

MATERIALES ELECTRICOS

CONFIGURACION ELECTRONICA

Ecuación de Schrödinger

El Átomo Monoatómico de Hidrogeno descrito por Bohr es un átomo simple por que solo contiene un electrón. Este puede ubicarse en el estado fundamental o estacionario o en estados excitados de mayor energía. Para átomos con Numero atómico mayor que uno, con mas de un electrón, o átomos **polielectronicos**, se debe conocer la forma como están distribuidos los electrones en los distintos orbitales atómicos o niveles energéticos.

Recordemos que la Mecánica Cuántica trata con magnitudes observables pero el principio de incertidumbre altera por completo el concepto de magnitud observable. Para la mecánica Clásica o Newtoniana la posición y la cantidad de movimiento tiene un valor definido y verificable en cada instante en cambio por el principio de incertidumbre sabemos que no es así en M. C. Las cantidades que da la M.C. son probabilidades.

En vez de afirmar por ejemplo que el radio de la orbita del electrón en su estado fundamental en el átomo de hidrogeno es $5,3 \times 10^{-11} \text{m}$, la M.C. afirma que este es el radio mas probable.

Por el principio de Correspondencia la M.C. da los mismos resultados que la M.N.

Para completar estos conceptos en mecánica cuántica y generalizando los resultados de las ondas de De Broglie se utiliza la Ecuación de Schrödinger que es la describe el comportamiento electromecánico de los electrones que se mueven en el átomo, en presencia de un campo de potencial, debido no solamente al núcleo positivo, sino también a los otros electrones del átomo y a los átomos vecinos. Si se aplica la Ecuación de Schrödinger al átomo de Hidrogeno da la misma solución obtenida por Bhor.

De la solución Ecuación de Schrödinger se derivan los tres números cuánticos n, l y m_l que son necesarios para describir la distribución de los electrones en el átomo

La Ecuación de Schrödinger es

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

donde m es la masa de los electrones, E es su energía total y V su energía potencial ψ es la función de onda de la partícula (electrón en este caso)

La función ψ solución de esta ecuación no tiene un significado físico inmediato, es una solución matemática. Pero el cuadrado de la función ψ^2 es la **densidad de probabilidad** que significa la probabilidad de encontrar los electrones en ese instante de tiempo y en ese volumen elemental

Completar estudio de configuración electrónica de capítulo 7 de Libro Química de Chang.