

**1er Taller de Dinámica y
Estructura Atómica,
Molecular y Óptica**

AMO

2010

Instituto de Química, UNAM
Mayo 20 y 21, 2010

Organizadores:

Remigio Cabrera-Trujillo, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM*

José Ignacio Jiménez Mier y Terán, *Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM*

Antonio M. Juárez Reyes, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM*

				
Instituto de Ciencias Físicas	Instituto de Ciencias Nucleares	Instituto de Química	DGAPA/UNAM	CONACYT

Prefacio

En años recientes hemos visto un incremento rápido en los temas de investigación en dinámica y estructura atómica, molecular y óptica. En particular, en México, se cultivan áreas que van desde la dinámica de láseres ultra-rápidos, hasta los condensados de Bose-Einstein.

Este crecimiento rápido de temas atómicos y moleculares ha sido principalmente influenciado por el ámbito internacional. Así surge la pregunta ¿Cuáles son los temas que se cultivan en México en estas áreas? Para responder a esta pregunta, surge el

1er. Taller de Dinámica y Estructura Atómica, Molecular y Óptica

**Instituto de Química, UNAM
Mayo 20 y 21, 2010**

El estudio de la física atómica y molecular es un campo muy dinámico y de gran importancia en la física actual. Esto se debe a que el conocimiento a nivel fundamental de átomos y moléculas es una base importante para entender las propiedades de la materia tanto a nivel mesoscópico (agregados moleculares, nanoestructuras) como macroscópico (cristales, líquidos, fases amorfas, por ejemplo). Además de esta gran relevancia a nivel fundamental, una parte importante de los avances más recientes en tecnología médica, telecomunicaciones, ciencia de materiales y biotecnología, se fundamenta en una buena medida en el entendimiento de las propiedades, estructura y dinámica de los átomos y moléculas así como de las técnicas que se han desarrollado en torno a estos estudios fundamentales. En la actualidad, este tipo de estudios han alcanzado un nivel muy sofisticado tanto en el aspecto teórico como el experimental. Los desarrollos de fuentes de luz de ultra-alta rapidez, gran intensidad y coherencia, combinados con la creciente velocidad y capacidad de cómputo disponible han permitido un desarrollo vertiginoso en los campos de la óptica cuántica, de la interacción de átomos y moléculas con luz, del desarrollo de estándares atómicos de muy alta precisión, así como la disponibilidad de cálculos muy refinados de propiedades atómicas y moleculares por mencionar solo algunos de los temas que tendremos oportunidad de compartir en el presente taller.

Es un motivo de orgullo el que una comunidad relativamente pequeña como lo es la mexicana esté participando y contribuyendo al más alto nivel en estas área de estudio. El **1er Taller de Estructura y Dinámica Atómica y Molecular** tiene como propósito el conjuntar, en una reunión breve pero dinámica, a distintos grupos que realizan estas actividades en nuestro país. Es indudable que las contribuciones más profundas e importantes provienen del trabajo de grupos experimentales y teóricos que conjuntan sus capacidades y esfuerzos para contribuir con ciencia del más alto nivel. Un primer paso para fomentar estas colaboraciones consiste en conocerse y compartir con la comunidad las capacidades y planes de desarrollo de cada uno de los grupos que

compartimos el entusiasmo e interés por el estudio de los átomos y las moléculas. En este espíritu, esperamos que el presente taller contribuya a la cohesión y formación de nuevas colaboraciones entre los participantes, o al fortalecimiento de las que ya existen actualmente.

Ha sido una sorpresa muy agradable constatar, por la calidad y profundidad de las contribuciones que nos enviaron los participantes, el vigor y calidad del quehacer científico de la comunidad mexicana en el área de la Física Atómica y Molecular. Sin embargo, es posible, y necesario, extender la calidad y profundidad de las contribuciones de nuestra comunidad. Para esto es importante fomentar la participación más amplia de quienes estamos haciendo investigación en estos temas así como propiciar el surgimiento de nuevas colaboraciones.

Los organizadores del presente taller hacemos votos por que éste sea el primero de muchos de este tipo en el futuro. La entusiasta respuesta y envío de contribuciones que hemos recibido (19 presentaciones orales y 15 carteles) nos hace pensar que este deseo es bastante concreto y alcanzable.

Finalmente queremos agradecer a Adrián Avila y Patricia Rodríguez del ICF-UNAM por el apoyo administrativo para llevar a cabo este evento.

Virgilio Beltrán, *In Memoriam*

Dentro de una semana recordaremos el décimo aniversario del fallecimiento de uno de los indudables pioneros de la física atómica en México, Virgilio Beltrán. Es por este motivo que el 1er Taller de Dinámica y Estructura Atómica y Molecular está dedicado a Virgilio. Los que lo conocimos seguro recordamos su gran entusiasmo por el estudio de los átomos, su incansable labor dedicada a la construcción de laboratorios de investigación o su habilidad en el cálculo de la estructura electrónica. Otros más recordamos también su pasión en el salón de clase o en el laboratorio de enseñanza.

Virgilio estudió en su natal Puebla las carreras de ingeniería y física y obtuvo el doctorado en la Universidad de Yale, donde realizó experimentos con átomos que le valieron ser incluido en el libro de revisión de los principales artículos publicados en los primeros cien años de Physical Review. En esos experimentos atómicos se puso una cota a la anisotropía de la masa inercial. A su regreso a México Virgilio participó muy activamente en la construcción de laboratorios de investigación en Puebla, en el ININ y en la UNAM. Realizó aportaciones importantes a la teoría del magnetismo atómico. También tuvo una muy destacada labor docente. Virgilio impulsó una visión integral de la enseñanza de la física, en la que la teoría y el experimento proporcionan visiones complementarias. Hasta estos momentos ha sido el único investigador del Instituto de Ciencias Nucleares de la UNAM que ha sido distinguido con el nombramiento de Investigador Emérito. Por estas y muchas razones más, los que nos dedicamos a estudiar los átomos y las moléculas en México recordamos a nuestro querido colega y amigo, Virgilio Beltrán.

México D.F. 19 de Mayo de 2010

Los Organizadores

Presentaciones orales

Un método para la descripción vibracional de moléculas.....	6
Estudios por espectroscopía de pulsos láser ultracortos de la dinámica de moléculas en estados electrónicos superiores.....	6
Imanes monomoleculares.....	7
Cobalto como catalizador: Disminución del carácter covalente de su enlace con oxígeno mediante impurificación con metales divalentes.....	8
Fotoionización de capa N del catión de Kriptón.....	8
Realce de borde isotrópico y anisotrópico de objetos de fase a través de la transformada de Hilbert en tomografía óptica de proyecciones paralelas.....	9
Radiación sincrotrónica y algunos ejemplos de su uso en la física atómica y molecular.....	10
Fotoionización de átomos, moléculas y agregados moleculares con luz sincrotrónica...	11
Propuesta para la implementación de una fuente de luz (IR-VIS-UV-VUV) de pulsos ultracortos.....	11
Estudio de efectos de confinamiento espacial en átomos multielectrónicos y moléculas diatómicas simples.....	12
Resultados nuevos y recientes sobre átomos y moléculas libres y confinados.....	13
Nuevos desarrollos en cálculos de estructuras atómicas y moleculares.....	14
Orden orientacional en un clúster de 13 moléculas de hidrógeno a baja temperatura y baja presión	14
Mediciones de temperatura de átomos de Cesio-133 ultra fríos en el reloj de fuente atómica del CENAM.....	15
Trampa dipolar para tuneo inducido por luz.....	16
Interacción átomo – campo externo.....	16
Procesos dependientes del tiempo en física atómica, molecular y óptica: Desde la fragmentación molecular y colisiones asistidas por láser hasta guías de onda de materia en chips atómicos.....	16
Dinámica caótica de átomos térmicos en laberintos creados por redes ópticas.....	17
Universalidad y el cruce BEC-BCS.....	17
Presentaciones Póster	18
Ligamiento de un electrón por molécula polar.....	18
Evolución de la energía basal de átomos multielectrónicos confinados en cavidades esféricas y esferoidales prolatas.....	19
Átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros.....	19
Cálculo ab-initio del estado base de la molécula H ₂ confinada en cajas esferoidales empleando como base los orbitales exactos del H ₂ ⁺	20
Molécula polar con momento dipolar eléctrico en presencia de campo eléctrico uniforme.....	21
Predicción del espectro de bombeo óptico polarizado en rubidio atómico.....	22
Espectroscopía en el infrarrojo lejano de la molécula de oxígeno.....	22
Estructura fina de átomos ligeros y su espectro infrarrojo.....	23
Soluciones numéricas al modelo de Dicke.....	23
Transferencia de carga asistida por láser en colisiones He ₂ ⁺⁺ H.....	24
Configuración láser amplificadora y rápidamente sintonizable.....	25

