pasar del estado $2p^5 3p^1$ al estado fundamental directamente (emisión espontánea) ?



0.0.2. Solución

1. La energía del electrón en el enésimo nivel de energía del átomo de Hidrógeno está dada por:

$$E_n = \frac{-13,6\,eV}{n^2} Z^2 \tag{1}$$

Donde Z es el número atómico, en este caso Z=1 para el hidrógeno. Además, la energía cinética presente en el electrón será igual a la energía transferida al electrón del hidrógeno:

$$E_K = E_n - E_0 \tag{2}$$

La energía fundamental en el caso del hidrógeno es de -13,6 eV. Así:

$$E_K = \frac{-13,6\,eV}{n^2} + 13,6\,eV \tag{3}$$

Luego:

$$n = \sqrt{\frac{13,6\,eV}{13,6\,eV - E_K}} \tag{4}$$

Substituyendo el valor dado de $E_K = 12,2\,eV$ obtenemos que:

$$n = 3,12 \tag{5}$$

Por lo tanto, el electrón sube hasta el tercer nivel de energía del átomo de hidrógeno (ya que n debe ser entero). De esta manera, no toda la energía cinética será absorbida sino que sólo una parte dada por:

$$\Delta E = \frac{-13,6}{3^2} - E_0 = 12,09\,eV \tag{6}$$

Luego el electrón guarda una parte de su energía, dada por:

$$E'_K = E_K - \Delta E = 12,2\,eV - 12,09\,eV = 0,11\,eV \tag{7}$$

2. El electrón puede volver al estado fundamental desde n=3 a n=1 o bien pasar por un nivel intermedio, es decir de n=3 a n=2 y luego a n=1.

   Para la primera transición (de 3 a 1) tendremos:

$$\Delta E_{31} = \frac{-13,6\,eV}{3^2} - \frac{-13,6\,eV}{1^2} = 12,09\,eV \tag{8}$$

   Para encontrar la longitud de onda emitida hacemos:

$$\begin{aligned}
\Delta E_{31} &= h\nu = h\frac{c}{\lambda_{31}} \\
\lambda_{31} &= h\frac{c}{\Delta E_{31}} = (6,626 \times 10^{-34}\,Js)\frac{3,0 \times 10^8}{(12,09\,eV)(1,062 \times 10^{-19}\,J/eV)} \\
\lambda_{31} &= 1,03 \times 10^{-7}\,m = 103\,nm
\end{aligned}$$

   Esta longitud de onda no está en el espectro visible. Para la transición: n=3 a n=2 a n=1 , dos longitudes de onda diferentes de luz serán liberadas:

$$\begin{aligned}
\Delta E_{32} &= \frac{-13,6\,eV}{3^2} - \frac{-13,6\,eV}{2^2} = 1,889\,eV \\
\lambda_{32} &= h\frac{c}{\Delta E_{32}} = 6,57 \times 10^{-7}\,m = 657\,nm
\end{aligned}$$

   Esta longitud de onda sí es visible (rojo). Para la transición de 2 a 1 se tiene que:

$$\begin{aligned}
\Delta E_{21} &= \frac{-13,6\,eV}{2^2} - \frac{-13,6\,eV}{1^2} = 10,2\,eV \\
\lambda_{21} &= h\frac{c}{\Delta E_{21}} \\
\lambda_{21} &= 1,22 \times 10^{-7}\,m = 122nm
\end{aligned}$$

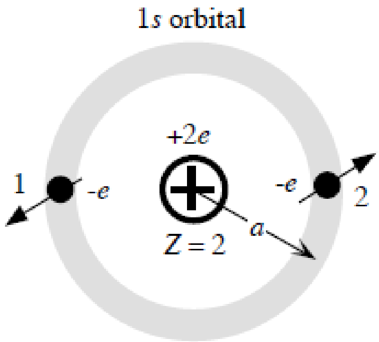
   Esta longitud de onda no es visible.

3. La longitud de onda de la figura, de 600 nm aproximadamente, es roja. Si la transición involucra un fotón el número cuántico l debe cambiar. La transición $2p^5 3p^1$ a $2p^6$ no cambia el número l, por lo que no es una transición permitida.

