



Casa abierta al tiempo
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

DR. JUAN MORALES CORONA

Jefe del Departamento de Física

CdMx a 3 de octubre de 2025.

DR. ROMAN LINARES ROMERO
Presidente del Consejo Divisional de
Ciencias Básicas en Ingeniería
P R E S E N T E.

Después de haber revisado el informe de actividades realizadas por el **Dr. Norbeto Aquino Aquino**, durante su periodo sabático, me permito informarle a usted que, a mi juicio, los objetivos se cumplieron de forma satisfactoria.

De esta manera pongo a su consideración que se incluya en la orden del día de la próxima sesión del Consejo Divisional que usted preside la presentación del informe.

Sin más por el momento, quedo a sus órdenes para cualquier duda o aclaración al respecto.



A T E N T A M E N T E
"CASA ABIERTA AL TIEMPO"

DATOS GENERALES

Nombre del profesor: Norberto Aquino Aquino N° empleado: 12036
Departamento: Física Área: Mecánica
Teléfono particular: [REDACTED] Extensión UAM-I: [REDACTED] E-mail: [REDACTED]@xanum.uam.mx

DATOS DEL PERÍODO SABÁTICO SOLICITADO

N° meses solicitados: 18 Fecha de inicio: 6/11/2023 Fecha de terminación: 5/05/2025
Institución donde se realizará: UAM-Iztapalapa
Depto., Laboratorio, etc.: Departamento de Física, T-338
Domicilio de la institución: Av. Ferrocarril de San Rafael Atlixco 186, Iztapalapa
Teléfono: [REDACTED] Fax: [REDACTED] E-mail: [REDACTED]@xanum.uam.mx

OBJETIVOS DEL PERÍODO SABÁTICO

Realizar trabajo de investigación en Sistemas Cuánticos Confinados y en Medidas
Entrópicas de Información Cuántica, en colaboración con colegas nacionales y extranjeros
Finalizar la elaboración de mis notas para los cursos de Mecánica Cuántica I y II.
Finalizar la dirección de una tesis de Maestría y continuar con la dirección del trabajo doctoral de un estudiante.

METAS ALCANZADAS EN EL PERÍODO SABÁTICO

☐ Memorias in extenso en libro de resúmenes* ☒ Artículos de investigación en revista indexada* ☒ Presentaciones en congresos
☐ Libros o capítulos de libros ☐ Grado ☐ % Avance de estudios de posgrado
☒ Otros (especifique): Dirección de tesis de Maestría y Doctorado

* Indicar en anexo si se trata de trabajo publicado, aceptado o sometido

TIPO DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS

(Indique aquellas relacionadas con las actividades desarrolladas)

☒ Investigación

☒ Docencia

☐ Difusión

☐ Formación académica

☐ Formación profesional

☐ Entrenamiento técnico

☒ Otros (especifique): Formación de recursos humanos

RESUMEN DEL PLAN DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS

(El llenado de esta sección no sustituye el informe detallado de actividades)

Obtención del espectro de energías y propiedades electrónicas de algunos sistemas cuánticos confinados de uno y dos electrones;

átomo hidrogenoide confinado en una esfera impenetrable con el núcleo fuera del centro de la esfera, un electrón moviéndose sobre la superficie de un cono bajo la acción de la atracción de una carga positiva colocada en el ápice del cono y en presencia de campo magnético externo,

Propiedades entrópicas de los sistemas antes mencionados.

El estudio de las propiedades de inversión de la molécula de PH₃

PARA USO DEL JEFE DE DEPARTAMENTO

Después de haber evaluado el informe detallado de actividades del período sabático del interesado según los lineamientos establecidos para tal efecto; informo al Consejo Divisional que:

- ☒ Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
☐ Los objetivos SE cumplieron parcialmente
☐ Los objetivos NO se cumplieron
☐ NO se cumplió el propósito del sabático



Firma del Jefe de Departamento

04- Agosto - 2025

Fecha

PARA USO DEL CONSEJO DIVISIONAL

El Consejo Divisional, en su Sesión No. _____ del _____ sobre el Período sabático del interesado acordó que:

- ☐ Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
☐ Los objetivos SE cumplieron parcialmente
☐ Los objetivos NO se cumplieron
☐ NO se cumplió el propósito del sabático

Secretario del Consejo Divisional

*Además de este formato-resumen, el interesado deberá entregar su Informe detallado de actividades junto con la documentación probatoria correspondiente.

RESEARCH ARTICLE

The confined helium atom: An information-theoretic approach

C. R. Estañón¹ | H. E. Montgomery Jr.² | J. C. Angulo^{3,4} | N. Aquino¹ 

¹Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Ciudad de México, México

²Chemistry Program, Centre College, Danville, Kentucky, USA

³Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universidad de Granada, Granada, Spain

⁴Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Granada, Spain

Correspondence

N. Aquino, Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, CP 09340 CDMX, México.
Email: naa@xanum.uam.mx

Funding information

Universidad de Granada; Junta de Andalucía

Abstract

In this article, we study the helium atom confined in a spherical impenetrable cavity by using informational measures. We use the Ritz variational method to obtain the energies and wave functions of the confined helium atom as a function of the cavity radius r_0 . As trial wave functions we use one uncorrelated function and five explicitly correlated basis sets in Hylleraas coordinates with different degrees of electronic correlation. We computed the Shannon entropy, Fisher information, Kullback–Leibler entropy, Tsallis entropy, disequilibrium and Fisher–Shannon complexity, as a function of r_0 . We found that these entropic measures are sensitive to electronic correlation and can be used to measure it. As expected these entropic measures are less sensitive to electron correlation in the strong confinement regime ($r_0 < 1$ a.u.).

KEYWORDS

confined helium atom, disequilibrium, Fisher information, Fisher–Shannon complexity, Kullback–Leibler entropy, Shannon entropy, Tsallis entropy

1 | INTRODUCTION

Spatially confined quantum systems have become the subject of increasing attention because when a very high pressure is exerted on a physical system, its energy levels increase rapidly. However, not all of them grow with the same rate, and this results in the filling of the energy levels that may differ significantly from those of the compression-free system. As a consequence its physical properties can change drastically with high pressure. Notable changes are found in electronic structure, emission and absorption frequencies, half-lives of excited states, selection rules, polarizability, electronic affinity, chemical and ionization potential and so forth. Confined quantum systems can be used to model a wide variety of problems in physics and chemistry such as: atoms trapped in cavities, in zeolite channels, in fullerenes, the electronic structure of atoms and molecules subjected to high external pressures, the behavior of the specific heat of a monocrystal solid under high pressure, in the study of the proton–deuteron transformation as a source of energy in dense stars, in the theory of white dwarf stars, phase transitions caused by compression as in the collapse of the chemical bonding of H_2 [1–9] and so forth. This growing interest is also due to the fabrication of quantum systems of nanometric sizes with potential technological applications such as in quantum wires, dots and wells [10, 11].

In 1937 Michels et al. [12] studied the variation of the polarizability of the hydrogen atom subjected to high external pressures. They proposed a model in which a hydrogen atom is confined inside an impenetrable spherical cavity with the nucleus clamped in the center of a sphere of radius r_0 . This model is known as the confined hydrogen atom (CHA) [7, 13–16], and has been used to study how some physical properties behave in terms of pressure, such as: the hyperfine separation, given by the Fermi contact term, and the nuclear magnetic screening of the ground state. Emission frequencies, as well as the half-lives of some excited states [17, 18], and electronic properties of multi-electron atoms have been studied with it. The model has been extended to cavities of shapes other than spherical to study atoms and molecules trapped inside cavities.

After the confined hydrogen atom, the next most studied confined atom is the helium atom. Confined helium-like atoms are the simplest confined many-electron atoms, consisting of a nucleus with nuclear charge Z and two electrons. It is now when the electron–electron repulsion appears, which

This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivs License, which permits use and distribution in any medium, provided the original work is properly cited, the use is non-commercial and no modifications or adaptations are made.
© 2024 The Authors. *International Journal of Quantum Chemistry* published by Wiley Periodicals LLC.

Capítulo 1

1. La función de onda y su interpretación

El objetivo de este capítulo es:

1. Dar una interpretación física de la densidad de probabilidad
2. Definir los valores esperados de la posición
3. Definir el operador de momento lineal

Ciudad de México a 1 de agosto de 2025.

