

Temas selectos de Química Cuántica

Montserrat Navarro Espino

07/31/2023

Table of contents

Prefacio

Este es un sitio creado con Quarto y publicado a través de GitHub Pages. En él se encuentran conceptos y ejercicios relevantes para el estudio de la Química Cuántica.

La elaboración de estas notas tiene como propósito revisar conceptos selectos de Química Cuántica, así como la resolución de problemas de forma numérica o a través del uso de la librería GPAW en el lenguaje de programación Python.

Esta recopilación y adaptación de material se realizó como una actividad de retribución a la beca de CONAHCyT recibida por la autora durante su estancia en el Programa de Maestría en Ciencias Químicas.

1 Introducción

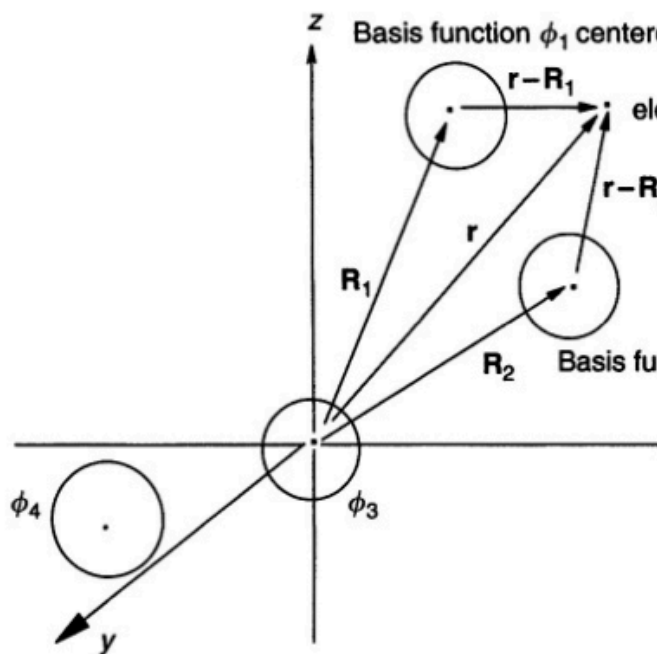
La Química Cuántica es un área donde se conjuntan ... Esta tiene un gran potencial pues para su aplicación se conjuntan...

2 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 ejemplo, 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]:

2.0.1 Definir sistema de estudio y base



El presente proyecto se realizó bajo el sistema de referencia:

```
import numpy as np
from numpy import*
import scipy
from numpy.linalg import inv
```

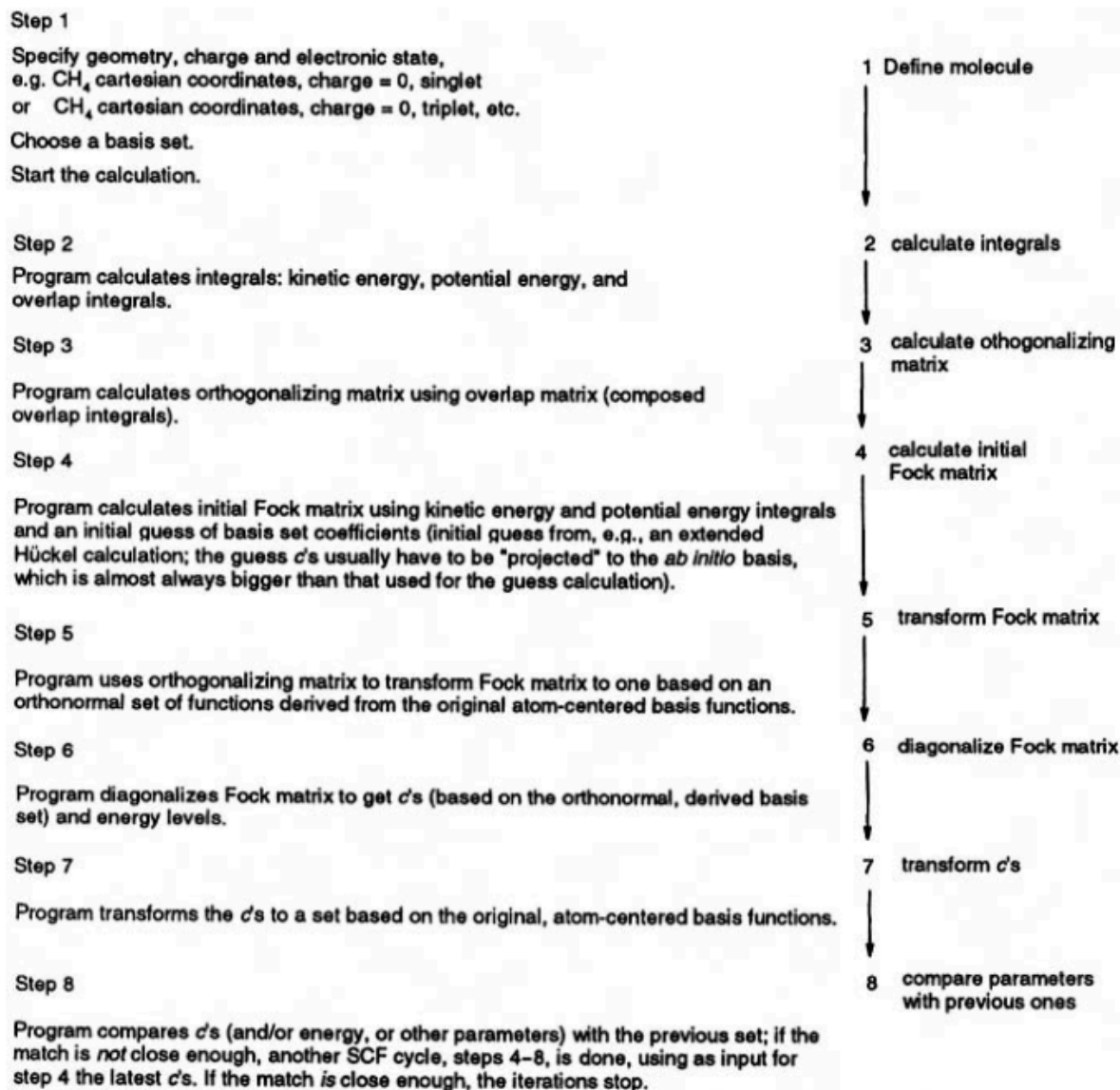


Figure 2.1: 1