0.0.3. Problema 2

Suponga que para el átomo de He el nivel de energía cero está tomado cuando los dos electrones estacionarios están infintamente separados entre ellos y del núcleo (He^{++}). Estime la energía (en eV) de los electrones del átomo de He, despreciando la interacción entre los electrones, es decir, despreciando la energía potencial debida a la repulsión eléctrica. ¿Cómo se compara esto con el valor experimental de $-79\,eV$? ¿Cuán fuerte es la interacción electrón-electrón?

0.0.4. Solución



En el He hay dos electrones y un núcleo de carga positiva $+2e$. Ambos electrones ocupan el mismo orbital, por lo que tienen la misma distribución espacial (n, l, m_l). Los dos electrones, sin embargo, tienen spins opuestos (debido al Principio de Exclusión de Pauli). Sea a la distancia donde la densidad de probabilidad es máxima. Ésta se relaciona con el radio de Bohr (a_0) según:

$$a = \frac{a_0}{Z} \tag{9}$$

La energía en eV de un electrón será:

$$E_n = -\frac{13,6\,eV}{n^2}Z^2 \tag{10}$$

Donde n=1 corresponde al estado fundamental. Hasta aquí no se ha tomado en cuenta la energía de interacción entre los electrones. El electrón ve una carga neta de $+2e$ en el nucleo, es decir, Z=2. Si el electrón está en el estado fundamental:

$$E_1 = -\frac{13,6\,eV}{1^2}2^2 = -54,4\,eV \tag{11}$$

Que es idéntica a la energía del otro electrón E_2. Por lo tanto,

$$E_{tot} = E_1 + E_2 = -108,8\,eV \tag{12}$$

Como esperabamos, este valor es negativo, que corresponde a una fuerza atractiva entre cargas de signo opuesto. Nuestro valor difiere del valor experimental ya que se ha despreciado la energía de interacción entre los electrones, que vendrá dada por:

$$E_{e-e} = E_{exp} - E_{tot} = 29,8\,eV \tag{13}$$

Como se esperaba, es positiva que corresponde a una repulsión. Estimemos de otra manera esta energía de interacción: Ambos electrones ocupan el mismo orbital, luego, tienen en promedio la misma distribución espacial. Los electrones tratarán de evitarse: cuando uno esté en el extremo izquierdo el otro estará al derecho y vice versa. El radio más probable para un estado $1s$ con Z=2 será:

$$a = a_0/Z = (5,29 \times 10^{-11})/2 = 2,645 \times 10^{-11} m \tag{14}$$

Así, la energía potencial podemos estimarla según:

$$\begin{aligned} E_P &= \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0(2a)} && (15) \\ &= \frac{(1,602 \times 10^{-19}\, C)^2}{4\pi(8,854 \times 10^{-12}\, F/m)(2 \times 2,645 \times 10^{-11})} \frac{1}{1,602 \times 10^{-19}\, J/eV} && (16) \\ &= 27,2\, eV && (17) \end{aligned}$$

Cercano al valor encontrado anteriormente.

0.0.5. Problema 3

Ciertos pigmentos orgánicos [1] están constituídos de iones lineales, a lo largo de los cuales los electrones se desplazan libremente. Estos iones forman una structura lineal del tipo:

$$(CH_2...CH...CH...CH...CH_2)^-$$

que contiene un número impar n de átomos de carbono equidistantes separados por una distancia d = 1,40 $\mathring{A}$. En esta estructura, se puede considerar que $n+1$ electrones se mueven **independientemente** en una barrera de potencial unidimensional infinita de largo $L_n = nd$

$$V(x) = \infty \text{ si } x < 0 \text{ o } x > L_n \quad ; \quad V(x) = 0 \text{ si } 0 \leq x \leq L_n$$

(En realidad, para considerar efectos de borde uno escribe $L_n = (n-1)d + 2b$, y experimentalmente resulta adecuado tomar $b = d/2$.
a) Cuáles son los de energía e_k de un electrón en este potencial?
b) A causa del principio de Pauli, pueden haber máximo 2 electrones por nivel de energía. Cuál es entonces la energía E_0 del estado fundamental y la energía E_1 del primer estado excitado del conjunto de $n+1$ electrones? (Considere $\sum_{k=1}^{N} k^2 = N(N+1)(2N+1)/6$)
c) Cuál es la longitud de onda λ_n de la luz absorbida cuando ocurre una transición desde el estado fundamental al primer estado excitado del sistema?. (Recuerdo: la longitud de onda de compton es $\lambda_c = h/(m_e c) = 2{,}426 \;\; 10^{-2} \;\; A$)
d) Se observa experimentalmente que los iones $n = 9$, $n = 11$ y $n = 13$ absorben respectivamente en el azul ($\lambda_9 \approx 4700 \;\; A$), el amarillo anaranjado ($\lambda_{11} \approx 6000 \;\; A$) y el rojo ($\lambda_{13} \approx 7300 \;\; A$). Cómo funciona el modelo?
e) Los iones $n \leq 7$ son colorados?

