



# TaDEM 2012

## 3<sup>er</sup> Taller de Dinámica y Estructura de la Materia

(Física atómica, molecular y óptica)

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM el 24  
de mayo e  
Instituto de Química, UNAM el 25 de mayo.  
Ciudad Universitaria, D.F.  
2012

### 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*

 <p><b>INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS</b></p>		
<b>Instituto de Ciencias Físicas</b>	<b>Instituto de Ciencias Nucleares</b>	<b>DGAPA/UNAM</b>

## Prefacio

Motivados por la entusiasta respuesta de la comunidad al primer taller, llevado a cabo en Ciudad Universitaria en el año 2010 y al segundo taller en el 2011 que se llevó a cabo en el Instituto de Ciencias Físicas, en Cuernavaca, Morelos, nos hemos dado a la tarea de organizar el tercer Taller de Dinámica y Estructura de la Materia (TaDEM). Este tercer taller pretende seguir fomentando y construyendo, motivado por el dinamismo y calidad de los anteriores, 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 tercer taller sea un eslabón más 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. 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 **3<sup>er</sup> 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 tercer taller hacemos votos porque esta reunión, de regreso en Ciudad Universitaria, constituya una clara señal de

continuidad para estos eventos y este esfuerzo de cohesión entre la comunidad de Física Atómica y Molecular y Óptica, sea solamente uno de muchos mas de su tipo que 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, Instituto de Química y del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM por los recursos que nos han permitido realizar este tercer taller.

Finalmente, como ya es tradición en este taller, en el que celebramos la labor y trayectoria de los decanos en el área, este taller será en honor de nuestro querido colega Carlos F. Bunge Molina, del Instituto de Física de la UNAM y pionero en cálculos de alta precisión en química cuántica. ¡En hora buena Carlos!

México D.F. 24 de Mayo de 2012

Los Organizadores

## Carlos F. Bunge Molina y la Química Cuántica

Carlos Federico Bunge Molina y Vedia nació en Buenos Aires, Argentina en 1941. Hijo de Julia D. Molina y Mario Bunge, desde muy pequeño, se le inculca un aprecio especial hacia las actividades intelectuales y de reflexión. La personalidad fuerte y a la vez dulce de su abuela y de su madre permitieron que Carlos o Cantarito - como lo llamaba su abuela- aprendiera a disfrutar también de la compañía de su familia. Por otra parte las actividades deportivas, en particular el fútbol se convirtieron en un espacio para relajarse y expresarse. Así, desde su niñez, las pasiones por el conocimiento, la familia y el fútbol han sido ejes que definen en gran parte su personalidad.



En 1962 Carlos Bunge obtiene la Licenciatura en Ciencias Químicas en la Universidad de Buenos Aires y se traslada en compañía de su primera esposa Annik Vivier a la Universidad de Florida donde obtiene el Doctorado en Físico-química. Como parte de su tesis doctoral titulada “A configuration interaction study of atomic beryllium” generó un programa de cómputo que buscaba obtener con la máxima precisión posible los niveles de energía y las funciones que describen a átomos más allá de la aproximación de campo medio utilizando el método de interacción de configuraciones (CI). Este método variacional se basa en el desarrollo en serie de la función de onda en términos de funciones propiamente simetrizadas construidas en base a orbitales atómicos. Entre las contribuciones de los Bunge en el periodo doctoral y posdoctoral, destaca la identificación de los espacios interactuantes de funciones de configuración, lo cual permite obtener funciones de onda compactas, punto importante para entender los efectos de correlación electrónica.

La familia Bunge realiza entonces estancias de trabajo en las Universidades de Indiana (1967-1968), Central de Venezuela (1968-1970) y Sao Paulo (1971-1976). En estas instituciones educativas además de impartir cursos, diseñar planes de estudio y formar estudiantes graduados, Carlos continúa sus investigaciones acerca del método CI y de sus aplicaciones concretas. Destacan en este periodo el estudio sistemático de la convergencia del desarrollo CI para obtener cotas superiores a las energías no relativistas de átomos de pocos electrones. Esas cotas tienen precisión tal que en un momento dado han sido confundidas por autores como valores experimentales difícilmente mejorables.

