

# TaDEM 2011

2o Taller de Dinámica y estructura de la materia

Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, Cuernavaca. 26 y 27 de mayo, 2011

Instituto de Ciencias Físicas, UNAM  
Cuernavaca, Morelos  
Mayo 26 y 27, 2011

**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	DGAPA/UNAM	CONACYT

## Prefacio

Motivados por la entusiasta respuesta de la comunidad al primer taller, llevado a cabo en Ciudad Universitaria el año pasado, nos hemos dado a la tarea de organizar el segundo taller de dinámica y estructura de la materia. Los asistentes al primer taller notarán el cambio en el título. En opinión de los organizadores, los temas de física atómica, molecular y óptica FAMO abarcan, en la actualidad, áreas que en ocasiones se intersectan con temas tradicionalmente separados de FAMO, tales como la ciencia de materiales, el estudio de los coloides, los agregados moleculares de muchos átomos, sistemas mesoscópicos e incluso aplicaciones en biología y medicina. Con el fin de que el título del taller sea lo más incluyente posible, se ha decidido hacerlo más general, y eso explica el cambio de título. Sin embargo, haciendo a un lado los títulos, este segundo taller pretende seguir fomentando y construyendo, motivado por el dinamismo y calidad del primero, las relaciones y colaboraciones de la comunidad mexicana que dedica su esfuerzo y afanes al estudio de la materia, en cualquiera de sus fases, y su interacción con la luz. Es en este espíritu que hacemos votos por que este segundo taller sea el siguiente eslabón de una cadena larga de eventos que fomenten las interacciones, enlaces, cohesiones y coherencias de la joven (de corazón y mente) comunidad de física dedicada al estudio de la materia en sus distintas fases, desde un punto de vista fundamental.

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. En el proceso de realizar estos estudios se han desarrollado innumerables técnicas que impactan de manera directa a la ciencia y tecnología actuales. Los estudios de la estructura de la materia, desde el punto de vista fundamental, han alcanzado un nivel muy sofisticado tanto en el aspecto teórico como el experimental, actualmente. 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 este segundo taller. Es un motivo de orgullo el que una comunidad relativamente pequeña, como lo es la mexicana, esté participando y haciendo aportaciones importantes en estas áreas de estudio. El **2do Taller de Estructura y Dinámica de la Materia** 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. 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. 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. Los organizadores de este segundo taller hacemos votos porque esta segunda reunión, en Cuernavaca, constituya una clara señal de continuidad para estos eventos y este esfuerzo de cohesión entre la

comunidad de Física Atómica y Molecular y Óptica, y que éste sea solamente uno de muchos más de su tipo se realizarán en el futuro cercano.

Los organizadores queremos agradecer, enfáticamente, a Adrián Dávila y Patricia Rodríguez del ICF-UNAM por el apoyo administrativo para llevar a cabo este evento y a los directores del Instituto de Ciencias Nucleares y del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM por los recursos que nos han permitido realizar este segundo taller.

México D.F. 26 de Mayo de 2011

Los Organizadores

## Eugenio Ley Koo y la Física Atómica y Molecular

*Eugenio Ley Koo nació en la Ciudad de México en 1939. Realizó sus estudios profesionales en la Escuela de Ciencias Físico-Matemáticas de la Universidad Autónoma de Puebla, en donde se graduó como físico en 1959, con la tesis profesional “Radioisótopos: Teoría y Experimentación” bajo la asesoría del Profesor Augusto Moreno. En ese entonces, Eugenio ya trabajaba en la Comisión Nacional de Energía Nuclear, coordinando y participando como instructor en los cursos sobre técnicas básicas de radioisótopos que la Comisión ofrecía para profesionistas, en las instalaciones del Instituto de Física y de la Facultad de Ciencias de la UNAM con la colaboración de sus respectivas plantas académicas. La tesis mencionada se convirtió en una referencia básica en dicho curso y otros. También participó en la planeación y establecimiento del Laboratorio de Radioisótopos de la CNEN bajo la dirección del Profesor Moreno. Su asociación con el Programa de Formación de Recursos Humanos de la CNEN se extendió hasta el verano de 1986.*



*En el período de septiembre de 1960 a julio de 1964 realizó sus estudios de posgrado en la Universidad de Indiana, Bloomington, Estados Unidos con apoyo de la CNEN y la OEA, obteniendo sucesivamente los grados de maestría y doctorado. El Profesor Emil Konopinski dirigió su trabajo de investigación para la tesis de doctorado “Signs of Beta-Moments and Expectations for the Asymmetry Parameters in Beta-Emissions”, motivada por la reciente medición por Eugene Commins en el decaimiento beta entre el Flúor 19 polarizado y el Oxígeno 19 en Berkeley, con extensiones para otros pares de núcleos espejo.*

*A principios de los sesentas se inició el Movimiento de Reforma Universitaria en la Universidad Autónoma de Puebla. Como parte del mismo en 1963, los colegas Virgilio Beltrán López, Leopoldo García-Colín y Fernando Chaos aceptaron la invitación de los Ingenieros Luis Rivera Terrazas y Joaquín Ancona, profesores fundadores de la ECFM-UAP una década antes, para reformar el programa de la carrera de Física y ofrecer a los estudiantes una formación actualizada, y desarrollar trabajos de investigación en sus temas respectivos, Física Atómica y Mecánica Estadística. Eugenio, en sus vacaciones de verano en 1963, tuvo oportunidad de platicar con ellos, enterarse de sus planes para la Escuela, y ser invitado a incorporarse a la misma después de obtener su doctorado. Efectivamente, después de su examen doctoral, Virgilio le escribió para felicitarlo y reiterarle formalmente la invitación, con la información de que ya había solicitado una plaza para su incorporación, Eugenio aceptó con gusto regresar a su Alma Mater como profesor. En la Reunión Conjunta de la Sociedad*

Mexicana de Física y la Sociedad Matemática Mexicana realizada en Monterrey en Octubre de 1964, por primera vez se contó con contribuciones de la ECFM-UAP y también por primera vez en temas de las áreas mencionadas. En el Congreso Nacional de Física de 1965 en Mérida, ese número fue aún mayor incluyendo trabajos con participación de alumnos. En ese momento ya se había incorporado Eliezer Braun, y se contemplaba la incorporación de Manuel de Llano con un apoyo de la OEA.

En Noviembre de 1965 hubo cambio de Rector en la UAP. Eugenio fue designado Director de la ECFM, y de común acuerdo con la planta académica se reafirmaron los planes en desarrollo. La nueva administración mostró una posición hostil a tales planes, la cual culminó con el ataque de estudiantes de medicina a las instalaciones de la ECFM dirigidos por un profesor de Medicina y otro de Derecho en abril de 1966. El Secretario General de la UAP fue testigo de los destrozos y se negó a levantar el acta correspondiente. El Rector había rehusado renovar los contratos de la ECFM, y evitó escuchar la opinión de colegas de la Academia Mexicana de Ciencias citados por él mismo para ese día. La planta académica decidió renunciar en su totalidad, ofreciendo y consiguiendo que los alumnos fueran aceptados en la FC UNAM y la ESFM-IPN.

A partir de 1966, Eugenio ha laborado en el IFUNAM como investigador y en la FCUNAM como profesor. Manuel de Llano y él fueron invitados por Marcos Moshinsky a incorporarse al Departamento de Física Teórica para iniciar sus colaboraciones en física nuclear. Los otros colegas fueron invitados a laborar en el Centro Nuclear. Un poco más tarde, Virgilio y él también iniciaron sus colaboraciones en física atómica.

Lo dicho anteriormente es una sinopsis que traza, a mano alzada y con pinceladas sencillas el perfil biográfico de un gran maestro, amigo y colega cuya genuina vocación por la ciencia, la enseñanza de la misma y su difusión le han valido reconocimientos, como el Premio Universidad Nacional 1997 en docencia en ciencias exactas, la Medalla Académica de la Sociedad Mexicana de Física en 1987, y las Medallas al Mérito Universitario. La trama delicada de esa filigrana que constituye la obra de Eugenio requeriría de muchas páginas para ser descrita aquí. Los siguientes párrafos se limitan a ilustrar las líneas de investigación en física atómica y molecular en que sus contribuciones han sido importantes.

Las colaboraciones con Virgilio Beltran sobre cálculos del momento magnético del átomo de flúor y de oxígeno, reportados en *Physical Review* en 1968 y 1969, respectivamente, mostraron acuerdo dentro de una parte por millón con los valores experimentalmente medidos. Quince años después, la medición directa del intervalo de estructura fina  $\Delta E(^3P_0 - ^3P_1)$  y el factor  $g_j$  del átomo de silicio mediante Resonancia Magnética Láser (LMR), realizada por Inguscio y Evenson en Boulder, fue publicada como una Carta en *Astrophysical Journal* conjuntamente con el cálculo correspondiente que ellos pidieron a Virgilio y Eugenio que implementaran. En la década de los noventa Virgilio montó el Laboratorio de LMR en el Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM.

A fines de los setentas Eugenio inició el desarrollo de la línea de investigación de átomos confinados, motivado por la medición de la estructura hiperfina anisotrópica del átomo de hidrógeno atrapado en cuarzo alfa. El reconoció la necesidad de extender el modelo original de átomo confinado en una esfera impenetrable a modelos con esferas penetrables o con otras geometrías de confinamiento, para poder explicar las propiedades físicas medidas experimentalmente como el caso mencionado. Los modelos sucesivos desarrollados con estudiantes en sus tesis (Sergio Rubinstein, Rosa María García Castelán, Sergio Mateos Cortés, Alejandra Taylor-Armitage, Karen Volke Sepúlveda, Ana Flores Flores, Guadalupe Villa Torres, Lorea Chaos Cador) y colegas (Valdir Aguilera-Navarro, Abraham Zimmerman, Salvador Cruz, Guo Zi-Qian, You Jun-Han, Shi Xie-Ji, José Luis Marín, Remigio Cabrera) tuvieron un reconocimiento de la comunidad al ser invitado Eugenio a escribir el capítulo "The Hydrogen Atom Confined in Semi-Infinite Spaces Limited by Conoidal Boundaries" en *Advances in Quantum Chemistry*, Vol 57 dedicado a Sistemas Cuánticos Confinados. Las extensiones más recientes para rotaciones de moléculas asimétricas en colaboración con

Ricardo Méndez Frago han sido también reconocidas con la invitación para escribir el capítulo “Rotations of Asymmetric Molecules and the Hydrogen Atom in Free and Confined Configuration” en prensa en *Advances in Quantum Chemistry*, Vol. 62.