INFORME DE ACTIVIDADES DESARROLLADAS DURANTE EL PERIODO SABÁTICO

A continuación doy un informe detallado de las actividades que realicé durante mi periodo sabático de 18 meses.

Norberto Aquino Aquino

No. económico 12036

Profesor Titular C

Departamento de Física

Área de Mecánica

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

1. **Propuesta.** Continuaré la codirección y asesoría, junto con el Dr. Eleuterio Castaño Tostado, del estudiante de doctorado: M. en C. Luis Manuel Arvizu Cornejo, con el tema "Teoría cuántica de electrones confinados a la superficie de conos circulares rectos. Efectos Aharonov-Bohm y teoría de la información". El alumno cursa el Posgrado en Ciencias (Física) de la UAM-I, grado de avance del 20%.

Actividades: reuniones de trabajo para asesorías, supervisión, planeación, análisis, discusión y revisión de avances.

Resultados. Continúe con la co-dirección del estudiante de doctorado, Luis Manuel Arvizu Cornejo, quien cursó del Trabajo de Investigación II al Trabajo de Investigación VI, se incluye copia de la boleta de calificaciones del alumno. Grado de avance 60%. Como parte del trabajo de investigación que realizamos se publicaron dos artículos en revistas internacionales indexadas:

- a) L. M. Arvizu, E. Castaño and N. Aquino, Shannon entropy of a particle on a conical surface, Phys. Scr. **99** (2024) 095270. <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad6fe0>

- b) L. M. Arvizu, E. Castaño and N. Aquino, Shannon entropy of an electron on a conical surface: Aharonov-Bohm effects, *J. Phys.A: Math. Theor.* **58** (2025) 145301. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/adc4a3>

2. **Propuesta.** Continuaré la codirección y asesoría, junto con el Dr. Adrián Mauricio Escobar Ruiz, del estudiante de Maestría: José Manuel Pérez Minguela, con el tema “Deformación de las superficies nodales del átomo de hidrógeno en presencia de un campo magnético constante”. El alumno cursa el Posgrado en Ciencias (Física) de la UAM-I, grado de avance de 25%.

Actividades: reuniones de trabajo para asesorías, supervisión, planeación, análisis, discusión y revisión de avances.

Resultado. El alumno José Manuel Pérez Minguela decidió no continuar con sus estudios de Maestría y se dio de baja sin explicación alguna.

3. **Propuesta.** Continuaré el estudio de las propiedades energéticas y las medidas de información cuántica del estado base y primer estado excitado del átomo de helio confinado, con los siguientes colegas: Dr. Antonio Flores Riveros, Dr. Juan Francisco Rivas Silva, (Benemérita Universidad Autónoma de Puebla), Dr. Eduard Montgomery Jr. (Centre College, Kentucky, USA), Vinod Prasad (India), Juan Carlos Angulo (Universidad de Granada, España) y el alumno de doctorado Carlos R. Estañón.

Los resultados se presentarán en un congreso nacional y escribirá un artículo de investigación.

Resultado. Se publicó un artículo sobre la teoría de la información cuántica del helio confinado: C. R. Estañón, H. E. Montgomery Jr., J. C. Angulo and N. Aquino, The confined helium atom: An information-theoretic approach, *International Journal of Quantum Chemistry*, 2024;124:e27358. <https://doi.org/10.1002/qua.27358>

En este momento, continuamos estudiando formas alternativas de obtener el entrelazamiento cuántico en el helio confinado a través de medidas de la información.

4. **Propuesta.** Se estudiará el estado base del átomo de hidrógeno confinado en una esfera impenetrable con el núcleo del átomo fuera del centro de la esfera. Se obtendrá la energía,

la entropía de Shannon y la información de Fisher como función del radio de la esfera. En este proyecto colaborarán los doctores Francisco Adrián Duarte (Universidad de Sonora, Hermosillo), Andrei Solórzano (Tec de Monterrey, Campus Puebla) y Alejandro Rojas Calderón (UAM-A).

Resultado. Se realizaron cálculos numéricos con una función de prueba sencilla y los resultados obtenidos se presentaron en el Congreso Nacional de Física 2023. Se continua la investigación utilizando una función de prueba con más parámetros variacionales.

5. **Propuesta.** Estudiaré el espectro de inversión de la molécula PH_3 , en colaboración con los doctores Juan Francisco Rivas Silva y Dr. Francisco Javier Melendez Bustamante (Benemérita Universidad Autónoma de Puebla) y Hernani Yee-Madeira (ESFM-IPN).

Resultado. Se calculó la superficie de potencial del PH_3 mediante el programa Gaussian 09 usando el funcional híbrido Becke3LYP, a partir del cual se construyó una función analítica y, se resolvió la ecuación de Schrödinger correspondiente, obteniendo las frecuencias de inversión de dicha molécula. Se continúa trabajando en el cálculo con funcionales más modernos.

6. **Propuesta.** El estudio de tres osciladores cuánticos acoplados en colaboración con los colegas Adrián Mauricio Escobar Ruiz y Horacio Olivares Pilon del Departamento de Física, UAM-I, y Mario Alán Quiroz Juárez de la UNAM (Juriquilla). Los resultados se presentarán en un congreso nacional.

Resultado. Durante el tiempo del periodo sabático no hubo la suficiente colaboración y está se quedó sin avances.

7. **Propuesta.** Escribiré unas notas para los cursos de Mecánica Cuántica I y II a nivel licenciatura, que servirán de apoyo a los estudiantes de la carrera de Física de la UAM-I.

Resultado. Las notas de los cursos de Mecánica Cuántica I y II se encuentran al final de este reporte. Me hizo falta tiempo para terminar algunos temas.

8. **Propuesta.** Se enviará para su publicación al menos dos artículos de investigación sobre los temas antes mencionados a una revista internacional indexada.

Resultado. Durante mi periodo sabático publiqué 8 artículos de investigación y uno más fue aceptado:

- a) C. R. Estañón, H. E. Montgomery Jr., J. C. Angulo and N. Aquino, The confined helium atom: An information-theoretic approach, *International Journal of Quantum Chemistry*, 2024;124;e27358. <https://doi.org/10.1002/qua.27358>.
- b) Elizabeth Cruz, N. Aquino, V. Prasad and A. Flores-Riveros, A two-dimensional harmonic oscillator confined in a circle in presence of a constant electric field: an informational approach, *Eur. Phys. J. D* (2024) 78:71, <https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-024-00861-3>
- c) L. M. Arvizu, E. Castaño and N. Aquino, Shannon entropy of a particle on a conical surface, *Phys. Scr.* **99** (2024) 095270. <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad6fe0>
- d) L. M. Arvizu, E. Castaño and N. Aquino, Shannon entropy of an electron on a conical surface: Aharonov-Bohm effects, *J. Phys. A: Math. Theor.* **58** (2025) 145301. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/adc4a3>
- e) F. M. Fernández, J. García, N. Aquino and A. Flores-Riveros, On the two-dimensional harmonic oscillator with an electric field confined to a circular box, *Phys. Scr.* (2024) 125278, <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad921f>
- f) N. Aquino, S. Cruz, J. Garza and R. Vargas, Contributions from UAM-Iztapalapa to the study of confined atoms and molecules, *J. Mex. Chem. Soc.*, (2024) 68(4), <http://dx.doi.org/10.29356/jmcs.v68i4.2266>
- g) B. Dahiya, D. Mugal, A. Maan, N. Aquino, V. Prasad, Exploring quantum information in spherical confined positronium. *Chinese Journal of Physics*, 97(2025) 302-314, <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2025.03.049>
- h) B. Dahiya, B. Vidhani, N. Aquino and V. Prasad, Shannon entropy and energy of H-atom confined in a fullerene cage: Effect of an external electric field, *Chemical Physics Impact*, 10(2025) 100826, <https://doi.org/10.1016/j.chphi.2025.100826>
- i) E. Cruz, N. Aquino, C. Estañón and Y. Yee-Madeira, A quantum particle in a circle an informational approach revisited, *Rev. Mex. Fís.* ACEPTADO

Actividades no programadas.