Anclado de láseres de diodo por espectroscopia de polarización empleando LabView®	25
Generación eficiente de bandas laterales para EIT	26
Manipulación de los estados hiperfinos del átomo de Cs-133 en un haz-térmico	26
Electronic structure and spectroscopy of CO	27

HORARIO Taller AMO 2010

HORARIO	Jueves 20	Viernes 21
8:30-9:00	Registro	Registro
9:00-9:30	(Chair: Antonio Juárez) Inauguración	(Chair: Rocio Jauregui) O10 Salvador A. Cruz-Jiménez
9:30-10:00	O1 Renato Lemus Casillas	O11 <u>Eugenio Ley Koo</u>
10:00-10:30	O2 Jorge Peón Peralta	O12 <u>Carlos F. Bunge Molina</u>
10:30-11:00	O3 Jorge Hirsch	O13 <u>Jacques Soullard</u>
11:00-11:30	CAFE	CAFE
11:30-12:00	(Chair: Salvador Cruz) O4 José Jiménez-Mier	(Chair: Remigio Cabrera) O14 Eduardo de Carlos
12:00-12:30	O5 G. Hinojosa	O15 <u>Víctor Valenzuela</u>
12:30-13:00	O6 Areli Montes-Pérez	O16 Diana Rodríguez Méndez
13:00-15:00	COMIDA	COMIDA
15:00-16:30	POSTERS (P1-P15)	POSTERS (P1-P15)
16:30-17:00	(Chair: José I. Jiménez) O7 Alejandro Aguilar	(Chair: Eugenio Ley Koo) O17 R. Cabrera-Trujillo
17:00-17:30	O8 Antonio. M. Juárez Reyes	O18 R. Pérez-Pascual
17:30-18:00	O9 José Luis Hernández Pozos	O19 R. Jauregui
18:00-18:30		CLAUSURA

Un método para la descripción vibracional de moléculas

Renato Lemus Casillas
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM
renato@nucleares.unam.mx

Se presenta un método algebraico para describir excitaciones vibracionales en moléculas en el marco de un esquema de operadores locales. Se parte de una representación en coordenadas y momentos y posteriormente se introduce una representación algebraica bosónica en el esquema de modos normales. El paso crucial consiste en introducir una realización en términos de bosones locales que serán anarmonizados e identificados con operadores de creación y aniquilación de funciones de Morse o Pöschl-Teller. Este procedimiento permite mejorar la descripción en forma considerable. Se presenta el ejemplo de la molécula de trifluoruro de Boro.

Estudios por espectroscopía de pulsos láser ultracortos de la dinámica de moléculas en estados electrónicos superiores

Jorge Peón Peralta
Instituto de Química, UNAM

Los fenómenos que resultan del cambio de la configuración electrónica de un compuesto ocurren en la escala de tiempo de la mil-billonésima parte de un segundo ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$). Estos procesos son centrales en campos como la fotoquímica y la optoelectrónica ya que la velocidad relativa de los diferentes caminos por los que se puede disponer de la energía electrónica define el destino del sistema fotoexcitado. En esta presentación se darán a conocer resultados recientes de estudios sobre la dinámica de estados superiores mediante el seguimiento de la emisión molecular transitoria con resolución de femtosegundos. En particular, se incluirán investigaciones sobre la dinámica de la conversión singulete-triplete de compuestos nitroaromáticos. Estudios experimentales en conjunto con la caracterización de las excitaciones por el método de funcionales de la densidad dependiente del tiempo, revelaron que los nitroaromáticos son los compuestos con la mayor velocidad de cambio de multiplicidad observada a la fecha y que dicha transición está mediada por la existencia de estados triplete superiores que se acoplan directamente con el primer singulete excitado. Adicionalmente, se

incluirán estudios sobre los mecanismos de la transferencia intramolecular de energía en sistemas multicromofóricos. En este sentido, se estudiaron oligómeros de PPV substituidos con derivados de pireno y que se unen a la cadena principal por puentes no conjugados de tamaño variable. En dichos compuestos, se observó que el mecanismo coulombico o de Förster es responsable de la transferencia y que el tiempo en el que ocurre la misma esta determinado por las fluctuaciones de la distancia entre cromóforos (pireno y la cadena de PPV), la cual es a su vez determinada por las fluctuaciones el puente no conjugado. El fenómeno de transferencia intramolecular de energía también fue estudiado en ftalocianinas sensibilizadas con cromóforos auxiliares en forma de ligantes unidos directamente al metal central del macrociclo mediante grupos carboxilato. En este último grupo de compuestos, se verificó que el mecanismo de intercambio electrónico es el principal responsable de la transferencia, la cual ocurre en tiempos menores a 200 fs y con una eficiencia de prácticamente el 100 %.

O3

Imanes monomoleculares

Jorge A. Campos, Jorge G. Hirsch

*Instituto de Ciencias Nucleares,
Universidad Nacional Autónoma de México,*

Apdo. Postal 70.543 México 04510 D.F.

Los imanes mono-moleculares (imm) son compuestos con iones metálicos en los que cada molécula se comporta como un imán individual, con muy poca interacción con las demás moléculas. Se caracterizan por una lenta relajación de la magnetización, por lo que resultan ser candidatos prometedores para aplicaciones en cómputo cuántico. En los últimos años se han realizado el estudio de mono-cristales de algunas de estas especies mediante espectroscopía de resonancia paramagnética electrónica (EPR).

En esta presentación se presenta el caso del 8Fe , mostrando que a pesar de la gran complejidad de estas moléculas, su respuesta a excitaciones en la región de las microondas se puede describir muy bien modelando al sistema como un trompo cuántico gigante, construido a partir de los espines de los electrones de valencia de los átomos de hierro.

La dinámica de estos sistemas se puede describir empleando el modelo Lipkin-Meshkov-Glick, muy conocido en la física de muchos cuerpos, que presenta diversas fases, en función del campo magnético externo aplicado. Estas fases son muy interesantes desde el punto de vista teórico, y son accesible en los imanes mono-moleculares.

Cobalto como catalizador: Disminución del carácter covalente de su enlace con oxígeno mediante impurificación con metales divalentes.

José Jiménez-Mier,¹ Paul Olalde Velasco,^{1,2} Giovanni Carabalí Sandoval,¹ Elizabeth Chavira,³ Wanli Yang.²

¹ *Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM.*

² *The Advanced Light Source, Berkeley.*

³ *Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM.*

El óxido de lantano-cobalto es un buen oxidante de óxido nítrico. Se sabe que la sustitución controlada de lantano trivalente por estroncio divalente mejora el desempeño del compuesto como catalizador. En esta plática se discutirá la información que se obtiene del estudio de la estructura electrónica de estos compuestos mediante absorción y emisión resonante de rayos X blandos. Se presentarán datos experimentales en las orillas $L_{2,3}$ de cobalto y K de oxígeno en compuestos de la familia $La_{1-x}Sr_xCoO_3$. La comparación de los espectros de absorción en la orilla $L_{2,3}$ de cobalto con cálculos de multiplete atómico indican que la introducción de estroncio produce una disminución del grado de covalencia en el enlace cobalto-oxígeno. Esta comparación permite obtener los coeficientes de mezcla de las configuraciones $3d^6$ y $3d^7\bar{L}$ de cobalto en el compuesto, donde \bar{L} representa un hueco electrónico en un oxígeno. Los espectros de emisión también muestran cambios importantes en la región de emisión debida a estados de transferencia de carga. Así mismo, los espectros de absorción y emisión en la orilla K de oxígeno muestran modificaciones en los estados de valencia y conducción de este ligando.

Fotoionización de capa N del catión de Kriptón

G. Hinojosa, A. Aguilar, A. M. Covington, M. F. Gharaibeh, M. M. Sant'Anna, A. S. S. Schlachter, I. Domínguez, C. Cisneros, I. Alvarez and R. A. Phaneuf.

Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

Se mostrarán resultados preliminares de la ionización: $Kr^+ + \gamma \rightarrow Kr^{++} + e^-$ en el intervalo de energías que contempla desde el umbral de la transición $4s^24p^5(^2P_{1/2}) \rightarrow 4s^24p^4(^3P_2)$ hasta $4s^14p^5(^3P_2)(n = 6)$ aproximadamente. El haz de iones de Kr^+ se produjo con una fuente de iones de filamento con una energía de 6 keV y el haz de fotones se tomó de la salida de un ondulator del sincrotrón del ALS en LNL Berkeley. La técnica tiene la característica de hacer coincidir las trayectorias de ambos haces en una región finita

delimitada por un electrodo al que se le aplica una diferencia de potencial. Se observan varias series de Rydberg y resonancias de ventana. Adicionalmente al espectro de iones de Kr^{2+} , también se mostrarán resultados de la medición de las secciones transversales para este proceso.

Realce de borde isotrópico y anisotrópico de objetos de fase a través de la transformada de Hilbert en tomografía óptica de proyecciones paralelas

*Areli Montes-Pérez¹, Cruz Meneses-Fabián¹, Gustavo Rodríguez-Zurita¹, Noel Ivan Toto-Arellano²,

¹*Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Posgrado Física Aplicada, 72000 Puebla, Pue.,*

²*Centro de Investigaciones en Óptica, A.C. Loma del Bósque #115, Col. Lomas del Campestre, 37150 León Gto.,*

e-mail: 275700815@estudiantes.fcfm.buap.mx

En tomografía óptica de fase bajo la aproximación de proyecciones paralelas nos permite reconstruir la rebanada de un objeto, la cual se relaciona con la distribución de índice de refracción. Experimentalmente, los datos capturados tienen significado útil por la inspección de operaciones involucradas en el plano del senograma. El senograma puede ser considerado como una matriz compuesta de valores de proyección como una función dependiente de la coordenada de la posición y el ángulo de proyección. El senograma capturado debida a una rebanada del objeto es una imagen bidimensional, la cual debe ser sometida a un proceso computacional para obtener la reconstrucción. Uno de los algoritmos computacionales para reconstrucción de rebanadas, adaptado y desarrollado, es el algoritmo de reproyección filtrada. En el presente trabajo, se propone un método experimental de reconstrucción de realce de bordes de un objeto de fase, donde, el sistema experimental tomográfico esta basado en un interferómetro de trayectoria común (sistema $4f$) basando su funcionamiento en los efectos de difracción de campo lejano o de Fraunhofer. En el plano de Fourier es colocado un filtro signo (filtro escalón de fase) con el fin de obtener la Transformada de Hilbert [1] de la proyección en el plano imagen. Se presenta el análisis teórico, resultados numéricos y resultados experimentales preliminares del realce de borde isotrópico de la rebanada del objeto, mediante la transformada de Hilbert de las proyecciones a través del algoritmo de la retroproyección filtrada.

[1] G. Abhilash, *Article series of the Signals Research Laboratory*, April 28, 2006.

*Becario CONACYT.

Radiación sincrotrónica y algunos ejemplos de su uso en la física atómica y molecular

Alejandro Aguilar
Advanced Light Source,
Lawrence Berkeley National Laboratory,
1 Cyclotron Road, Berkeley, CA-94720, USA
aaguilar@lbl.gov
<http://ssg.als.lbl.gov/ssgbeamlines/beamline10-0-1>

La línea 10.0.1 o HRAMO (por sus siglas en inglés; *High Resolution Atomic, Molecular and Optical Beamline*) del Advanced Light Source (ALS) en Berkeley California, es una línea de radiación sincrotrónica abierta a usuarios externos y dedicada al estudio de sistemas atómicos, iónicos, moleculares y conglomerados en fase gaseosa. Los fotones son producidos por un ondulator de 4.55 metros de largo, con 43 periodos de 10 cm cada uno. La línea está equipada con un monocromador esférico, que contiene tres rejillas de difracción (380, 925 y 2100 líneas/mm, respectivamente) y cubre la región de energía de entre 17 eV y 350 eV. En la mayor parte de esta región de energías, la línea proporciona 10^{12} fotones/s con un poder de resolución ($E/\Delta E$) mayor a 10,000. A expensas de la resolución, se puede obtener hasta 10^{14} fotones/s en algunas regiones de energía. También, se puede alcanzar un poder de resolución de aproximadamente 64,000 reduciendo las rejillas de entrada y salida al monocromador y por ende el flujo de fotones.

En esta plática, describiré las características de la línea 10.0.1 del ALS y presentaré algunos ejemplos de las investigaciones que se realizan en ella. Pondré énfasis en los estudios de fotoionización en iones positivos, negativos así como conglomerados iónicos. Estos estudios se realizan utilizando la técnica de haces sobrepuestos. Una gran variedad de intereses científicos provenientes de áreas tales como la astrofísica, el desarrollo de fuentes de luz en el extremo ultravioleta para la siguiente generación de la tecnología de litografía así como posibles aplicaciones médicas son algunas de las motivaciones para los estudios de fotoionización que se presentaran. Finalmente plantearé algunos planes para extender las capacidades de este instrumento para detectar en un futuro los fotoelectrones en el proceso de fotoionización de iones.

Fotoionización de átomos, moléculas y agregados moleculares con luz sincrotrónica

Antonio M. Juárez Reyes
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM
Avenida Universidad S/N Colonia Chamilpa, Cuernavaca, Mor.
juarez@fis.unam.mx

El desarrollo de fuentes sintonizables en energía, en el rango del ultravioleta y los rayos x propició una revolución en el estudio de la fotoionización de átomos, moléculas y otras especies más complicadas, como los agregados moleculares (clusters). En esta presentación mostraré una colección de estudios llevados a cabo en distintas fuentes de radiación sincrotrón, enfocadas al estudio de la fotoionización en fase gaseosa. En particular, presentaré el estudio de distribuciones angulares de fotoelectrones en O₂, H₂, H₂O, N₂O, SO₂ y de clusters de CdS. La elección de estas moléculas ha sido hecha teniendo en mente que cada uno de estos estudios ilustrará el uso de técnicas experimentales distintas. El estudio de H₂ y O₂, por ejemplo, requiere el empleo de campos confinados para realizar distribuciones angulares con analizadores fijos, a alta resolución. El estudio de las moléculas involucra la medición en coincidencias de dos fotoelectrones y, finalmente, el estudio de agregados involucra el estudio de la dinámica de una pluma de plasma generada por ablación. El propósito de presentar este catálogo de técnicas tiene el propósito de mostrar a los colegas que hacen cálculos, el potencial que se tiene al acoplar sistemas experimentales de alta resolución con las fuentes de luz ultravioleta de tercera generación. La presentación concluirá con una discusión breve de las tendencias actuales en estudios de fotoionización, así como las oportunidades que existen actualmente para realizar estudios de la dinámica y estructura de átomos, moléculas y clusters.

Propuesta para la implementación de una fuente de luz (IR-VIS-UV-VUV) de pulsos ultracortos.

José Luis Hernández Pozos
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Se propone la construcción de una fuente de luz, a partir de láseres de femtosegundos amplificados, que emita desde el infrarrojo hasta el ultravioleta extremo con pulsos de duración de alrededor de 30 fs. La filosofía de una instalación como ésta es tener una fuente multiusuario donde diferentes investigadores puedan conectarse para realizar experimentos de manera similar a como se trabaja en un sincrotrón. Una fuente

de este tipo sería una de las pocas en su género en el mundo y ciertamente la única en Latinoamérica.

O10

Estudio de efectos de confinamiento espacial en átomos multielectrónicos y moléculas diatómicas simples.