0.0.6. Solución

a) La ecuación de Schrodinguer es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \varepsilon\psi(x), \quad 0 \leq x \leq L_n$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

[1]Wiki: Un pigmento es un material que cambia el color de la luz que refleja como resultado de la absorción selectiva del color

Llamando $\kappa = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$, la solución general es de la forma:

$$\psi(x) = A \sin \kappa x + B \cos kx$$

La condición de borde $\psi(0) = 0$ implica $B = 0$, y $\psi(L_n) = 0$ impone:

$$\sin \kappa L_n = 0, \quad \kappa_k = \frac{k\pi}{L_n} \quad k = \{1, 2...\}$$

Es decir, los valores de κ (y por lo tanto de la energía ε) están cuantizados. Se tiene:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}\kappa_k^2 = \frac{\hbar^2 k^2 \pi^2}{2mL_n^2}, \quad k = 1, 2, ...$$

b) Sólo dos electrones pueden ocupar un nivel de energía, y se tienen $n+1$ electrones (con n impar). El estado fundamental se obtiene colocando estos $n+1$ electrones en los niveles más bajos de energía posible. Esto es: 2 electrones en el nivel k-ésimo, con $k = 1, 2, ..., (n+1)/2$. La energía del estado fundamental es entonces:

$$E_0 = 2\sum_{k=1}^{(n+1)/2} \varepsilon_k = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL_n^2}\sum_{k=1}^{(n+1)/2} k^2$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL_n^2}\frac{1}{6}\left\{\left(\frac{n+1}{2}\right)\left(\frac{n+3}{2}\right)(n+2)\right\} = \frac{\hbar^2\pi^2}{24mL_n^2}(n+1)(n+2)(n+3)$$

El primer estado excitado se obtiene exitando a uno de los 2 electrones de mayor energía ($\varepsilon_{(n+1)/2}$) al siguiente estado. Entonces:

$$E_1 = E_0 + \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL_n^2}\left\{\left(\frac{n+1}{2}+1\right)^2 - \left(\frac{n+1}{2}\right)^2\right\} = E_0 + \frac{\pi^2\hbar^2(n+2)}{2mL_n^2}$$

b) Se tiene

$$h\nu = h\frac{c}{\lambda} = E_1 - E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2(n+2)}{2mL_n^2}$$

$$\lambda = hc\frac{2mL_n^2}{\pi^2\hbar^2(n+2)} = hc\frac{8\pi^2 mn^2d^2}{\pi^2h^2(n+2)}$$

$$\lambda = \frac{8mc}{h}d^2\frac{n^2}{(n+2)} = \frac{8d^2}{\lambda_c}\frac{n^2}{n+2}$$

Para $d = 1{,}4 \;\; \mathring{A}$, $\lambda_c = 2{,}426 \;\; 10^{-2} \;\; \mathring{A}$

$$\lambda_n = 646{,}33\frac{n^2}{n+2} \quad A \tag{18}$$

d) A partir de 18 se obtiene $\lambda_9 = 4760 \;\; \mathring{A}$, $\lambda_{11} = 6020 \;\; \mathring{A}$, $\lambda_{13} = 7280 \;\; \mathring{A}$, en buen acuerdo con los resultados experimentales.

e) Se puede mostrar que $n^2/(n+2)$ es una función creciente en n (Evaluar la derivada de $x^2/(x+2)$ para $x \geq 1$). Además:

$$\lambda_7 = 3520 \ \mathring{A} \quad \text{ultravioleta}$$

Es decir, los iones con $n \leq 7$ no absorben en el visible y por lo tanto no tienen coloración.

