



“El saber de mis hijos  
hará mi grandeza”

# Explorando sistemas cuánticos con Python: una guía para el salón de clases

Rafael Obed Egurrola Corella (Asesor: Dr. Adrián Duarte)

Universidad de Sonora

Congreso Nacional de Física, 2025

## Introducción y motivación

- ▶ La física contemporánea se apoya fuertemente en la computación.
- ▶ Integramos **implementaciones numéricas en Python** directamente en los cursos de mecánica cuántica.
- ▶ Dos niveles:
  1. **Numerov**: oscilador armónico 1D y radial de H.
  2. **Hartree–Fock (RHF)**: diatómicos sencillos ( $\text{H}_2$ ,  $\text{HeH}^+$ ).
- ▶ Objetivo docente: avanzar de *comprender/aplicar* a *analizar/evaluar/crear*.

## Método de Numerov (1D)

### Ecuación de Schrödinger 1D:

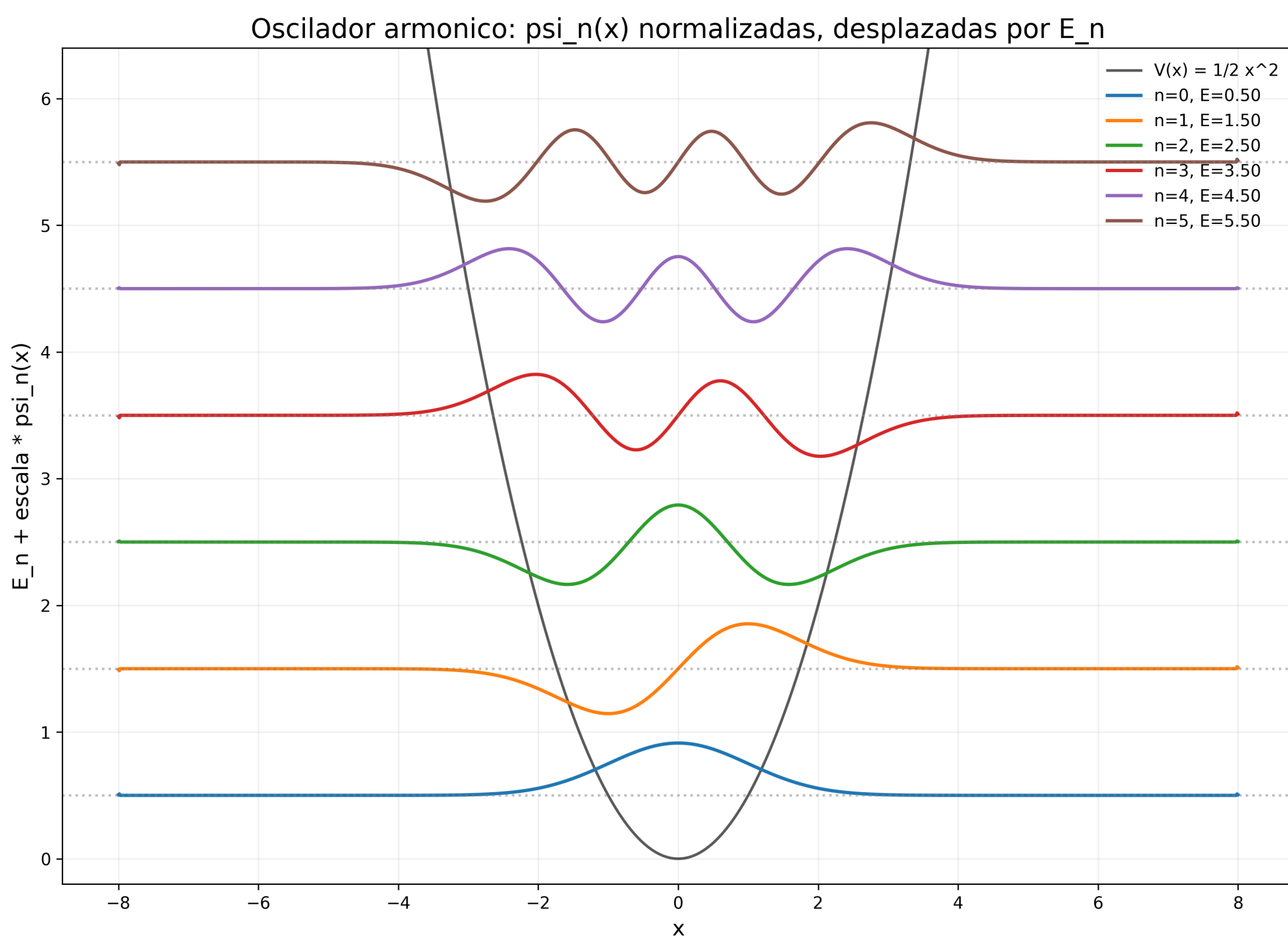
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Si  $\psi''(x) = f(x)\psi(x)$ , el esquema de **Numerov** (paso  $h$ ) es