Salvador A. Cruz-Jiménez,
Departamento de Física , UAM-Iztapalapa
cruz@xanum.uam.mx

El propósito de esta comunicación es presentar trabajos recientes y en proceso, realizados por el autor y sus colaboradores, sobre el análisis de efectos de confinamiento en las propiedades electrónicas de diversos sistemas cuánticos. Dentro de los trabajos recientes, se obtuvieron las condiciones de confinamiento para identificar las diferentes etapas de ionización de átomos multielectrónicos atrapados en cavidades esféricas con barreras de confinamiento penetrables [1], se calcularon energías medias de ionización en materia condensada para predecir diferencias en la pérdida de energía de protones al atravesar un medio en fase gaseosa y en fase líquida (sólida) [2]. Se extendió el análisis de confinamiento de átomos multielectrónicos al caso de cavidades esferoidales prolatas impenetrables con el núcleo atómico anclado en uno de los focos y para el caso de una frontera plana impenetrable [3]. En este último caso, se obtuvo el potencial dispersor átomo-superficie [2,4] y se analizó la dependencia de la energía media de excitación de un átomo multielectrónico en función de su distancia al plano, prediciéndose efectos de superficie e interficie vs. volumen en la pérdida de energía de haces de iones [2]. Por otra parte, en el caso de sistemas monolectrónicos confinados por cavidades esferoidales prolatas impenetrables, se estudió variacionalmente el problema del ión molecular H_2^+ (estado base y primer estado excitado) con núcleos situados en posiciones arbitrarias a lo largo del eje mayor de la cavidad, para el cual la ecuación de Schrödinger no es separable, obteniéndose condiciones de relajamiento internuclear más flexibles al desacoplar las posiciones nucleares de las focales, como tradicionalmente se hacía. Esta misma metodología se empleó para analizar la evolución energética del estado base del átomo de hidrógeno en función de su posición dentro de una caja esferoidal prolata de un tamaño y excentricidad dados [5]. Finalmente, dentro de este esquema, se obtuvo la energía de un electrón atrapado en una cavidad esferoidal prolata y se comparó con las correspondientes soluciones exactas a la ecuación de Schrödinger [6]. Dentro de los trabajos recién terminados se reportarán los relacionados con la molécula de H_2 confinada por una cavidad esferoidal prolata, con sus núcleos localizados en posiciones arbitrarias a lo largo del eje mayor empleando una combinación de funciones variacionales tipo H_2^+ [7]. Así mismo, en este taller se reportará el cálculo *ab initio* para la molécula H_2 confinada empleando la base de soluciones exactas a la ecuación de Schrödinger para H_2^+ [8] y los avances en el análisis de propiedades de átomos multielectrónicos confinados en cavidades esferoidales prolatas con posición nuclear arbitraria a lo largo del eje mayor [9].

- [1] C. Díaz-García, S. A. Cruz, *Int. J. Quantum Chem.*, **108**, 1572 (2008).
- [2] S. A. Cruz, *Radiat. Eff. & Defects in Solids*, **164**, 389 (2009).
- [3] S. A. Cruz, *Adv. Quantum Chem.* **57**, Cap. 8, 255 (2009).
- [4] S. A. Cruz, E. Ley-Koo, R. Cabrera-Trujillo, *Phys. Rev. A*, **78**, 032905 (2008)
- [5] S. A. Cruz, R. Colín-Rodríguez, *Int. J. Quantum Chem.*, **109**, 3041 (2009).
- [6] R. Colín-Rodríguez, S. A. Cruz, *Amer. J. Physics* (to be submitted).
- [7] R. Colín-Rodríguez, S. A. Cruz, *J. Phys. B* (to be submitted).
- [8] R. Colín-Rodríguez, S. A. Cruz, *Taller AMO* (2010).
- [9] C. Díaz-García, R. Colín-Rodríguez, S. A. Cruz, *Taller AMO* (2010).

O11

Resultados nuevos y recientes sobre átomos y moléculas libres y confinados

Eugenio Ley Koo,
Instituto de Física, UNAM
eleykoo@fisica.unam.mx

En esta contribución para el taller de Átomos, Moléculas y Óptica 2010 se hace una revisión de trabajos recientes del autor y sus colaboradores [1-8], destacando resultados nuevos, implementación de métodos de cálculo, y su extensión y adaptación al pasar de átomos y moléculas libres a confinados. Concretamente se identificó una función generadora para las funciones de onda completas del átomo de hidrógeno en cuatro sistemas de coordenadas diferentes [1], y se formuló y evaluó la rotación de moléculas asimétricas en forma exacta usando bases de armónicos esféricos [2] y de armónicos esferoconales [3]. En la contribución invitada al volumen especial de *Advances in Quantum Chemistry* sobre sistemas cuánticos confinados [4], se anticiparon varios problemas que desde entonces empezamos a investigar. Algunos de ellos los hemos ido completando, como el del helio atómico He e ionizado He⁺ al ser dispersado por una superficie plana [5], el átomo de hidrógeno confinado en conos elípticos [6], y por extensión la rotación de moléculas asimétricas confinadas en conos elípticos [7] así como cualquier sistema cuántico con potencial central con el mismo tipo de confinamiento [8]. En este taller también se reportarán avances sobre el átomo de hidrógeno en ángulos diedros [9], rotaciones de moléculas asimétricas polares en campo eléctrico uniforme [10] y el ligamiento de un electrón en el campo dipolar eléctrico de una molécula polar [11].

- [1] E. Ley-Koo and A. Góngora-T, *Int. J. Quantum Chem.* **109**, 790 (2009)
- [2] E. Ley-Koo and R. Méndez-Fragoso, *Rev. Mex. Fís.* **54** 69 (2008)
- [3] E. Ley-Koo and R. Méndez-Fragoso, *Rev. Mex. Fís.* **54** 162 (2008)
- [4] E. Ley-Koo, *Adv. Quantum Chem.* **57**, Chap. 3, 79 (2009)
- [5] S. A. Cruz, E. Ley-Koo and R. Cabrera-Trujillo, *Phys. Rev. A* **78** 032905 (2008)
- [6] R. Méndez-Fragoso and E. Ley-Koo, *Int. J. Quantum Chem.* (en prensa 2010)
- [7] R. Méndez-Fragoso and E. Ley-Koo, *Int. J. Quantum Chem.* (to be submitted)

- [8] R. Méndez-Fragoso and E. Ley-Koo, *Int. J. Quantum Chem.* (en prensa 2010)
[9] Guo-Hua Sun and E. Ley-Koo, *Taller AMO* (2010)
[10] R. Méndez-Fragoso and E. Ley-Koo, *Taller AMO* (2010)
[11] S. A. Cruz, E. Ley-Koo and L. Medina, *Taller AMO* (2010)

O12

Nuevos desarrollos en cálculos de estructuras atómicas y moleculares

Carlos F. Bunge Molina
Instituto de Física, UNAM
bunge@fisica.unam.mx

El método de interacción de configuraciones ha sido reformulado permitiendo cálculos relativamente eficientes de exactitud controlada tanto en regímenes relativistas (átomos) como no relativistas (átomos y moléculas). Se presentarán los nuevos métodos y aplicaciones recientes para O^{5+} , B^+ , B , B^- y Ne.

O13

Orden orientacional en un clúster de 13 moléculas de hidrógeno a baja temperatura y baja presión

Jacques Soullard y Ruben Santamaria.
Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal
20-364, C.P. 01000, Mexico DF.
soullard@fisica.unam.mx

Presentamos un modelo de confinamiento para sistemas con un número finito de partículas y derivamos las expresiones de la temperatura, presión y volumen que determinan el estado termodinámico del sistema, excluyendo el régimen donde los efectos cuánticos, como la condensación de Bose-Einstein, son importantes. El modelo de confinamiento se aplica al caso de un clúster de 26 átomos de hidrógeno en una cavidad fulerenica de 60 átomos de hidrógeno. Para este sistema, se reporta resultados de cálculos de dinámica molecular en la aproximación clásica de Born-Oppenheimer. El sistema está estudiado utilizando la versión de la Teoría de la Funcional de la Densidad conocida como la del Gradiente Generalizado con la funcional de intercambio de Becke88 y la funcional de correlación de Lee-Yang-Parr. Las orbitales moleculares

están descritas por funciones Gaussianas del tipo DZVP proporcionadas por el programa NWChem. En el régimen de baja presión y baja temperatura, el clúster está constituido por moléculas. Reportamos resultados relativos al orden orientacional y a la variación de la frecuencia vibracional como función de la presión. Este último resultado está en acuerdo cualitativo con el resultado experimental obtenido con el sólido.