0.0.7. Problema 4

Considere los estados ligados estacionarios de una partícula de masa m en el pozo de potencial:

$$V = \infty \quad \text{para} \quad x < 0, \qquad V = -V_0 \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq a, \quad V = 0 \quad \text{para} \quad x > a$$

Uno escribe la función de onda de un estado ligado ($E < 0$)

$$\psi(x) = A \sin kx \quad \text{para} \quad x \leq a, \quad \psi(x) = Be^{-Kx} \quad \text{para} \quad x > a$$

a) Justifique brevemente esta expresión para las funciones de onda, y exprese k, K en términos de E y V_0
b) Escriba las condiciones de continuidad en $x = a$. Deduzca la condición de cuantificación. Existen estados ligados para cualqueir valor de V_0?
c) Se utiliza este modelo para describir la interacción nuclear entre un neutrón y un protón. La experiencia muestra que existe solo un estado ligado, el deuterón. Deduzca que V_0 está acotado entre dos límites V_{min} y V_{max} que se deben calcular en MeV ($1 \quad MeV = 10^6 \quad eV$). Se toma $a = 2 \ \ 10^{-15} \ \ m = 2 \ \ fm$. La masa m es la masa reducida $m = m_p m_n/(m_p + m_n) \approx m_p/2$. Esto da $mc^2 \sim 470 \ \ MeV$, y $\hbar c \sim 197 \ \ MeV \ \ fm$
d) Cuál es la energía de ligazón para $V_0 = V_{min}$? La energía de ligazón del deuterón es $E_d = -2{,}2 \ MeV$. Utilize el hecho de que $|E_d|$ es pequeño comparado a V_{min} para linealizar las ecuaciones y calcular V_0.

0.0.8. Solución

a) La ecuación de Schrodinguer independiente del tiempo es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Para $0 \leq x \leq a$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)\psi(x) = 0$$

La solución general es:

$$\psi(0 \leq x \leq a) = Ae^{ikx} + A^{'}e^{-ikx}$$

con $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 + E)}$

Para $x > a$, se tiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

Como $E < 0$, la solución general es:

$$\psi(x > a) = Be^{Kx} + B^{'}e^{-Kx}$$

con $K = \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}$. Las condiciones en los extremos son:

$$\psi(0) = 0 \quad \text{y} \quad \psi(\infty) = 0$$

La primera de ella impone $A + A^{'} = 0$, lo que significa:

$$\psi(0 \leq x \leq a) = A\sin kx$$

donde se ha redefinido la constante A. La condición en el infinito significa $B^{'} = 0$. Finalmente se tiene:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ A\sin kx & 0 \leq x \leq a \\ Be^{-Kx} & x > a \end{cases}$$

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 + E)}, \quad K = \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}$$

b) En $x = a$ la función de onda y su derivada son continuas, esto significa:

$$A\sin ka = Be^{-Ka}$$

$$Ak\cos ka = -BKe^{-Ka}$$

Dividiendo ambas y multiplicando por a:

$$ka \operatorname{cotg} ka = -Ka \tag{19}$$

Con

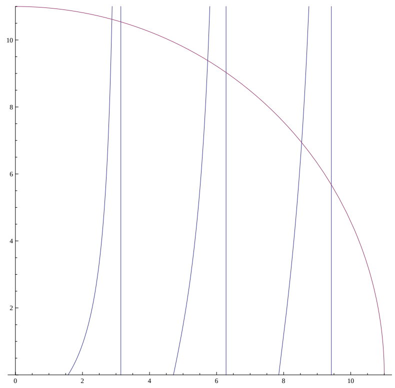
$$K^2a^2 + k^2a^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2 \tag{20}$$

El sistema 19 y 20 no se puede resolver analíticamente. Sin embargo, el número de soluciones puede ser encontrado fácilmente de forma gráfica, definiendo $y = Ka$, $x = ka$, entonces:

$$y = -x \operatorname{cotg} x, \quad y^2 + x^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2$$

Las soluciones (que son finitas en número) se obtienen intersectando en el primer cuadrante del plano $x - y$ la circunferencia de radio $r = \sqrt{2mV_0}a/\hbar$, con la curva $y = -x \operatorname{cotg} x$. En la siguiente figura se muestra el caso para $r = 11$, donde hay 3 soluciones.

