



“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 (H_2 , HeH^+).
- ▶ Objetivo docente: avanzar de *comprender/aplicar* a *analizar/evaluar/crear*.

Método de Numerov (1D)

Ecuación de Schrödinger 1D:

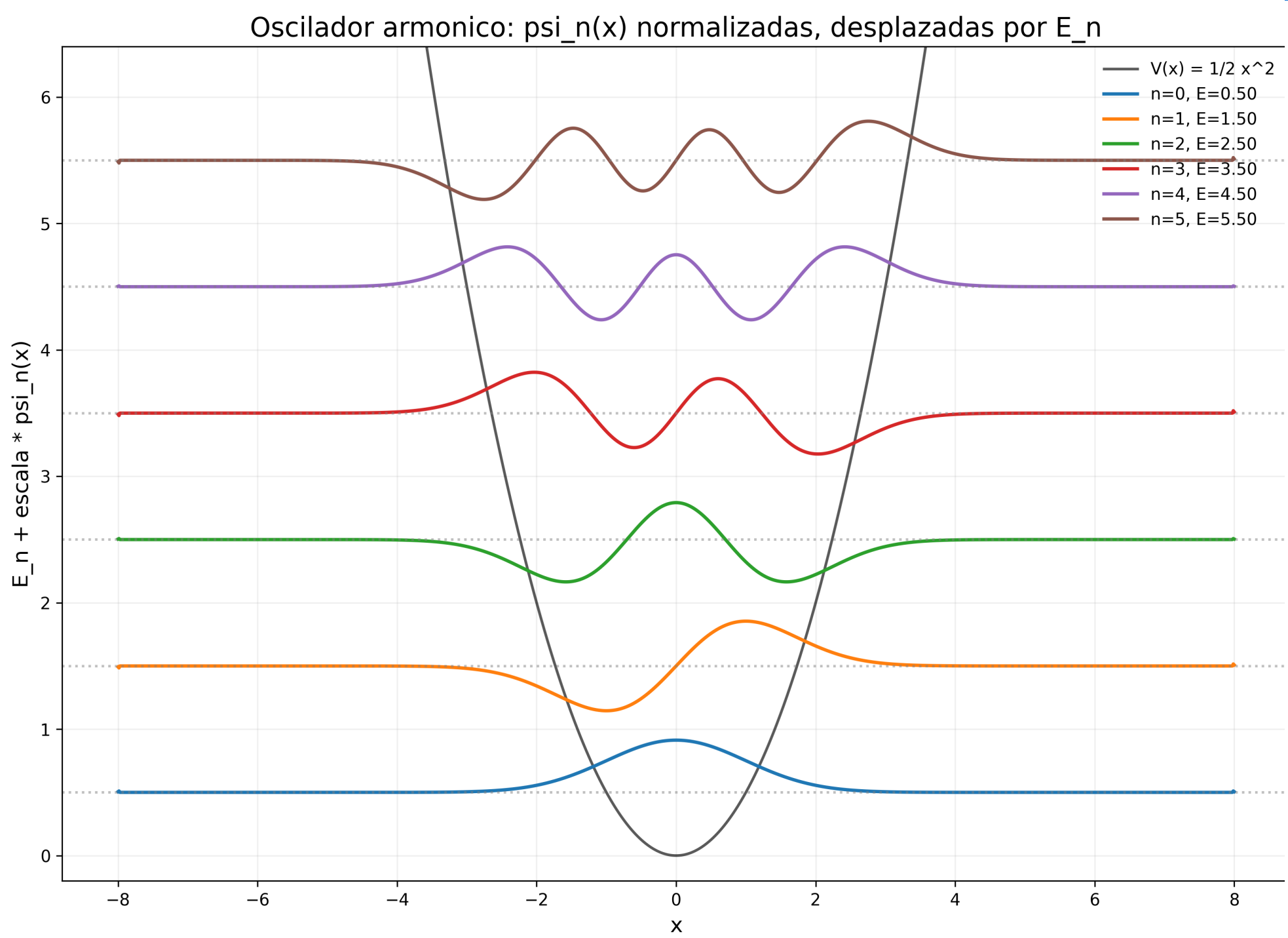
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