Las colaboraciones con Carlos Bunge y Rocío Jáuregui, “Upper bounds to the eigenvalues of the no-pair Hamiltonian”, “Relativistic self-consistent-field atomic calculations using a generalization of Brillouin’s theorem”, “Optimal decoupling of positive- and negative-energy orbitals in relativistic electronic structure calculations beyond Hartree-Fock”, “Relativistic electronic structure calculations with positive-energy and negative-energy orbitals”, “Relativistic electronic structure calculations with positive-energy and negative-energy orbitals”, y “Justification of relativistic Dirac-Hartree-Fock and configuration interaction” (1997-2000), han permitido entender la posibilidad y la necesidad de incorporar orbitales de energías positivas y negativas en calculos atómicos relativistas en las diferentes aproximaciones.

En 1969, tuve la fortuna de ser alumno de Eugenio en la Facultad de Ciencias, donde le conocí como maestro riguroso y afable. Sin exagerar, su habilidad para enseñar me impresionó y sin lugar a dudas llevé el mejor curso de Física Moderna de mi vida. Como consecuencia, con el afán de aprender más, en 1971 le solicité que me dirigiera la tesis de licenciatura. El tema que me asignó correspondía a un tópico de física atómica viendo al átomo de Helio como un sistema de tres cuerpos y estudiarlo mediante coordenadas hiperesféricas. La tarea no era nada simple y puedo decir que gracias a la paciencia de Eugenio y la formalidad de las discusiones, en ese período le conocí como un verdadero maestro y a quien debo el dedicarme a la física atómica a partir de 1972, cuando recibí el grado.

Es claro que la vocación científica de Eugenio Ley Koo ha sido el motor que mueve su interés y pasión por la investigación, mismo que le permite compartir su conocimiento con estudiantes y colegas, iluminando las diversas tramas de su obra. Su gentileza y franqueza van de la mano con su calidad humana, sin soberbias ni egocentrismos. Hace poco, Eugenio me comentaba que para él es más importante reconocer el papel que otros colegas han tenido en el desempeño de su carrera científica y la labor que en conjunto han hecho en México por el desarrollo de la ciencia.

La celebración del Segundo Taller de Estructura y Dinámica de la Materia en las instalaciones del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM en Cuernavaca, Morelos, constituye el marco ideal para rendir homenaje al Dr. Eugenio Ley Koo por sus 52 años dedicados al avance en el conocimiento de la física y fructífera labor en la formación de recursos humanos. Este reconocimiento es extensivo desde luego a Jocele Allegra Wild Wolf de Ley, esposa de Eugenio, quien le ha brindado siempre su entusiasta apoyo con paciencia, amor y entereza , como el campo fértil de un huerto de opimos frutos.

Agradezco a Eugenio Ley Koo su revisión del manuscrito original y la valiosa aportación de información sobre detalles de su carrera académica que él conoce mejor que nadie, lo cual ha enriquecido enormemente el contenido de esta semblanza del maestro.

Salvador A. Cruz Jiménez

Departamento de Física  
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa  
mayo, 2011

**HORARIO Taller AMO 2011**

HORARIO	Jueves 26	Viernes 27
8:30-9:00	<b>Registro</b>	<b>Registro</b>
9:00-9:30	(Chair: J. Flores-Mijangos) <b>Inauguración</b>	(Chair: Rocio Jáuregui) <b>O10</b> Diana Rodríguez
9:30-10:00	<b>O1</b> Alejandro Amaya	<b>O11</b> F. Ramírez-Martínez
10:00-10:30	<b>O2</b> Antonio Juárez	<b>O12</b> J. Flores-Mijangos
10:30-11:00	<b>O3</b> Guillermo Hinojosa	<b>O13</b> V. Valenzuela-Jiménez
11:00-11:30	CAFE	CAFE
11:30-12:00	(Chair: Remigio Cabrera) <b>O4</b> Cecilia Díaz-García	(Chair: Antonio Juárez) <b>O14</b> Rocío Jáuregui
12:00-12:30	<b>O5</b> Carlos Bunge	<b>O15</b> R. Cabrera-Trujillo
12:30-13:00	<b>O6</b> Eugenio Ley-Koo	<b>O16</b> Salvador Cruz
13:00-13:30	<b>O7</b> Paul Olalde	<b>O17</b> A. Díaz-de-Anda
13:30-15:30	COMIDA	COMIDA
15:30-17:00	POSTERS (P1-P17)	POSTERS (P1-P17)
17:00-17:30	(Chair:Guillermo Hinojosa) <b>O8</b> Ramón Hernández	(Chair: Salvador Cruz) <b>O18</b> Yosslen Aray
17:30-18:00	<b>O9</b> Agustín González F.	<b>O19</b> Luis Javier Álvarez
18:00-18:30		<b>CLAUSURA</b>

**Presentaciones orales**

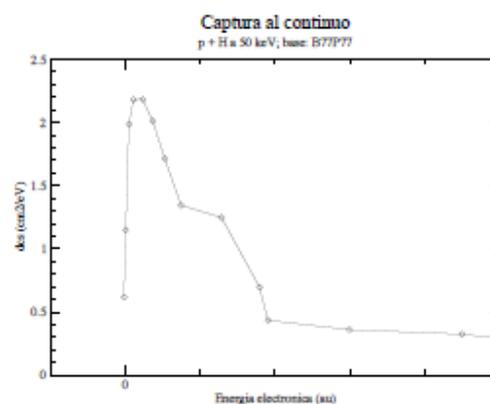
<b>O1</b> Ionización en colisiones protón-H a energías de keV.....	8
<b>O2</b> FAMA: Física Atómica y Molecular Aplicadas en biología, medicina y petroquímica, algunos ejemplos ilustrativos.....	9
<b>O3</b> Conducción de iones a través de capilares en pet.....	10
<b>O4</b> Ión Molecular de Hidrógeno en Cajas Esferoidales Prolatas Penetrables con Posiciones Nucleares Arbitrarias a lo Largo del Eje Mayor.....	11
<b>O5</b> Cálculos atómicos de exactitud espectroscópica.....	12
<b>O6</b> Teoría de momento angular en base de armónicos esferoconales de Lamé.....	13
<b>O7</b> Electronic structure of MF <sub>2</sub> (M=Cr-Zn) studied by X- ray Absorption (XAS), Normal X-ray Emission (NXES) and Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS).....	14
<b>O8</b> Competencia entre las dinámicas de predisociación vibracional y electrónica en complejos de van der Waals.....	15
<b>O9</b> Estructura fractal de las fronteras de los núcleos de cristalización en cristales coloidales en 2D: simulaciones por computadora.....	16
<b>O10</b> NOON states in entangled cavities.....	17
<b>O11</b> Autosincronización de espín y largos tiempos de coherencia en gases atómicos atrapados.....	18

<b>O12</b> Propuesta de medición de la transición cuadrupolar eléctrica 5p 2P <sub>3/2</sub> -> 6p 2P <sub>1/2</sub> en una trampa magneto-óptica de rubidio.....	19
<b>O13</b> Caracterización de una trampa dipolar .....	20
<b>O14</b> Mecánica Cuántica SUSY para partículas atrapadas interactuando a través de potenciales de contacto.....	21
<b>O15</b> Leyes de escalamiento en pérdida de energía en colisiones atómicas.....	22
<b>O16</b> Tratamiento General del Efecto de Confinamiento Espacial en las Propiedades Electrónicas y Estructurales de Moléculas Diatómicas Mono y Bi- electrónicas.....	23
<b>O17</b> Espectro de transmisión óptico de microesfera multicapas con estructura cuasiperiódica (Fibonacci) de metamateriales y materiales convencionales.....	24
<b>O18</b> Exploring the Structure-Solubility Relationship of Asphaltenes Models in Toluene, Heptane and Amphiphiles using a Molecular Dynamic Atomistic Methodology.....	25
<b>O19</b> Estructura de bromuro de cetiltrimetilamonio en disolución acuosa a partir de simulaciones de dinámica disipativa de partículas.....	26
<b>Presentaciones Póster</b> .....	27
<b>P1</b> Estudio y cálculo numérico de la sección eficaz del sistema C <sub>4</sub> <sup>+</sup> + H.....	27
<b>P2</b> Sistema de radio frecuencia para amarre de frecuencia relativa de dos lasers.....	28
<b>P3</b> Oscilaciones de Bloch en presencia de un gradiente de campo magnético.....	29
<b>P4</b> Procesos de adquisición de imagen en el laboratorio de átomos fríos del ICN. Control de obturación de una cámara CCD y su calibración en tiempo e intensidad.....	30
<b>P5</b> Molécula de Hidrógeno en Cajas Esferoidales Prolatas Penetrables con Posiciones Nucleares Arbitrarias a lo Largo del Eje Mayor.....	31
<b>P6</b> Descripción común entre sistemas cuánticos confinados por un cono elíptico.....	32
<b>P7</b> First principles study of the nanoparticles nature of unsupported transition metal sulfide catalyst in hydrotreating conditions.1, 2, 3.....	33
<b>P8</b> Método experimental alternativo para medir las energías de estados vibracionales en soluciones aromáticas.....	34
<b>P9</b> Control y sincronización digital de procesos en una Trampa Magneto-Óptica.....	35
<b>P10</b> Clathrate hydrates: applied to hydrogen storage.....	36
<b>P11</b> Propiedades dieléctricas de la mezcla gaseosa CF <sub>3</sub> I-SF <sub>6</sub> .....	37
<b>P12</b> Sobre el confinamiento de CH <sub>4</sub> en una caja de aguas, con números de moléculas de agua menores a 20.....	38
<b>P13</b> Un caso de estudio para transferencia adiabática de población en un sistema de cuatro niveles: producción de estados de Rydberg en rubidio.....	39
<b>P14</b> Transparencia inducida electromagnéticamente en vapor de rubidio atómico a partir de las transiciones 5S <sub>1/2</sub> → 5P <sub>3/2</sub> → 5D <sub>J</sub> .....	40
<b>P15</b> Realce de bordes direccional e isotrópico en tomografía óptica de objetos de fase .....	41
<b>P16</b> Espectroscopía electrónica de HCl.....	42
<b>P17</b> Rydberg and valence states of co in the far-UV.....	43

## Ionización en colisiones protón-H a energías de keV

A. Amaya-Tapia and A. Antillón  
*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México,*  
*AP 48-3, 62251 Cuernavaca, Mor., México*

Se estudió la producción de electrones en el sistema compuesto por un haz de protones, a energías de keV, incidiendo sobre un gas de hidrógeno, usando el método de canales cercanos acoplados (CC). Se centró la atención al proceso conocido como captura electrónica al continuo. Se muestra que los pseudoestados de baja energía positiva en el método CC [1] describen la producción de electrones desprendidos del H y lanzados en la dirección de incidencia del proyectil, en el rango de energías de los keV. En el modelo CC, cada pseudoestado representa una región de energía del continuo. La distribución en energía de la producción de electrones puede ser aproximada en términos de las amplitudes de los pseudoestados del continuo del proyectil, de energía baja [2]. En el marco de referencia del proyectil, la figura muestra la sección eficaz diferencial simple, en energía electrónica, para electrones con velocidades similares a la del proyectil y en la dirección de incidencia. La estructura se reproduce, con pequeñas variaciones, cuando se consideran diferentes bases, incluso cuando éstas no son simétricas con respecto a los núcleos. Esto muestra que la estructura no es un artefacto de la base.