Esta última función es negativa para $x < \pi/2$, se anula en $x = \pi/2$ y diverge para $x = \pi$. (Esta comportamiento se reproduce cualitativamente con un período igual a π). Se deduce que si el radio de la circunferencia es menor que $\pi/2$, no existe solución y por lo tanto no existe ningún estado ligado. Es decir, sólo hay estados ligados si:



$$\sqrt{2mV_0a^2}\hbar^2 \geq \frac{\pi}{2}$$

c) Hay ún solo estado ligado si se cumple $\pi/2 \leq r \leq 3\pi/2$, es decir:

$$\frac{\pi}{2} \leq \frac{\sqrt{2mV_0a^2}}{\hbar} \leq \frac{3\pi}{2}$$

Es decir, $V_{min} \leq V_0 \leq V_{max}$, con

$$V_{min} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} = \frac{\pi^2}{8a^2}\frac{(hc)^2}{mc^2} = \frac{\pi^2}{8\ 2^2}\frac{197^2}{470} = 25{,}5\ \ MeV$$

$$V_{max} = 9V_{min}$$

d) Si $V = V_{min}$, se tiene una sola solución con $y = 0$, equivalentemente $K = E = 0$. Que $|E_d|$ sea pequeño significa $V \sim V_0$. Usando entonces que $x = ka \sim \frac{\pi}{2}$, un desarrollo a primer orden en serie de Taylor da:

$$Ka = \frac{d}{d(ka)}\left(-ka \operatorname{cotg} ka\right)\Big|_{ka=\pi/2}(ka - \pi/2)$$

$$Ka = \left(\frac{ka\sec^2 ka}{\tan^2 ka}\right)\Big|_{ka=\pi/2}(ka - \pi/2) = \frac{\pi}{2}\left(ka - \pi/2\right) = \frac{a}{\hbar}\sqrt{-2mE}$$

y

$$ka \approx \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$$

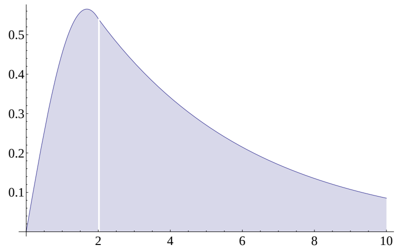
Finalmente:

$$\frac{a}{\hbar}\sqrt{-2mE} = \frac{\pi}{2}\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0} - \frac{\pi}{2}\right)$$

$$\frac{2a}{\pi\hbar}\sqrt{-2mE} + \frac{\pi}{2} = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$$

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left\{\frac{\pi}{2} + \frac{2a}{\pi\hbar}\sqrt{-2mE/\hbar^2}\right\} \approx 35{,}9\ \ MeV$$

La siguiente figura muestra la función de onda para el deuterón, la línea vertical blanca indica $x = 2$ (fm).



0.0.9. Problema 5

Los niveles de energía de los estados con simetría esférica del átomo de hidrógeno se obtienen por el cálculo unidimensional siguiente. Considere un electrón de masa m en un potencial $V(x)$ tal que $V = \infty$ si $x \leq 0$, $V = -A/x$ si $x > 0$, donde $A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$, con e la carga elemental. Se define $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = 1/137$ (constante de estructura fina), donde c es la velocidad de la luz.

a) Muestre que la función de onda $\psi(x) = Cxe^{-x/a}$ para $x \geq 0$ y $\psi(x) = 0$ para $x < 0$ es función propia del hamiltoniano para un valor de a que se debe determinar. Calcule el valor propio E correspondiente, expréselo en términos de $a, m, \alpha, \hbar$ y c.
b) Calcule numéricamente E y a. Utilize $mc^2 = 5{,}11 \times 10^5 \;\; eV$ y $\hbar c = 197 \;\; eV\ nm$.
c) Determine la constante de normalización C en función de a.

0.0.10. Solución

a) El operador hamiltoniano en este caso es:

$$\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{A}{x}$$

Se tiene, para $\psi(x) = Cxe^{-x/a}$:

$$\frac{d}{dx}\left\{Cxe^{-x/a}\right\} = Ce^{-x/a} - \frac{C}{a}xe^{-x/a}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\left\{Cxe^{-x/a}\right\} = -\frac{2C}{a}e^{-x/a} + \frac{C}{a^2}xe^{-x/a} = -\frac{2}{ax}\psi(x) + \frac{1}{a^2}\psi(x)$$

Por lo tanto:

$$\hat{H}\psi(x) = \frac{\hbar^2}{max}\psi(x) - \frac{\hbar^2}{2ma^2}\psi(x) - \frac{A}{x}\psi(x)$$

Si se cumple $A = \hbar^2/(ma)$, entonces:

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

La energía asociada a este estado es:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} = -\frac{mA^2}{2\hbar^2} = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}$$

Finalmente:

$$E = -\frac{mc^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar c)^2} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2}$$

b) Tenemos:

$$a = \frac{\hbar^2}{mA} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar}{\alpha mc}$$

$$a = 137\frac{\hbar c}{mc^2} = 137\frac{197\ eV\ nm}{5{,}11 \times 10^5\ eV} = 0{,}053nm \sim 0{,}5\ A$$

y

$$E = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} = \frac{5{,}11 \times 10^5}{2\ (137)^2} = -13{,}6\ eV$$

$a = a_0$ es el radio de Bohr, $E = -13{,}6\ eV$ es la energía de ionización del átomo de Hidrógeno: $\psi(x)$ es el estado fundamental de un electrón en el átomo de Hidrógeno.

c) La condición de normalización para la función de onda ψ es:

$$\int_{\mathbb{R}} dx\ |\psi(x)|^2 = \int_0^\infty dx\ |\psi(x)|^2 = 1$$

Se tiene

$$\int_0^\infty dx\ C^2 x^2 e^{-2x/a} = C^2 \int_0^\infty dx\ x^2 e^{-2x/a}$$

Consideremos la integral:

$$I(\lambda) = \int_0^\infty dx\ e^{-2\lambda x/a} = \frac{a}{2\lambda}$$

luego:

$$\frac{dI}{d\lambda} = -\frac{2}{a}\int_0^\infty dx\ xe^{-2\lambda x/a} = -\frac{a}{2\lambda^2}$$

$$\frac{d^2I}{d\lambda^2} = \frac{4}{a^2}\int_0^\infty dx\ x^2 e^{-2\lambda x/a} = \frac{a}{\lambda^3}$$

Evaluando esta última identidad en $\lambda = 1$:

$$\int_0^\infty dx\ x^2 e^{-2x/a} = \frac{a^3}{4}$$

Se deduce:

$$\int_{\mathbb{R}} dx\ |\psi(x)|^2 = \frac{C^2 a^3}{4} = 1$$

La constante de normalización vale:

$$C = \frac{2}{a^{3/2}}$$

1. Cristalografía

El sistema cúbico de cristales es un sistema cristalino donde celda unitaria tiene forma de cubo. Ésta se repite indefinidamente a lo largo de todo el material. En general, hay 3 variedades de cristales: Cúbico Simple (SC), Cúbico de cuerpo centrado (BCC) y cúbico de caras centrado (FCC). En el caso SC cada vértice del cubo posee un átomo, es decir en la celda unitaria hay ocho octavos de átomo, es decir 1 átomo por cubo.

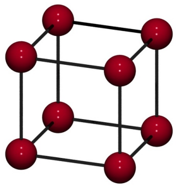


Figura 1: Sistema cúbico simple

En el caso BCC se puede encontrar átomos en los vértices y uno en el centro, es decir por celda unitaria hay 2 átomos:

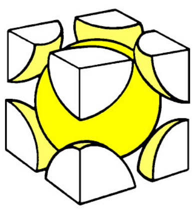


Figura 2: Malla elemental del arreglo BCC

Por último, el caso FCC (Ar, Ag, Al, Au, Co, Cu) tiene átomos en cada vértice y en los centros de las caras, dando un total de 4 átomos por celda (ocho octavos de los vértices y 6 medios por las caras).

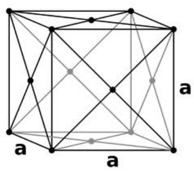


Figura 3: Estructura cristalina de cara centrada (FCC)

2. Postulados de la mecánica cuántica

Resumen

1. La descripción del estado de una partícula en el espacio se logra por una función de onda $\psi(\vec{x}, t)$ donde su módulo cuadrado da la densidad de probabilidad de prescencia en el punto $\vec{x}$ al instante t.