1. Obtención de grado de Doctor del M. en C. Carlos Alberto Ruiz Estañón. Fui director de la tesis titulada: "Algunas aplicaciones de la teoría de la información cuántica a sistemas confinados de uno y dos electrones". Fecha de la obtención de grado: 27 de febrero de 2024.
2. Obtención del grado de Maestría del Lic. Didier Gamaliel Buendia Ortiz. Fui codirector de la tesis: "Algoritmos cuánticos". Fecha de examen: 22 de abril de 2025
3. Editor invitado de la Revista ContactoS para el número especial del Departamento de Física con motivo de la celebración del 50 aniversario de la Universidad Autónoma Metropolitana.
4. Participación en el Simposio del Cuerpo Académico de Física Computacional de la Materia Condensada, Instituto de Física BUAP. Título de la plática: "Valores propios y funciones propias de un electrón que se mueve sobre la superficie de un cono de tamaño finito.
5. Plática dentro del marco de la Celebración del 50 Aniversario del Departamento de Física de la UAM-Iztapalapa. Título de la plática: "Entropía de Shannon de una partícula que se mueve sobre la superficie de un cono".
6. Participación en la XXII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
7. Tutor de la alumna de Maestría: Julieta Saraí Aguila Villocaña durante 2023.
8. Miembro de la comisión de Posgrado del Departamento de Física 2023-2024.

Atentamente,



Dr. Norberto Aquino Aquino
Departamento de Física,
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA
Unidad-Iztapalapa

CBI.AP.607.2023
28 de junio de 2023

Dr. Norberto Aquino Aquino
Departamento de Física
UAM - Iztapalapa
Presente

Estimado Dr. Aquino:

Por este conducto me permito informarle que la Comisión del Posgrado Divisional, de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería, ha decidido nombrarlo co-asesor conjuntamente con el Dr. Eleuterio Castaño Tostado, profesor del Departamento de Física, UAM - Iztapalapa, del proyecto doctoral ***"Teoría cuántica de electrones confinados a la superficie de conos circulares rectos. Efectos Aharonov-Bohm y teoría de la información"*** en virtud de que **Luis Manuel Arvizu Cornejo**, alumno del Posgrado en Física, sustentó y aprobó su examen predoctoral el día 19 de mayo de 2023.

Asimismo, le informo que el alumno deberá entregar a la Comisión Divisional de Posgrado el proyecto modificado de acuerdo con los comentarios emitidos por los sinodales que lo evaluaron; junto con una carta en la que conteste a dichos comentarios, con especial atención en incluir y explicar los conceptos fundamentales del efecto Aharonov-Bohm y la norma de Landau. La nueva versión del proyecto deberá contar con el visto bueno de usted y de los sinodales y deberá ser entregada a más tardar el 23 de agosto del presente.

Anexa a la presente encontrará usted copia de los comentarios emitidos por el jurado evaluador.

Sin otro particular, aprovecho la ocasión para enviarle un cordial y respetuoso saludo.

Atentamente
Casa abierta al tiempo



Dr. Hugo A. Morales Técoli
Coordinador del Posgrado Divisional

c.c.p.: M. en C. Luis Manuel Arvizu Cornejo.- Alumno del Posgrado en Física.
c.c.p.: Dr. Eleuterio Castaño Tostado.- Co-asesor, Departamento de Física, UAM - Iztapalapa.
c.c.p.: Dr. José Inés Jiménez Aquino.- Coordinador del Posgrado en Física.

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Av. Ferrocarril San Rafael Atlixco No. 186, Col. Leyes de Reforma 1ª. Sección,
Alcaldía Iztapalapa, 09310 Ciudad de México
Tel. 5804 46000 ext. 4605, E-mail: pddiv@xanum.uam.mx



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

IZT - 560

BOLETA DE CALIFICACIONES

TRIMESTRE LECTIVO	FECHA EXPEDICION	DIA	MES	AÑO	NOMBRE	MATRICULA
		12	02	25		

UNIDAD	DIVISION	CARRERA	AREA DE CONCENTRACION
IZT	CBI	DOCTORADO EN CIENCIAS (FISICA)	FENOMENOS OPTICOS Y DE TRANSPORTE EN LA MATER

No.	CLAVE Y NOMBRE DE LA UNIDAD DE ENSEÑANZA	APRENDIZAJE	TIPO EV.	CALIFICACION	NUMERO CREDITOS	TRIMESTRE	UNIDAD	
1	2116035	MECANICA ESTADISTICA	GLO.	B	BIEN	12	17P	IZT
2	2116038	MECANICA Y CAOS	GLO.	B	BIEN	12	17P	IZT
3	2116036	ELECTRODINAMICA	GLO.	MB	MUY BIEN	12	170	IZT
4	2116037	MECANICA CUANTICA	GLO.	B	BIEN	12	170	IZT
5	2116063	ESTADO SOLIDO I	GLO.	MB	MUY BIEN	9	18I	IZT
6	2116065	FOTONICA I	GLO.	MB	MUY BIEN	9	18I	IZT
7	2116064	ESTADO SOLIDO II	GLO.	MB	MUY BIEN	9	18P	IZT
8	2116071	TEMAS SELECTOS DE ESPECTROSCOPIA I	GLO.	MB	MUY BIEN	9	18P	IZT
9	2116083	INTRODUCCION A LA INVESTIGACION I	GLO.	MB	MUY BIEN	20	18P	IZT
10	2116084	INTRODUCCION A LA INVESTIGACION II	GLO.	MB	MUY BIEN	20	180	IZT
11	2116085	INTRODUCCION A LA INVESTIGACION III	GLO.	MB	MUY BIEN	20	19I	IZT
12	2119001	TRABAJO DE INVESTIGACION I	GLO.	MB	MUY BIEN	30	23P	IZT
13	2119002	TRABAJO DE INVESTIGACION II	GLO.	MB	MUY BIEN	30	230	IZT
14	2119003	TRABAJO DE INVESTIGACION III	GLO.	MB	MUY BIEN	30	24I	IZT
15	2119004	TRABAJO DE INVESTIGACION IV	GLO.	MB	MUY BIEN	30	24P	IZT
16	2119005	TRABAJO DE INVESTIGACION V	GLO.	MB	MUY BIEN	30	240	IZT
TOTAL DE CREDITOS.....					294			



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

CONSTANCIA DE COEFICIENTES
DE PARTICIPACION

FECHA: 04/Feb/2025

NOMBRE DEL PROFESOR: AQUINO AQUINO NORBERTO			No. DE EMPLEADO: 12036	
CATEGORIA: TITULAR	NIVEL: C	DEDICACION: TIEMPO COMPLETO	CONTRATACION: DETERMINADO	
UNIDAD: IZTAPALAPA	DIVISION: CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA		FISICA	

CLAVE	U.E.A.	UNI	GRUPO	NIVEL	TRIM	CREDITOS	H.T.	H.P.	NO. PROF.	COEF.
2119002	TRABAJO DE INVESTIGACION II	IZT	CP11A	POSGRADO	230	30	0.0	0.0	2	0.50
2119003	TRABAJO DE INVESTIGACION III	IZT	CQ11A	POSGRADO	24I	30	0.0	0.0	1	1.00
2119004	TRABAJO DE INVESTIGACION IV	IZT	CX11B	POSGRADO	24P	30	0.0	0.0	2	0.50
2119005	TRABAJO DE INVESTIGACION V	IZT	CY11	POSGRADO	24O	30	0.0	0.0	2	0.50
TOTAL DE U.E.A.s IMPARTIDAS:					4.00					

DIRECTOR DE LA DIVISION

DR. ROMAN LINARES ROMERO

A quien corresponda.

Tenemos el gusto de informarle que el trabajo con clave única: **LXVI-007160** y cuyo título es: **La entropía de Shannon del problema del átomo de hidrógeno confinado en una esfera impenetrable con su núcleo fuera del centro de la esfera.**, de los autores:

- Aquino Aquino Norberto (*Presentador*)
Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa
- Rojas Calderón Rafael Alejandro
Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco
- Duarte Alcaraz Francisco Adrián
Departamento de Física, Universidad de Sonora
- Solórzano Pérez Andrei
Instituto Tecnológico de Monterrey, campus Puebla

Fue aceptado para su presentación tipo **póster** en la sesión de **Física Atómica y Molecular** el día **11 de octubre de 2023** en **Expocentro Planta Alta** dentro del programa del LXVI Congreso Nacional de Física.

