



Implementación del método de elemento finito para el estudio de la estructura electrónica de moléculas diatómicas confinadas

Raymundo Hernández-Esparza¹, Jorge Garza-Olguín¹

¹Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. San Rafael Atlixco 186. Col. Vicentina. Iztapalapa. C.P. 09340, Ciudad de México; México
e-mail: rayhe88@gmail.com

El avance actual en la ciencia y la tecnología a llevado al ser humano a poder manipular los sistemas a escala nanométrica, a estas escalas la correcta descripción de los sistemas físicos, se da por la ecuación de Schrödinger. Si se manipulan las dimensiones de los sistemas del orden de la longitud de onda de de Broglie del electrón, se habla de sistemas cuánticos confinados.

Los sistemas cuánticos confinados presentan nuevas propiedades que difieren del análogo libre.[1,2] Por otro lado los modelos de confinamiento resultan adecuados para simular la presión externa, por lo tanto, es posible calcular la estructura electrónica bajo efectos de alta presión, similares a los existentes en núcleos planetarios.

Para el caso de confinamiento molecular existen escasos reportes en la literatura, siendo un tema poco explorado por la complejidad que impone resolver las ecuaciones de Hartree-Fock o Kohn-Sham con restricciones espaciales. Hasta el momento sabemos solamente de trabajos que abordan sistemas con 1 o 2 electrones.[3]

En el presente trabajo, resolvemos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para sistemas diatómicos, empleando el método de elemento finito (MEF). En este método, las condiciones de frontera dadas como condiciones Dirichlet aparecen de forma natural dentro de la formulación;[4] éstas nos permiten manipular el confinamiento de una forma relativamente sencilla. La principal ventaja que mostramos en nuestra implementación es el evitar conjuntos de funciones de base y sobre todo la optimización de exponentes que se tiene de manera intrínseca.

[1] Cortés-Santiago A., Vargas R., y Garza J. J. Mex. Chem Soc 56(3), 270 (2012).

[2] Garza J., Hernández-Pérez J.-M., Ramírez J.-Z, y Vargas R., J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics 45, 015002 (2012).

[3] Cruz S. A., y Colín – Rodríguez R., Int. J. Quantum Chem. 109,3041(2009).

[4] Ramdas Ram-Mohan L., Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics, Oxford University Press, 2002. New York.