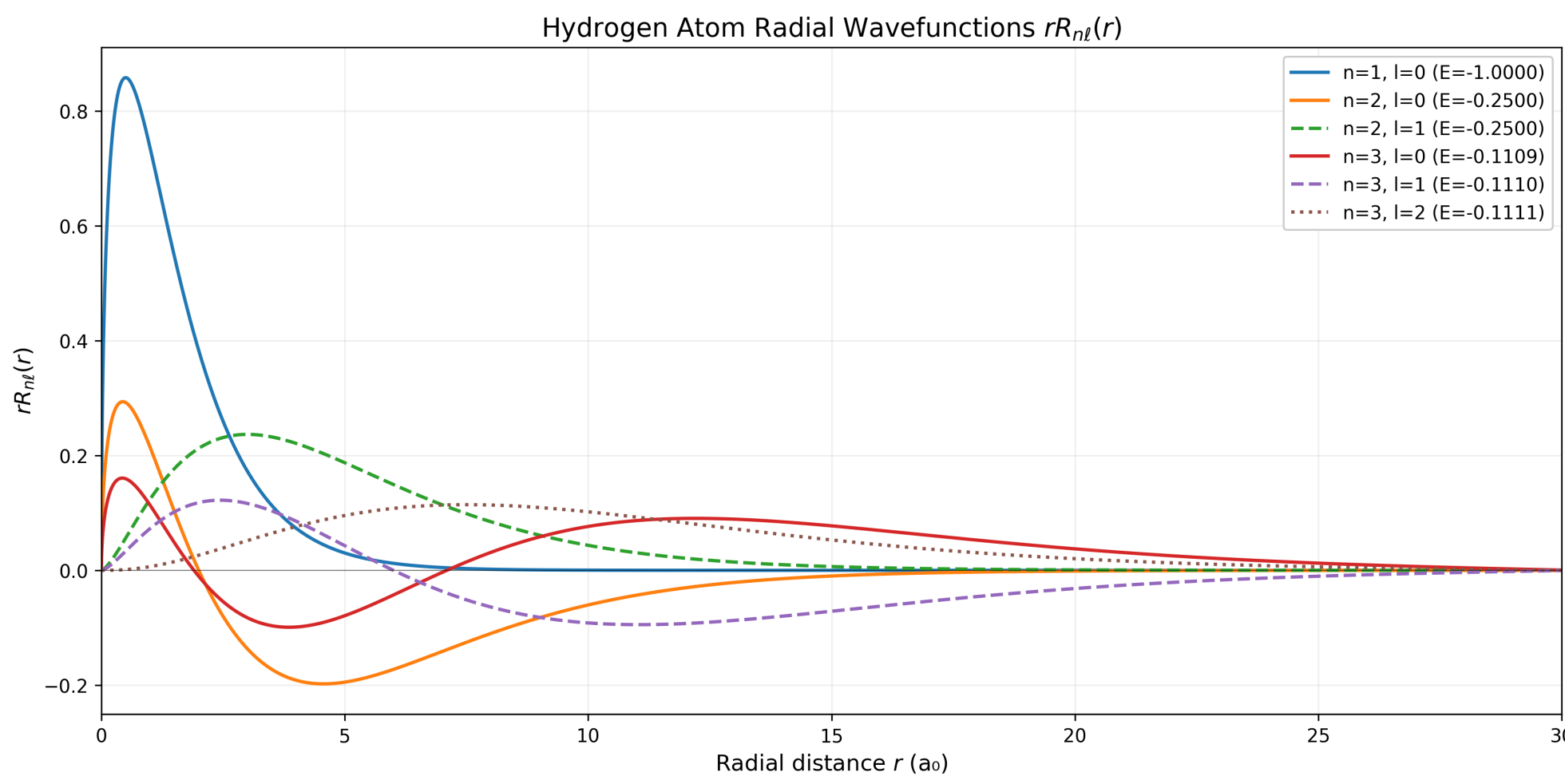
$$\psi_{n+1} = \frac{2\left(1 - \frac{5}{12}h^2f_n\right)\psi_n - \left(1 + \frac{1}{12}h^2f_{n-1}\right)\psi_{n-1}}{1 + \frac{1}{12}h^2f_{n+1}}.$$