Se extiende la presente constancia el día 14 de septiembre de 2023.

ATENTAMENTE

Comité Científico
Sociedad Mexicana de Física





Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
Unidad-Iztapalapa

CBI.AP.235.2024
27 de febrero de 2024

Dr. Norberto Aquino Aquino
Departamento de Física
UAM - Iztapalapa

Presente

Estimado Dr. Aquino:

Por este conducto me permito agradecer ampliamente su participación como director y sinodal en el proceso que culminó con el examen de grado de Doctor en Ciencias (Física) del **M. en C. Carlos Alberto Ruiz Estañón** (CVU # 640239), el día 27 de febrero de 2024.

El cuidado con el que usted revisó la tesis y los artículos de investigación del **M. en C. Carlos Alberto Ruiz Estañón**, y su presencia durante el examen de grado, fueron fundamentales para asegurar que este trabajo doctoral fuera de la calidad requerida para obtener el grado de Doctorado en Ciencias (Física).

Uno de los objetivos de mayor importancia de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería es evaluar rigurosamente el trabajo del alumnado de doctorado. Su participación fue de particular importancia para cumplir con este objetivo.

Sin otro particular, aprovecho la ocasión para enviarle un cordial y respetuoso saludo.

Atentamente
Casa abierta al tiempo



Dr. Hugo Aurelio Morales Técotl
Coordinador del Posgrado Divisional

División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Av. Ferrocarril San Rafael Atlixco No. 186, Col. Leyes de Reforma 1ª. Sección, Alcaldía
Iztapalapa, 09310 Ciudad de México
Tel.: 58044600, ext. 4605, e-mail: pdiv@xanum.uam.mx

22 de abril de 2022.

Dr. Norberto Aquino Aquino
Departamento de Física de la UAM-Iztapalapa
P R E S E N T E

Estimados Dr. Aquino, a nombre de la Comisión del Posgrado en Física, le comunico que su solicitud para codirigir el trabajo de tesis de Maestría "*Simulación de Sistemas Cuánticos de Muchos Cuerpos usando Computación Cuántica*" que desarrollará el alumno **Didier Gamaliel Buendía Ortiz**, matrícula 2212801497, bajo la dirección del Dr. Isaac Pérez Castillo, ha sido aceptado en el programa de Posgrado en Ciencias (Física).

Sin otro particular les envío un cordial saludo

Atentamente



Dr. José Inés Jiménez Aquino
Coordinador del Posgrado en Física



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa

ContactoS

REVISTA DE EDUCACIÓN EN CIENCIAS E INGENIERÍA

cts@xanum.uam.mx, apcts@xanum.uam.mx

NOVIEMBRE 30, 2024

DR. NORBERTO AQUINO AQUINO
DR. SALVADOR A. CRUZ JIMÉNEZ
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA

El Comité Editorial de ContactoS, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería, les agradece haber participado como editores invitados en el:

NÚMERO ESPECIAL DEL DEPARTAMENTO DE FÍSICA.

REFERENCIA: CTSN082024

Mismo que ha sido evaluado por pares académicos y aceptado para su publicación en el No. 139 del año 2024 de Contactos, revista registrada en Latindex, Sistema Regional de Información en Línea para Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal y en el Índice de Revistas Mexicanas de Divulgación Científica y Tecnológica del CONACYT.

Agradecemos su interés y colaboración.

ATENTAMENTE



M. C. ALMA E. MARTÍNEZ LICONA
EDITORA EN JEFE

Av. Ferrocarril San Rafael Atlixco, número 186. Colonia Leyes de Reforma 1A Sección, Alcaldía Iztapalapa. C.P. 09310 Ciudad de México. Tel: 55 5804 4600 Ext. 1144

**Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas"**

Otorga la presente

CONSTANCIA

Al: Dr. Norberto Aquino Aquino

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Por su participación en el **SIMPOSIO: Reunión Anual del Cuerpo Académico "FÍSICA COMPUTACIONAL DE LA MATERIA CONDENSADA"** con la conferencia "Valores propios y funciones propias de los estados electrónicos de un electrón que se mueve sobre la superficie de un cono de tamaño finito", llevado a cabo los días 12 y 13 de septiembre de 2024.



BUAP



"Pensar Bien, Para Vivir Mejor"

H. Puebla de Z. 13 de Septiembre de 2024

Dr. Felipe Pérez Rodríguez
Instituto de Física, BUAP
Director

Dr. Antonio Flores Riveros
Instituto de Física, BUAP
Responsable del Cuerpo Académico

**El Departamento de Física
de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa**

Extiende la presente Constancia a:

*Dr. Luis Manuel Arvízu,
Dr. Eleuterio Castaño Tostado
y Dr. Norberto Aquino Aquino*

Por su distinguida participación en la Conferencia Plenaria:

**“Entropía de Shannon de una partícula
que se mueve sobre la superficie de un cono”**

**Dentro del marco de la Celebración del 50 Aniversario del Departamento de Física
de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.**

El evento se llevó a cabo del 7 al 11 de octubre de 2024, en la Ciudad de México.


Dr. Juan Morales Corona
Jefe del Departamento de Física.


Dra. Rebeca Sosa Fonseca
Comité Organizador

Física Antes y Ahora, Conmemorando los 50 años del Departamento de Física

Programa Edificio G, Sala Cuicacalli, Octubre 2024

	Lunes 7	Martres 8	Miércoles 9	Jueves 10	Viernes 11
9:00 - 10:00	Inauguración	Dr. Mengke Cai	Dr. Juan AzorIn Nieto	Dr. Ciro Falcony Guajardo	Dra. Linda Hirst
10:00 - 10:30	Coffee Break				
10:30 - 11:00	Dr. Hai-Zhi Song	Dr. Moisés Martines	Dr. José Inés Jiménez Aquino	Dr. Norberto Aquino	Dr. Ian Cavin
11:00 - 11:30		Dr. Manuel Fernández	Video	Dr. José Antonio Moreno	
11:30 - 12:00	Mesa Redonda	Dr. Octavio Obregon	Mesa Redonda	Dr. Peter Shawhan	Mesa Redonda
12:00 - 12:30	Jefatura del Departamento de Física				
12:30 - 13:00					
13:00 - 13:30					
13:30 - 14:00	Comida	Comida			
14:30 - 15:00					
15:00 - 15:30					
15:30 - 16:00	Dra. Silvia Hidalgo Tobón	Posters	Libre	Dr. Roberto Olayo Valles	
16:00 - 16:30	Dr. Adrián Escobar Ruíz			Posters	
16:30 - 17:00	Dr. Miguel Bastarrachea				



El Comité Nacional de la

Reunión Mexicana de Fisiología Teórica

Otorga la presente

CONSTANCIA

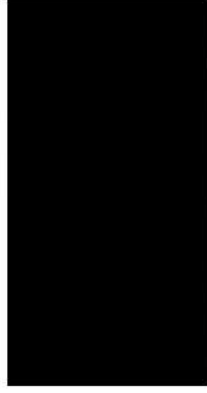
A: Noe Muñoz Peral *, María Eugenia Castro2, Luis A. Cobos1, Norberto Aquino, Francisco J. Melendez1

Por su participación en la XXII RMFQT con el trabajo "Estudio teórico de las propiedades de la cumarina y derivados de la 2-selenocumarina", ocurrida en Chihuahua, Chihuahua del 7 al 9 de noviembre de 2024



Dra. Luz María Rodríguez Valdez
UACH

Comité Local de la RMFQT



Dr. Joaquín Barroso Flores
UNAM

Comité Nacional de la RMFQT

Code: MTA0Ng==



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
Unidad-Iztapalapa

CBI.AP.643.2023
30 de junio de 2023

C. Julieta Sarai Aguila Villocaña
P R E S E N T E

A nombre de la Comisión del Posgrado en Física me complace informarle que ha sido aceptada como alumna de este programa en la opción terminal de Maestría a partir del trimestre **2023-P**. Se le ha asignado como su tutor al Dr. Norberto Aquino Aquino, profesor del departamento de Física de nuestra institución.

Es indispensable que lea con cuidado los siguientes documentos de tal forma que esté bien informada respecto a los derechos y las obligaciones que adquiere como alumna del Posgrado en Física: a) plan de estudios del Posgrado en Física, b) reglamento de estudios superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, c) lineamientos particulares del Posgrado en Física y d) lineamientos particulares del Sistema de Posgrado Divisional.