### References

- [1] R. Cabrera, A. Amaya-Tapia and A. Antillón 2009 Phys. Rev. A 79, 012712
- [2] J. F. Reading, A. L. Ford, G. L. Swafford and A. Fitchard 1979 Phys. Rev. A 20, 130

## **FAMA: Física Atómica y Molecular Aplicadas en biología, medicina y petroquímica, algunos ejemplos ilustrativos**

A. M. Juárez

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

*Apartado Postal 48-3, 62251 Cuernavaca, Mor., México*

El área de física atómica, molecular y óptica es, actualmente, una de las áreas más dinámicas en ciencia básica y estudios fundamentales de la materia. Además de los profundos avances que se están logrando en el área de ciencia básica -óptica cuántica, peines ópticos, láseres de pulsos ultrabreves-, la Física Atómica y Molecular proporciona una serie de herramientas instrumentales muy poderosas que pueden emplearse en un sinnúmero de aplicaciones prácticas y soluciones de problemas en biología, medicina, medio ambiente y petroquímica. En esta charla, dedicada a los estudiantes que nos acompañen en este taller, presentaré algunos ejemplos que ilustren el poder de la FAMA: Física Atómica y Molecular Aplicadas. En concreto, presentaré el potencial y usos de la técnica de Cavity Enhanced Spectroscopy para estudiar comunicación molecular en plantas y raíces, en estudios de diagnósticos médicos por detección de trazas moleculares, en estudios de descargas gigantes en la atmósfera superior e incluso en procesos de prospección petrolera. La intención de presentar esta plática aplicada consiste en motivar a los estudiantes jóvenes a integrarse a esta área que proporciona, no sólo retos intelectuales y científicos importantes, sino también la posibilidad de contribuir de manera concreta a solucionar algunos de los varios problemas que enfrenta nuestro país actualmente.

## **Conducción de iones a través de capilares en pet**

Zuleima M. Vázquez, Edgar M. Hernández,  
Guillermo Hinojosa y Nico Stolterfoht  
*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de  
México,  
Apartado Postal 48-3, 62251 Cuernavaca, Mor., México*

En este trabajo, se reportan resultados sobre la conducción de iones de  $\text{Ar}^+$ ,  $\text{H}^+$  y  $\text{H}_2^+$  con energías de 3, 5 y 7 keV a través de capilares de 10 micrones de largo y 100 nm de diámetro aproximadamente. Los capilares se fabricaron en PET con iones de energías del orden de MeV's. Se discutirán algunos principios físicos de este peculiar fenómeno así como posibles aplicaciones.

UNAM-DGAPA IN113010-3

## **Íon Molecular de Hidrógeno en Cajas Esferoidales Prolatas Penetrables con Posiciones Nucleares Arbitrarias a lo Largo del Eje Mayor.**

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 ión molecular de hidrogeno ( $H_2^+$ ) es el sistema molecular más simple y ha servido como una referencia importante para calibrar aproximaciones teóricas para el estudio de sistemas moleculares bajo presión.. En este contexto los efectos de presión han sido modelados a través del modelo de confinamiento en cajas esferoidales prolatas con fronteras duras y suaves empleando soluciones exactas a la ecuación de Schrödinger [1,2] y distintas aproximaciones [3,4] con la condición de que los núcleos estén anclados en los focos de la cavidad. Sin embargo, para el sistema confinado por paredes impenetrables, en un trabajo reciente [5] se muestra la importancia de desacoplar las posiciones nucleares de los focos - para el cual no hay soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger- encontrando las condiciones óptimas de equilibrio del sistema.

En este trabajo presentamos, por primera vez, la generalización del método para estudiar efectos de confinamiento sobre la energía del estado basal y primer estado excitado del ión molecular de hidrógeno confinado por una cavidad esferoidal prolata cuando las paredes son penetrables y con posiciones nucleares arbitrarias, utilizando el método variacional.

### Referencias:

- [1] E. Ley-Koo and S. A. Cruz J. Chem. Phys. 74 (8), (1981) 4603.
- [2] S. Mateos-Cortés, E. Ley-Koo, S.A. Cruz Int. J. Quantum Chem. 86 (2002) 376.
- [3] LeSar R and Herschbach D R, J.. Phys. Chem, 85, (1981) 2798.
- [4] J. Gorecki and W. Byers Brown J. Chem. Phys. 89, (4), (1988) 2138.
- [5] S. A. Cruz and R. Colín-Rodríguez Int. J. Quantum Chem. 109 (2009) 3041.

## Cálculos atómicos de exactitud espectroscópica

César X. Almora-Díaz y Carlos F. Bunge

Se mencionará brevemente un paquete de nuevas metodologías que se han implementado para el cálculo de estados estacionarios atómicos. Se ha reproducido satisfactoriamente la separación entre el estado doblete fundamental y el primer cuarteto del  $C^+$ , conocida por mediciones directas. También se predice que para el B (sistema isoelectrónico) esa separación es de  $28930 \text{ cm}^{-1}$ , en franco desacuerdo con el valor tradicional de  $28870$  de las viejas tablas de espectroscopía del NIST (1970) y aun más con los  $28659 \text{ cm}^{-1}$  reportado en las nuevas tablas del NIST (2007), ambos obtenidos por extrapolación de datos experimentales a lo largo de la serie isoelectrónica. Este resultado permitirá ubicar la posición de los demás cuadripletes del B y la identificación de posibles transiciones entre dobletes y cuadripletes.

## **Teoría de momento angular en base de armónicos esferoconales de Lamé**

Eugenio Ley Koo,  
Instituto de Física, UNAM  
E-mail: <[eleykoo@fisica.unam.mx](mailto:eleykoo@fisica.unam.mx)>

La experiencia adquirida en las investigaciones sobre “Rotaciones de Moléculas Asimétricas y de Átomo de Hidrógeno en Configuraciones Libres y de Confinamiento” [1] ha permitido iniciar la formulación de la teoría de momento angular en base de armónicos esferoconales de Lamé. En esta contribución se dan a conocer los elementos y resultados de tal formulación hasta el momento, así como las herramientas esferoconales ya identificadas para continuar en su desarrollo.

[1] Ricardo Mendez-Fragoso and Eugenio Ley-Koo, Invited Chapter in ADVANCES IN QUANTUM CHEMISTRY Vol. 62 (in press) 2011.

## **Electronic structure of MF<sub>2</sub> (M=Cr-Zn) studied by X-ray Absorption (XAS), Normal X-ray Emission (NXES) and Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS)**

P. Olalde-Velasco, J. Jiménez-Mier, J. Denlinger and W. L. Yang.

Electronic structure of the strongly correlated MF<sub>2</sub> (M = Cr-Zn) is elucidated by using X-ray Absorption (XAS), Normal X-ray Emission (NXES) and Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS). We have observed by aligning structures in the F K $\alpha$  and TM L $\alpha$  spectra the transition from Mott-Hubbard (M-H) to Charge Transfer (CT) Insulator regime. From this we concluded that the difluorides from Cr-Cu are M-H type while the only CT insulator is ZnF<sub>2</sub>. We were able to experimentally determine the value of the important parameters U and  $\Delta_{CT}$ . Our approach can be extended to other systems including oxides. LDA+U calculations confirm that the 3d TM density of states dominate over F 2p close to the Fermi level. Relative good agreement is found between the calculated F2p DOS and F K $\alpha$  and F 1s XAS spectra. The bandgaps reported by theory are in good agreement with experimental results. TM L<sub>2,3</sub> XAS spectra were measured and reproduced satisfactorily by using ligand field multiplet (LFM) calculations in D<sub>4h</sub> symmetry, the relevant parameters are reported. RIXS maps for Cr-Ni cations were taken at the L<sub>2,3</sub> edges and the neutral d-d and CT excitations were identified. These RIXS maps were reproduced by using the LFM theory combined with Kramers-Heisengberg formalism for coherent second order processes. Since our calculations do not include CT effects we unambiguously distinguished the character of the different neutral excitations of the cations.

## **Competencia entre las dinámicas de predisociación vibracional y electrónica en complejos de van der Waals**

R. Hernández Lamonedá

*Centro de Investigaciones Químicas, UAEMor,  
Av. Universidad 1001, Cuernavaca, 62209, MEXICO*

La dinámica de predisociación vibracional en complejos de van der Waals ha sido ampliamente caracterizada tanto desde el punto de vista teórico como experimental en los últimos 30 años. En combinación con otros estudios espectroscópicos esto ha dado lugar a una comprensión muy detallada a nivel cuántico de la estructura, espectroscopía y dinámica de estos sistemas, que pueden servir para comprender sistemas más complejos. Por otro lado es mucho menos detallada y amplia la información, tanto experimental como teórica, relacionada con la predisociación electrónica.

En esta charla presentare resultados de cálculos basados en primeros principios para interpretar y predecir información experimental de los sistemas  $\text{NeCl}_2$ ,  $\text{ArCl}_2$  y  $\text{NeBr}_2$ . En todos ellos se observa la competencia entre los mecanismos de predisociación vibracional y electrónico. Por razones que explicaremos en la charla la dinámica del último de estos sistemas es más fácil de describir teóricamente y hemos podido reproducir la información experimental con gran exactitud. Para los otros sistemas todavía es necesario realizar estudios más ambiciosos y mencionaremos cuales son las principales dificultades en su descripción.

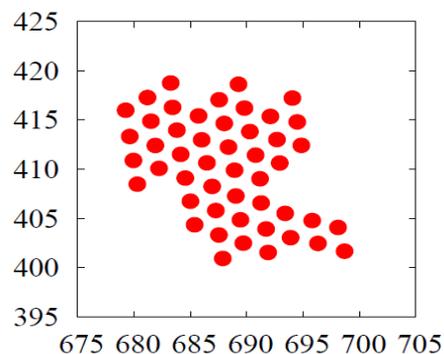
## Estructura fractal de las fronteras de los núcleos de cristalización en cristales coloidales en 2D: simulaciones por computadora

A. E. González<sup>1</sup>, L. Ixtlilco-Cortés<sup>1,2</sup>

(1) Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, Cuernavaca, Morelos 62210, México.

(2) Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Cuernavaca, Morelos 62209, México.

