CONSIDERACIONES ACERCA DE LA SOLUCIÓN DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO PARA LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

La solución exacta del sistema de un electrón en un campo central y su correspondencia con la realidad experimental es determinante para las aplicaciones de la mecánica cuántica a los sistemas de interés para la Química. Es cuestionable que se hubiera podido intentar calcular resultados teóricos basados en los procedimientos y postulados cuánticos sin un modelo exitoso de referencia como este.

Se trata de la única referencia consistente, independiente y exacta de la teoría cuántica con resultados experimentales, esencialmente de tipo espectroscópico. Por ello, las funciones de onda hidrogenoides son modelos para construir cualquier modelo cuántico de sistemas con más de un electrón en un átomo y sistemas poliatómicos en general, desde las moléculas aisladas a sus agregados de cualquier tipo.