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

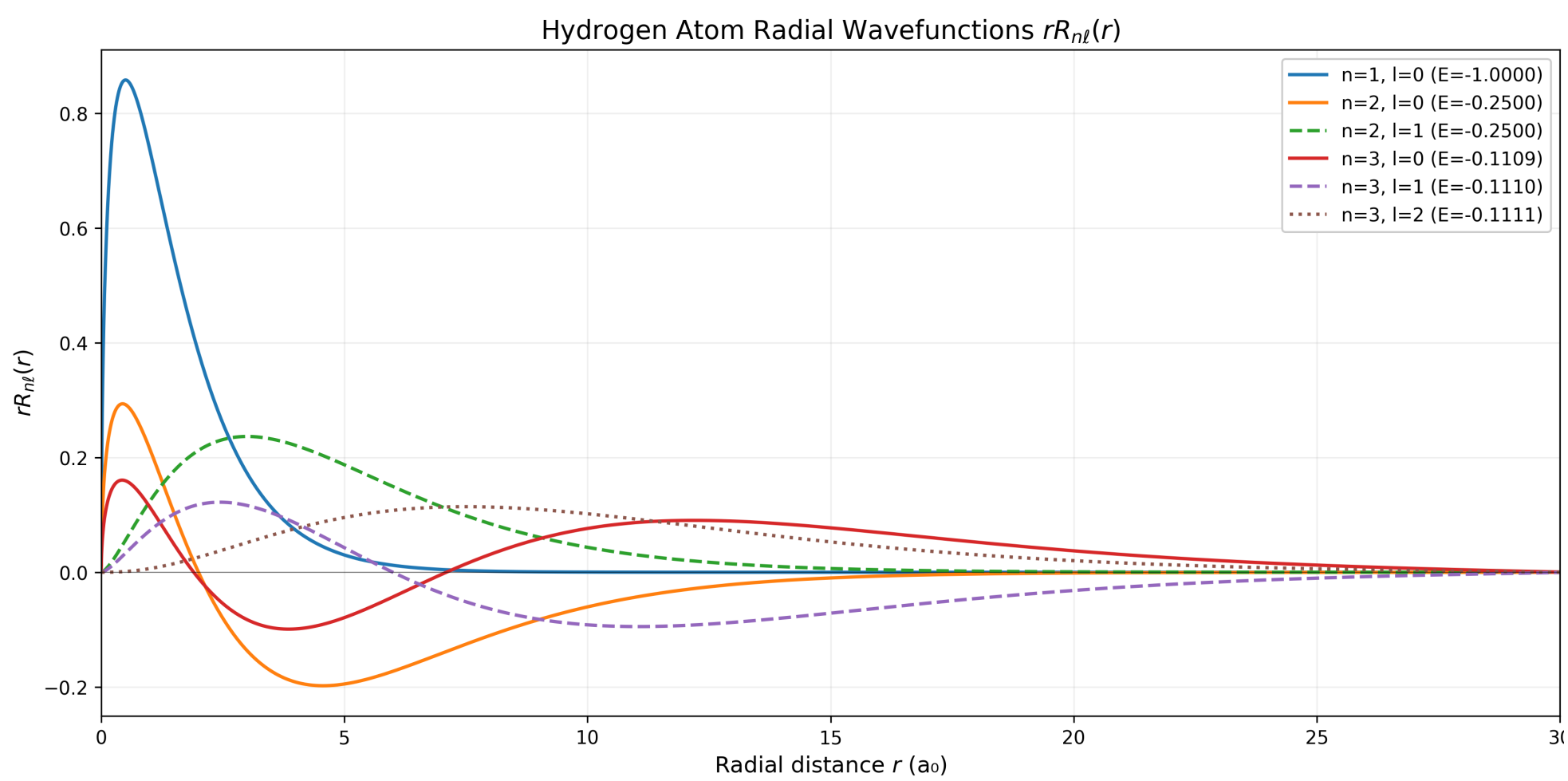
$$\psi_{n+1} = \frac{2(1 - \frac{5}{12}h^2f_n)\psi_n - (1 + \frac{1}{12}h^2f_{n-1})\psi_{n-1}}{1 + \frac{1}{12}h^2f_{n+1}}.$$