Carlos se traslada a México en 1976. Con su ingreso, el Instituto de Física de la U. N. A. M. incorpora a un investigador que conoce en detalle a veces anecdótico la energía de diversos sistemas atómicos. El micro hartree, unidad correspondiente aproximadamente a dos veces la millonésima parte de la energía del estado base del átomo de hidrógeno, es la escala natural para describir la precisión alcanzada. Los alumnos de la Facultad de Ciencias encuentran en Carlos a un profesor entusiasta, obsesivo en la perfección y de una personalidad única. Entre los logros más importantes cercanos a su incorporación a nuestra Universidad está la identificación sistemática de las propiedades de estados electrónicos que permitirían la formación de iones negativos (átomos con un electrón de más) así como el cálculo detallado de algunos de ellos. Las predicciones de su grupo se comprueban en laboratorio:  $\text{Li}^-$ ,  $\text{Be}^-$  o el controversial  $\text{Ca}^-$ .

Los avances tecnológicos asociados al cómputo estallan a inicios de los años 80 y Carlos está al pendiente de ellos; se inician las conversaciones a distancia y Carlos es pionero en México en su uso; el

cómputo impacta al quehacer nacional y los primeros equipos a ser utilizados en las elecciones han sido probados antes por Carlos quien detecta detalles a ser mejorados en los compiladores. Es muy tentador para su carácter perfeccionista el buscar siempre optimizar su programa de cómputo de acuerdo a los avances en *hardware* (de la vieja *Burroughs*, a la *VAX*, de la *VAX*, al supercómputo...) y en *software* (el uso óptimo de la memoria virtual, la vectorización, mas tarde el paralelismo...). Carlos Bunge es conocedor de lo último y quiere usarlo; sin embargo, esto conlleva riesgos; en una ocasión se extravió el programa original y Carlos se ve obligado a reiniciar un trabajo que ya llevaba 20 años. Al hacerlo, rediseña el programa y, nuevamente, es pionero en el uso de la arquitectura modular. Perfecciona y optimiza programas de diagonalización y de simetrización. Extiende la infraestructura para realizar también cálculos moleculares.

Sin embargo, no solo hay interés en el aspecto computacional. Se trabaja entonces en los fundamentos para establecer métodos variacionales para la ecuación de Dirac de muchos cuerpos. Eugenio Ley y yo misma somos partícipes de una época especialmente emocionante donde se encuentran resultados interesantes y no exentos de controversia. ¿Cómo caminar sobre las aguas y no hundirse en el mar de Dirac? ¿Es indispensable para ello pasar por un formalismo de campo medio Dirac-Fock? Entonces, ¿como se integran los efectos de correlación? Así por ejemplo, en colaboración con Oliverio Jitrik, Carlos estudia los efectos de orbitales de energía negativa en transiciones radiativas prohibidas en el contexto dipolar no relativista.

Actualmente, junto con sus estudiantes entre los que destaca César X. Almora, trabaja en el estudio espectroscópico de sistemas atómicos pequeños tratando de establecer los dominios de validez de la teoría atómica estándar.

La semblanza de un científico debe incluir datos duros algunos de ellos son la publicación de más de un centenar de artículos con alrededor de 2500 citas entre las que destacan aquellas hechas por el *Physics News*. Ha sido galardonado con la Medalla académica de la Sociedad Mexicana de Física y fue Guggenheim Fellow. La American Physical Society lo distingue como arbitro destacado.

Es difícil definir a Carlos en pocas palabras, sin embargo, estas debieran incluir sin duda alguna la integridad y el entusiasmo.