La mayor parte de los estudios y teorías de cristalización y nucleación cristalina consideran fronteras lisas entre los cristalitos y el fluido circundante. Los cristalitos son los pequeños cúmulos de átomos, moléculas y/o partículas con la simetría de la red cristalina que, con una probabilidad muy pequeña de éxito, crecerán para formar los granos cristalinos. De hecho, en la teoría clásica de nucleación, se supone que los cristalitos tienen una forma esférica (circular en 2D). No obstante esto, hay un buen número de resultados experimentales que encuentran superficies rugosas para los cristalitos y los granos cristalinos (véase, por ejemplo la Ref. [1]), aunque el tipo de rugosidad de estas fronteras no se ha dilucidado. Motivados por este trabajo, efectuamos un buen número de simulaciones de Monte Carlo Cinético en 2D, que siguen el crecimiento eventual de algunos cristalitos para formar los granos cristalinos. El potencial utilizado tiene, además de la esfera dura, una esfera blanda seguida por un pozo de potencial. Encontramos que, en efecto, los cristalitos tienen una frontera rugosa, de hecho fractal, cuyo valor fuimos capaces de obtener. Véase la figura abajo de un típico cristalito aislado. También fuimos capaces de obtener el tamaño crítico de los cristalitos, medido por su número de partículas,  $N_c$ , y no por algún radio crítico. La fronteras de los cristales arriba de  $N_c$  también tienen una estructura fractal, pero de un valor inferior, cercano a uno. Finalmente, también obtuvimos la tensión de línea entre los cristalitos y el fluido que los rodea, como función de la temperatura y el diámetro de las partículas, así como la diferencia de potencial químico entre las dos fases. En la siguiente dirección: [www.fis.unam.mx/agus/](http://www.fis.unam.mx/agus/) hay dos películas que se pueden descargar: (1) 2D crystal nucleation.mp4, y (2) 2D crystal growth.mp4, que ilustran la nucleación cristalina y el crecimiento posterior de los cristales, la primera de las cuales mostraremos en la presentación.



[1] U. Gasser et al. Science 292, 258 (2001).

## **NOON states in entangled cavities**

D. Rodríguez-Méndez, *diaynk@hotmail.com*, H. Moya-Cessa,  
*hmmc@inaoep.mx*

*INAOE, Apdo. Postal 51 y 216, 72000 Puebla, Pue., Mexico*

We show how NOON states may be generated entangling two cavities by passing atoms through them. The atoms interact with each cavity via two-photon resonant transitions. We take advantage of the fact that depending on the state the atom enter (excite or ground), it leaves or takes two photons per interaction and leaves the cavities in a pure state.

## **Autosincronización de espín y largos tiempos de coherencia en gases atómicos atrapados**

F. Ramírez-Martínez<sup>1,2</sup>, C. Deutsch<sup>3</sup>, C. Lacroute<sup>2</sup>, F. Reinhard<sup>3</sup>, T. Schneider<sup>3</sup>, J. N. Fuchs<sup>4</sup>, F. Piéchon<sup>4</sup>, F. Laloe<sup>3</sup>, G. Kleine Buning<sup>5</sup>, J. Will<sup>5</sup>, W. Ertmer<sup>5</sup>, E. Rasel<sup>5</sup>, J. Arlt<sup>6</sup>, C. Klempt<sup>5</sup>, J. Reichel<sup>3</sup> and P. Rosenbusch<sup>2</sup>.

*1 ICN, UNAM. Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria. Delg. Coyoacán. C.P. 04510, México D.F., México.*

*2LNE-SYRTE, Observatoire de Paris, UPMC, CNRS, 61 av de l'Observatoire, 75014 Paris, France.*

*3Laboratoire Kastler Brossel, ENS, UPMC, CNRS, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France.*

*4Laboratoire de Physique des Solides, CNRS UMR 8502, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, France.*

*5Institut für Quantenoptik, Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover, Germany.*

*6QUANTOP, Danish National Research Foundation Center for Quantum Optics, Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Ny Munkegade 120, 8000 Aarhus C, Denmark.*

Se reportan largos tiempos de coherencia obtenidos en un reloj con átomos atrapados basado en la tecnología de los chip atómicos [C.Lacroute et al.,IEEE TUFFC,57,106-110,(2010)]. Átomos de  $87\text{Rb}$  son enfriados a  $0.2\text{microK}$ , ligeramente por encima de la temperatura crítica para la condensación de Bose-Einstein. Los estados atrapables  $|F, m_F\rangle = |1, -1\rangle$  y  $|2, 1\rangle$  definen la transición de dos fotones del reloj. Con base en un análisis de las condiciones de operación de este sistema, el tiempo de defasaje esperado es de alrededor de  $1.5\text{s}$  [P.Rosenbusch,APB,95,227-235,(2009)] y previos trabajos experimentales registraron tiempos de defasaje de hasta  $2.8\text{s}$  [D.M.Harber et al., PRA,66,053616,(2002) y P.Treutlein et al.,PRL,92,203005,(2004)]. Nosotros medimos el tiempo de defasaje/coherencia a través de la reducción en el contraste de las franjas de Ramsey al variar el tiempo de precesión libre. La medición del contraste muestra una caída de  $7\%$  en  $5\text{s}$ , equivalente a un tiempo de decaimiento  $1/e$  de  $50\pm 12\text{s}$ . Esto es más de 30 veces mayor que el valor estimado, al menos 16 veces más largo que los resultados experimentales anteriores y constituye un récord en experimentos con átomos neutros. Así mismo, se han registrado franjas de Ramsey récord de  $100\text{mHz}$  (ancho máximo a la mitad del máximo) con un contraste aceptable, lo cual corresponde a un factor de calidad de casi  $10^{11}$ . El efecto de rotación de espines idénticos, el cual se ha identificado como el origen del fenómeno de ondas de espín [F.Piechon et al.,PRL,102,215301,(2009)], produce una sincronización de las fases atómicas dando como resultado los largos tiempos de coherencia observados [C.Deutsch et al.,PRL,105,020401, (2010)]. La generalidad de este efecto ha sido demostrada en un segundo aparato experimental, en el que una nube de átomos de  $87\text{Rb}$  confinada en una trampa dipolar óptica de  $1064\text{nm}$  es sujeta a una interrogación de Ramsey en la transición  $|1,0\rangle \rightarrow |2,0\rangle$ , donde se han observado largos tiempos de coherencia de hasta  $21\text{s}$ . Estos resultados son relevantes para el desarrollo de relojes atómicos ópticos ultraestables con átomos neutros [H. Katori et al. PRL,91,173005(2003)], candidatos para el desarrollo de múltiples aplicaciones como mejorados sistemas de navegación por satélite, mejores métodos de seguimiento de sondas para la exploración del espacio profundo, sensibles pruebas de la relatividad general, mediciones de alta precisión de constantes

fundamentales, y podrían incluso tener como resultado la redefinición de la unidad de tiempo del sistema internacional de medidas, el segundo.

012

## **Propuesta de medición de la transición cuadrupolar eléctrica $5p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 6p \ ^2P_{1/2}$ en una trampa magneto-óptica de rubidio**

M. Carrillo-Fuentes,<sup>1</sup> J. Flores-Mijangos,<sup>1</sup> R. Jáuregui,<sup>2</sup> J. Jiménez-Mier,<sup>1</sup> A. M. Juárez,<sup>3</sup> C. Mojica-Casique,<sup>1</sup> F. Ramírez-Martínez,<sup>1</sup> D. Sahagún-Sánchez,<sup>4</sup> K. Volke-Sepúlveda.<sup>2</sup>

*1 Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM.*

*2 Instituto de Física, UNAM.*

*3 Instituto de Ciencias Físicas, UNAM*

*4 Microtrap Group, Centre for Quantum Technologies, National University of Singapore*

El proyecto que se presenta busca contribuir al desarrollo de estudios experimentales y teóricos de transiciones prohibidas en la aproximación dipolar eléctrica (E1). Se realizará espectroscopía de alta resolución en la transición cuadrupolar eléctrica (E2)  $5p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 6p \ ^2P_{1/2}$  con átomos de Rb confinados en una trampa magneto-óptica (MOT). Se estudiará el efecto que la estructura de amplitud, fase, polarización y ancho espectral del haz de excitación (estructura interna) tiene en la dinámica atómica, comparando los efectos generados tanto por haces gaussianos así como por haces con estructura interna, tales como aquellos con momento angular orbital. La interpretación de las observaciones experimentales se sustentará en la descripción teórica detallada de las probabilidades de transición mediante cálculos de primeros principios del sistema atómico elegido, realizando descripciones teóricas precisas de los estados estacionarios involucrados y el cálculo de las probabilidades de transición correspondientes en diferentes escenarios (haces gaussianos, haces estructurados). Se obtendrán funciones de onda estacionarias utilizando las técnicas más sofisticadas como interacción de configuraciones y teoría de perturbaciones de muchos cuerpos. La descripción de transiciones atómicas en haces estructurados, un tema teórico de frontera, se estudiará utilizando métodos perturbativos dependientes del tiempo donde el papel del centro de masa atómico será incorporado.

## **Caracterización de una trampa dipolar**

Lorenzo Hernández Díaz, Víctor Valenzuela Jiménez, Eduardo Gómez  
García

*Instituto de Física, UASLP*

Las redes ópticas pueden utilizarse para demostrar fenómenos cuánticos de transporte novedosos como lo es el tuneleo inducido por luz. Las redes son útiles también para mejorar la precisión de mediciones tales como la fuerza de Casimir-Polder. Presentamos la caracterización y optimización de una trampa dipolar. Construimos un sistema de láseres sintonizables y amplificados que utilizamos en la trampa magneto-óptica. Aplicamos una molasa óptica para reducir la temperatura de los átomos y aumentar la eficiencia de transferencia a una trampa dipolar. Contar con un alto número de átomos en una trampa dipolar es un paso indispensable para poder realizar experimentos en redes ópticas.

## Mecánica Cuántica SUSY para partículas atrapadas interactuando a través de potenciales de contacto

Rocío Jáuregui<sup>1</sup>, José Recamier<sup>2</sup>, and Oscar Rosas-Ortiz<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apdo. Postal 20-364, México D. F. 01000, México.

<sup>2</sup>Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apdo. Postal 48-3, Cuernavaca Morelos 62251, México and

<sup>3</sup>Departamento de Física, CINVESTAV,  
Apdo. Postal 14-740, México D. F. 07000, México

Después de revisar la utilidad de los pseudopotenciales de contacto para la descripción de colisiones atómicas ultrafrías, analizamos en detalle la ecuación estacionaria de Schrödinger para dos partículas atrapadas en un potencial de oscilador armónico e interactuando a través de un pseudopotencial de onda parcial  $l$  para cualquier valor del momento angular  $l$ . Tal y como ya ha sido reportado para  $l = 0$  y  $1$ , la función de onda correspondiente en el caso general presenta una singularidad que requiere de teoría de distribuciones para una interpretación clara. Además, operadores tan importantes como el de energía cinética muestran una asimetría en su aplicación derecha (izquierda) en el espacio de estas funciones de onda. Esto conlleva a una reinterpretación de conceptos fundamentales como el de hermiticidad. El uso de las técnicas usuales de supersimetría para, tanto la factorización del Hamiltoniano, como la construcción del problema pareja son discutidas, y una solución basada en distribuciones de contacto es presentada. El hamiltoniano pareja correspondiente se construye explícitamente y se muestra que el espacio de funciones en el cual su aplicación a la derecha tiene un sentido claro, corresponde a aquellas funciones adecuadas para el pseudopotencial de contacto de onda parcial  $l + 1$  pero el pseudopotencial correspondiente no es un potencial de contacto  $l+1$ . Operadores de ascenso y descenso que relacionan soluciones para una onda  $l$  se presentan en forma explícita.