Notas didácticas breves:

- ▶ Precisión de orden 6, estable para potenciales suaves.
- ▶ Discretización de frontera 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

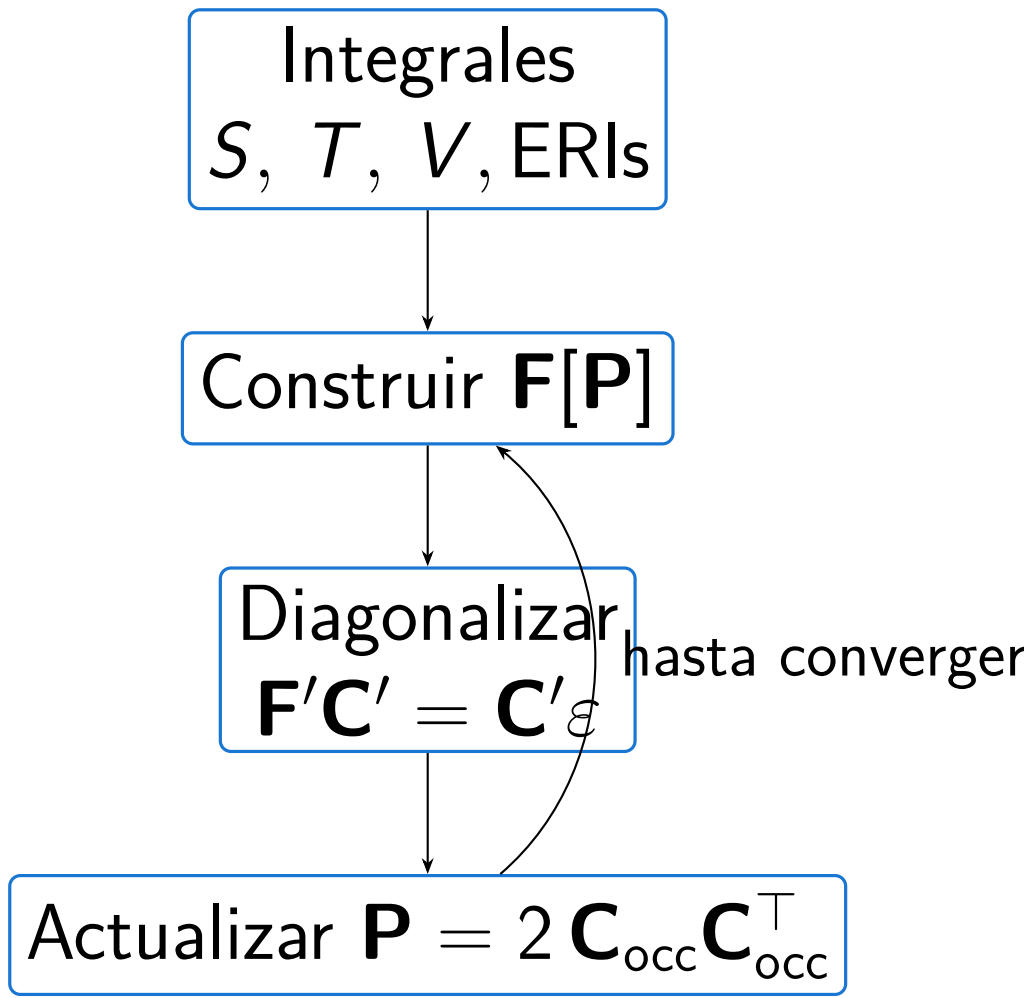
Ecuaciones de Roothaan–Hall:

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

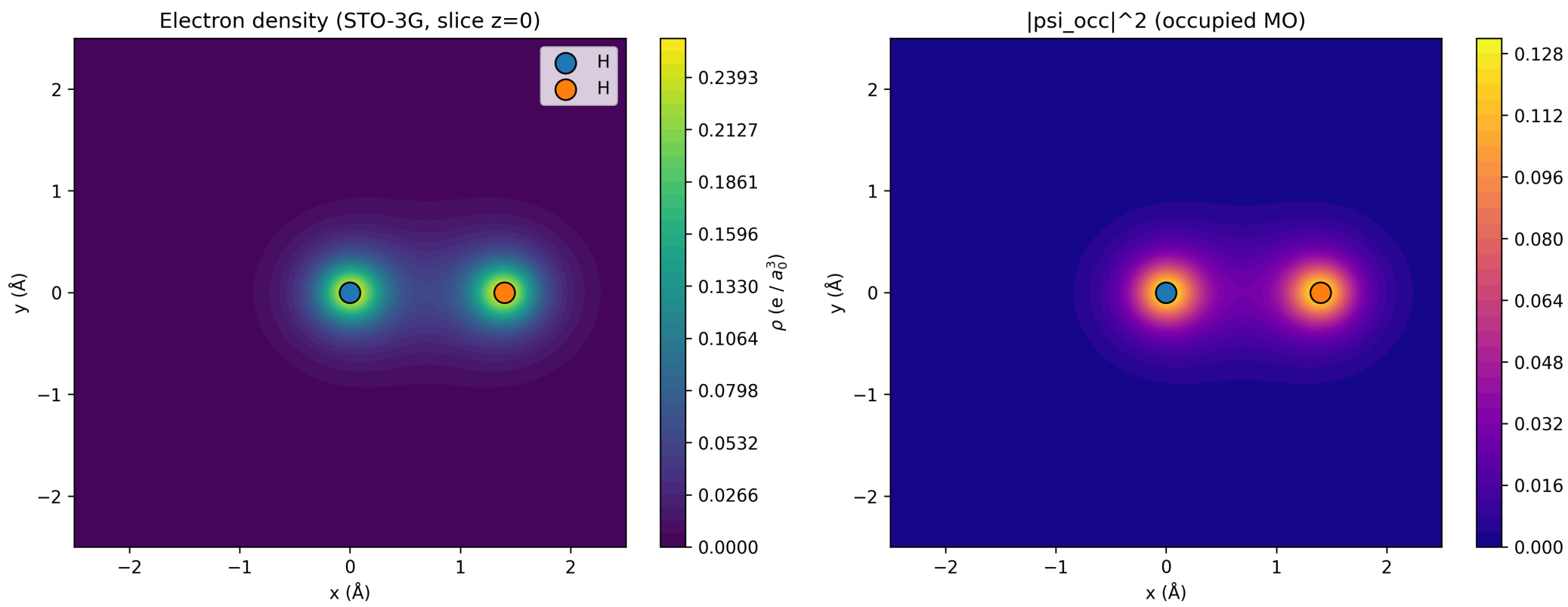
donde \mathbf{F} es el operador de Fock, \mathbf{S} la matriz de traslape, \mathbf{C} coeficientes de los orbitales moleculares y $\boldsymbol{\varepsilon}$ energías orbitales (teorema de Koopmaans).

