

Explorando Sistemas Cuánticos con Python: Una guía para el salón de clases.

Rafael Corella, Bryan Campa, Carlos Felix, Dr. Adrian Duarte
Universidad de Sonora

Introducción

Se desarrollaron implementaciones desde cero de los métodos computacionales fundamentales en la física cuántica: el método de **Numerov** y el método de **Hartree-Fock**. El propósito de este trabajo no es solo resolver sistemas cuánticos simples, sino fomentar un pensamiento de orden superior mediante la construcción explícita de los algoritmos que subyacen a la teoría.

El estudio detallado de estos métodos permite al estudiante conectar la formulación matemática con su representación numérica, desarrollando intuición física y criterio computacional.

Método de Hartree-Fock

El método de Hartree-Fock aproxima el estado fundamental de un sistema de N electrones mediante un determinante de Slater que minimiza la energía total bajo el principio variacional. Este procedimiento conduce a las ecuaciones de Roothaan-Hall, resueltas iterativamente en un ciclo de campo medio (SCF):

$$\mathbf{FC} = \mathbf{SC}\epsilon \quad (1)$$

donde \mathbf{F} es la matriz de Fock, \mathbf{S} la de solapamiento, \mathbf{C} los coeficientes moleculares y ϵ los valores propios orbitales.

- Proporciona las energías y los orbitales moleculares en el marco del campo medio.
- La densidad electrónica $\rho(\mathbf{r})$ describe la distribución espacial de carga en el sistema.
- Constituye la base para métodos de correlación electrónica y DFT.

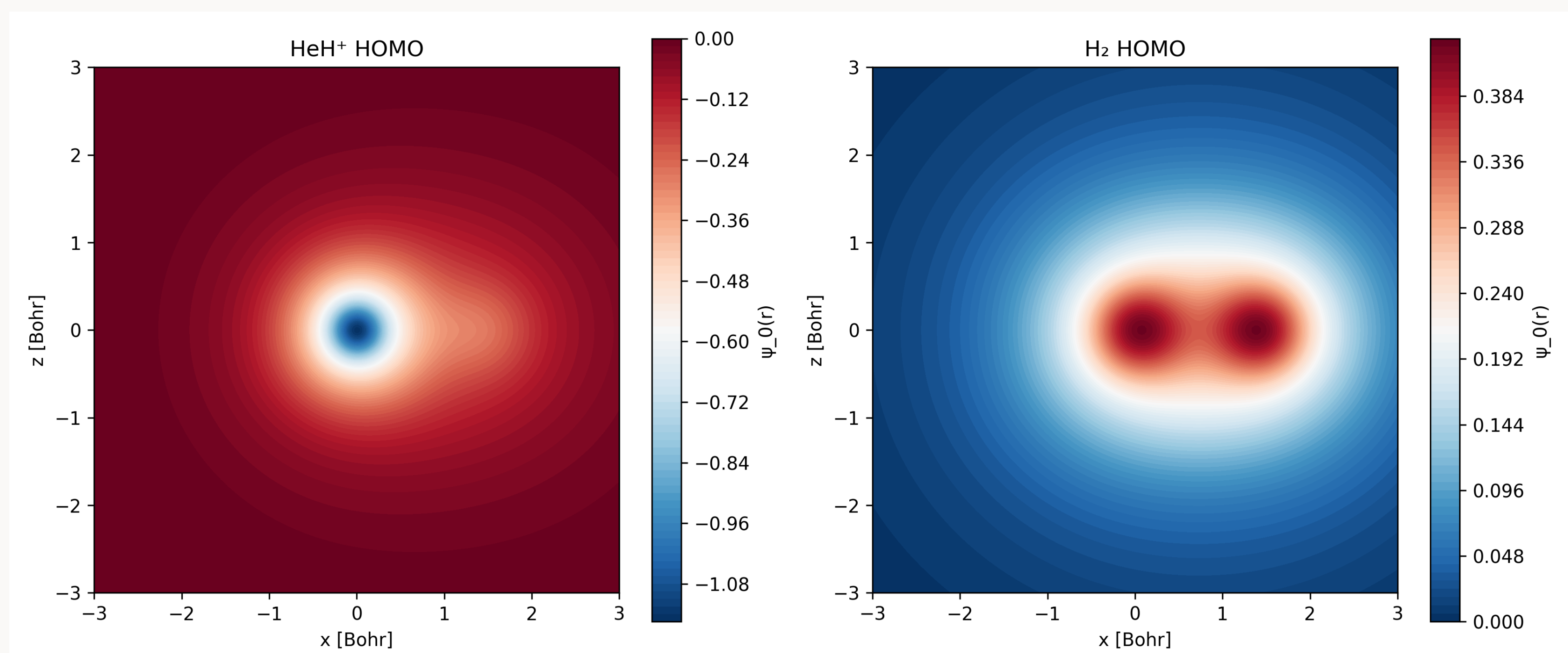


Figura 1: Rebanada xz de Orbitales Moleculares para H_2 y HeH^+ .