En particular debe observar los tiempos límites contemplados en los diferentes procesos. Esto incluye, si es su caso, la entrega de documentos probatorios pertinentes asociados con sus estudios previos en la oficina de Posgrado en la Coordinación de Sistemas Escolares; planear junto con su tutor la calendarización de sus cursos con el fin de contar con los créditos requeridos para la presentación de su examen de grado dentro del tiempo planeado de seis trimestres. Le hago notar que durante el trimestre 2023-P los cursos obligatorios programados son: **2116035 Mecánica Estadística y 2116038 Mecánica y Caos**

A más tardar en la semana siete del trimestre anterior a aquel en que planea inscribirse a la UEA Introducción a la Investigación I, deberá solicitar por escrito, a la Comisión de Posgrado en Física, la asignación de asesor de tesis e informar el tema de investigación a desarrollar, con el visto bueno del asesor propuesto. Para acreditar las UEA de Introducción a la Investigación I, II y III, respectivamente, deberá presentar un informe detallado de sus actividades de investigación.

Por lo que toca a apoyo de becas CONACYT, es importante entregar completa y oportunamente la solicitud correspondiente con la M. en C. María Iseo González Christen, en la oficina de Atención a Alumnos de la DCBI (Tel. 5804-4605, pddiv@xanum.uam.mx), con quien puede solicitar la información correspondiente.

Finalmente, uno de los elementos cruciales en su formación es, sin lugar a dudas, su participación en las reuniones trimestrales de los estudiantes de Posgrado en Física, así como participar en los seminarios del Departamento de Física, por lo que tiene que tomar en cuenta que la asistencia a los seminarios es obligatoria.

Deseándole éxito en esta nueva empresa en su carrera, le doy la más cordial bienvenida.

A t e n t a m e n t e
Casa abierta al tiempo

Dr. José Inés Jiménez Aquino
Coordinador del Posgrado en Física

c.c.p.: Dr. Norberto Aquino Aquino.- Departamento de Física, UAM - Iztapalapa
c.c.p.: Lic. César Hernández Vázquez.- Sistemas Escolares.

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Av. Ferrocarril San Rafael Atlixco, Núm. 186, Col. Leyes de Reforma 1 A Sección, Alcaldía Iztapalapa, C.P. 09310, Ciudad de México



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Ciudad de México, 18 de marzo de 2024.

A quien corresponda:

A petición del interesado y para los fines que considere convenientes, se hace constar que el **Dr. Norberto Aquino Aquino**, profesor del Departamento de Física, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, **se desempeñó como miembro de la Comisión de Posgrado en Física**, durante el periodo del 1 de enero al 31 de diciembre de 2024.

Cabe mencionar que, a la fecha, el Dr. Aquino Aquino continúa como miembro de dicha Comisión.

Atentamente
Casa abierta al tiempo



Dr. Orlando Guzman
Coordinador del Posgrado en Física



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Ciudad de México, 25 de febrero de 2025.

A quien corresponda:

A petición del interesado y para los fines que considere convenientes, se hace constar que el **Dr. Norberto Aquino Aquino**, profesor del Departamento de Física, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, **se desempeñó como miembro de la Comisión de Posgrado en Física**, durante el periodo del 1 de enero al 31 de diciembre de 2024.

Cabe mencionar que, a la fecha, el Dr. Aquino Aquino continúa como miembro de dicha Comisión.

Atentamente
Casa abierta al tiempo



Dr. Orlando Guzmán
Coordinador del Posgrado en Física

A quantum particle in a circle; an informational approach revisited

E. Cruz^a, N. Aquino^{a,*}, C. R. Estañón^a and H. Yee-Madeira^b

^a*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa,
Av. Ferrocarril San Rafael Atlixco 186, Iztapalapa, 09310 Ciudad de México, México,*

**e-mail: naa@xanum.uam.mx*

^b*Departamento de Física, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional,
Edificio 9 Ciudad de México, México.*

This work is dedicated to the memory of Dr. Víctor David Granados García (1949-2023)

Received 3 September 2024; accepted 14 February 2025

We study the localization-delocalization of a particle moving within an infinite circular well of radius r_0 from a theoretical information point of view. We computed the Shannon entropy, Fisher information and disequilibrium in configuration and momentum spaces for a collection of stationary states. Comparing our results of Shannon entropies with those previously published we found good agreement with those. Shannon entropy, Fisher information and the disequilibrium offer complementary results for the description of the particle localization-delocalization.

Keywords: Particle in a circle; Shannon entropy; Fisher information; disequilibrium.

DOI: <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.71.040701>

1. Introduction

Information theory is an area of constant growth, as shown by the number of papers published each year, and of wide application in various areas of knowledge. Some examples of its applications are: the study of earthquakes [1], image retrieval and indexing [2], cryptography [3], noise theory [4], robot navigation [5], machine learning [6], study of early stone tools [7], black holes [8], etc.

In particular in quantum mechanics it has been used to study free systems and some systems subject to spatial confinement. The Shannon entropy has been used as a measure of electron localization-delocalization in aromatic compounds [9], in atomic and molecular calculations [10-24] and recently, in spatially confined systems such as: the hydrogen atom, helium and multi-electron atoms enclosed within penetrable and impenetrable walled boxes, models that simulate the behaviour of matter under the action of high external pressures.

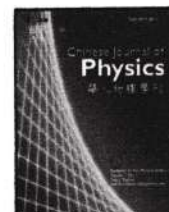
The particle inside an infinite circular well (ICW) is a simple quantum mechanical example [25-27], but the study of this system is not only of academic interest. Dong *et al.* [28] studied the Shannon entropy in configuration and momentum spaces of a particle in an ICW like a mathematical example. On the other hand, Corzo *et al.* [29] studied the particle inside an ICW as a model of an electron in a circular quantum corral. They calculated the radial Shannon entropy in the configuration and momentum spaces and also they introduced a one dimensional entropy with a more simple structure as a function of the radial and angular quantum numbers. Cruz *et al.* [30] studied an electron inside an ICW in the presence of a magnetic field. Tai *et al.* [31] found by molecular calculations that the cluster B_{20}^{2-} has the shape of a ICW.

Corzo *et al.* [29] and Dong *et al.* [28] analysed the radial standard deviation and radial Shannon entropy of the problem of a quantum particle in an ICW. Corzo *et al.* [29] pointed out that the standard deviation is sensitive to the shape and width of the probability density distribution. This fact is reflected in a study made by Bialynicki-Birula and Rudnicki [32] in which they show that in some very simple physical systems the standard deviation has serious fails in the description of the dispersion of the probability density.

Corzo *et al.* [29] found that the radial standard deviation and the radial Shannon entropy have different behavior. The radial standard deviation of different states as a function of the radial quantum number shows an increase, *i.e.*, it shows a growing in the dispersion in the probability density distribution (delocalization). While the radial Shannon entropy shows a trend towards localization for states with angular momentum $m \leq 4$. They found that the radial Shannon entropy results give a measure consistent with the probability distribution of the analyzed states.

The aim of this work is to study the localization-delocalization of an electron inside an infinite circular well by means of the following information measures: Shannon entropy, Fisher information and disequilibrium, in configuration and momentum spaces. Our interest in using these informational measures is to know whether these other measures give results equivalent to those of the Shannon entropies reported previously [28,29] or whether additional information is obtained.