## **Leyes de escalamiento en pérdida de energía en colisiones atómicas**

R. Cabrera-Trujillo

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

La pérdida de energía o poder de frenamiento de iones colisionando con materia es un problema que data desde la época Niels Bohr. Esto no implica que es un problema resuelto, por el contrario, aún hay mucho que decir. En esta plática les presentare resultados sobre leyes de escalamiento en términos de las masas (efecto isotópico) en la pérdida de energía nuclear, así como en la transferencia de carga durante la colisión, derivadas a partir de primeros principios y verificadas mediante cálculos ab initio de la colisión. En particular discutiré las oscilaciones de Stuckelberg en la transferencia de carga y su nulo efecto en la pérdida de energía.

Trabajo apoyado por DGAPA-UNAM IN-101611.

## **Tratamiento General del Efecto de Confinamiento Espacial en las Propiedades Electrónicas y Estructurales de Moléculas Diatómicas Mono y Bi-electrónicas**

Salvador A. Cruz

*Departamento de Física,  
Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa Apartado Postal  
55534, 09340, México, D. F., México.*

En este trabajo se presenta la estrategia desarrollada para generalizar el estudio de efectos de confinamiento por cavidades esferoidales prolatas en la energía basal y primer estado excitado del ión molecular  $H_2^+$ , en situaciones en que los núcleos ocupan posiciones arbitrarias y para barreras de confinamiento finitas y para lo cual la ecuación de Schrödinger no admite soluciones exactas. Así mismo, se presenta lo correspondiente al caso de la molécula de  $H_2$  sin considerar correlación electrónica. Los resultados de este trabajo [1,2] constituyen una extensión natural de generalizaciones previas para el caso impenetrable [3,4]. Se discuten las consecuencias de este tratamiento para un modelamiento realista de procesos de ionización molecular inducida por presión así como de propiedades vibracionales en situaciones en que la cavidad de confinamiento es penetrable. Este planteamiento puede extenderse al caso de otras moléculas diatómicas iso-electrónicas con los sistemas aquí estudiados explícitamente. En todos los casos se hace uso del método variacional, probando su alto potencial para el estudio de este tipo de sistemas.

### Referencias:

- [1] C. Díaz-García, R. Colín-Rodríguez, S. A. Cruz, Taller FAMO (2011).
- [2] R. Colín-Rodríguez, C. Díaz-García, S.A. Cruz, Taller FAMO (2011).
- [3] S. A. Cruz and R. Colín-Rodríguez Int. J. Quantum Chem. 109 (2009) 3041.
- [4] R. Colín-Rodríguez, S.A. Cruz, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, 43, 235102 (2010).

## **Espectro de transmisión óptico de microesfera multicapas con estructura cuasiperiódica (Fibonacci) de metamateriales y materiales convencionales**

A. Díaz-de-Anda, Gennadiy Burlak

*Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas,  
Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Mor.  
México.*

Estudiamos el espectro transmisión óptico y la distribución del campo electromagnético en mi-croesferas recubiertas con capas alternantes con una estructura cuasiperiódica con la inclusión de metamateriales (left-handed materials). Se encuentra que la banda de frecuencia prohibida de tal sistema se hace mas amplia con respecto a la de un sistema que únicamente esta formado con mate-riales convencionales (materiales con índice de refracción positivo). Cuando el valor del parámetro de cuasiperiodicidad  $\phi$  esta cerca del valor de la regla de oro, aparece una estructura estrecha de picos dentro de la banda prohibida. Con el aumento de  $\phi$ , tal estructura migrar al centro de la banda prohibida. Se encuentra que la distribución radial del campo electromagnético para los valores de frecuencia de tales picos dentro de la banda prohibida, esta localiza en las capas de la microesfera. Este efecto permite la creación de fíltros ópticos con bandas de paso extremadamente estrechas.

## **Exploring the Structure-Solubility Relationship of Asphaltenes Models in Toluene, Heptane and Amphiphiles using a Molecular Dynamic Atomistic Methodology**

Yosslen Aray

*Centro de Química, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, IVIC, Apartado 21827, Caracas 1020 A, Venezuela  
Instituto de Matemáticas, Unidad Cuernavaca, Universidad Nacional Autónoma de México, Morelos, México.*

The solubility parameter,  $\delta$ , corresponds to the cohesive energy density and is a kind of cohesion parameter which describes the interaction between molecules in a condensed phase. A huge amount of works along the years has demonstrated the versatility of  $\delta$  to deal with solubility and other properties of petroleum and fossil solids and liquids providing good grounds for application to related issues such as affinity between asphaltenes fractions and affinity for solvents and other compounds with a given  $\delta$ .

The solubility parameters of several asphaltene (the heaviest and most complex fraction of crude oil) models were calculated by mean of an atomistic NPT ensemble. Continental, like a hand and archipelago models were explored. The continental model, is shaped "like your hand", with an aromatic core (palm) with associated alicyclic rings, and with alkyl groups hanging off the periphery (fingers) while the archipelago model consists of smaller aromatic groups linked by aliphatic bridges. A relationship between the solubility parameter and the molecule structure was determined. In general, increase of the fused-rings number forming the aromatic core and the numbers of heteroatoms such as oxygen, nitrogen and sulfur produces an increase of the solubility parameter. While increases of the numbers and length of the aliphatic chains yield a systematic decreases of those parameters. The molecular structure-solubility parameter relationship was explored using the molecular connectivity indices of Kier and a genetic function approximation (GFA) methodology.

The solubility of those models in toluene, heptane and amphiphiles as resins models was studied using the Scatchard-Hildebrand methodology and the sphere method developed by Hansen. Asphaltenes and resins compose the disperse phase of this colloidal system forming small nanoaggregates while maltenes are the continuous phase. There is no doubt regarding the important role played by resins in the behavior of asphaltenes: resins help to asphaltenes to stay in solution. We have found that, in general, there is a large affinity between the asphaltene type-archipelago and the amphiphiles containing large aliphatic tails and no aromatic rings. On the contrary, type-continental asphaltenes show high affinity for amphiphiles containing aromatic rings, small aliphatic chains and heteroatoms.

## **Estructura de bromuro de cetiltrimetilamonio en disolución acuosa a partir de simulaciones de dinámica disipativa de partículas**

Yosslen Aray[1], Geysler Fernández Catá[2] y Luis Javier Álvarez

*Instituto de Matemáticas, Unidad Cuernavaca,*

*Universidad Nacional Autónoma de México, A. P. 273-3 Admon. 3,  
Cuernavaca, Morelos, 62251 México.*

El surfactante catiónico bromuro de cetiltrimetilamonio (CTAB) es uno de los más ampliamente usados como plantilla en la síntesis de compuestos inorgánicos tales como materiales nano-estructurados basados en SiO<sub>2</sub>. Los mecanismos de formación de micelas, su estabilidad estructural posterior, la morfología y la agregación de micelas todavía no está bien entendido. La influencia de las propiedades físicas de las micelas y de los agregados de micelas en las propiedades finales de sólidos nano-estructurados tampoco se entiende bien. Las escalas de tiempo y longitud de las simulaciones necesarias para estudiar estos aspectos están más allá de los alcances de los métodos actuales de dinámica molecular y Monte Carlo. Con simulaciones mesoscópicas de dinámica disipativa de partículas (DDP) ha sido posible investigar las propiedades de este líquido complejo hasta escalas de micro segundos. La estrategia está basada en dos ingredientes principales. Primero, los átomos se aglutinan en "átomos unidos", las llamadas "perlas" que describen a más de un átomo. Para el CTAB, CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>15</sub>NH(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>Br, hemos puesto juntos cuatro grupos CH<sub>2</sub> en una nueva entidad que llamamos T y la cabeza NH(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>Br la hemos llamado H. Así, la representación mesoscópica del CTAB es HT<sub>4</sub>. El segundo ingrediente es que las nuevas partículas interactúan entre ellas vía fuerzas suaves dejando fuera la interacción repulsiva de núcleo duro que fuerzan a la utilización de pequeños pasos de integración. En DDP la fuerza que actúa sobre una partícula está dada por la suma de una fuerza conservativa, una fuerza de arrastre y una fuerza aleatoria aditiva por pares. La fuerza conservativa está dada por un conjunto de parámetros de repulsión, *aij*, que dependen de la naturaleza de la perla. Las simulaciones de CTAB en disolución acuosa se llevaron a cabo en un intervalo de concentraciones que va de 1M (moles/lit) a 1x10<sup>-4</sup> M. El tiempo simulado para cada una fue de 1.97 micro segundos (1.97x10<sup>7</sup> ps). Se encontraron agregados en forma de barra para concentraciones *c* > 0.390 M. Se forman micelas en estructuras en capas esféricas H-T, H-T para concentraciones en el intervalo (0.033,0.390) M y micelas con solamente una estructura esférica H-T para *c* < 0.333 M. Al igual que en informes experimentales, la concentración micelar crítica se determino alrededor de 0.001 M.

---

[1] *En estancia sabática. Dirección permanente: Centro de Química, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, IVIC, Apartado 21827. Km 14 Carretera Panamericana. Caracas. 1020 A. Venezuela.*

## Presentaciones Póster

P1

### **Estudio y cálculo numérico de la sección eficaz del sistema $C^{4+} + H$ .**

Javier Domínguez-Gutiérrez y R. Cabrera-Trujillo

*Instituto de Ciencias Físicas,  
Universidad Nacional Autónoma de México.*

El cálculo de la sección eficaz de colisiones atómicas se puede realizar por medio de métodos numéricos conocidos. En especial, el método de diferencias finitas (MDF) el cual es eficiente y fácil de implementar; dado que las colisiones son dinámicas uno puede ayudarse del método de Crank-Nicolson para la evolución temporal del sistema a estudiar. De este modo, calculamos la sección eficaz de nuestro sistema  $C^{4+} + H$  resolviendo la ecuación de Schödinger numéricamente. Además, usando el método de interpolación por cubic-splines aseguramos una buena precisión en nuestros resultados. La finalidad es encontrar la sección eficaz como función de la energía de colisión del proyectil para después estudiar el efecto de un láser ultra rápido e intenso. Reportamos resultados para energías de colisión de 100 eV/amu a 10 keV/amu, comparándolos con resultados experimentales ya publicados para la sección eficaz. Además, se muestra la probabilidad de captura electrónica como función del parámetro de impacto.

