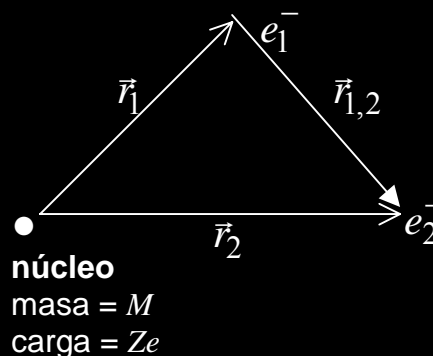


EL ÁTOMO CON DOS ELECTRONES



La ecuación de Schrödinger del sistema con dos electrones puede expresarse como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}_2}^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{1,2}} \right) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

donde $\mu = \frac{M}{(M+m)}m$ es la masa reducida de cada electrón de masa m con respecto al núcleo de masa M , e es la carga del electrón, ϵ_0 es la permitividad del medio en el sistema internacional de unidades (SI) y Z es el número atómico del núcleo, que equivale al número de sus cargas positivas.

Este operador puede expresarse en términos de unidades atómicas:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}_1}^2 - \frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}_2}^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{1,2}}$$

y la ecuación de Schrödinger:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}_1}^2 - \frac{1}{2} \nabla_{\vec{r}_2}^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{1,2}} \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

La función de onda bielectrónica puede tener las formas:

$$\psi = \pm\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Cuando se cumple con el signo + se denotan como $\psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ y se denominan **espacio – simétricas**. Cuando se cumple con el signo – se denotan como $\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ y entonces se llaman **espacio – antisimétricas**.

Los estados espacio – simétricos se denominan **para** y los espacio antisimétricos como **orto**.