### Notas:

- ▶ Discretización del espacio y búsqueda de  $E$  por *shooting* / nodos.
- ▶ Comparación con soluciones analíticas para OA y H.



Estados del oscilador armónico (Numerov).



Funciones radiales del hidrógeno (Numerov).

## Hartree–Fock (RHF): Formulación y SCF

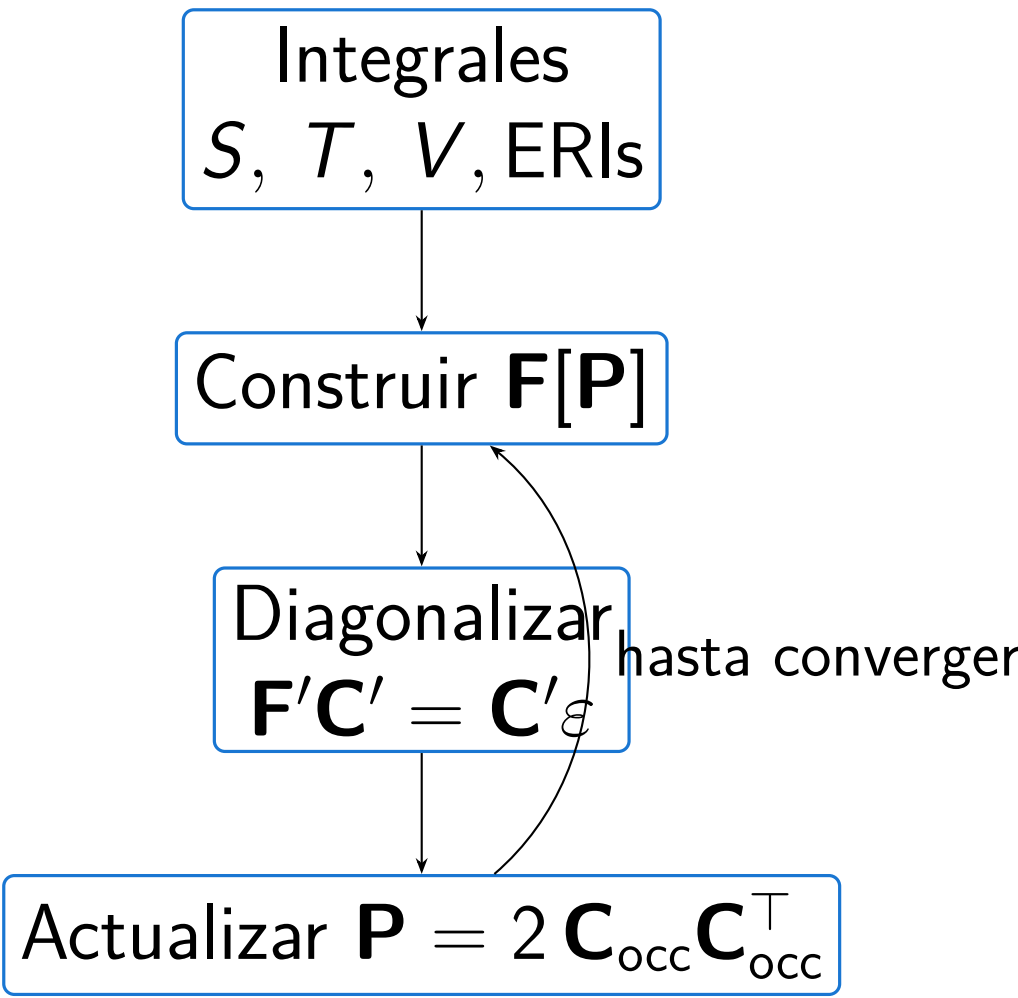
### Ecuaciones de Roothaan–Hall:

$$\mathbf{F}\mathbf{C} = \mathbf{S}\mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon},$$

