

Temas selectos de Química Cuántica

Montserrat Navarro Espino

07/31/2023

Table of contents

Preface	3
1 Introduction	4
2 Summary	5
4 Simetría de la función de onda	7
5 Partícula en una caja	8
6 Método de Hartree-Fock	9
References	10

Preface

This is a Quarto book.

To learn more about Quarto books visit <https://quarto.org/docs/books>.

1 Introduction

This is a book created from markdown and executable code.

See Knuth (1984) for additional discussion of literate programming.

2 Summary

In summary, this book has no content whatsoever.

3

4 Simetría de la función de onda

5 Partícula en una caja

6 Método de Hartree-Fock

Las ecuaciones de Hartree-Fock son ecuaciones no lineales que pueden ser resueltas con los métodos numéricos apropiados. Sin embargo, en 1951, C.C.J. Roothan demostró que utilizando el método de LCAO, las ecuaciones de Fock se simplifican reformulándose como matrices [1][2].

En este proyecto, se resolverá la ecuación de Roothan $\mathbf{FC} = \mathbf{SC}\epsilon$ para el ión de hidruro de helio (HeH^+) siguiendo el algoritmo esquematizado en la siguiente figura[3]:

References

Knuth, Donald E. 1984. “Literate Programming.” *Comput. J.* 27 (2): 97–111. <https://doi.org/10.1093/comjnl/27.2.97>.