Rocío Jáuregui

Instituto de Física  
Universidad Nacional Autónoma de México  
mayo, 2012

## HORARIO Taller AMO 2011

HORARIO	24/05/12	25/05/12
8:30-9:00	<b>Registro</b>	<b>Registro</b>
9:00-9:30	<b>(Chair: R. Jáuregui)</b> <b>Inauguración</b>	<b>(Chair: S. A. Cruz)</b> O10 Jesús Flores Mijangos
9:30-10:00	O1 Carlos Bunge	O11 Antonio Juárez
10:00-10:30	O2 Luis Orozco (Lecture)	O12 Luis O. Castaños
10:30-11:00	O2 Luis Orozco	O13 Carlos Amero
11:00-11:30	<b>CAFE</b>	<b>CAFE</b>
11:30-12:00	<b>(Chair: A. Juárez)</b> O3 Lorenzo Hernández	<b>(Chair: E. Gómez)</b> O14 Luis Orozco (Lecture)
12:00-12:30	O4 Ricardo Méndez F.	O14 Luis Orozco
12:30-13:00	O5 Lina Hoyos	O15 J. I. Jiménez M y T
13:00-13:30	O6 Ramón Hernández	O16 Rocío Jáuregui
13:30-15:30	<b>COMIDA</b>	<b>COMIDA</b>
15:30-17:00	<b>POSTERS (P1-P16)</b>	<b>POSTERS (P1-P16)</b>
17:00-17:30	<b>(Chair: J. I. Jiménez)</b> O7 Salvador Cruz	<b>(Chair: J. Flores Mijangos )</b> O17 Javier Domínguez
17:30-18:00	O8 Eugenio Ley Koo	O18 Guillermo Hinojosa
18:00-18:30	O9 Irineo P. Zaragoza	<b>CLAUSURA</b>

## ANUNCIO

### Coloquio del Instituto de Física y de la OSA-UNAM Student Chapter

*Luis A. Orozco*

Joint Quantum Institute  
Department of Physics, University of Maryland, USA

## Nanofibras ópticas para sistemas híbridos de información cuántica

Miércoles 23 de mayo de 2012  
Auditorio Alejandra Jáidar  
13:00 horas  
Instituto de Física, UNAM

# Índice de contenido

Objetivos, logros recientes y metas inmediatas de mi proyecto científico.....	8
Electrodinámica cuántica de cavidades.....	8
Demostración de una trampa dipolar para mediciones coherentes.....	9
Cálculo del número máximo de partículas de un condensado de Bose-Einstein dentro de una trampa modelada por un potencial cuadrado.....	9
Efecto optogalvanico en un catodo hueco.....	10
Tetrámero de oxígeno molecular (O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> : Fuerzas intermoleculares y la fase sólida epsilon .....	10
Modelo de confinamiento espacial para el estudio de efectos interfaciales en el depósito de energía de haces de iones.....	11
Operadores escalera para el oscilador armonico isotropico confinado en angulos diedros. ....	12
Study of interaction between fullerene molecule and CH <sub>2</sub> fragment by molecular dynamic.....	12
Espectroscopia por resonancia magnética láser de átomos ligeros.....	13
Usos avanzados de la Física Molecular en áreas estratégicas para México: Salud, alimentación, energía y medioambiente.....	14
Transiciones magnético-dipolares con desintonia dependiente del tiempo.....	15
Resonancia Magnética Nuclear en proteínas en México.....	15
Que sabemos del Francio .....	16
Espectroscopía de polarización con selección de velocidades para los esquemas de excitación en lambda y en escalera.....	16
Esparcimiento de haces de átomos fríos por haces de luz estructurados.....	17
Estudio de la colisión asistida por láser del sistema Li <sup>++</sup> +H a energías intermedias.....	17
Transmisión y guía de iones simples a través de capilares en PET.....	18
<b>Presentaciones Póster</b> .....	19
Obturador mecánico de rápido desempeño y bajo costo para láseres en una MOT.....	19
Microscopio confocal para el estudio de photon antibunching y de fuentes de fotones individuales....	19
Operadores escalera para armónicos esferoconales.....	20
El atomo de hidrógeno confinado en angulos diedros y el principio de Aufbau .....	20
High NOON states in trapped ions .....	21
Diseño del sistema de detección por absorción saturada de nubes de rubidio en una trampa magneto óptica.....	21
Estudio numérico y analítico del comportamiento de una partícula cuántica confinada por una trampa armónica unidimensional y el efecto de un láser de Ti:Safiro en su propagación.....	21
Nuevo sistema de vacío para MOT compatible con molasa óptica.....	22
Sistema de micro-ondas sintonizable para oscilaciones de Rabi.....	22
Conducción de protones a través de nanocapilares en PET.....	23
Cálculo del poder de frenamiento electrónico molecular para protones utilizando el modelo del oscilador armónico y los orbitales moleculares FSGO.....	23
Ecuación universal del poder de frenamiento electrónico utilizando el modelo del oscilador armónico	24
Propuesta para un sistema de detección de iones en una MOT.....	24
Vibronic oscillator strengths for the A1 X1+ band system of carbon monoxide.....	25
New bound electronic states of CF+.....	26
Estados coherentes no lineales con fotones añadidos para el potencial de Pöschl-Teller trigonométrico .....	27