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

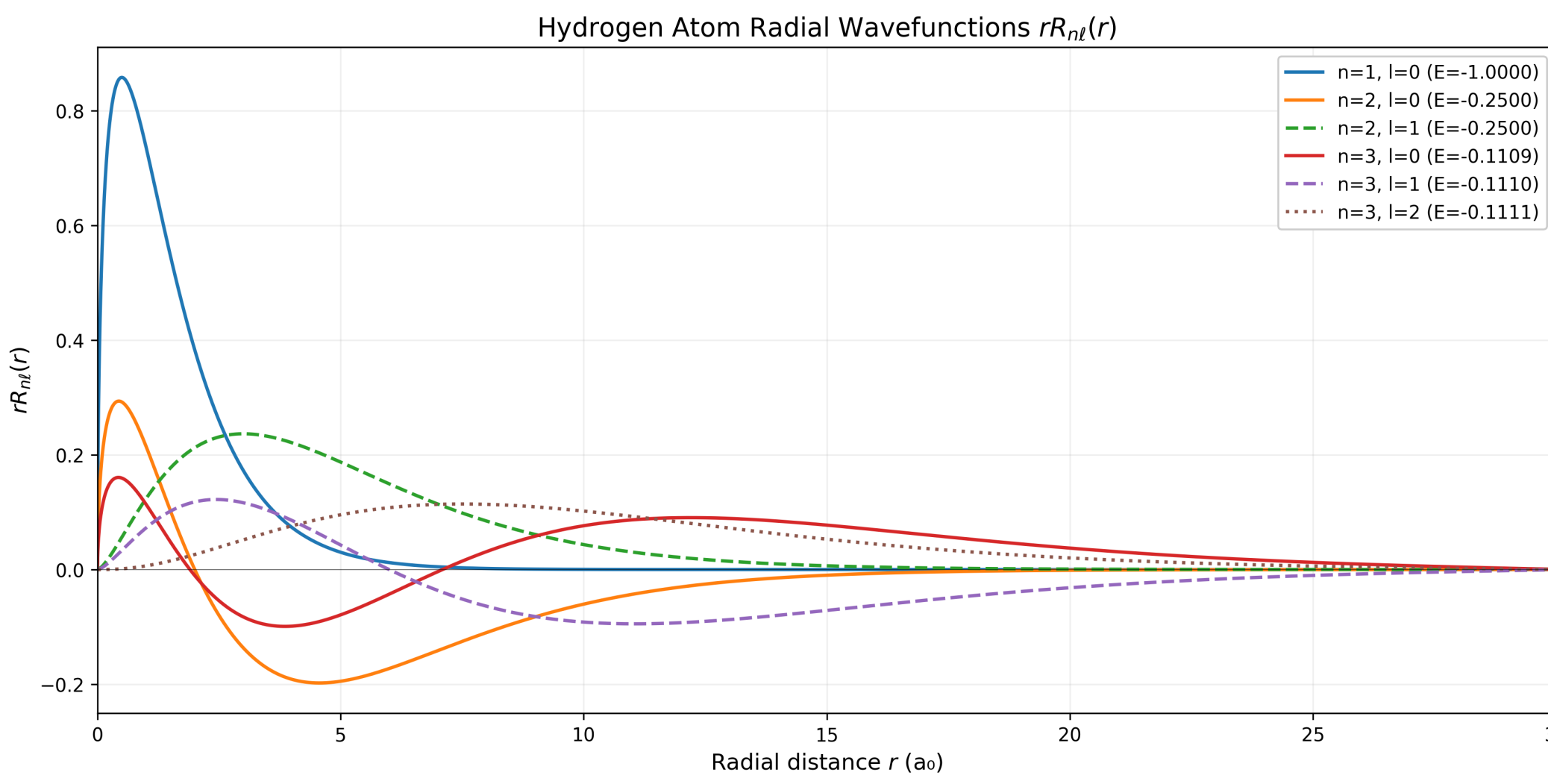
Ciclo SCF (esquema):