O14

Mediciones de temperatura de átomos de Cesio-133 ultra fríos en el reloj de fuente atómica del CENAM

Eduardo de Carlos, J. Mauricio López, María Guadalupe Espinosa, Sergio López
División de Tiempo y Frecuencia, CENAM

La definición de la unidad de tiempo del Sistema Internacional de unidades (SI), el segundo, está dada en términos de la frecuencia del campo eléctrico asociado a la transición hiperfina del estado base del átomo de Cesio 133. Las mejores reproducciones experimentales de la unidad de tiempo se realizan a través de los llamados relojes de fuente atómica, los cuales utilizan técnicas de manipulación de átomos con luz para disminuir la temperatura en átomos de Cesio hasta varios cientos de nano Kelvins. Las mejores incertidumbres en la reproducción del segundo del SI con estos experimentos son del orden de partes en 10^{16} . Para alcanzar dichas incertidumbres es necesario evaluar los efectos sistemáticos presentes en las fuentes atómicas, los cuales desvían el valor de la frecuencia del campo eléctrico de interés. Uno de estos efectos proviene de las colisiones entre los átomos que componen la nube atómica. De esta manera, mediciones de alta exactitud de la temperatura en los átomos de Cs-133 son necesarias a fin de corregir uno de los efectos sistemáticos más importantes en la realización experimental de la unidad de tiempo. En este trabajo se presentan algunos resultados de la medición de la temperatura en átomos de Cesio-133 atrapados en la MOT de la fuente atómica del CENAM, CENAM CsF-1, utilizando el método de tiempo de vuelo (TOF). Se presenta y discute el arreglo óptico utilizado, la secuencia de enfriamiento y atrapamiento, post-enfriamiento y lanzamiento vertical de la nube atómica. La temperatura es calculada considerando una distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann de los átomos que forman la nube, obteniendo temperaturas alrededor de un micro Kelvin sobre el cero absoluto.

Trampa dipolar para tuneleo inducido por luz

Víctor Valenzuela, Lorenzo Hernández, J. Juan Ortega y Eduardo Gómez
Instituto de Física, UASLP

Existe una diferencia de energía gravitacional entre dos pozos adyacentes en una red óptica vertical. Un láser desintonizado por esta energía con respecto a resonancia induce un tuneleo de átomos a pozos adyacentes. El proceso es coherente y la dirección de tuneleo se controla con el signo de la desintonía. La trampa dipolar requiere de un láser de alta potencia, sintonizado lejos de resonancia y enfocado en la posición de los átomos. Utilizamos una cavidad de Fabry-Perot para transferir la estabilidad de un laser amarrado a una referencia atómica al láser de la trampa dipolar.

Interacción átomo – campo externo

Diana Rodríguez Méndez, Héctor Manuel Moya Cessa,
dianarm@inaoep.mx, hmmc@inaoep.mx
Instituto Nacional de Astrofísica Óptica y Electrónica.

En el presente trabajo mostramos la solución dinámica al problema de interacción entre un campo cuantizado, un átomo de dos niveles y un campo clásico. Partiendo del Hamiltoniano que nos describe ésta interacción, le aplicamos unas transformaciones que nos permiten encontrar el operador de evolución, con lo cual tenemos la solución a la ecuación de Schrödinger.

Procesos dependientes del tiempo en física atómica, molecular y óptica: Desde la fragmentación molecular y colisiones asistidas por láser hasta guías de onda de materia en chips atómicos

R. Cabrera-Trujillo
*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México
Cuernavaca, Morelos, México*

Los dinámica de procesos físicos tales como la fragmentación de moléculas, la transferencia de carga en colisiones, la pérdida de energía, excitaciones, dispersión y propagación de ondas de materia en física de átomos ultrafríos se describe mediante la evolución temporal de la ecuación de Schrödinger o su variación no lineal (ecuación de Gross-Pitevskii) para gases diluidos.

En esta plática, dentro del espíritu del taller, daré una revisión de las contribuciones que ha hecho nuestro grupo en estas áreas con el fin de dar una idea general de los métodos *ab initio* y numéricos que utilizamos, así como de los retos que enfrentamos. Pondremos énfasis en procesos de fragmentación molecular fuera de la aproximación de Born-Oppenheimer, continuaremos con el control y optimización de la transferencia de carga en presencia de un láser intenso y corto. Concluiremos con potenciales de atrapamiento en guías de onda de materia y el número de átomos que éstos pueden contener con aplicaciones a chips atómicos.

Éste trabajo se llevo a cabo con apoyo de PAPIIT 107108 y CONACyT 89607

O18

Dinámica caótica de átomos térmicos en laberintos creados por redes ópticas

R. Perez-Pascual, B. M. Rodríguez-Lara, R. Jauregui
Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

Estudiamos la dinámica de átomos térmicos no interactuantes embebidos en una red óptica estructurada. La latiz se genera por haces lumínicos contrapropagantes con simetría parabólico-cilíndrica fuera de resonancia respecto a la transición atómica relevante hacia el rojo. El sistema exhibe comportamiento cuasi-periódico o caótico cuya dominancia puede controlarse variando la intensidad de los haces. La presencia de vuelos tipo Levy en el plano transversal de la latiz, as como la estructura de frecuencias asociadas a las trayectorias son utilizados como señales del caos.

O19

Universalidad y el cruce BEC-BCS

R. Jauregui, R. Paredes, L.E.C. Rosales-Zarate y Genaro Toledo
Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México Apartado Postal 20-364, México D. F. 01000, México

Después de hacer una descripción general de los procesos involucrados en la creación y control de gases atómicos ultra fríos fermiónicos, se describe la metodología numérica empleada en este trabajo para su estudio. Los resultados numéricos dan énfasis a las funciones de correlación y a la relación entre propiedades establecidas por el teorema del virial. Se discute la hipótesis de universalidad en el límite de unitariedad y las manifestaciones de este a nivel numérico y experimental.

Presentaciones Póster

P1

Ligamiento de un electrón por molécula polar

Salvador A. Cruz, *Departamento de Física, UAM-Iztapalapa*

Eugenio Ley Koo, *Instituto de Física, UNAM*

Lucía Medina, *Facultad de Ciencias, UNAM*

cruz@xanum.uam.mx

eleykoo@fisica.unam.mx

lumg@fciencias.unam.mx

El análisis del ligamiento de un electrón en el campo dipolar eléctrico de una molécula polar con momento dipolar \vec{p} , como solución de la ecuación de Schrödinger con energía potencial $U^{\text{ext}}(r,\theta)=-ep\cos\theta/r^2$ data de hace cuatro décadas [1]. Ese tipo de análisis es incompleto por el comportamiento no físico de “caída hacia la singularidad $r\rightarrow 0$ ” de la solución radial correspondiente que se manifiesta a través de oscilaciones con amplitudes y números de onda crecientes. En la sección 5.4 de la Ref. [2] se propuso remediar esa situación usando la energía potencial dipolar eléctrica en el interior de una esfera de radio $r=a$, $U^{\text{int}}(r,\theta)=-\frac{ep}{a^3}r\cos\theta$. Como la ecuación de Schrödinger es separable e integrable para $r\leq a$ en coordenadas esféricas, y para $r\leq a$ lo es en coordenadas cilíndricas circulares, en la Ref. [3] intentamos construir la solución completa para $0\leq r<\infty$ imponiendo las condiciones de continuidad de dichas funciones radiales y sus derivadas en la frontera $r=a$, concluyendo que no es posible. En esta contribución para el Taller AMO 2010, presentamos una formulación alternativa para construir la solución a partir de la solución separable en el exterior, e integrando numéricamente la ecuación diferencial parcial en el interior incorporando los valores conocidos en la frontera $\psi^{\text{ext}}(r=a,\theta)$ y $\nabla\psi^{\text{ext}}(r=a,\theta)$.

[1] J.E. Turner, Am. J. Phys. **45**, 758 (1977)

[2] E. Ley-Koo, Adv. Quantum Chem. **57**, 79 (2010)

[3] E. Ley-Koo and S.A. Cruz, LII Congreso Nacional de Física 4MJ03, 94 (2009)

Evolución de la energía basal de átomos multielectrónicos confinados en cavidades esféricas y esferoidales prolatas.

Cecilia Díaz-García , Ricardo Colín-Rodríguez, y Salvador A. Cruz,
Departamento de Física,
Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa Apartado Postal 55534, 09340,
México, D. F., México.