The structure of the work is as follows: In Sec. 2, we show the eigenfunctions and eigen-energies of a particle in a circular box. In Sec. 3 we briefly describe the quantum probability density in configuration and momentum spaces and, the informational measures: Shannon entropy, Fisher information and disequilibrium. In Sec. 4 we show the results and



Research paper

Exploring quantum information in spherically confined positronium

Brijender Dahiya^{a,b}, Dipti Munjal^c, Anjali Maan^d, Norberto Aquino^e,
Vinod Prasad^{a,*}

^a Department of Physics, Swami Shraddhanand College, University of Delhi, Alipur Delhi 110036, India

^b Department of Physics and Astrophysics, University of Delhi, Delhi 110007, India

^c Department of Physics, Post Graduate Government College for Girls, Sector-11 Chandigarh 160011, India

^d Department of Physics, Pt.N.R.S.G.C. Rohtak, Maharshi Dayanand University, Rohtak 124001, Haryana, India

^e Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Ferrocarril San Rafael Atlixco 186, Col. Leyes de Reforma 1a Sec., Iztapalapa C.P. 09310 Ciudad de Mexico, Mexico



ARTICLE INFO

Keywords:

Confined Positronium

Information entropy

The Onicescu information energy

The complexity

ABSTRACT

Various information theoretic measures, such as the Shannon entropy, the Fisher information, the Onicescu information energy, the complexity, etc., are studied to understand the effect of confinement in a two-particle system. Here, we have considered confined Positronium. Positronium, being an important system for various reasons, has been explored in detail. The energy eigenvalues and eigenfunctions have been evaluated numerically and are in excellent agreement with those reported in the literature. With confinement, the various information theoretic measures show interesting behaviour. The lower bounds established for different uncertainty relations still apply in confinement.

1. Introduction

There has been renewed interest in studying the information theory of various quantum mechanical systems. This interest is basically due to the fact that various uncertainty relations of the information theory provide a deeper insight into the fundamental physical properties of the system under study [1–4], and also because by analysing the probability density of the system with information theory, it is possible to understand better the location and correlation of the electrons [5–10] and the references in [9]. In information theory, the Shannon entropy in position and momentum space has a special mention, as these measures give information about the localization or delocalization of the system and their sum is always supposed to follow a bound [11–13], known as Bialynicki-Birula and Mycielski (BBM) inequality [14]. Panos et al. [15] calculated the Shannon entropy of a single particle state and obtained a relation between the entropy sum and the energy of the system. The Shannon entropy and the Fisher information describe the spreading of the wave function. The Shannon entropy is a global measure of the concentration of probability density, whereas the Fisher information tells about the point-wise concentration of probability density [16]. The study of information entropic measures has essential applications in quantum computation and information technology [17,18]. Also, polarizability, susceptibility and other experimentally observable parameters have been derived in terms of information entropies [19]. Studying information theory is crucial to have a deeper knowledge of quantum mechanical systems. Romera and Dehesa [20] have developed a new correlation measure in terms of the Shannon entropy power and the Fisher information. In addition to the Shannon entropy and the Fisher information, we have also studied the Onicescu information energy [21] and the complexity of confined Positronium

* Corresponding author.

E-mail addresses: brijender@ss.du.ac.in (B. Dahiya), diptiphy9877@gcg11.ac.in (D. Munjal), anjalimaan2607@gmail.com (A. Maan), naa@xanum.uam.mx (N. Aquino), vprasad@ss.du.ac.in (V. Prasad).

<https://doi.org/10.1016/j.cjph.2025.03.049>

Received 2 November 2024; Received in revised form 27 March 2025; Accepted 27 March 2025

Available online 7 April 2025

0577-9073/© 2025 The Physical Society of the Republic of China (Taiwan). Published by Elsevier B.V. All rights are reserved, including those for text and data mining, AI training, and similar technologies.



Full length article



Shannon entropy and energy of H-atom confined in fullerene cage: Effect of External electric field

Brijender Dahiya^{a,b}, Bhavna Vidhani^c, Norberto Aquino^d, Vinod Prasad^a *^a Department of Physics, Swami Shraddhanand College, University of Delhi, Delhi 110036, India^b Department of Physics and Astrophysics, University of Delhi, Delhi 110007, India^c Department of Physics, Hansraj College, University of Delhi, Delhi 110007, India^d Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Ferrocarril San Rafael Atlixco 186, Col. Leyes de Reforma 1a Sec., Iztapalapa, C. P. 09310, Ciudad de Mexico, Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:

Fullerene cage
Shell width
Shannon entropy
Electric field
Avoided crossing

ABSTRACT

This study examines the energy and entropic properties of a hydrogen atom confined within a fullerene cage, using two potential models: the Square Well (SW) and Gaussian Potential (GP). The fullerene cage sizes considered correspond to C@36 (C₃₆) and C@60 (C₆₀). Key factors influencing the energy levels and total Shannon entropy include the radius of the fullerene cage, the strength of the confining potential, and the shell width of the cage. Additionally, the impact of an external electric field on these properties is analysed in detail. Notably, the electric field introduces avoided crossings in various states, which were previously observed only in *s*-states due to variations in the confining potential strength. This study underscores the complex interplay between the confining potential strength, cage width, and perturbations induced by the electric field.

Introduction

The concept of measure of information loss or the amount of information associated with a variable was introduced by C. E. Shannon [1]. This concept of Shannon entropy is the main base of information theory. Over time, this information theory has been extended in many areas, such as signal processing, data compression [2], lossless data communication [3], quantum computation [4], chemical reaction dynamics [5,6], ionization energy [7,8], etc. The concept of alteration of properties of the atoms or molecules by confinement is way back in 1937 [9]. Since then, confinement has been applied to modify the properties of various quantum systems. The hard wall/impenetrable spherical confinement is considered to understand the high-pressure effects on the atomic systems, such as in the stars or the interior of Jupiter and Saturn [10–14]. Information theory has gained attention in studying the confined quantum systems [15–25]. Shannon entropy of confined systems has been intensively studied in the last decade. Shannon entropy is associated with the localization/delocalization in the position and momentum spaces. Sen [26] has studied the H-like atom in spherical shell confinement. The potential within the shell is zero and infinite elsewhere. The conditions of various inner and outer radii values depict the different confinement conditions studied. Nascimento [27] studied Shannon entropies and energies of H-like

atoms confined in infinite potential. Using Shannon entropy, Rojas and Aquino analysed the quality of seven trial wave functions for the ground state of a confined hydrogen atom [28]. Salazar et al. [22] studied the Shannon entropy of confined H-atom and showed that the Shannon entropy of H-atom approaches the Shannon entropy of Particle in a Spherical Box (PISB) as the radius tends to zero. The dip in the Shannon entropy of the 1s state of confined H-atom results from the Coulombic term in H-atom, which is absent in PISB. Jioa et al. [29] presented analytically the highly accurate values of Shannon entropy of spherical hard wall confined H-atom. The infinite potential confinement is helpful in modelling/ understanding many phenomena. The wavefunction vanishes at the confining boundary for infinite potential conditions, and Dirichlet boundary conditions are applied to the wavefunction.

However, there are cases for finite confining potentials. The confined hydrogen atom by hard and soft walls is studied using the logistic potential as the confinement potential [31]. Martinez-Sanchez [32] has studied the Shannon entropy of H-atom confined by the finite harmonic oscillator and finite positive potential of varying strength and presented a relation between kinetic energy and Shannon entropy. One of the essential finite potential conditions is the attractive potential condition due to an atom trapped in a fullerene cage, known as an

* Corresponding author.

E-mail addresses: brijender@ss.du.ac.in (B. Dahiya), bhavnavidhani@hrc.du.ac.in (B. Vidhani), naa@xanum.uam.mx (N. Aquino), vprasad@ss.du.ac.in (V. Prasad).<https://doi.org/10.1016/j.chphi.2025.100826>

Received 2 November 2024; Received in revised form 18 December 2024; Accepted 5 January 2025

Available online 24 January 2025

2667-0224/© 2025 The Author(s). Published by Elsevier B.V. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Shannon entropy of an electron on a conical surface: Aharonov–Bohm effects

L M Arvizu, E Castaño and N Aquino* 

Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Leyes de Reforma 1ª Sec., Iztapalapa, Ciudad de México C. P. 09310, Mexico

E-mail: naa@xanum.uam.mx

Received 29 November 2024; revised 19 March 2025

Accepted for publication 24 March 2025

Published 3 April 2025



CrossMark

Abstract

In this work, we solve the Schrödinger equation of a particle restricted to move on a cone surface of finite height under the influence of an Aharonov–Bohm magnetic field. The energy eigenvalues and their respective wave functions are obtained analytically as a function of the radial distance from the apex and the apex angle. We compute the Shannon entropy in configuration and momentum space for the ground and the first excited states as a function of the slant height and the apex angle. In the absence of magnetic flux the states (n, m) and $(n, -m)$ have identical Shannon entropies, but for non-zero fluxes the Shannon entropies of these states are different, their values depending on the state, the apex angle and the value of the magnetic flux.