## **Sistema de radio frecuencia para amarre de frecuencia relativa de dos láseres**

J. Ramón Ramos B.<sup>1,2</sup>, Francisco Salces C.<sup>2</sup>, Eduardo Gómez G.<sup>2</sup>

*1CUCEI, Universidad de Guadalajara*

*2Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí*

Existen algunas aplicaciones en física atómica que requieren de dos láseres separados en frecuencia por una distancia específica. En las trampas magneto-ópticas se utilizan dos láseres cuya separación es la hiperfina del estado base que corresponde a 3 GHz (6.8 GHz) para <sup>85</sup>Rb (<sup>87</sup>Rb). Para inducir transiciones Raman también se requieren dos láseres similares, solo que ahí no basta el amarre en frecuencia sino que se requiere de un amarre en fase. Presentamos un sistema de radio frecuencia capaz de dejar la diferencia de frecuencia de dos láseres de 0 a 7.6 GHz. Hacemos incidir dos láseres en un detector rápido (10 GHz) y observamos el batido que oscila a la diferencia de frecuencia de los láseres. Comparamos la frecuencia del batido con la de una señal de referencia en la tarjeta ADF4007 que contiene divisores de frecuencia conectados a un sintetizador PLL y a un contador. Las variaciones del contador dependen de la diferencia de frecuencias de los láseres. Retroalimentamos la señal de salida de la tarjeta a uno de los láseres para fijarlo con respecto al otro.

## **Oscilaciones de Bloch en presencia de un gradiente de campo magnético**

Víctor Valenzuela Jiménez, Lorenzo Hernández Díaz y Eduardo Gómez García

*Instituto de Física, UASLP*

Las oscilaciones de Bloch se han usado para realizar mediciones de alta precisión, por ejemplo, la medición de la aceleración gravitacional ( $g$ ). Sin embargo, la presencia de un gradiente de campo magnético introduce un efecto sistemático en estas mediciones. Resolvemos las oscilaciones de Bloch en un gradiente magnético para un espinor. Proponemos un método para determinar la aceleración gravitacional en un gradiente distinto de cero. El sistema funciona también como sensor de gradiente de campo magnético. El arreglo experimental para su implementación requiere una infraestructura muy similar a la existente actualmente en nuestro laboratorio.

## **Procesos de adquisición de imagen en el laboratorio de átomos fríos del ICN. Control de obturación de una cámara CCD y su calibración en tiempo e intensidad**

M. Carrillo Fuentes, F. Ramírez-Martínez, C. Mojica, J. Flores Mijangos, J. Jiménez-Mier.

*Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, 04510 México DF, México.*

Se presentan avances en el desarrollo del sistema de adquisición de imágenes por absorción del laboratorio de átomos fríos. La obturación de una cámara CCD (Charged-Coupled Device) es controlada mediante un programa desarrollado en LabVIEW para el chasis PXI-1042Q. Una tarjeta PXI-6602 genera pulsos de disparo con secuencias temporales bien definidas, los cuales son responsables de controlar la obturación de la cámara CCD determinando tanto el momento de inicio de la exposición como la duración de la misma. La imagen obtenida se transfiere a la computadora mediante un módulo PXI-1411. Utilizando este sistema se determinó un tiempo de retraso de 790 nanosegundos entre el pulso de disparo y el momento de inicio de la obturación. Así mismo, se realizó la calibración de la señal registrada en las imágenes en función de la potencia luminosa que incide sobre el CCD para diferentes tiempos de obturación. Con este fin en mente se hizo incidir sobre el chip CCD un haz láser colimado con una longitud de onda de 780nm y un perfil gaussiano ovalado. Se registraron series de imágenes con diferentes tiempos de obturación y con diferentes valores de la potencia incidente. Posteriormente se analizaron las imágenes adquiridas y se reconstruyó el perfil del haz pixel por pixel con el fin de conocer el valor de la constante de proporcionalidad entre el número de cuentas generadas y la potencia luminosa incidente sobre cada pixel. En conclusión, este procedimiento nos permitirá en un futuro determinar el número de átomos registrados por nuestro sistema de detección, así como el rango de operación por debajo del límite de saturación del CCD.

## **Molécula de Hidrógeno en Cajas Esferoidales Prolatas Penetrables con Posiciones Nucleares Arbitrarias a lo Largo del Eje Mayor**

Ricardo Colín-Rodríguez, Cecilia Díaz-García y Salvador A. Cruz

*Departamento de Física,  
Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa Apartado Postal  
55534, 09340, México, D. F., México.*

En este trabajo se presentan, por primera vez, resultados del estudio de la molécula de hidrógeno confinada por una cavidad esferoidal prolata con paredes penetrables y posiciones nucleares desacopladas de los focos de la cavidad, generalizando estudios variacionales recientes para el caso impenetrable [1]. Se presenta la dependencia de la energía basal total y posiciones nucleares de equilibrio en función del tamaño, forma y altura de la barrera de confinamiento. Este estudio se considera el más general para analizar efectos de confinamiento sobre la energía basal de la molécula de  $H_2$  dentro de una cavidad esferoidal prolata. En este tratamiento se ignoran los efectos de correlación electrónica, los cuales pueden ser incorporados siguiendo la misma metodología.

### Referencias:

- [1] R. Colín-Rodríguez and S.A. Cruz, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, 43, 235102 (2010).

## Descripción común entre sistemas cuánticos confinados por un cono elíptico

Ricardo Méndez-Fragoso  
[rmf@fisica.unam.mx](mailto:rmf@fisica.unam.mx)

*Instituto de Física, UNAM*

Los armónicos esferoconales son una base de eigenfunciones alternativa a la base de armónicos esféricos en la teoría familiar de momento angular [1]. Sin embargo, son la base natural para la descripción de las rotaciones de moléculas asimétricas, ya que la ecuación de Schrödinger es separable en coordenadas esferoconales al incorporar la geometría de las moléculas [2,3]. Los armónicos esferoconales quedan en términos de productos de polinomios de Lamé para el caso de las rotaciones libres. Recientemente se han utilizado para sistemas cuánticos confinados en conos elípticos como el átomo de Hidrógeno [4], sistemas con cualquier campo central [5], y en moléculas asimétricas [6]. En este caso los armónicos esferoconales se convierten en funciones cuasiperiódicas ya que al introducir la frontera de confinamiento se rompe la simetría en la parte angular. A pesar de que en todos estos trabajos se trata de sistemas cuánticos asimétricos, se han reconocido las simetrías que se preservan para identificar las cantidades dinámicas conservadas. En la presente contribución se presentan diferentes resultados derivados de los trabajos en los que se han desarrollado las herramientas para identificar las propiedades de los armónicos esferoconales y sus aplicaciones a diferentes sistemas [6].

- [1] E. Ley-Koo y R. Méndez-Fragoso., Rev. Mex. Fís. 2008, 54 (1), 69.
- [2] E. Ley-Koo y R. Méndez-Fragoso., Rev. Mex. Fís. 2008, 54 (2), 162.
- [3] M. T. Valdéz y E. Piña, Rev. Mex. Fís. 2006, 52, 220.
- [4] R. Méndez-Fragoso y E. Ley-Koo, Int. J. Quantum Chem. 2010. DOI 10.1002/qua.22569
- [5] R. Méndez-Fragoso y E. Ley-Koo, Int. J. Quantum Chem. 110 (2010) 2765. DOI 10.1002/qua.22806
- [6] R. Méndez-Fragoso y E. Ley-Koo, Advances in Quantum Chemistry. Vol. 62 (en prensa 2011).

## First principles study of the nanoparticles nature of unsupported transition metal sulfide catalyst in hydrotreating conditions.<sup>1, 2, 3</sup>

Yosslen Aray

*Centro de Química, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, IVIC, Apartado 21827, Caracas 1020 A, Venezuela  
Instituto de Matematicas, Unidad Cuernavaca, Universidad Nacional Autónoma de México, Morelos, México.*

Density functional theory calculations combined with surface thermodynamic arguments (First-principles surface thermodynamics), and the Gibbs-Curie-Wulff equilibrium morphology formalism have been employed to explore the effect of the reaction conditions, temperature and gas-phase partial pressures ( $p_{H_2}$  and  $p_{H_2S}$ ), on the stability of low Miller-index surfaces exposed by the nanoparticles of  $MoS_2$ ,  $CoMoS$ ,  $NiMoS$ ,  $Ni_3S_2$  and  $RuS_2$  sulfides. The determined equilibrium morphology (particle shape, type and area of the exposed surfaces) of the nanoparticles at hydrosulfurization conditions are: a flat octahedron (two perfect hexagonal (001) faces skirted by six (100) faces with rectangular form) for  $MoS_2$ ; a tetradecahedron (two dodecagonal (001) basal faces, six small rectangular (100) faces and six big rectangular 110 faces) for  $NiMoS$  and  $CoMoS$ ; an octahedron (two deformed hexagonal (111) faces bordered by six (11-1)-type faces with trapezium form) for  $Ni_3S_2$  and a truncated cuboctahedron (12 trapeziums, 8 deformed hexagons and 6 deformed octagons) for  $RuS_2$ . Direct visualization of the atomic basins of the outermost individual atoms of the particle exposed surface using the Quantum Theory of Atoms in Molecules methodology has shown that for very inactive catalysts such as  $MoS_2$  and  $Ni_3S_2$  the outermost metal atoms are almost totally covered by the outermost S basins. Small holes between the outermost S atoms give reduced access to the Ni and Mo atoms. On the contrary, for very active catalysts such as  $NiMoS$  and  $RuS_2$  there are substantial open zones (holes) on the outermost S basin given considerable access to the metal atoms. Analysis of the electrostatic potential mapped on the exposed surfaces reveals soft Lewis acid character for  $Ni_3S_2$  and  $MoS_2$  and strong Lewis acid sites for  $NiMoS$ ,  $CoMoS$  and  $RuS_2$ . For all the studied cases, the most positive zones are localized at the holes among the basins of the outermost S atoms. Consequently, the S atoms contained in the polluting molecules are very attracted by the surface sites exposed by the  $NiMoS$  and  $RuS_2$  surface cuts. These results suggest that the origin of the observed high HDS reactivity of the catalysts is strongly related with the presence of strong accessible Lewis acid sites at the surfaces exposed by the catalyst particles.

- Y. Aray, D. Vega, J. Rodríguez, A. B. Vidal, M. E. Grillo, S. Coll.  
First Principles Study of Low Miller Index  $Ni_3S_2$  Surfaces in Hydrotreating Conditions.  
*Journal of Physical Chemistry B*, (2009), 113, 3058.
- Y. Aray, D. Vega, J. Rodríguez, A. B. Vidal, M. E. Grillo, S. Coll.  
First Principles Study of Low Miller Index  $RuS_2$  Surfaces in Hydrotreating Conditions.  
*Journal of Physical Chemistry C*, (2009), 113, 19545. Escogido como Portada de la Revista J. Phys.Chem. C, número del 12 de Noviembre del 2009.
- Y. Aray, A. B. Vidal, S. Coll, J. Rodríguez  
First Principles Study of the Nanoparticles Nature of Unsupported Transition Metal Sulfide Catalyst in Hydrotreating Conditions.