El estudio de la evolución de la energía del estado base en átomos multielectrónicos confinados ha sido estudiado utilizando método HF [1-2] y funcionales de la densidad [3-4], los cuales son en su tipo métodos de gran precisión. Sin embargo, se ha probado la capacidad del funcional de densidad TFD λ W para el cálculo de energía del estado basal para átomos multielectrónicos confinados en cajas esféricas y con diferentes alturas de barrera [5-6]. Fundamentalmente nos interesa mostrar en este trabajo las diferentes etapas de ionización y las condiciones para encontrar el valor umbral para el cual el electrón escapa de la región de confinamiento. Este trabajo se ha dividido en dos partes concernientes a el análisis de confinamiento en cavidades esféricas y a los avances que se tienen sobre la evolución de la energía basal de sistemas multielectrónicos confinados en cavidades esferoidales prolatas, donde a diferencia con [7], se estudia la situación más general en la que la posición del núcleo es arbitraria a lo largo del semieje mayor en lugar de dejarla fija en los focos. Se presentan las condiciones de ionización para los sistemas $C \rightarrow C^+$, $Ne \rightarrow Ne^+$ en una cavidad de confinamiento con tamaño y excentricidad fijos.

- [1] Eduardo V. Ludeña, J. Chem. Phys., **69**, 4 (1978) 1770.
- [2] J. P. Connerade, V. K. Dolmatov, P. A. Lakshmi, J. Phys. B, **33** (2000) 251.
- [3] J. Garza, R. Vargas, A. Vela, Phys. Rev. E. **58** (1998) 3949.
- [4] J. Garza, R. Vargas, N. Aquino, K. D. Sen, J. Chem. Sci. **117** (2005) 379;
- [5] S.A. Cruz, C. Díaz-García, G. Covarrubias, Int. J. Q. Chem., **102**, (2005).
- [6] C. Díaz-García, S. A Cruz, Int. J. Q. Chem., **108** (2008) 1572.
- [7] S.A. Cruz, Adv. Quantum. Chem. **57** (2009) 255.

Átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros

Guo-Hua Sun, *Departamento de Física, ESFM-IPN*
Eugenio Ley-Koo, *Instituto de Física, UNAM*
sunghdb@yahoo.com, eleykoo@fisica.unam.mx

La investigación de esta contribución se anticipó en la Sección 5.2 de la Ref. [1]. Efectivamente, la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno es separable e integrable en coordenadas esféricas ($x=r \sin \vartheta \cos \varphi$, $y=r \sin \vartheta \sin \varphi$, $z=r \cos \vartheta$), parabólicas ($x=\xi \eta \cos \varphi$, $y=\xi \eta \sin \varphi$, $z=(\xi^2-y^2)/2$), y esferoidales prolatas ($x=f \sqrt{(u^2-1)(1-v^2)} \cos \varphi$, $y=f \sqrt{(u^2-1)(1-v^2)} \sin \varphi$, $z=f \xi \eta$) que comparten la simetría rotacional alrededor del eje z , con la coordenada común φ y la componente de momento angular l_z como constante de movimiento también común. En particular, el confinamiento del átomo en el ángulo diedro $0 \leq \varphi \leq \varphi_0$, con las condiciones de frontera $\psi(q_1, q_2, \varphi=0)=0$ y $\psi(q_1, q_2, \varphi=\varphi_0)=0$ rompen la simetría rotacional del sistema al restringir las funciones angulares a la forma $\Phi(\varphi)=A \sin \mu \varphi$, donde $\mu=n_\varphi \pi/\varphi_0$, $n_\varphi=1, 2, \dots$ siendo el eigenvalor μ de l_z no entero en general. En el Taller AMO2010 se presentan resultados numéricos sobre los eigenvalores de energía y las eigenfunciones del átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros $0 < \varphi_0 \leq 2\pi$, en los tres sistemas de coordenadas incluyendo un análisis de la degeneración de los eigenestados dentro de cada sistema y las relaciones entre ellos de un sistema a otro.

[1] E. Ley-Koo, *The Hydrogen Atom confined in Semi-Infinite Spaces Limited by Conoidal Boundaries*, *Advances in Quantum Chemistry* **57**, Chapter 3, 79 (2009).

P4

Cálculo *ab-initio* del estado base del la molécula H_2 confinada en cajas esferoidales empleando como base los orbitales exactos del H_2^+

Ricardo Colín-Rodríguez y Salvador A. Cruz
Departamento de Física, UAM-Iztapalapa
colinrr81@yahoo.com.mx, cruz@xanum.uam.mx

En la aproximación de Born-Oppenheimer, la ecuación de Schrödinger para el ión molecular H_2^+ confinado en cavidades esferoidales prolatas con cargas nucleares colocadas en los focos es separable y por lo tanto permite solución exacta [1]. La base completa formada por estas soluciones puede ser utilizada en la construcción de la función de onda de sistemas más complicados tales como la molécula de hidrógeno bajo las mismas condiciones de confinamiento. En este trabajo se presenta el cálculo *ab initio* del efecto de confinamiento en la energía electrónica de la molécula de H_2 empleando la base de H_2^+ y se resuelve el problema de eigenvalores correspondiente obteniéndose un conjunto de energías y eigenvectores asociados al estado base y otros estados excitados. En este trabajo, se pone especial atención a la evolución del estado basal, desde la condición de molécula libre hasta la de confinamiento fuerte de manera totalmente *ab initio*, es decir, sin necesidad de parámetros variacionales o externos. Para la molécula libre se obtiene una energía total de -1.1424 a.u. para una distancia internuclear $R=1.4$ a.u., la cual difiere en 0.032 a.u. de la energía correspondiente (-1.1744 a.u.) obtenida por los cálculos más precisos de Kolos-Roothaan [2,3]. Esta diferencia corresponde a la energía de correlación [3], la cuál no ha sido incluida en nuestros cálculos. Para el caso

confinado se comparan las energías obtenidas con las de otros autores [4,5], mostrando buen acuerdo. Finalmente, se discute trabajo en proceso para la identificación de los estados excitados obtenidos empleando el límite de átomo unido.

- [1]. E. Ley-Koo, S. A. Cruz, J. Chem. Phys., **74**, 4603 (1981).
- [2]. W. Kolos, C. C. J. Roothaan, Rev. Mod. Phys., **32**, 205 (1960).
- [3]. W. Kolos, C. C. J. Roothaan, Rev. Mod. Phys., **32**, 219 (1960).
- [4]. R. LeSar, D. R. Herschbach, J. Chem. Phys., **85**, 2798 (1981).
- [5]. Tao Pang, Phys. Rev. A, **49**, 1709 (1994).

P5

Molécula polar con momento dipolar eléctrico en presencia de campo eléctrico uniforme

Ricardo Méndez Fragoso y Eugenio Ley Koo
Instituto de Física, UNAM

rmf@fisica.unam.mx, eleykoo@fisica.unam.mx

Se formula la descripción de una molécula asimétrica con momento dipolar eléctrico \vec{p} en interacción con un campo eléctrico uniforme \vec{E} . Se trabaja en el marco de referencia de ejes principales fijos en la molécula en que el Hamiltoniano toma la siguiente forma:

$$H = \frac{\hat{l}_x^2}{2I_1} + \frac{\hat{l}_y^2}{2I_2} + \frac{\hat{l}_z^2}{2I_3} - \vec{p} \cdot \vec{E}$$

La base natural para hacer la descripción son los armónicos esferoconales, mismos que se pueden expresar como superposición de armónicos esféricos [1], o como productos de polinomios de Lamé [2]. La base de eigenfunciones en la referencia [1] sirven para calcular los elementos de matriz necesarios para evaluar los eigenvalores de la energía y las eigenfunciones de la molécula con el campo eléctrico uniforme [3]. La matriz de rotación del Hamiltoniano para la rotación libre, correspondiente a los tres primeros términos, se rompe en bloques tridiagonales de órdenes $l \times l$ y $(l+1) \times (l+1)$ para cada valor de l entero [1].