## Objetivos, logros recientes y metas inmediatas de mi proyecto científico

Carlos F. Bunge

Instituto de Física,  
Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apdo. Postal 20-364, México 01000, México.

En la primavera de 1965, cuando me di cuenta que el proyecto de doctorado asignado por mi supervisor (Per-Olov Löwdin) iba a fracasar, decidí que mi tesis sería el mejor cálculo del estado fundamental del Be, una meta muy codiciada por entonces, y que no tenía dudas de alcanzar antes que me ganara la competencia. Sin pensar en otra cosa, empecé a escribir un programa general en Fortran IV para aproximar la ecuación de Schrödinger por el método de interacción de configuraciones con dos ingredientes no utilizados hasta el momento: el uso de operadores de proyección para generar una lista completa de funciones de simetría de N-electrones con todas las degeneraciones incluídas, y el uso de orbitales naturales para optimizar la convergencia de la función de onda. En mayo de 1966 el programa empezó a funcionar y en dos meses logré la meta esperada, me gradué, y por primera vez me puse a pensar en un proyecto serio. Les contaré la historia de este proyecto, cómo fue evolucionando mi carrera científica hasta el presente, y las metas inmediatas que me desvelan y que seguirán ocupándome mientras viva: la solución aproximada de la ecuación de Schrödinger para estados estacionarios con cotas de error confiables en regímenes no-relativistas, relativistas y más allá, y sus aplicaciones.

## Electrodinámica cuántica de cavidades

Luis Orozco

Joint Quantum Institute  
Physics Department  
Universidad de Maryland, USA

Presentaré el sistema donde la interacción de uno o un grupo de átomos interactúa con un número finito de modos del campo electromagnético mostrando fenómenos colectivos y cuánticos. Haré énfasis en la realización experimental con átomos de Rubidio.

## **Demostración de una trampa dipolar para mediciones coherentes**

Lorenzo Hernández, Víctor Valenzuela y Eduardo Gómez  
Instituto de Física, UASLP

Presentamos la transferencia de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  de una MOT a una trampa dipolar. Caracterizamos los parámetros de las trampas y mostramos los alcances del sistema completo de enfriado laser que poseemos. Presentaremos las mediciones de precisión a realizar utilizando esta trampa.