Keywords: energy eigenvalues, eigenfunctions, quantum cone, Shannon entropy

1. Introduction

Information theory has become a very useful tool for interpreting phenomena in different areas of science, including the derivation of fundamental equations in physics [1], robot navigation [2], machine learning [3], seismology [4], biomedical imaging [5, 6], cryptography [7], the study of fabrication of early stone tools [8] and black holes [9] to mention just a few.

* Author to whom any correspondence should be addressed.



Original content from this work may be used under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 licence. Any further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the title of the work, journal citation and DOI.

Contributions from UAM-Iztapalapa to the Study of Confined Atoms and Molecules

Norberto Aquino^{*1}, Salvador Cruz^{*1}, Jorge Garza^{*2}, Rubicelia Vargas^{*2}

¹Departamento de Física, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Iztapalapa, C.P. 09340. Ciudad de México, México.

²Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Iztapalapa, C.P. 09340. Ciudad de México, México.

***Corresponding author:** Norberto Aquino, email: naa@xanum.uam.mx; Salvador Cruz, email: cruz@xanum.uam.mx; Jorge Garza, email: jgo@xanum.uam.mx; Rubicelia Vargas, email: ruvf@xanum.uam.mx

Received May 1st, 2024; Accepted June 11th, 2024.

DOI: <http://dx.doi.org/10.29356/jmcs.v68i4.2266>

Abstract. The study of confined quantum systems has been a subject of fundamental interest of research at the Universidad Autónoma Metropolitana (UAM) for over 30 years. This summary highlights the contributions of the present authors from UAM in this field considering various quantum systems under different confinement conditions. The paper is divided into two sections: one focusing on atoms and molecules confined by closed and open hard walls, and the other on systems confined by closed and open soft walls. As UAM celebrates its 50th anniversary, it is a timely moment to reflect on the development of collective efforts of the Chemistry and Physics departments in contributing to knowledge in this intriguing and interesting field.

Keywords: Confined systems; systems under high pressure; electronic structure under extreme conditions.

Resumen. El estudio de sistemas cuánticos confinados ha sido objeto de fundamental interés en la Universidad Autónoma Metropolitana (UAM) sobre 30 años. Este resumen resalta las contribuciones de la autora y autores de la UAM en este campo considerando varios sistemas cuánticos bajo diferentes condiciones de confinamiento. El artículo está dividido en dos secciones: una enfocándose en átomos y moléculas confinadas por paredes duras cerradas y abiertas, y la otra en sistemas confinados por paredes suaves cerradas y abiertas. Como la UAM celebra su 50 aniversario, es un buen momento para mostrar el desarrollo de esfuerzos colectivos de los departamentos de química y física en la contribución del conocimiento en este interesante e intrigante campo.

Palabras clave: Sistemas confinados; Sistemas bajo altas presiones; Estructura electrónica bajo condiciones extremas.

Introduction

The first theory of metallic sodium and a method to calculate the binding properties of metals was put forward by Wigner and Seitz since 1933.[1,2] Their work gave rise to the celebrated Wigner-Seitz cell model, whereby each atom in the crystal lattice is surrounded by a polyhedron formed by bisecting planes between the atom and its neighbors. Without further details, we deem this was the first confined system



PAPER

On the two-dimensional harmonic oscillator with an electric field confined to a circular box

RECEIVED

5 August 2024

REVISED

12 October 2024

ACCEPTED FOR PUBLICATION

13 November 2024

PUBLISHED

25 November 2024

Francisco M Fernández¹, Javier García², Norberto Aquino³ and Antonio Flores-Riveros¹¹ INIFTA, DQT, Sucursal 4, C. C. 16, 1900 La Plata, Argentina² Instituto de Física La Plata, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, and Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata, C.C. 67, 1900, La Plata, Argentina³ Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. Ferrocarril de San Rafael Atlixco 186, Iztapalapa, C.P. 09310 Cd. Mexico, Mexico⁴ Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur, Col. San Manuel, Puebla, Pue, C. P. 72570, Mexico

E-mail: fernande@quimica.unlp.edu.ar

Keywords: confined harmonic oscillator, electric field, Rayleigh-Ritz method, perturbation theory**Abstract**

We revisit the quantum-mechanical two-dimensional harmonic oscillator with an electric field confined to a circular box of impenetrable walls. In order to obtain the energy spectrum we resort to the Rayleigh-Ritz method with polynomial and Gaussian basis sets. We compare present results with those derived recently by other authors. We discuss the limits of large and small box radius and also do some calculations with perturbation theory.

1. Introduction

In a paper published recently Cruz *et al* [1] studied a model for an electron confined to a circle of radius r_0 under the effect of a harmonic interaction and a uniform electric field. They solved the Schrödinger equation by means of the linear variational method (commonly known as the Rayleigh-Ritz method (RRM) [4, 5]) and studied the effect of the box size and the magnitude of the electric field on the Shannon entropy and Fisher information for some of the lowest states of the system.

In their calculation Cruz *et al* resorted to an incomplete trial function that is a linear combination of states sharing the same radial part. Since there are no other results that may be chosen as benchmark it was not possible to estimate the accuracy of those variational results. In this paper we repeat the calculation using a suitable basis set. Since the RRM yields increasingly accurate upper bounds to the all eigenvalues of the problem [6, 7] we can easily estimate the accuracy of the results of Cruz *et al*.

2. Two-dimensional harmonic oscillator confined to a circle with a constant electric field

In what follows we outline some general features of the Schrödinger equation for the model as well as the earlier calculation carried out by Cruz *et al* [1].

2.1. Some general features of the eigenvalue equation

The problem discussed by Cruz *et al* is given by the Hamiltonian operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{k}{2} r^2 + efx + V_c(r), \quad (1)$$

where m is the electron mass, e is the electron charge, k is the oscillator force constant, f is the magnitude of the electric field and $V_c(r)$ is a confining potential given by



PAPER

Shannon entropy of a particle on a conical surface

OPEN ACCESS

RECEIVED
8 May 2024REVISED
2 August 2024ACCEPTED FOR PUBLICATION
15 August 2024PUBLISHED
29 August 2024

Original content from this work may be used under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 licence.

Any further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the title of the work, journal citation and DOI.



L M Arvizu, E Castaño and N Aquino*

Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. Ferrocarril San Rafael Atlixco 186, Iztapalapa, C. P. 09310, Ciudad de México, Mexico

* Author to whom any correspondence should be addressed.

E-mail: arvizu13@xanum.uam.mx, ele@xanum.uam.mx and naa@xanum.uam.mx

Keywords: Shannon entropy, particle on a cone surface, energy eigenvalues, radial standard deviation

Abstract

In this work we solve the time-independent Schrödinger equation of a particle restricted to move on the surface of a circular cone of finite height. The energy eigenvalues, as well as the corresponding wave functions, are obtained analytically as a function of, r and ϕ , the radial distance to the apex, $0 \leq r \leq r_0$, and the angular variable around the axis of the cone. We compute the Shannon entropy of this system in both configuration and momentum space as a function of r_0 and θ_0 , the angular semi-aperture of the cone. In configuration space, the Shannon entropy decreases, signalling a more pronounced localization, as either r_0 or θ_0 diminish; in momentum space, an opposite behaviour happens, i.e., the Shannon entropy increases when either, r_0 or θ_0 , decrease. We also compute the radial standard deviation; we find that the Shannon entropy better describes the localization-delocalization phenomena. The present results agree with those previously published for a particle confined to a circle of radius r_0 , which corresponds to $\theta_0 = \pi/2$ in the present case.

1. Introduction

Spatially confined quantum systems have gained much interest in recent years since one can effectively design their electronic properties by modifying the energy quantization, something that is achieved by changing their size, shape and dimensionality, as well as by using different materials and applying external fields. Recently, different experimental techniques have been developed for the elaboration of a variety of confined quantum systems that comprehends quantum wells, wires and dots, electronic structure of atoms and molecules subjected to external high pressures, specific heat of monocrystals under high pressures, atoms trapped in cavities, and nanopores, [1–18], among many others. Recent progress on the field of confined atoms and molecules can be reviewed in [19].

In recent years, a great deal of work has been devoted to the experimental and theoretical study of quantum dots of different shapes that include spherical, ellipsoidal, cylindrical, conical, pyramidal and lenticule geometries, [20–25], since these systems have a wide range of applications in electronic and optoelectronic technology, [26, 27].