Las reglas de selección para el potencial de interacción son: $l' = l \pm 1$ y $m' = m - 1, m, m + 1$, y se traducen en sub-matrices rectangulares de tamaño $(2l-1) \times (2l+1)$ horizontalmente y $(2l+1) \times (2l-1)$ verticalmente en las vecindades superior e izquierda respectivamente, de los bloques cuadrados del párrafo anterior. Al igual que en la referencia [1], también se reconocen tres bases alternativas de armónicos esféricos que se pueden utilizar dependiendo de la geometría de la molécula. Las reglas de selección en el número cuántico l hace que la matriz asociada al Hamiltoniano sea de rango infinito, pero con matrices suficientemente grandes se pueden obtener resultados exactos con precisión y convergencia [3]. En la presente contribución para el Taller AMO 2010 se incluyen

resultados numéricos sobre las energías y eigenfunciones para diferentes tipos de moléculas asimétricas y diferentes orientaciones del momento dipolar eléctrico.

- [1] E. Ley-Koo y R. Méndez-Fragoso., Rev. Méx. Fís., **54**, 69 (2008)
- [2] E. Ley-Koo y R. Méndez-Fragoso., Rev. Méx. Fís., **54**, 162 (2008)
- [3] R. Méndez-Fragoso y E. Ley-Koo. Congreso Nacional de Física, Acapulco, 2009. SMF.

P6

Predicción del espectro de bombeo óptico polarizado en rubidio atómico.

Jesús Flores-Mijangos, y José I. Jiménez-Mier y Terán
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, México, D. F.

Resolviendo numéricamente las ecuaciones de Einstein se evalúa la evolución temporal de las poblaciones de los estados F , M_F en los niveles atómicos $5s$ y $5p$ del rubidio atómico al interactuar con dos haces contrapropagantes de distinta frecuencia. El primer haz, denominado haz de prueba, está linealmente polarizado y sintonizado en una transición del rubidio mientras el segundo haz, el haz de saturación, está circularmente polarizado y de frecuencia variable para ir sintonizando las diferentes transiciones. Se calculan los coeficientes de absorción bajo estas condiciones para posteriormente determinar el espectro equivalente a aquellos obtenidos en experimentos de bombeo óptico polarizado. Los coeficientes de absorción presentan una anisotropía que se registra al monitorear el haz de prueba. Los coeficientes de absorción están promediados en el tiempo en función de los tiempos de tránsito de los átomos de rubidio al atravesar el par de haces contrapropagantes. Se presentan los resultados para distintas situaciones experimentales así como la verificación de los espectros obtenidos en nuestro laboratorio.

P7

Espectroscopía en el infrarrojo lejano de la molécula de oxígeno

Hermenegildo Barceinas Cruz y Jesús Flores Mijangos
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM
flores@nucleares.unam.mx

En este trabajo se estudia la dinámica rotacional incluyendo la estructura fina de la molécula de oxígeno. Haciendo uso del hamiltoniano efectivo para una molécula en el

estado electrónico $^3\Sigma_g^-$ se obtienen los elementos de matriz en la base desacoplada correspondiente al caso a) de Hund. Estos cálculos se efectúan dentro del marco del teorema de Wigner-Ekcart y la teoría de tensores esféricos. El objetivo central es predecir el espectro de la molécula en la región del infrarrojo lejano a partir del cual se pueda valorar la posibilidad de registrar su presencia en el medio interestelar así como en la atmósfera terrestre. Dadas las propiedades de simetría de los estados que describen la dinámica de este sistema resulta interesante identificar las diferencias en estructura que se presenta entre los distintos isómeros de la molécula de oxígeno. La probabilidades de transición involucran sólo aquellas debidas al dipolo magnético del sistema molecular.

P8

Estructura fina de átomos ligeros y su espectro infrarrojo

Lucía Cristina Contreras González y Jesús Flores Mijangos
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM
 flores@nucleares.unam.mx

En este trabajo se estudian las correcciones relativistas al hamiltoniano atómico de sistemas ligeros, en particular se analizan la interacción magnética y cuadrupolar de la estructura hiperfina debida al espín del núcleo atómico. Se parte del hamiltoniano efectivo dividido en tres partes: interacción clásica, estructura fina y estructura hiperfina. Los cálculos se efectúan en la base acoplada y se incluye la presencia de un campo magnético externo con el propósito de analizar el desdoblamiento Zeeman de los niveles de energía y analizar la posibilidad de cuantificar los coeficientes atómicos de la estructura hiperfina a partir del registro espectroscópico usando la técnica de resonancia magnética láser en el infrarrojo lejano. Los sistemas a estudiar son átomos ligeros con electrones en las subcapas p y d . Con los resultados obtenidos se desarrolló un programa en lenguaje de alto nivel con el cual se pueda predecir la posición de las líneas espectrales así como las probabilidades de transición asociadas.

P9

Soluciones numéricas al modelo de Dicke

Miguel Angel Bastarrachea Magnani, Jorge Hirsch Ganievich
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM
 hirsch@nucleares.unam.mx

Se estudian soluciones numéricas exactas de sistemas atómicos de dos niveles en una cavidad dentro de un campo de radiación monocromático modelados a través del hamiltoniano de Dicke. El modelo de Dicke es un ejemplo del comportamiento cuántico

colectivo que exhibe transiciones de fase cuánticas “superradiantes” en el límite termodinámico. Se comparan los resultados obtenidos empleando dos bases distintas. Ambas emplean la base de “pseudospin” para los estados atómicos. En un caso los fotones se describen en la base de número, mientras que en el otro se emplean estados coherentes resultantes de desplazar a los operadores de creación y aniquilación del campo de radiación por un factor proporcional a Jz , y potencias de estos operadores actuando sobre los estados coherentes. Se muestra que al aumentar el número de átomos, en la fase superradiante el número de fotones que se acoplan a ellos crece exponencialmente, y con ellos la dimensión de las matrices a diagonalizar. Esto impone un límite muy fuerte a los estados que se pueden resolver exactamente. En la base de estados coherentes el número de excitaciones que se acoplan con los átomos disminuye cuando el número de átomos crece, permitiendo cálculos que son impensables en la otra base. Trabajo apoyado parcialmente por Conacyt, México y DGAPA-UNAM.

P10

Transferencia de carga asistida por láser en colisiones $\text{He}^{2+} + \text{H}$

Fco. Javier Domínguez-Gutiérrez y R. Cabrera-Trujillo.
Instituto de Ciencias Físicas
Universidad Nacional Autónoma de México.
Cuernava, Morelos. 62210. México.

La interacción radiación-materia es un problema abierto en física atómica y molecular, en particular el caso de la interacción de un láser con un sistema en colisión. En este trabajo resolvemos la ecuación de Schrödinger numéricamente para investigar la transferencia de carga asistida por láser en colisiones $\text{He}^{2+} + \text{H} + n\hbar\omega$ en la aproximación semi-clásica de parámetro de impacto. Se estudia el efecto de la intensidad moderada (del orden de 10^{12} W/cm^2), el efecto de la frecuencia del láser, así como el efecto de la fase relativa del láser con la colisión y su influencia sobre la transferencia de carga a una energía de colisión de 1 keV. Por último se hace un estudio de la probabilidad de captura para energías de colisión de 150 eV a 4 keV y se compara con resultados experimentales existentes para este sistema y con otros métodos teóricos disponibles. En este trabajo nos enfocamos en los parámetros del problema más favorables al experimento, reportamos que la sección eficaz se incrementa hasta dos ordenes de magnitud por efecto del láser. Esto tiene implicaciones en procesos de manipulación y neutralización en física de fusión de plasmas (Tokamaks).

Configuración láser amplificada y rápidamente sintonizable

Lorenzo Hernández, J. Juan Ortega, Víctor Valenzuela, Eduardo Gómez.
Instituto de Física de la UASLP, San Luis Potosí
San Luis Potosí, Mexico.

En nuestro laboratorio perseguimos la medición del tuneo inducido por luz. Éste y otros experimentos requieren de átomos confinados en una trampa dipolar. Presentamos una configuración para los láseres que permite realizar cambios rápidos en frecuencia limitados solamente por la velocidad de respuesta del modulador acusto-óptico y no por el ancho de banda del sistema de retroalimentación. Obtenemos una alta potencia de salida aún después de pasar por varios moduladores utilizando un amplificador láser armado y caracterizado en nuestro laboratorio.

