Reporte de actividades.

Dr. Ricardo Méndez Fragoso.

1. Resumen: En este proyecto se realizan cálculo de alta precisión para sistemas cuánticos confinado. En particular se aborda el estudio de un sistema atómico confinado en una cavidad cilíndrica que asemeja la estructura de un nanotubo o de un cristal dependiendo de los valores de la altura y el radio del cilindro. Esta cavidad tiene la propiedad de que es penetrable con la finalidad de que la impureza atómica tenga todos los estados ligados y se puedan estudiar las propiedades del material confinante. El objetivo principal de estas simulaciones es obtener el espectro de energías dependiendo de la posición de la impureza dentro del cilindro y calcular las propiedades ópticas del material confinante.

2. Avances: Se envió a publicación 1 artículo con los cálculo que se pudieron realizar y se participó en un congreso internacional en los que se presentaron los resultados de los cálculos realizados.

3. Cálculos realizados: Los cálculos realizados se concentraron en utilizar diferencias finitas para resolver la ecuación de Schrödinger de un átomo de hidrógeno en una cavidad cilíndrica para obtener propiedades de energía, polarizabilidad y respuesta óptica del material confinante.

4. Software utilizado: Julia

5. Recursos utilizados: GPU y procesamiento en paralelo.

6. Lista de colaboradores:

   (a) Remigio Cabrera Trujillo.
   (b) Salvador A. Cruz.

7. Publicaciones

   (a) 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, (Enviado a publicación: Enero 2016).

8. Trabajos en congresos

   (a) **R. Méndez-Fragoso** y R. Cabrera-Trujillo. *"Cálculo del espectro y propiedades de un paquete de ondas ultrafrío en una guía de onda con varias impurezas".* VIII Taller de colisiones inelásticas en la materia. Playa del Carmen, Quintana Roo, México. 11 al 14 de diciembre de 2016.