Numerov

El método de Numerov permite integrar ecuaciones diferenciales de segundo orden como la ecuación de Schrödinger adimensional:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} = -2 \left(\epsilon - \frac{\xi}{2} \right) \Psi \quad (2)$$

Formula de recurrencia de Numerov:

$$\Psi_{n+1} = \frac{(12 - 10f_n)\Psi_n - f_{n-1}\Psi_{n-1}}{f_{n+1}} \quad (3)$$

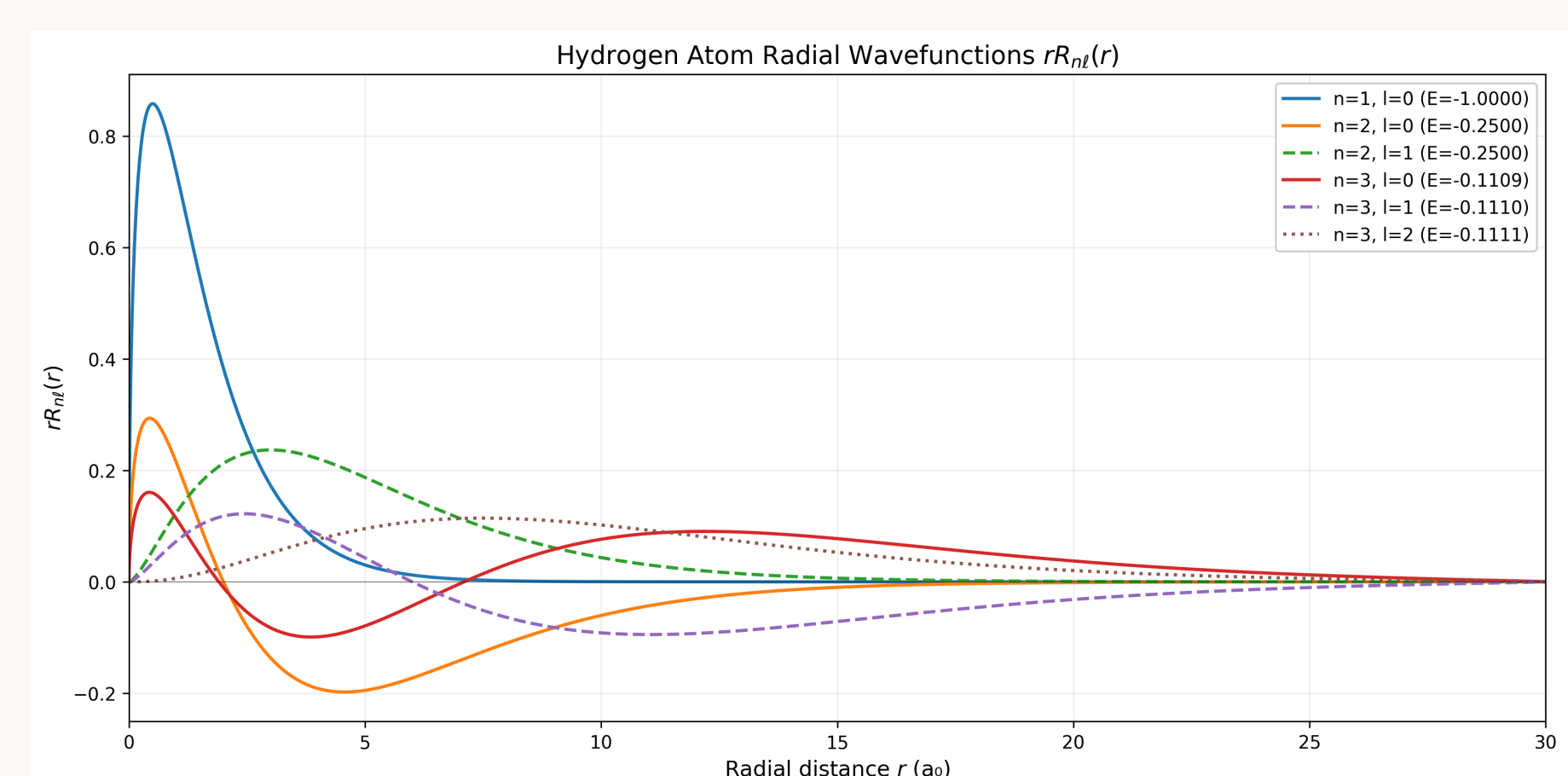
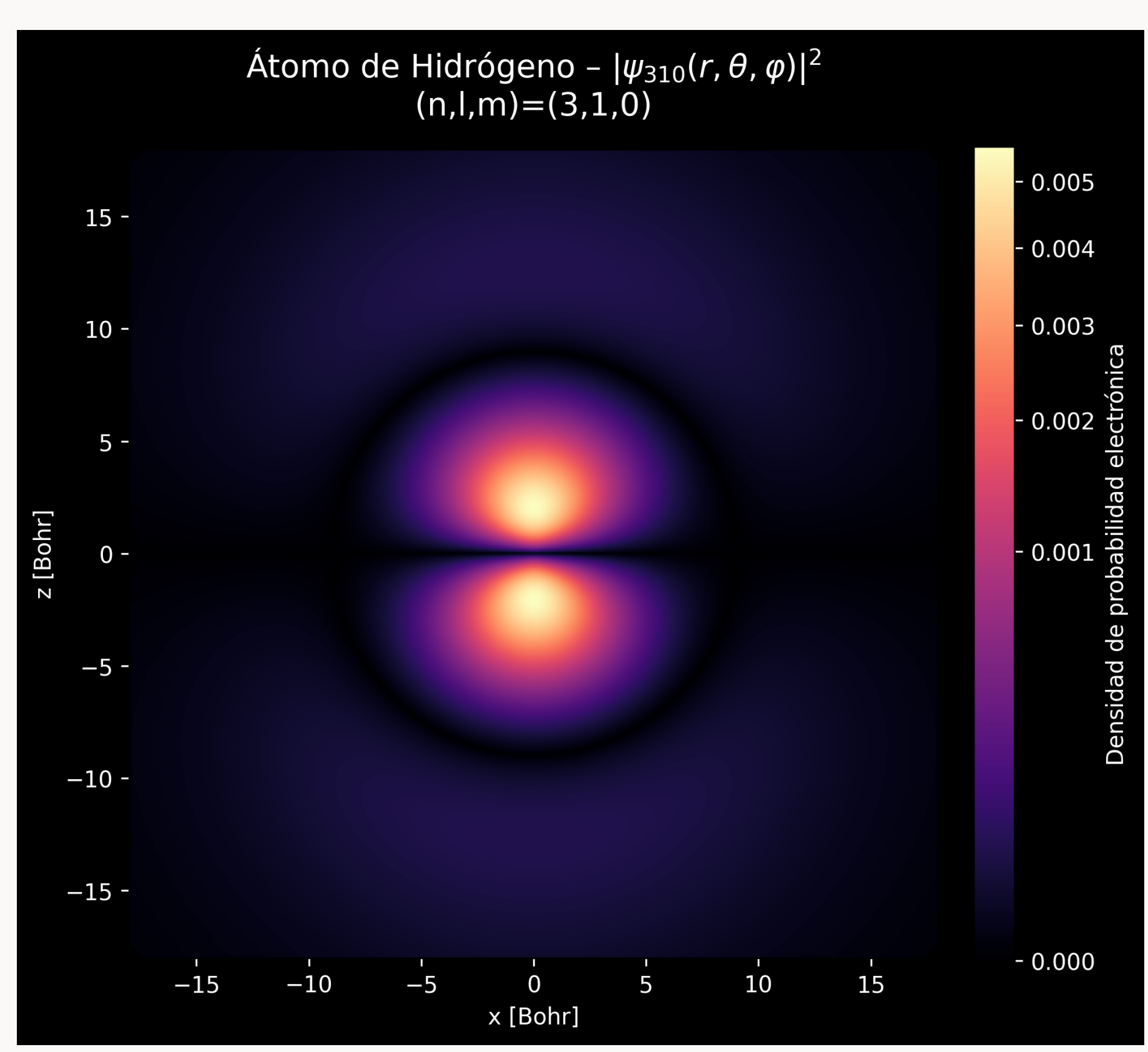


Figura 2: Funciones de onda radiales obtenidas con Numerov.