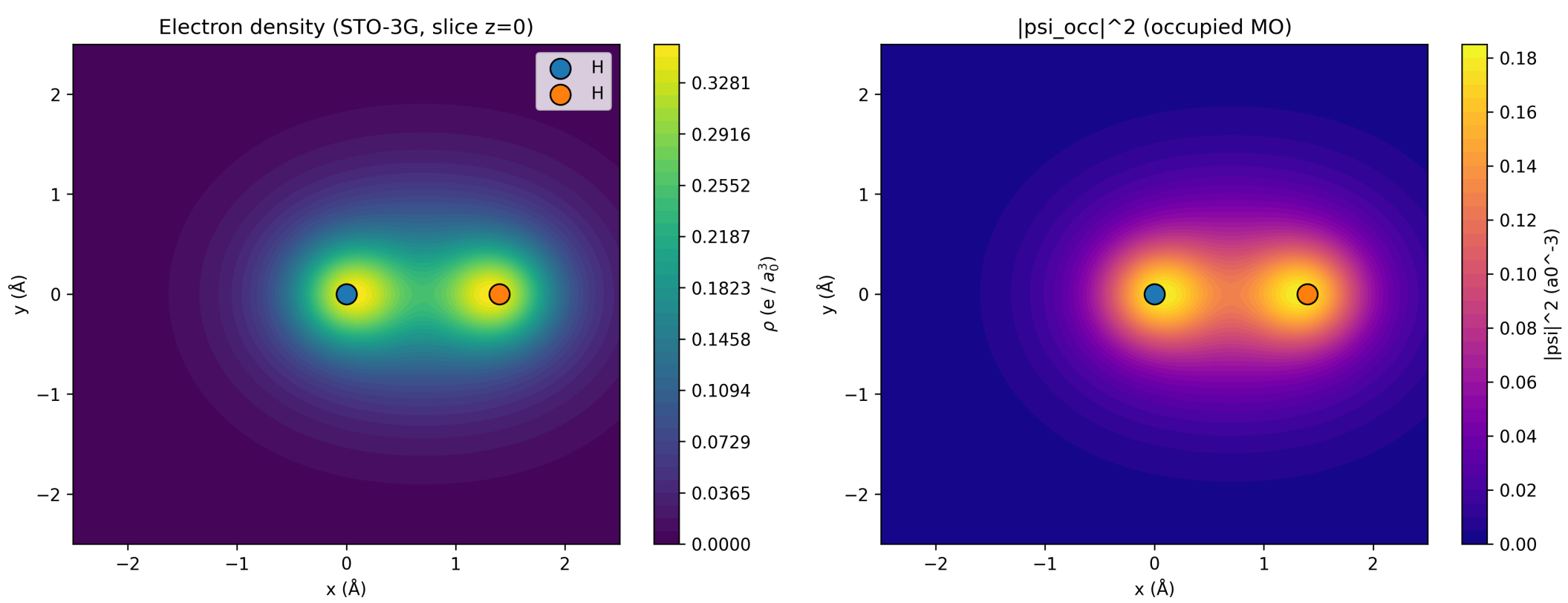
donde  $\mathbf{F}$  es el operador de Fock,  $\mathbf{S}$  la matriz de traslape,  $\mathbf{C}$  coeficientes de los orbitales moleculares y  $\boldsymbol{\varepsilon}$  energías orbitales (teorema de Koopmans).