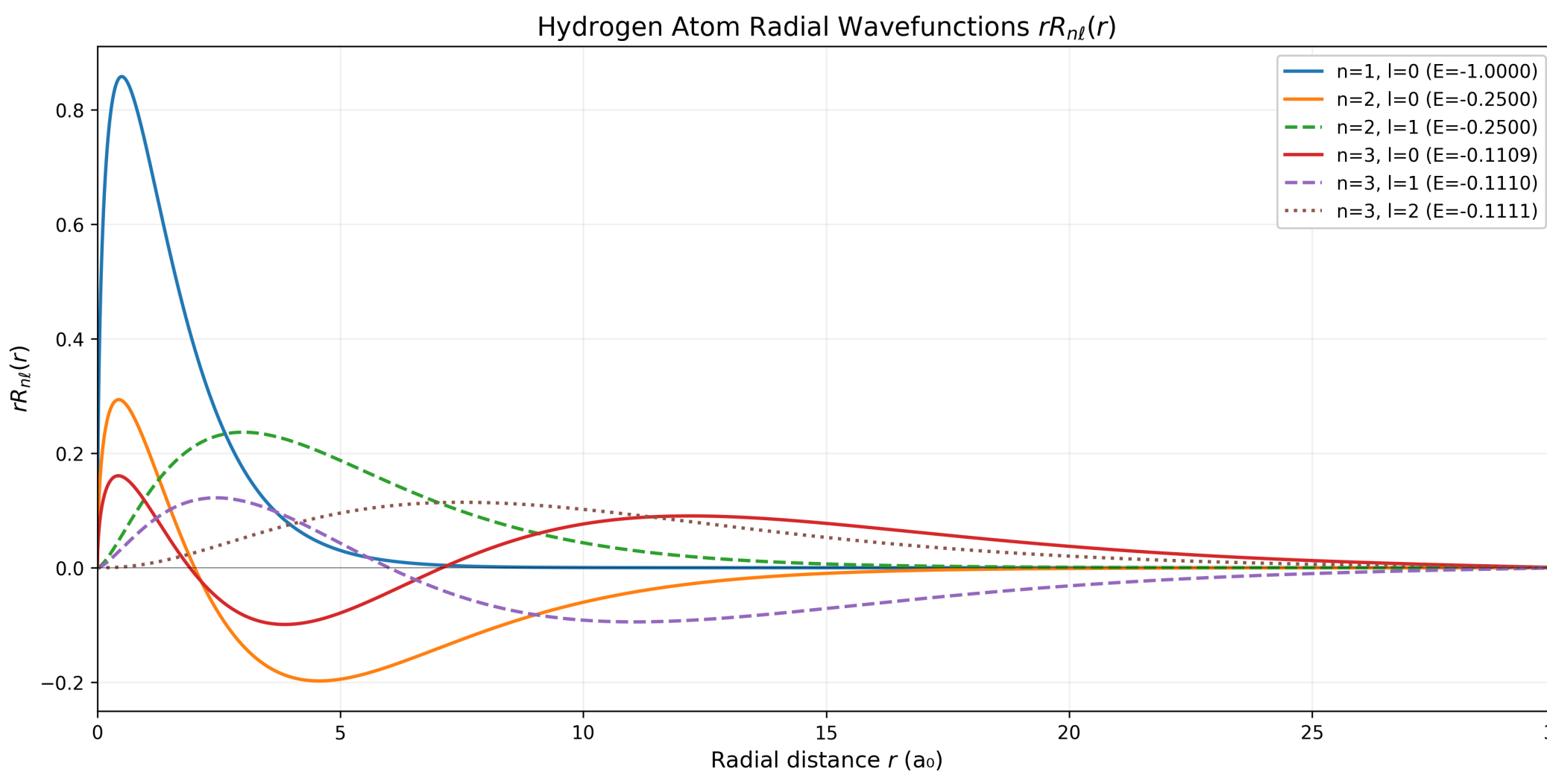
Resultados RHF



Densidad electrónica RHF (plano $z = 0$).



Curva $E_{\text{tot}}(R)$ para H_2 (HF).



Curva $E_{\text{tot}}(R)$ para 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):

- ▶ src/numerov/: integrador y scripts OA/H.
- ▶ src/hf/: SCF (RHF), helpers de grilla para MO/densidad.
- ▶ examples/: *PEC H_2* , *PEC HeH^+* , *MO maps*, *Mulliken*.
- ▶ docs/ (GitHub Pages): animaciones y derivaciones completas.

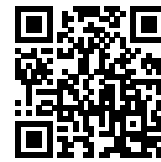
Notas prácticas:

- ▶ Base mínima s-GTO \Rightarrow visualización rápida de σ_g , σ_u .
- ▶ Densidad en cortes 2D para el póster; 3D/isosuperficies en la web.

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>