

Introducción y Motivación

La enseñanza tradicional de la mecánica cuántica suele centrarse en problemas analíticos (pozos infinitos, osciladores armónicos, átomos de hidrógeno). Sin embargo, en este curso se enfatiza fuertemente en métodos computacionales para explorar sistemas más complejos.

Este proyecto desarrolla una **librería educativa en Python** que permite resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger para distintos sistemas y visualizar sus soluciones. El objetivo principal es crear una *herramienta pedagógica* que refuerce la comprensión conceptual, promueva el aprendizaje activo y fomente el uso de la computación.

“Lo que no se puede simular, no se comprende.”

Metodología y Herramientas

Librería Computacional en Python	Marco Pedagógico
<ul style="list-style-type: none">▪ Código abierto: Implementado en Python con NumPy, SciPy y Matplotlib. El repositorio está disponible en GitHub para promover el aprendizaje colaborativo.▪ Módulo <code>numerov.py</code>: Implementa el método de Numerov para resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional.<ul style="list-style-type: none">• Aplicaciones: oscilador armónico, parte radial del átomo de hidrógeno.▪ Módulo <code>hartreefock.py</code>: Implementa el método de Hartree–Fock mediante el esquema SCF para sistemas multielectrónicos simples.<ul style="list-style-type: none">• Aplicaciones: moléculas H_2, HeH^+.▪ Visualización: Generación de funciones de onda, densidades de probabilidad y espectros energéticos.	<ul style="list-style-type: none">▪ Nuevas herramientas: Se introduce la taxonomía de sistemas cuánticos:<ul style="list-style-type: none">• Sistemas de un cuerpo (oscilador, pozo).• Sistemas de muchos cuerpos (átomos, moléculas).▪ Estudio de casos: Se analizan casos clásicos y se comparan con resultados computacionales para validar la precisión del código.

Resultados y Aplicaciones

La librería permite obtener representaciones gráficas directas de conceptos cuánticos abstractos. Todos los resultados mostrados fueron generados automáticamente con nuestro código.