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu}^{\text{core}} + \sum_{\lambda\sigma} P_{\lambda\sigma} \left[ (\mu\nu|\lambda\sigma) - \frac{1}{2}(\mu\sigma|\lambda\nu) \right],$$
$$P_{\mu\nu} = 2 \sum_a^{N/2} C_{\mu a} C_{\nu a}^*$$

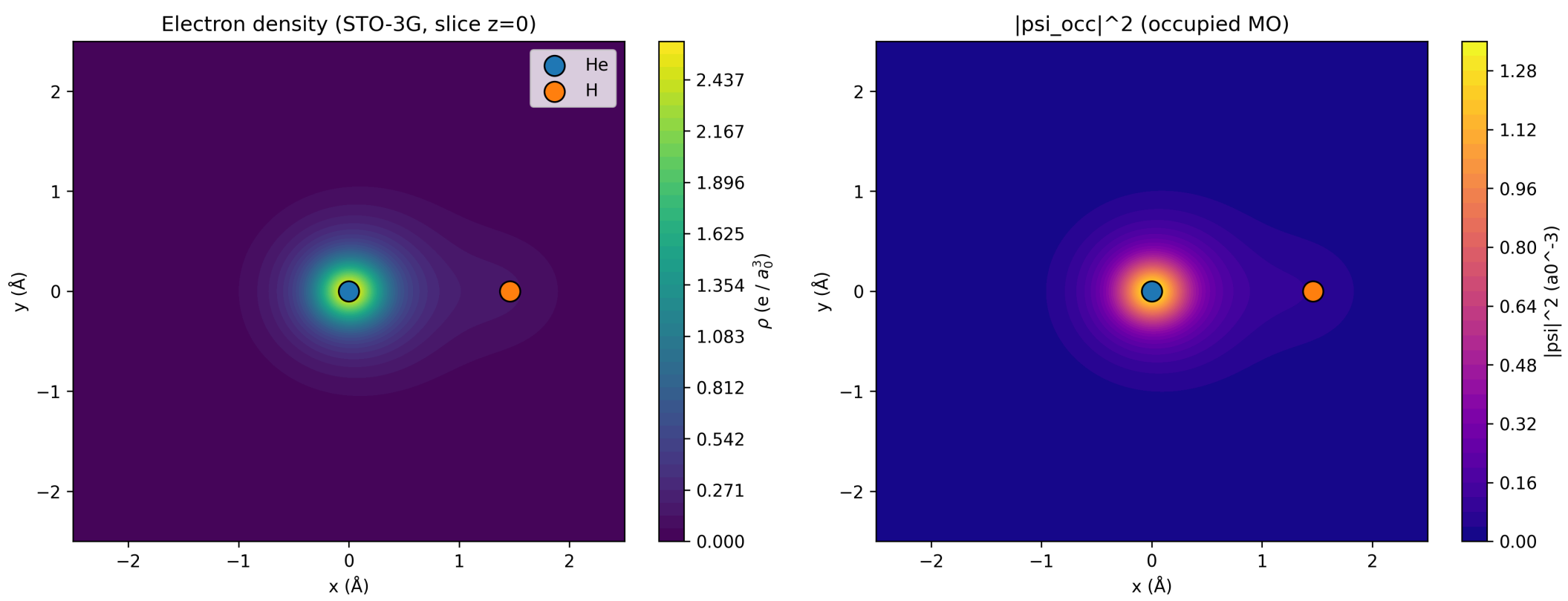
### Ciclo SCF (esquema):