## **Método experimental alternativo para medir las energías de estados vibracionales en soluciones aromáticas**

Sayab Garcés

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

*Apartado Postal 48-3, 62251 Cuernavaca, Mor., México*

Estudios espectroscópicos recientes de la Conversión Interna en moléculas complejas (aromáticas) han mejorado debido a la introducción de métodos y técnicas experimentales novedosos y de bajo costo. Los estudios consisten en la medición de las energías de los estados electrónicos excitados y, también, de las energías de los estados vibracionales de dichas moléculas. Estos estudios auxilian en el conocimiento de las moléculas orgánicas poliatómicas para usos potenciales en láseres dye y en estudios de dinámica molecular a partir de la fluorescencia de soluciones, por mencionar algunos. El presente estudio se lleva a cabo con una muestra molecular orgánica de Cumarina-460 (C1) disuelta en etanol ( $5 \times 10^{-3}$  molar, de concentración). El estudio consiste en bombear a la solución orgánica de C1 con una fuente de luz diodo, cuyo máximo central está en 362nm, en dos modos de operación: modo continuo y modo pulsado. Las observaciones devuelven espectros con diferencias sutiles en el Ancho de Banda Medio ( $FWHM_{BW}$ ). La diferencia de  $FWHM_{BW}$  hacia longitudes de onda menores (para el caso del espectro en modo pulsado) hace posible una medición indirecta de la energía del estado vibracional excitado. La causa, se propone, es el aumento de la población en el estado vibracional a partir de hacerlo resonar en el tiempo con luz pulsada en el orden de nanosegundos. Estos ordenes temporales coinciden con el tiempo de vida media del estado electrónico excitado de la molécula.

## **Control y sincronización digital de procesos en una Trampa Magneto-Óptica**

C. Mojica, M. Carrillo Fuentes, F. Ramírez-Martínez, J. Flores Mijangos, J. Jiménez-Mier.

*Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, 04510 México DF, México.*

Los átomos confinados en trampas magneto-ópticas representan una gran posibilidad para el estudio de sus propiedades y estructura. En el presente trabajo se presenta un programa desarrollado en LabView para controlar los procesos en la trampa magnetoóptica del laboratorio de átomos fríos. Se utiliza un sistema PXI cuyo elemento principal es una tarjeta PXI-6251. La tarjeta cuenta con las salidas y entradas tanto analógicas como digitales para llevar a cabo el control de la trampa magneto-óptica. Los procesos a controlar son: 1) Frecuencia de emisión de los láseres de enfriamiento y atrapamiento. 2) Control de encendido y apagado del campo magnético. 3) Control de obturadores para los haces. El control de estos procesos permite estudiar el comportamiento de los átomos en diferentes condiciones, por ejemplo, respuesta a cambios de frecuencia de los láseres, caída libre y caída en melaza óptica. De igual manera es posible utilizar más salidas digitales para controlar otros procesos como toma de imágenes sincronizadas.

### **Clathrate hydrates: applied to hydrogen storage**

Daniel Porfirio Luis Jiménez, Jorge López-Lemus  
*Universidad Autónoma del Estado de México.  
Instituto Literario 100, C.P. 50000, Toluca*

Since the discovery of clathrate hydrate of hydrogen in 2002, many efforts have been done to study this compound in many areas. In the present work we show some recent discoveries made with molecular simulations in order to observe the capability of clathrate hydrates to storage hydrogen molecules, after that, the stability of hydrogen clathrate hydrate was investigated using a classical molecular dynamics calculation package "GROMACS", arranging only one hydrogen molecule into each host-frame of the hydrogen clathrate. Coordination number was evaluated to be used like stability criteria of the clathrate structure. The diffusion coefficient of the hydrogen molecules was calculated to observe how the movement of the H<sub>2</sub> molecules can affect the stability of the structure, and also, an external electric field was applied in the system to observe how this external perturbation can destabilizing or stabilizing the hydrate structure. These calculations were done with a NPT ensemble at a temperature of 100 K and a pressure of 2.5 kbar. SPC/E potential was used for water molecules and a potential that consists in three sites of partial charges and a Lennard-Jones site for the molecules of hydrogen.

## **Propiedades dieléctricas de la mezcla gaseosa $\text{CF}_3\text{I}$ - $\text{SF}_6$**

Alejandro Mitrani  
*Instituto de Ciencias Físicas*

El hexafluoruro de azufre ( $\text{SF}_6$ ) es un muy buen aislante de altos voltajes, por lo cual es utilizado en grandes cantidades por la industria eléctrica. Este gas altamente inerte, tiene uno de los potenciales de calentamiento global más alto de todos los gases, y se ha calculado tener una vida media en la atmósfera superior a los 800 años. Debido a esto, muchos países han buscado reducir sus emisiones de este gas a la atmósfera, por lo que se ha tomado un interés en encontrar un gas con propiedades dieléctricas similares, que pueda sustituir el uso de  $\text{SF}_6$ . En esta búsqueda se han encontrado algunos gases, tanto puros como mezclas, con buenas propiedades dieléctricas, entre ellos el trifluoroyodometano ( $\text{CF}_3\text{I}$ ), pero hasta el momento ninguno ha sido tomado por la industria como sustituto. Este trabajo presenta un primer estudio de la mezcla  $\text{SF}_6$  -  $\text{CF}_3\text{I}$ , utilizando la técnica pulsada de Townsend, la cual consiste en medir la corriente creada por el desplazamiento de cargas dentro del gas, bajo la presencia de un campo eléctrico externo entre un par de electrodos. Con esta técnica, se pueden encontrar diferentes propiedades, llamadas parámetros de enjambre. Para este estudio se midieron la velocidad electrónica, el coeficiente de ionización efectiva y la difusión longitudinal para diferentes concentraciones de  $\text{SF}_6$  -  $\text{CF}_3\text{I}$ , obteniendo resultados prometedores. Se espera que los resultados obtenidos sirvan de base para futuros estudios que puedan determinar si esta mezcla podría ser un sustituto viable para  $\text{SF}_6$  puro, y ayudar a reducir las emisiones de este a la atmósfera.

## **Sobre el confinamiento de CH<sub>4</sub> en una caja de aguas, con números de moléculas de agua menores a 20**

Graciela Bravo Pérez<sup>1</sup> y Humberto Saint-Martin<sup>2</sup>,

<sup>1</sup>*Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central L. Cárdenas Nte. 152, México D.F., C. P. 07730, [gbperez@imp.mx](mailto:gbperez@imp.mx)*

<sup>2</sup>*Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, Cuernavaca, Morelos, C. P. 62251 [hstmartin@fis.unam.mx](mailto:hstmartin@fis.unam.mx)*

Mediante cálculos químico-cuánticos del tipo B3LYP/6-311g(d,p) se analiza el efecto de la formación de un hidrato de metano formando cajas de agua con monómeros que varían entre 13 y 16 moléculas de agua y se enlazan entre sí mediante puentes de hidrógeno. Se toma en cuenta la corrección por el efecto de superposición de base, se incluye el efecto de la corrección a la energía por entropía (1 Atm. and 298.15K), y se analiza el efecto del confinamiento y la preferencia entre caras pentagonales y/o cuadradas para este fin.

## **Un caso de estudio para transferencia adiabática de población en un sistema de cuatro niveles: producción de estados de Rydberg en rubidio**

J. Jiménez-Mier,<sup>1</sup> J. Flores-Mijangos,<sup>1</sup> F. Ramírez-Martínez,<sup>1</sup> D. Sahagún-Sánchez,<sup>2</sup> C. Mojica,<sup>1</sup> y M. Carrillo.<sup>1</sup>

*1 Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, 04510 México DF, México.*

*2 Microtrap Group, Centre for Quantum Technologies, National University of Singapur*

El empleo de pulsos laser en secuencia contraintuitiva para transferir población de manera eficiente entre estados con vida media larga (STIRAP) es un proceso bien conocido y probado con sistemas de tres niveles. Ha habido también una amplia discusión sobre esquemas de transferencia adiabática para más de tres niveles. En este trabajo se presentan resultados de cálculos STIRAP para la transferencia de población en la escalera  $5s \rightarrow 5p_{3/2} \rightarrow 5d \rightarrow nl$  en rubidio atómico, conectados por láseres de prueba ( $\pi_p$ ), de acoplamiento ( $\pi_c$ ) y Stokes ( $\pi_s$ ). Los cálculos emplean parámetros accesibles a los sistemas empleados en nuestro laboratorio. Se demuestra que si se utiliza la secuencia contraintuitiva (se inicia con pulso Stokes y se concluye con pulso de prueba) y el láser de acoplamiento de mantiene en resonancia durante el proceso completo, se debe lograr una transferencia eficiente de población a los estados de Rydberg  $nl$ . La población de los estados intermedios de vida corta nunca supera al 1%. El cálculo también permite estudiar las escalas de tiempo para satisfacer la condición de transferencia adiabática. Se presentan también los resultados de cálculos para probabilidades de transición dipolar eléctrica entre el nivel  $5d$  y estados de Rydberg que permiten evaluar la conveniencia del proceso STIRAP de cuatro niveles.

## Transparencia inducida electromagnéticamente en vapor de rubidio atómico a partir de las transiciones $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2} \rightarrow 5D_J$ .

Jesús Flores-Mijangos<sup>1</sup>, Alejandro M. Hernández y Hernández<sup>1</sup>, Cristian A. Mojica Casique<sup>1</sup>, Miriam P. Carrillo Fuentes<sup>1</sup>, Daniel Sahagún<sup>2</sup>, Fernando Ramírez-Martínez<sup>1</sup>, José Jiménez-Mier<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, 04510 México DF, México.*

<sup>2</sup>*Instituto de*

En este trabajo se estudia el proceso de transparencia inducida electromagnéticamente (EIT) sobre el perfil de absorción asociado a la transición  $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$  en rubidio atómico. El proceso ocurre en una celda con vapor de rubidio a temperatura ambiente que interactúa con dos haces contrapropagantes sintonizados a 780.42 y 776.16 nm, los cuales son generados por dos láseres de construcción local. El primero de ellos, denominado haz de prueba, tiene una intensidad inferior a la intensidad de saturación ( $1.6 \text{ mW/cm}^2$ ) y está preparado para incidir linealmente polarizado. El segundo, el haz de acoplamiento, induce la transparencia en el vapor de rubidio al estar sintonizado a la transición  $5P_{3/2} \rightarrow 5D_J$ .