Anclado de láseres de diodo por espectroscopia de polarización empleando LabView®

Cristian Mojica, Hugo García, José I. Jiménez Mier y Terán
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Se presenta un programa desarrollado en LabView que permite obtener espectros de polarización en celdas de rubidio. La intensidad del haz de prueba se divide en un cubo polarizador y las dos señales que se registran en fotodiodos son amplificadas y enviadas a una PC mediante la interfaz PXI-6251. El programa analiza los datos y obtiene espectros de absorción saturada (suma) o polarización (resta) con estas señales. El espectro de polarización sirve para generar una señal de error que puede ser retroalimentada al piezoeléctrico que controla el barrido de frecuencia del láser. Con este programa se puede anclar la frecuencia de dos láseres de manera independiente.

Generación eficiente de bandas laterales para EIT

José Juan Ortega Sigala¹, Eduardo Gómez García¹, Pablo Barberis²

¹*Instituto de Física, UASLP*

²*Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y Sistemas, UNAM*

La observación de Transparencia Inducida Electromagnéticamente requiere de dos láseres con diferente frecuencia y amarrados en fase. Este fenómeno se diferencia de otros similares mediante mediciones de correlaciones de fotones. Presentamos métodos eficientes para la generación de haces amarrados en fase que no requieren de sistemas de retroalimentación de gran ancho de banda. Modulamos la intensidad del haz láser con un modulador de fibra y con un amplificador láser externos y obtenemos bandas laterales con una amplitud mayor al 20% (10%) para frecuencias menores (mayores) a 1GHz.

Manipulación de los estados hiperfinos del átomo de Cs-133 en un haz-térmico

S. López López, J. M. Mauricio López-Romero, E. de Carlos-Lopez, Luis Lizama

Centro Nacional de Metrología

División Tiempo y Frecuencia

km 4.5 Carr. a Los Cues, El Marqués Querétaro, C.P. 76246

Luz láser ha sido usada desde la década de los 80's para el bombeo y la detección ópticas en relojes atómicos de haz térmico, sustituyendo con gran eficacia las regiones de selección con campos magnéticos, donde se hacía uso básicamente del experimento de Stern y Gerlach. Con el bombeo óptico es posible despoblar completamente uno de los dos niveles hiperfinos del estado base del átomo de Cs-133, auxiliándose de la línea D2 (852 nm) ($F_4 \rightarrow F'_3$, P.Ej.) del mismo átomo. Por otra parte, por medio de la transición cíclica $F_4 \rightarrow F'_5$ es posible censar el número de átomos en el nivel F_4 o por medio de $F_3 \rightarrow F'_2$, censar el nivel F_3 . En los relojes atómicos existe una cavidad de microondas entre las regiones de bombeo y detección ópticas, llamada cavidad de Ramsey, diseñada de tal manera que una de sus resonancias se encuentre cerca de la frecuencia de la transición hiperfina del estado base del Cs-133, es decir alrededor de 9.2 GHz. De esta manera en la región de detección se "cuenta" el número de átomos que han hecho la transición hiperfina a consecuencia de su interacción con las microondas confinadas en la cavidad de Ramsey. Por medio de un lazo de control, es

posible estabilizar las microondas en máximo de la probabilidad de transición. Teniendo así una referencia de frecuencia atómica. Es posible también aplicar el bombeo y detección ópticas, junto con la cavidad de microondas, para manipular los estados del átomo en un haz térmico, de tal manera que una posible aplicación se encuentra en la transmisión de información por medio de los estados energéticos (bits). En este trabajo se presenta esta propuesta y se discute su posibilidad de aplicación tecnológica.

P15

Electronic structure and spectroscopy of CO

Gabriel J. Vazquez^a, Jose M. Amero^b,

Hans Peter Liebermann^c, Helene Lefebvre-Brion^d

^a*Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, 62251 Cuernavaca, Mexico*

^b*Instituto de Física, Benemerita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, Mexico*

^c*Mathematik und Naturwissenschaften, Universität Wuppertal, D-42119 Wuppertal, Germany*

^d*Laboratoire de Photophysique Moléculaire du CNRS, Université de Paris Sud, 91405 Orsay, France*

We report ab initio SCF MRSD-CI electronic structure calculations of carbon monoxide. We employed Dunning's cc-pVQZ basis set for both C and O, augmented with s, p, and diffuse functions on each atom, together with an extensive treatment of electron correlation. All computations were carried out in C_{2v} symmetry. A relatively large number of valence and Rydberg states, singlets, triplets and quintets, of $\Sigma^{+\bar{c}}$, Π , $\Sigma^{-\bar{c}}$ and Δ spatial symmetries were computed. Vertical excitation and ionization energies, leading configurations of the states, and potential energy curves are reported. Spectroscopic constants (T_e , R_e , ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , D_e) obtained for the known bound states of CO and the lowest electronic states of CO⁺ are found in good agreement with experiment [1]. Particular attention is devoted to the $^1\Pi$ valence and Rydberg states of CO which are known to interact strongly among themselves. The current adiabatic calculations are required to generate diabatic potential energy curves which, in turn, are needed for a deperturbation of the $^1\Pi$ states [2] by resorting to a 2x2 system of coupled equations. We obtain the perturbed vibronic energies levels and wavefunctions which we compare to the first six observed levels. It is hoped that this procedure would enable the attribution of several VUV bands lying below 14 eV which remain unassigned.

[1] G. J. Vazquez, J. M. Amero, H. P. Liebermann, and H. Lefebvre-Brion, *J. Phys. Chem.* **113**, 13395 (2009).

[2] H. Lefebvre-Brion, H. P. Liebermann, and G. J. Vazquez, *J. Chem. Phys.* **132**, 24311 (2010).

Índice de participantes

A	
Aguilar, Alejandro.....	8, 10
Alvarez, I.....	8
Amero, Jose M.....	27
B	
Barberis, Pablo.....	26
Barceinas Cruz, Hermenegildo	22
Bunge Molina, Carlos F.....	14
C	
Cabrera-Trujillo, R.....	16, 24
Campos, Jorge A.....	7
Carabalí Sandoval, Giovanni	8
Chavira, Elizabeth.....	8
Cisneros, C.....	8
Colín-Rodríguez, Ricardo.....	19, 20
Contreras González, Lucía Cristina	23
Covington, A. M.....	8
Cruz, Salvador A.....	12, 18, 19, 20
D	
de Carlos, Eduardo.....	15, 26
Díaz-García, Cecilia.....	19
Domínguez-Gutiérrez, Fco. Javier.....	24
Domínguez, I.....	8
E	
Espinosa, María Guadalupe.....	15
F	
Flores-Mijangos, Jesús.....	22, 23
G	
García, Hugo.....	25
Gharaibeh, M. F.....	8
Gómez, Eduardo.....	16, 25, 26
H	
Hernández Pozos, José Luis.....	11
Hernández, Lorenzo.....	16, 25
Hinojosa, G.....	8
Hirsch Ganievich, Jorge.....	7, 23
J	
Jauregui, R.....	17
Jiménez-Mier y Terán, José I.....	8, 22, 25
Juárez Reyes, Antonio M.....	11
L	
Lefebvre-Brion, Helene.....	27
Lemus Casillas, Renato	6
M	
Ley Koo, Eugenio.....	13, 18, 19, 21
Liebermann, Hans Peter.....	27
Lizama, Luis.....	26
López López, S.....	26
López-Romero, J. J. Mauricio.....	26
López, J. Mauricio.....	15
López, Sergio.....	15
M	
Medina, Lucía.....	18
Méndez Frago, Ricardo.....	21
Meneses-Fabián, Cruz.....	9
Mojica, Cristian.....	25
Montes-Pérez, Areli.....	9
Moya Cessa, Héctor Manuel.....	16
O	
Olalde Velasco, Paul	8
Ortega Sigala, José Juan.....	26
Ortega, J. Juan.....	16, 25
P	
Paredes, R.....	17
Peón Peralta, Jorge.....	6
Perez-Pascual, R.....	17
Phaneuf, R. A.....	8
R	
Rodríguez Méndez, Diana.....	16
Rodríguez-Lara, B. M.....	17
Rodríguez-Zurita, Gustavo.....	9
Rosales-Zarate, L. E. C.....	17
S	
Sant'Anna, M. M.....	8
Santamaria, Ruben.....	14
Schlachter, A. S. S.....	8
Soullard, Jacques.....	14
Sun, Guo-Hua.....	19
T	
Toledo, Genaro.....	17
Toto-Arellano, Noel Ivan.....	9
V	
Valenzuela, Víctor.....	16, 25
Vazquez, Gabriel J.....	27
Y	
Yang, Wanli.....	8