Quantum mechanics of particles inside cones has also been shown to be a fruitful model for studying the effects of spatial quantization, [28–30], and Gravesen *et al* studied states of a particle on a surface of revolution forming a truncated cone [31].

Information measures such as Shannon entropy, Fisher information, disequilibrium, Tsallis and Renyi entropies, among others, have been successfully used in different works that include the derivation of fundamental equations of physics, image retrieval and indexing, machine learning, seismology, biological imaging, cryptography, noise theory, black holes and atoms [32–59]. Particular emphasis has been placed in the study of Shannon entropy in free atoms and molecules [41–45]. Recently, it has been used in the study of hydrogen and helium atoms as well as in many electron atoms confined in penetrable and impenetrable cavities [48–58].

A commonly used measure of the uncertainty of the position of a particle in one dimension is the standard deviation. When the standard deviation is small the particle will be localized, while when the standard deviation

RESEARCH ARTICLE

The confined helium atom: An information-theoretic approach

C. R. Estañón¹ | H. E. Montgomery Jr.² | J. C. Angulo^{3,4} | N. Aquino¹ ¹Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Ciudad de Mexico, Mexico²Chemistry Program, Centre College, Danville, Kentucky, USA³Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universidad de Granada, Granada, Spain⁴Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, Granada, Spain

Correspondence

N. Aquino, Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, CP 09340 CDMX, Mexico.
Email: naa@xanum.uam.mx

Funding information

Universidad de Granada; Junta de Andalucía

Abstract

In this article, we study the helium atom confined in a spherical impenetrable cavity by using informational measures. We use the Ritz variational method to obtain the energies and wave functions of the confined helium atom as a function of the cavity radius r_0 . As trial wave functions we use one uncorrelated function and five explicitly correlated basis sets in Hylleraas coordinates with different degrees of electronic correlation. We computed the Shannon entropy, Fisher information, Kullback–Leibler entropy, Tsallis entropy, disequilibrium and Fisher–Shannon complexity, as a function of r_0 . We found that these entropic measures are sensitive to electronic correlation and can be used to measure it. As expected these entropic measures are less sensitive to electron correlation in the strong confinement regime ($r_0 < 1$ a.u.).

KEYWORDS

confined helium atom, disequilibrium, Fisher information, Fisher–Shannon complexity, Kullback–Leibler entropy, Shannon entropy, Tsallis entropy

1 | INTRODUCTION

Spatially confined quantum systems have become the subject of increasing attention because when a very high pressure is exerted on a physical system, its energy levels increase rapidly. However, not all of them grow with the same rate, and this results in the filling of the energy levels that may differ significantly from those of the compression-free system. As a consequence its physical properties can change drastically with high pressure. Notable changes are found in electronic structure, emission and absorption frequencies, half-lives of excited states, selection rules, polarizability, electronic affinity, chemical and ionization potential and so forth. Confined quantum systems can be used to model a wide variety of problems in physics and chemistry such as: atoms trapped in cavities, in zeolite channels, in fullerenes, the electronic structure of atoms and molecules subjected to high external pressures, the behavior of the specific heat of a monocrystal solid under high pressure, in the study of the proton–deuteron transformation as a source of energy in dense stars, in the theory of white dwarf stars, phase transitions caused by compression as in the collapse of the chemical bonding of H_2 [1–9] and so forth. This growing interest is also due to the fabrication of quantum systems of nanometric sizes with potential technological applications such as in quantum wires, dots and wells [10, 11].

In 1937 Michels et al. [12] studied the variation of the polarizability of the hydrogen atom subjected to high external pressures. They proposed a model in which a hydrogen atom is confined inside an impenetrable spherical cavity with the nucleus clamped in the center of a sphere of radius r_0 . This model is known as the confined hydrogen atom (CHA) [7, 13–16], and has been used to study how some physical properties behave in terms of pressure, such as: the hyperfine separation, given by the Fermi contact term, and the nuclear magnetic screening of the ground state. Emission frequencies, as well as the half-lives of some excited states [17, 18], and electronic properties of multi-electron atoms have been studied with it. The model has been extended to cavities of shapes other than spherical to study atoms and molecules trapped inside cavities.

After the confined hydrogen atom, the next most studied confined atom is the helium atom. Confined helium-like atoms are the simplest confined many-electron atoms, consisting of a nucleus with nuclear charge Z and two electrons. It is now when the electron–electron repulsion appears, which

This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivs License, which permits use and distribution in any medium, provided the original work is properly cited, the use is non-commercial and no modifications or adaptations are made.

© 2024 The Authors. *International Journal of Quantum Chemistry* published by Wiley Periodicals LLC.



A two-dimensional harmonic oscillator confined in a circle in the presence of a constant electric field: an informational approach

Elizabeth Cruz¹, N. Aquino^{1,a}, V. Prasad², and A. Flores-Riveros³

¹ Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. Ferrocarril de San Rafael Atlixco 186, Iztapalapa, C.P. 09310 Cd. Mexico, Mexico

² Department of Physics, Swami Shraddhanand College, University of Delhi, New Delhi, Delhi C.P. 110036, India

³ Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur, Col. San Manuel, C.P. 72570 Puebla, Pue., Mexico

Received 30 January 2024 / Accepted 2 May 2024

© The Author(s) 2024

Abstract. In this work, we study an electron subjected to a harmonic oscillator potential confined in a circle of radius r_0 and in the presence of a constant electric field. We obtain energies and eigenfunctions for three different confinement radii as a function of the electric field strength. We have used the linear variational method by constructing the trial function as a linear combination of two-dimensional confined harmonic oscillator wave functions. We calculate the radial standard deviation as a measure of the dispersion of the probability density. We also computed the Shannon entropy and Fisher information, in configuration and momentum spaces, as localization-delocalization measures for three different confinement radii and as a function of the electric field strength. We find that Shannon entropy and Fisher information are more reliable than variance in determining electron location. The behaviour of Shannon entropy and Fisher information curves is shown to depend on each specific state under study.

1 Introduction

The harmonic oscillator is undoubtedly the most prolific model in physics, from classical mechanics, electromagnetism, plasma, quantum mechanics, atomic physics, nuclear physics and elementary particles. In nuclear physics, the harmonic oscillator has been used in four, five and six dimensions to study the Coulomb problem, nuclear collective motions and a model of interacting bosons, respectively [1]. N-dimensional harmonic oscillator have been used in string theory [2,3], and the four-dimensional harmonic oscillators have been used in D-brane space [4–7].

The quantum mechanical treatment of numerous three-dimensional problems has been the subject of intense and relevant investigation in physics, as an example, we may cite studies of specific heat, energy fluctuations and entropy of harmonic oscillators in one, two and three dimensions [8]. Recently, two-dimensional systems have attracted a great deal of attention due to the fact that technological advances now make it possible to design low-dimensional structures such as wells, wires and quantum dots [9–12]. The two-dimensional harmonic oscillator has been used by Ikhdaire and Sever to study the relativistic harmonic oscillator plus Cor-

nell potentials in an external magnetic field and of Aharonov–Bohm field [13]. The two-dimensional free hydrogen atom has been studied in a non-relativistic and relativistic quantum mechanics.

On the other hand, confined systems have been used as models in the study of a large variety of properties of matter under high pressure, embedded in cavities of different size and geometrical forms, [14–28]. The most studied confined systems are the one-dimensional [14,22–32], three-dimensional [16,33] confined harmonic oscillators (CHO) and the confined hydrogen atom (CHA) [14–16,18–22], because these systems are quite simple and they have all the features normally found in more complicated confined systems. The one-dimensional CHO was used at the beginning of the 40's by Kotari and Auluck [23], Auluck [24] and Chandrasekhar [25] as a model in the study of some properties of dense stars, white dwarfs and galactic clusters. The CHO was also used as a model to analyse certain electric and magnetic properties [28] and the specific heat of monocrystals [27].

Some examples of two-dimensional confined systems previously analysed are as follows: the computation of energy spectrum of a hydrogen atom confined in a circular impenetrable disc [34–39], the two-dimensional hydrogen atom in an external magnetic field, in empty space [40–43] or embedded in a plasma, as well as the

^a e-mail: naa@xanum.uam.mx (corresponding author)