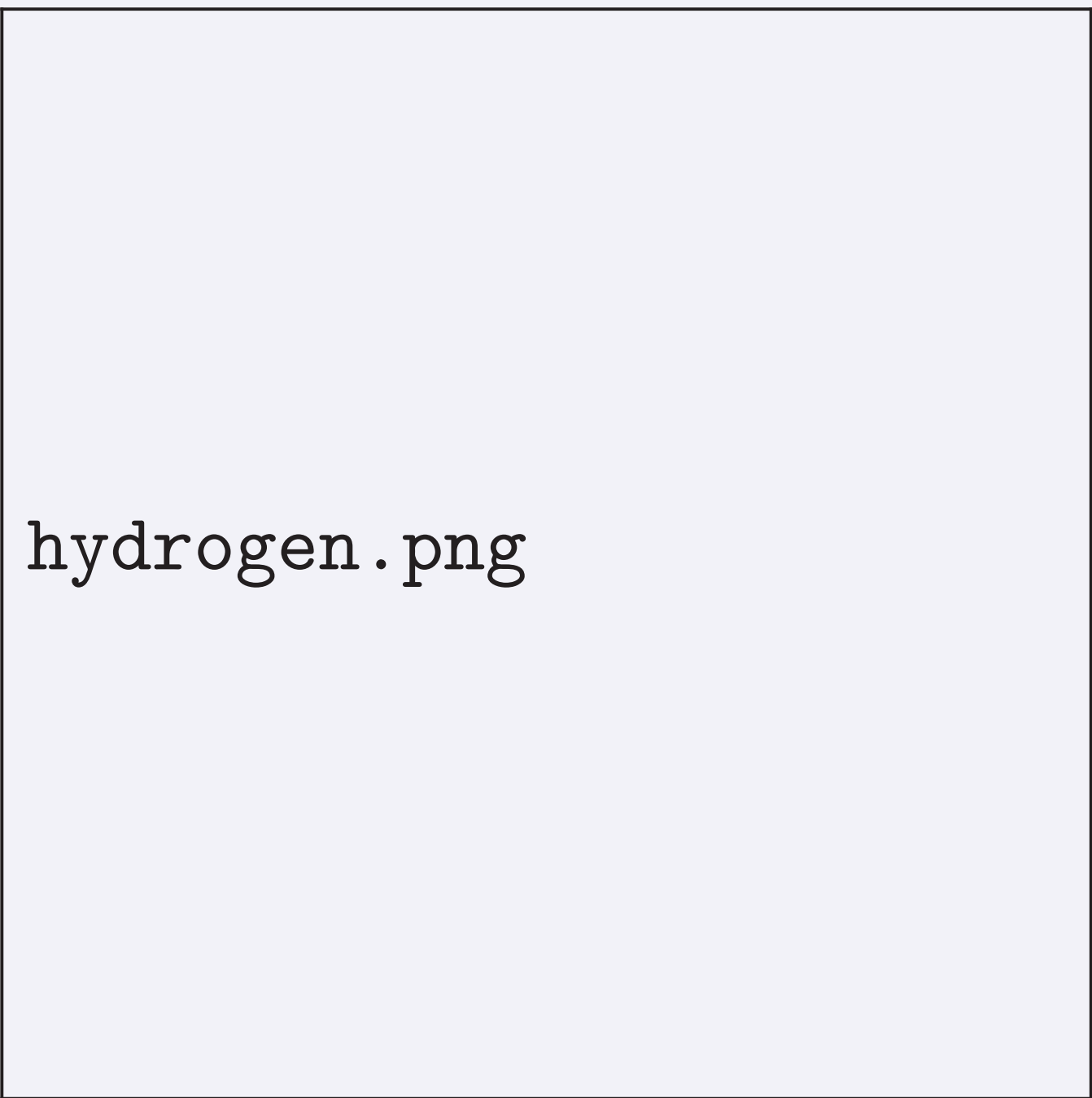


Figura 1: Funciones radiales $R_{n0}(r)$ del átomo de hidrógeno.

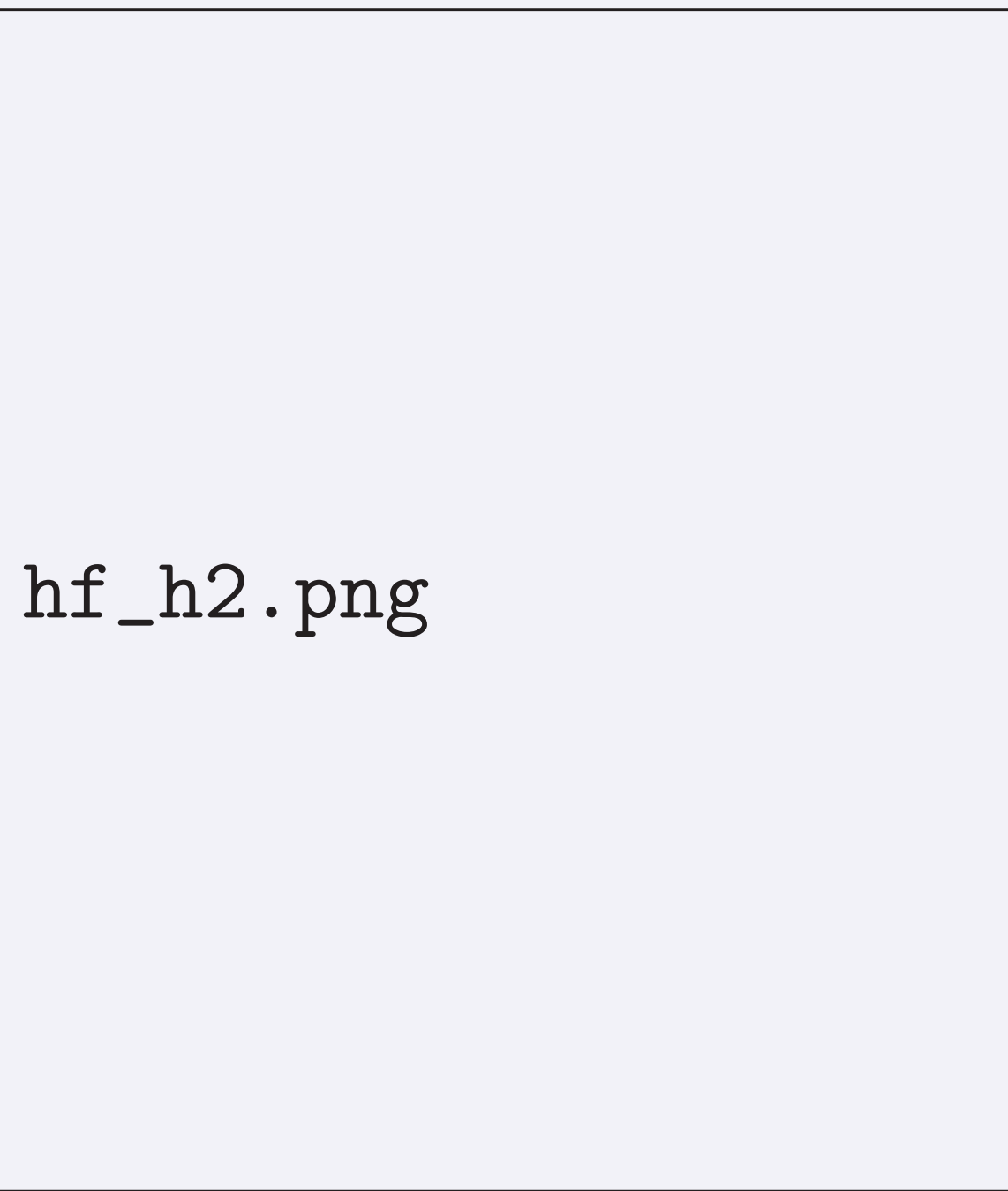


Figura 2: Densidad de probabilidad electrónica para la molécula de hidrógeno (H_2).

Los estudiantes pueden extender el código para estudiar potenciales más complejos y comparar resultados con experimentos.