Átomo de Hidrógeno



Conclusiones

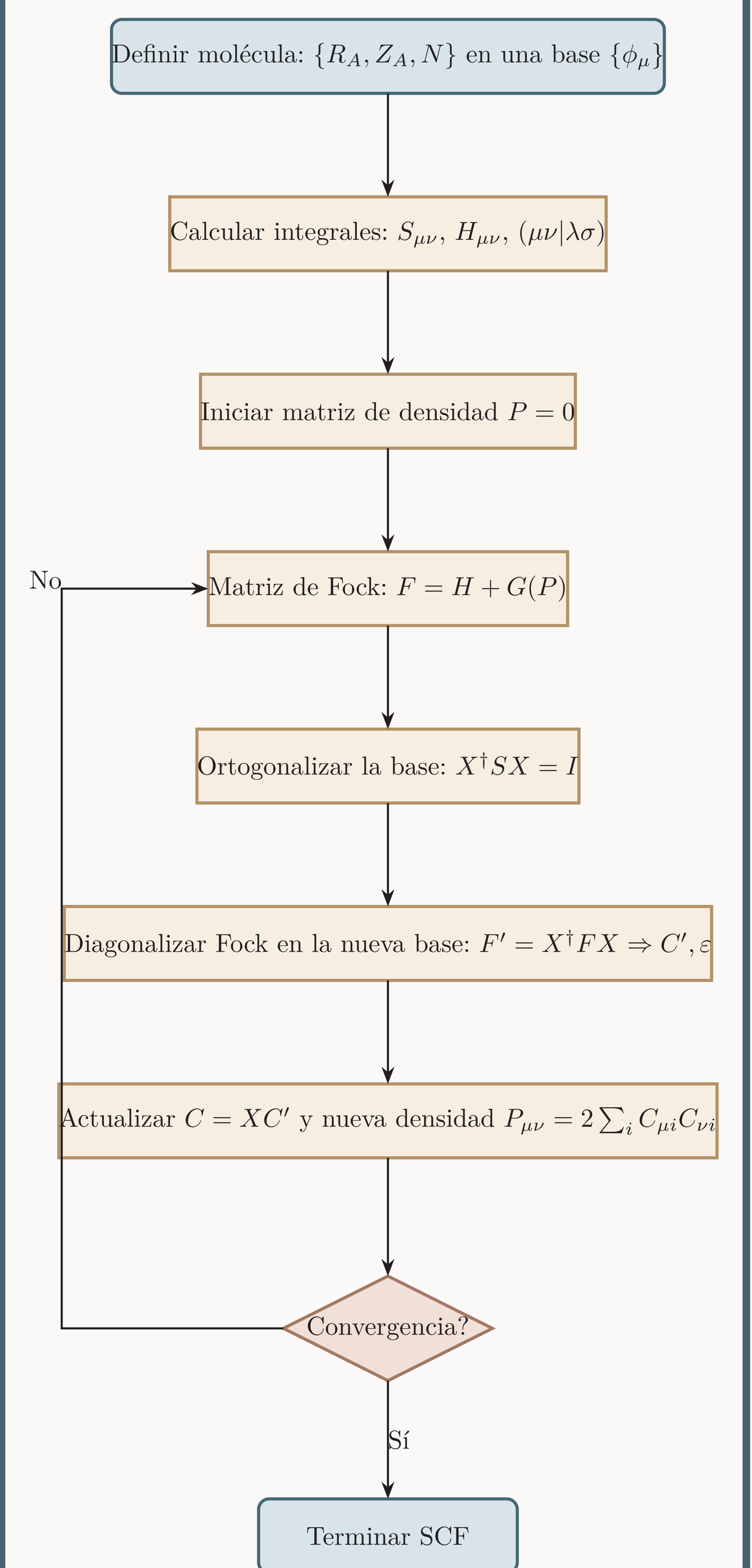
Comprender un método numérico desde su formulación hasta su implementación es una forma de investigación formativa. El proyecto busca que el estudiante no solo use algoritmos, sino que piense como el físico que los concibió.

Enfoque Pedagógico

El proyecto promueve el aprendizaje progresivo según la taxonomía de Bloom; desde comprender, hasta llegar a evaluar y crear.

A través del desarrollo de código, el estudiante transita desde la comprensión de la ecuación de Schrödinger hasta la creación de modelos autoconsistentes.

SCF



Repositorio