## **Cálculo del número máximo de partículas de un condensado de Bose-Einstein dentro de una trampa modelada por un potencial cuadrado.**

Ricardo Méndez Fragoso  
Instituto de Física, UNAM  
y  
R. Cabrera-Trujillo  
Instituto de Ciencias Física, UNAM

La ecuación que describe un gas ultra frío, es decir, un condensado de Bose-Einstein es la ecuación de Gross-Pitaevskii ó la ecuación no lineal de Shrödinger. En dicha ecuación, al igual que en el caso lineal, se puede poner un potencial efectivo para modelar la interacción con alguna trampa externa, o si el condensado se encuentra en una guía de onda se puede utilizar para describir los defectos que hay sobre ella o para modelar sus efectos de borde. Sin embargo, en este caso, el término no lineal hace modificaciones sobre el comportamiento de la función de onda del gas ultra frío ya que este término modela las interacciones del condensado. Dicho término es proporcional al cubo de la función de onda, y está modulado por un parámetro de interacción  $g$  que a su vez está relacionado con el número de partículas que tiene el gas ultra frío. En la presente contribución utilizamos las soluciones exactas a la ecuación no lineal de Shrödinger para un potencial cuadrado y potencial químico cero para encontrar el parámetro  $g$  en términos de la forma potencial con el objetivo de proporcionar el número máximo de partículas que esta trampa puede contener. Se muestran resultados para una dimensión y analizamos la forma de hacer sus extensiones a mas dimensiones y con diferentes formas geométricas del potencial efectivo.

Proyecto PAPIIT 101611

## Efecto optogalvanico en un catodo hueco

Lina M. Hoyos, Thomas Siegel, Antonio M. Juarez  
 Instituto de Ciencias Físicas,  
 Universidad Nacional Autónoma de México, P.O. Box 48-3,  
 62251, Cuernavaca, Mor., México.

La interacción de radiación láser con átomos o moléculas presentes en una descarga genera cambios en las propiedades eléctricas de la misma, lo cual se evidencia en variaciones de la corriente del plasma [1]. Este efecto es conocido como efecto optogalvánico y es una técnica particularmente útil en el estudio de fenómenos y especies transitorias, de tiempo corto de vida o muy diluídas, presentes en el seno de la descarga. Existen distintas configuraciones para la realización de la descarga, una de ellas es conocida como descarga en un cátodo hueco la cual proporciona alta sensibilidad de detección. En este trabajo presentaremos el avance en el diseño y construcción de un espectrómetro de cátodo hueco de alta sensibilidad basado en el efecto optogalvánico, acoplado a un láser de tintes de onda continua. La idea preliminar para validar el sistema consiste en comparar con estudios previos [2], relacionados con ionización asociativa, los resultados experimentales que obtengamos para distintos átomos de interés, inicialmente en Helio.

Este trabajo es financiado por el proyecto PAPIIT IN113910-3. Lina M. Hoyos agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, México por su beca de doctorado en el PCF-UNAM así como al Dr. A. Morales por su apoyo en este trabajo.

[1] B. Barbieri and Nicolò Beverini, Rev. Mod. Phys. 62, 603–644 (1990)

[2] James E. Lawler, Phys Rev A, 22, 3, 1980

## Tetrámero de oxígeno molecular ( $O_2$ )<sub>4</sub> : Fuerzas intermoleculares y la fase sólida $\epsilon$

M. Bartolomei, E. Carmona, M. Hernández, J. Pérez, J. Campos,  
 IFF-CSIC, Madrid, España

y

Ramón Hernández L.  
 CIQ, UAEMor, Cuernavaca, México

Recientemente ha sido determinada la estructura a presiones altas de la fase  $\epsilon$  del oxígeno sólido, encontrándose unidades tetraméricas constituyendo a la red cristalina[1,2]. Esto ha abierto un debate acerca de la naturaleza de las interacciones intermoleculares en agregados de oxígeno[3,4]. En este trabajo hemos calculado por métodos ab initio las características del estado fundamental del tetrámero, mostrando que es un singlete compatible con el carácter no magnético de esta fase. A diferencia de

otros trabajos relativos al tema que sugieren la importancia de enlaces de carácter químico[3], mostramos que las interacciones son de tipo van der Waals donde las interacciones de intercambio favorecen al estado singlete[5]. Sin embargo al disminuir las distancias entre moléculas de oxígeno del tetrámero aparece una estabilización debida a efectos de muchos cuerpos que puede relacionarse con la formación incipiente de enlaces químicos. En base a esto hemos construido un modelo para predecir la estructura del sólido como función de la presión[6] que esta en buen acuerdo con los valores experimentales.