2. La evolución en el tiempo de la función de onda de una partícula colocada en un potencial $V(r)$ se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinguer:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t) = \hat{H}\psi(\vec{x}, t)$$

donde el observable energía $\hat{H}$, o hamiltoniano del sistema, es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(r)$$

3. Para un sistema aislado en un potencial independiente del tiempo, los estados estacionarios son los estados propios de la energía, con una función de onda de la forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_\alpha(\vec{x})e^{-iE_\alpha t/\hbar}$$

donde ψ_α es una solución normada ($\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \ |\psi_\alpha|^2 = 1$) de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\hat{H}\psi_\alpha(\vec{x}) = E_\alpha\psi_\alpha(\vec{x})$$

La evolución en el tiempo de toda función de onda $\psi(\vec{x}, t)$ se escribe inmediatamente una vez conocidas las soluciones estacionarias:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_\alpha C_\alpha e^{-iE_\alpha t/\hbar}\psi_\alpha(\vec{x}), \quad \text{con} \quad C_\alpha = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \ \psi_\alpha^*(\vec{x})\psi(\vec{x}, t=0)$$

3. Constantes y propiedades

Resistividad en ohm-metros, medidos a 1 atm y a 20º C:

Material	Resistividad	Material	Resistividad
Conductor		*Semi-Conductores*	
Plata	$1,59 \times 10^{-8}$	Agua Salada	$4,4 \times 10^{-2}$
Cobre	$1,68 \times 10^{-8}$	Germanio	$4,6 \times 10^{-1}$
Oro	$2,21 \times 10^{-8}$	Diamante	2,7
Aluminio	$2,65 \times 10^{-8}$	Silicio	$2,5 \times 10^{3}$
Hierro	$9,61 \times 10^{-8}$	*Aislantes*	
Mercurio	$9,58 \times 10^{-7}$	Agua pura	$2,5 \times 10^{5}$
Nicromo	$1,00 \times 10^{-6}$	Madera	$10^{8} - 10^{11}$
Manganeso	$1,44 \times 10^{-6}$	Vidrio	$10^{10} - 10^{14}$
Grafito	$1,4 \times 10^{-5}$	Cuarzo	$\sim 10^{16}$

Susceptibilidades magnéticas a 1 atm y 20ºC:

Material	Susceptibilidad	Material	Susceptibilidad
Diamagnetico		*Paramagnetico*	
Bismuto	$-1,6 \times 10^{-4}$	Oxígeno	$1,9 \times 10^{-6}$
Oro	$-3,4 \times 10^{-5}$	Sodio	$8,5 \times 10^{-6}$
Plata	$-2,4 \times 10^{-5}$	Aluminio	$2,1 \times 10^{-5}$
Cobre	$-9,7 \times 10^{-6}$	Tungsteno	$7,8 \times 10^{-5}$
Agua	$-9,0 \times 10^{-6}$	Platinio	$2,8 \times 10^{-4}$
CO_2	$-1,2 \times 10^{-8}$	Oxígeno líquido (-200 ºC)	$3,9 \times 10^{-3}$
Hidrógeno	$-2,2 \times 10^{-9}$	Gadolinio	$4,8 \times 10^{-1}$

Constantes dieléctricas, a 1 atm y 20 ºC:

Material	Constante Dieléctrica	Material	Constante Dieléctrica
Vacío	1	Benceno	2,28
Helio	1,000065	Diamante	5,7
Neon	1,00013	Sal	5,9
Hidrógeno	1,00025	Silicio	11,8
Argón	1,00052	Metanol	33
Aire(seco)	1,00054	Agua	80,1
Nitrógeno	1,00055	Hielo(30ºC)	99
Vapor de agua (100ºC)	1,00587	$KTaNbO_3$	34 000

Algunas unidades y constantes fundamentales:

Unidades	
Ångstrom	$1\AA = 10^{-10}m$ ($\sim$ tamaño de un átomo)
Fermi	$1fm = 10^{-15}m$ ($\sim$ tamaño de un núcleo)
ElectronVolt	$1eV = 1,60218\,10^{-19}J$
Constantes Fundamentales	
Constante de Planck	$h = 6,6261\,10^{-34}Js$
Cte. Planck h-barra	$\hbar = h/2\pi = 1,054\,10^{-34}Js$
Velocidad de la luz	$c = 299\,792\,458\,m/s$
Permeabilidad del vacío	$\mu_0 = 4\pi\,10^{-7}$ y $\epsilon_0\mu_o c^2 = 1$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1,38\,10^{-23}JK^{-1}$
Número de Avogadro	$N_A = 6,0221\,10^{23}$
Carga del electrón	$q_e = -1,602\,10^{-19}C$
Masa del electrón	$m_e = 9,1094\,10^{-31}kg$
Masa del protón	$m_p = 1,672\,10^{-27}kg$