La transparencia inducida por el haz de acoplamiento se observa al registrar el perfil de absorción del haz de prueba, de modo que al modificar la sintonía del haz de acoplamiento se cambia la posición de la transparencia a lo largo del perfil de absorción del haz de prueba. Estos resultados son consistentes con trabajos anteriores como los de Gea-Banacloche et. al. [1], Grove et. al. [2] y Becerra et. al. [3]. Sin embargo, en nuestro caso el haz de acoplamiento, que tiene una potencia del orden de 10 mW, está circularmente polarizado e induce una anisotropía óptica en el haz de prueba. Esto último nos permite generar una señal de dispersión a partir del análisis de la rotación inducida en cada una de las dos componentes de polarización del haz de prueba sin la necesidad de la aplicación de un campo magnético externo como lo hacen en [3]. Por lo tanto, la señal de dispersión puede ser utilizada para anclar en frecuencia al láser de 776 nm como lo muestra Becerra [3] pero sin emplear un sistema DAVLL. Como resultado de la interacción del vapor de rubidio con estos dos haces fue posible observar a simple vista la fluorescencia de 420 nm debida al decaimiento  $6P_J \rightarrow 5S_{1/2}$ . El estudio de esta interacción multifotónica, además de dar información dinámica sobre los niveles atómicos involucrados, es la base para llevar a cabo la producción de átomos en estados Rydberg vía el proceso STIRAP empleando tres fotones (ver trabajo anexo).

[1] J. Gea-Banacloche, Yong-qing Li, Shao-zheng Jin, and Min Xiao, *Physical Review A*, 51, (1995).

[2] T. T. Grove, V. Sanchez-Villicana, B. C. Duncan, S. Maleki and P. L. Gould, *Physica Scripta*, 52, (1995).

[3] F. E. Becerra, R. T. Willis, S. L. Rolston, and L. A. Orozco, Journal Optical Society American B, 26, (2009).

P15

## **Realce de bordes direccional e isotrópico en tomografía óptica de objetos de fase**

Areli Montes-Pérez<sup>1</sup>, Cruz Meneses-Fabian<sup>1</sup>, Gustavo Rodriguez-Zurita<sup>1</sup>, Noel-Ivan Toto-Arellano<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>*Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas Posgrado de Física Aplicada, Apdo. Postal 1152, C. P. 72570 Puebla.*

<sup>2</sup>*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*

La tomografía óptica (TO) es una técnica de tomografía computarizada para obtener digitalmente la distribución espacial de algunas propiedades físicas de un objeto, esto es dado por la luz transmitida y dispersa que pasa a través del objeto. Cuando se considera que una onda viaja a través de un objeto sin desviarse (mínima refracción), el haz proveniente del objeto se considera como una serie de datos de proyección de una rebanada del objeto, y estos datos de proyección en el contexto matemático son modelados mediante la transformada de Radon, cada proyección puede ser detectada saliendo del objeto y caracterizada al ángulo de proyección entre 0 y 360 grados. En TO de objetos de fase, la propiedad física que se usa para estudiar estos objetos es el índice de refracción, hay técnicas de investigación de objetos de fase, como la técnica interferométrica para recuperar la fase y su reconstrucción, esto se conoce como tomografía interferométrica. En la tomografía descrita anteriormente se obtiene la función de rebanada del objeto pero usando técnicas de extracción de fase. En este trabajo, presentamos un método más directo que el ya conocido, donde se obtiene la función de rebanada del objeto y además se hace la operación de realce de borde direccional e isotrópico, basado en hallar la transformada de Hilbert del campo emergente del objeto de fase, esta operación de Hilbert es llevada a cabo mediante la implementación del correlador óptico  $4f$  y un filtro escalón espacial de fase de  $\pi$  radianes. Esto es bajo el contexto de objetos de fase delgada y gruesa. La dirección deseada del realce de borde se puede

elegir por la selección adecuada del ángulo de giro. Se discute el modelo matemático y se presentan resultados numéricos y experimentales.

P16

## Espectroscopía electrónica de HCl

G. J. Vázquez,

*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional  
Autónoma de México (UNAM), 62210 Cuernavaca, Mexico*

H.P. Liebermann,

*Fachbereich C-Mathematik und Naturwissenschaften,  
Universität Wuppertal, Gaustrae 20, D{42119 Wuppertal, Germany*

H. Lefebvre-Brion,

*Institut des Sciences Moleculaires d'Orsay, Bât. 213,  
Université de Paris Sud (CNRS), 91405 Orsay Cedex, France*

En años recientes hemos estudiado la espectroscopía y fotofísica de moléculas pequeñas de interés atmosférico y astrofísico. Continuando con esta línea de investigación en esta contribución reportamos cálculos ab initio SCF-CI de HCl. Para el átomo de cloro empleamos la base aug-cc-pCVTZ aumentada con seis funciones de Rydberg y para el de hidrógeno la base 10s6p. Calculamos curvas de potencial de alrededor de 80 estados electrónicos, singuletes, tripletes y quintetos, de simetrías espaciales  $^1\Sigma^+$ ,  $\Sigma^-$ ,  $\Pi$  y  $\Delta$ , las cuales discutiré brevemente. En mi presentación reportare las constantes espectroscópicas teóricas ( $T_e$ ,  $r_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e X_e$ ,  $B_e$ ) de los estados singuletes más bajos, de valencia y de Rydberg, las cuales están en buen acuerdo con los valores experimentales. Un artículo sobre HCl asociado con el presente trabajo está actualmente en prensa [1].

[1] H. Lefebvre-Brion, H. P. Liebermann, G. J. Vazquez, J. Chem. Phys., 134, xxxx (2011)

## Rydberg and valence states of co in the far-UV

G. J. Vázquez, J. M. Amero,  
*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional  
 Autónoma de México (UNAM), 62210 Cuernavaca, Mexico*  
 H.P. Liebermann,  
*Fachbereich C-Mathematik und Naturwissenschaften,  
 Universität Wuppertal, Gaustrae 20, D{42119 Wuppertal, Germany*  
 H. Lefebvre-Brion,  
*Institut des Sciences Moleculaires d'Orsay, Bât. 213,  
 Université de Paris Sud (CNRS), 91405 Orsay Cedex, France*

Ab initio potential energy curves of a relatively large number of Rydberg and valence states of CO are calculated in order to address a number of problems remaining in the interpretation of the experimental far-UV absorption spectra [1]. The calculations are of the type SCF MRSD-CI. We employed the aug-cc-pVQZ basis set for both carbon and oxygen, augmented with twelve diffuse functions, of s-, p- and d- type, located on both atomic centers. We focus on the energy region  $85\,000\text{ cm}^{-1} < E < 110\,000\text{ cm}^{-1}$  characterized by strong interactions between Rydberg and valence states. In this work we deal specifically with the  $^1\Sigma^+$ ,  $^1\Pi$  and  $^3\Pi$  states lying in this region [2,3]. Some of the relevant findings are: The minimum of the  $C^1\Sigma^+$  valence state is found 1920  $\text{cm}^{-1}$  above the value inferred from an extrapolation of experimental data. A new  $^1\Pi$  valence state, labelled E', is found to perturb strongly the  $(X^2\Sigma^+)3p\pi$   $E^1\Pi$  Rydberg state. The electrostatic perturbation of the  $(X^2\Sigma^+)3p\pi$   $c^3\Pi$  Rydberg state by the  $k^3\Pi$  valence state is confirmed. The energy position of the  $(A^2\Pi^+)3ps\sigma$   $^3\Pi$  state, the triplet companion of the  $W^1\Pi$  Rydberg state, is predicted.

[1] M. Eidelsberg, F. Launay, K. Ito, T. Matsui, P. C. Hinnen, E. Reinhold, W. Ubachs, K. P. Huber, *J. Chem. Phys.*, 121, 292 (2004)

[2] G. J. Vazquez, J. M. Amero, H. P. Liebermann, R. J. Buenker, H. Lefebvre-Brion, *J. Phys. Chem. A*, 113, 13395 (2009)

[2] H. Lefebvre-Brion, H. P. Liebermann, G. J. Vazquez, *J. Chem. Phys.*, 132, 024311 (2010)

## Índice alfabético

Almora-Díaz, C. X.....	12	Klempt, C.....	18
Álvarez, L. J.....	26	Lacroute, C.....	18
Amaya-Tapia, A.....	8	Laloe, F.....	18
Amero, J. M.....	43	Lefebvre-Brion, H.....	42, 43
Antillón, A.....	8	Ley Koo, E.....	13
Aray, Y.....	25, 26, 33	Liebermann, H. P.....	42, 43
Arlt, J.....	18	López-Lemus, J.....	36
Bravo Pérez, G.....	38	Luis Jiménez, D. P.....	36
Bunge, C. F.....	12	Méndez-Fragoso, R.....	32
Burlak, G.....	24	Mitrani, A.....	37
Cabrera-Trujillo, R.....	22, 27	Mojica, C.....	19, 30, 35, 39, 40
Carrillo, M.....	19, 30, 35, 39, 40	Montes-Pérez, A.....	41
Colín-Rodríguez, R.....	11, 31	Moya-Cessa, H.....	17
Cruz Meneses, F.....	41	Olalde-Velasco, P.....	14
Cruz, S. A.....	11, 23, 31	Piéchon, F.....	18
Denlinger, J.....	14	Ramírez-Martínez, F..	18, 19, 30, 35, 39, 40
Deutsch, C.....	18	Ramon Ramos, J.....	28
Díaz-de-Anda, A.....	24	Rasel, E.....	18
Díaz-García, C.....	11, 31	Recamier, J.....	21
Domínguez-Gutiérrez, J.....	27	Reichel, J.....	18
Ertmer, W.....	18	Reinhard, F.....	18
Fernández Catá, G.....	26	Rodríguez-Méndez, D.....	17
Flores Mijangos, J.....	19, 30, 35, 39, 40	Rodríguez-Zurita, G.....	41
Fuchs, N.....	18	Rosas-Ortiz, O.....	21
Garcés, S.....	34	Rosenbusch, P.....	18
Gómez, E.....	20, 28, 29	Sahagún, D.....	19, 39, 40
González, A. E.....	16	Saint-Martin, H.....	38
Hernández Díaz, L.....	20, 29	Salces, F.....	28
Hernández Lamonedá, R.....	15	Schneider, T.....	18
Hernández y Hernández, A. M.....	40	Stolterfoht, N.....	10
Hernández, E. M.....	10	Toto-Arellano, N. I.....	41
Hinojosa, G.....	10	Valenzuela Jiménez, V.....	20, 29
Ixtlilco-Cortés, L.....	16	Vázquez, G.J.....	42, 43
Jáuregui, R.....	19, 21	Vázquez, Z. M.....	10
Jiménez-Mier, J.....	14, 19, 30, 35, 39, 40	Volke-Sepúlveda, K.....	19
Juárez, A. M.....	9, 19	Will, J.....	18
Kleine Buning, G.....	18	Yang, W. L.....	14