

Seminario de investigación (Ecuaciones Diferenciales)
**Soluciones numéricas para Ecuaciones Diferenciales Parciales con aplicaciones a
Sistemas Cuánticos Confinados**

Dr. Ricardo Méndez Fragoso
rich@ciencias.unam.mx
(2024-2)

El objetivo del curso es conocer las soluciones y aplicaciones de la Ecuación de Schrödinger cuando ésta representa sistemas atómicos con restricciones geométricas. Con ello, las propiedades de las soluciones cambian, ya que la forma de obtener soluciones analíticas desaparece si las constricciones geométricas no son compatibles con las coordenadas del sistema a modelar. Hoy en día, el estudio de este tipo ecuaciones permite que se puedan estudiar sistemas mucho más apegados a la realidad y cuyas aplicaciones se encuentran en las áreas de nanotecnología y espectroscopía de alta precisión. En particular en este seminario se estudiarán y modelarán sistemas que combinan las geometrías cartesiana, cilíndrica y esférica de la Ecuación de Schrödinger, así como sus respectivas aplicaciones a sistemas reales.

Temario

1. Soluciones analíticas y numéricas de la Ecuación de Schrödinger.
 1. Soluciones en coordenadas esféricas y cilíndricas.
2. Métodos numéricos para soluciones estacionarias de la Ecuación de Schrödinger.
 1. Problema de Eigenvalores.
 2. Comparación entre soluciones numéricas y analíticas para algunos casos representativos.
3. Aplicaciones e implicaciones de soluciones de la Ecuación de Schrödinger para sistemas cuánticos confinados.
 1. Sistemas atómicos dentro de cavidades esféricas y cilíndricas.
4. Soluciones dependientes del tiempo y utilización de cómputo en paralelo para acelerar la obtención de soluciones numéricas.

Bibliografía

1. P O Fröman, S Yngve and N Fröman. The energy levels and the corresponding normalized wave functions for a model of a compressed atom. *Journal of Mathematical Physics*. 28, 1813–1826 (1987)
2. R. Cabrera-Trujillo, R. Méndez-Fragoso and S. A. Cruz. Pressure effects on the dipole oscillator strength, polarizability, and mean excitation energy of a hydrogen impurity under cylindrical confinement: off-center axis effect. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, (50) 13, 135002.
3. V C Aguilera-Navarro, E L Koo, A H Zimmerman and H Iwamoto. Quantum quadratic-attractive plus quartic repulsive potential in a box. *J. Phys. A: Math. Gen.* **15** 73. 1982.
4. K Sen. *Electronic Structure of Quantum Confined Atoms and Molecules*. Springer Cham. 2014.
5. B Çakır, Y Yakar, A Özmen. Calculation of oscillator strength and the effects of electric field on energy states, static and dynamic polarizabilities of the confined hydrogen atom. *Optics Communications* 311, 15 January 2013, Pages 222-228.
6. R. Cabrera-Trujillo and S. A. Cruz. Confinement approach to pressure effects on the dipole and the generalized oscillator strength of atomic hydrogen. *Phys. Rev. A* **87**, 012502.