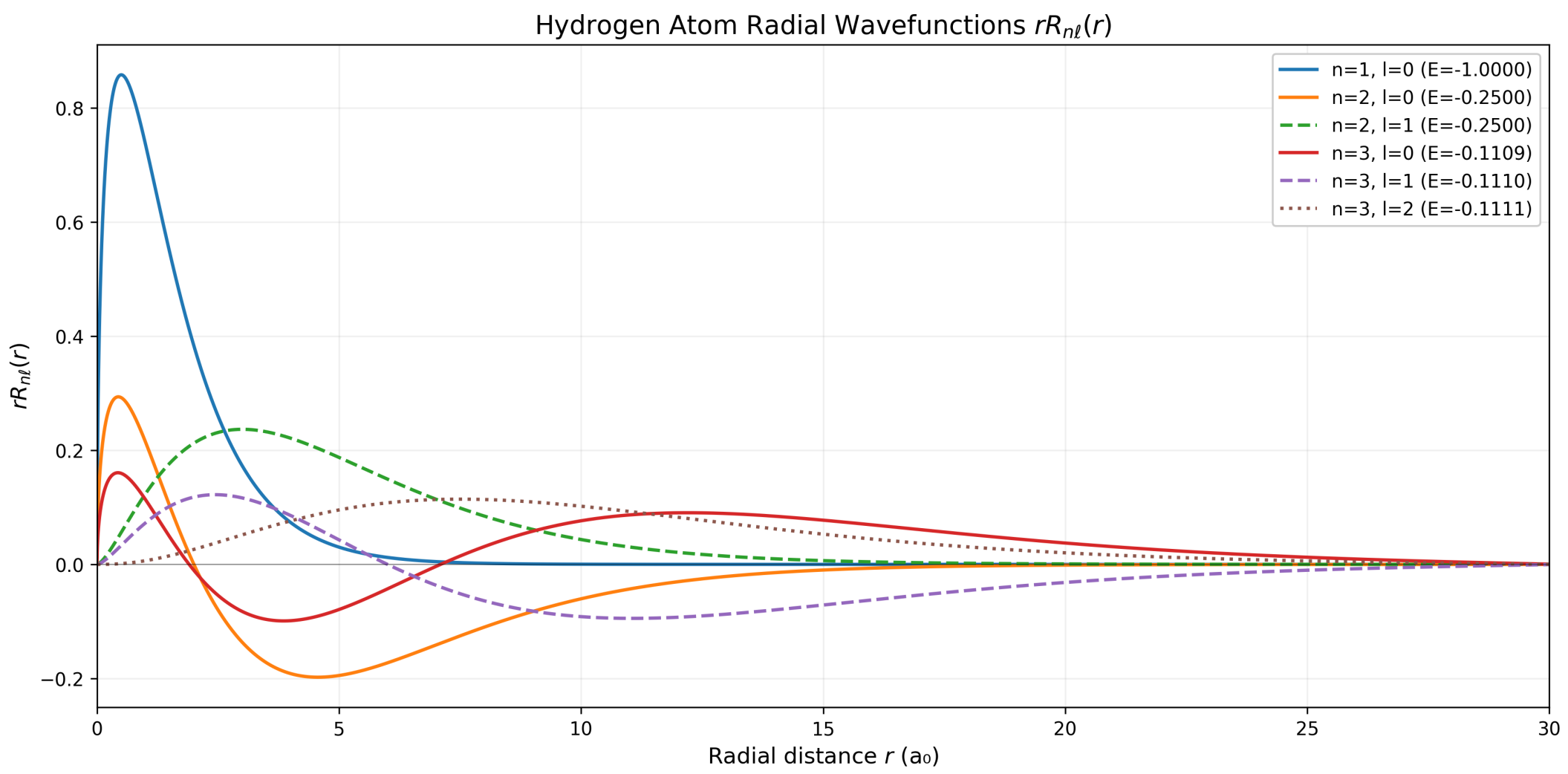
## Resultados RHF



Densidad electrónica RHF para  $\text{H}_2$  (plano  $z = 0$ ).



Densidad electrónica RHF para  $\text{HeH}^+$  (plano  $z = 0$ ).



Curva  $E_{\text{tot}}(R)$  para  $\text{HeH}^+$  (HF).

## Extensiones útiles (HF/Python)

### Mulliken (cargas y orden de enlace):

$$G_A = \sum_{\mu \in A} \sum_{\nu} P_{\mu\nu} S_{\nu\mu}, \quad q_A = Z_A - G_A, \quad BO_{AB} = \sum_{\mu \in A} \sum_{\nu \in B} P_{\mu\nu} S_{\nu\mu}.$$

**Brecha HOMO–LUMO vs.  $R$ :** estabilidad y carácter del enlace.

### Estrategia de código (repo):

## Conclusiones

- ▶ Numerov y RHF acercan la MQ computacional al aula: **reproducible y extensible**.
- ▶ Las implementaciones en Python permiten conectar teoría, cómputo y visualización.
- ▶ El sitio web (QR) ofrece derivaciones completas y animaciones adicionales.

## Código y material extendido



<https://github.com/recore799/schrodinger1d>