#### Referencias:

- 1.- L.S. Lundegaard, et al, Nature 443, 201, 2006.
- 2.- H. Fujihisa, et al, Phys. Rev. Lett., 97, 085503, 2006.
- 3.- R. Steudel, M.W. Wong, Angew. Chem. Intl. Ed., 46, 1768, 2007.
- 4.- Y. Meng, et al, PNAS, 105,11640, 2008.
- 5.- M. Bartolomei, et al, PCCP, 10, 5374, 2008.
- 6.- M. Bartolomei, et al, PRB, 84, 92105, 2011.

O7

## **Modelo de confinamiento espacial para el estudio de efectos interfaciales en el depósito de energía de haces de iones.**

Salvador A. Cruz

Departamento de Física

Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa

Apdo. Postal 55-534, 09340, México, D.F., México.

La frontera física entre dos materiales de diferente composición se representa mediante una barrera de potencial para las distribuciones electrónicas de átomos próximos a la misma. Para un material nanoestructurado en capas este efecto puede afectar considerablemente la manera en que cada región contribuye a la pérdida de energía inelástica de iones energéticos que atraviesan el material. Este fenómeno es analizado en términos de efectos de confinamiento sobre las energías medias de excitación de átomos del material cercanos a la interfase. En este trabajo se revisan resultados recientes para protones incidentes con energías de 3-10 MeV en una película de silicio amorfo suponiendo una frontera de altura de barrera infinita [1]. Así mismo, se presenta la estrategia y el avance de resultados para el caso en que la barrera de potencial tiene altura finita [2].

#### Referencias.

- [1] S. A. Cruz, Radiat. Eff. Defects Solids (2012), en prensa.
- [2] S. A. Cruz, R. Cabrera-Trujillo, en preparación.

## Operadores escalera para el oscilador armonico isotropico confinado en angulos diedros.

Eugenio Ley Koo,  
IFUNAM  
y  
Guo-Hua Sun  
ESFYM-IPN.

Esta contribución reporta la construcción de operadores escalera para los diversos grados de libertad de osciladores armónicos isotrópicos confinados en ángulos diedros, en coordenadas cilíndricas circulares y esféricas. El confinamiento en el ángulo diedro se modela mediante las condiciones de frontera de que las funciones de onda se anulen en los semiplanos meridianos que definen el ángulo. En consecuencia, las eigenfunciones y los eigenvalores de la componente z del momento angular tienen las formas  $\sin(\mu\varphi)$  y  $\mu = n_\varphi\pi/\varphi_0$ , donde  $n_\varphi$  toma valores enteros naturales, siendo comunes en ambos sistemas de coordenadas. En esta contribución se han identificado y construido los operadores escalera que cambian  $n_\varphi$  en una unidad, así como sus compañeros para  $n_\rho$ ,  $n_r$ ,  $n_\theta$  asociados a las eigenfunciones en las coordenadas radiales y polar respectivas para los osciladores libres con la sustitución de  $m$  con  $\mu$ ; los operadores de los osciladores en la dirección z y sus eigenfunciones coinciden con los del sistema libre. La disponibilidad de estos operadores ilustra el entendimiento de la superintegrabilidad, la solubilidad exacta, y las relaciones entre funciones especiales del oscilador armónico confinado.

## Study of interaction between fullerene molecule and CH<sub>2</sub> fragment by molecular dynamic.

Irineo Pedro Zaragoza, Ivonne Echevarria Chan, Oscar Miranda L.,

Instituto Tecnológico de Tlalnepantla,  
División de Posgrado e Investigación, UNAM  
e-mail: ip\_zaragoza@ittla.edu.mx

The interaction between fullerene and the ionic fragments CH<sub>2</sub> was studied as a first approximation of the DFT to describe a possible corresponding mechanism of reaction. The interaction shows an important effect that suggests the existence of an addition reaction mechanism by molecular dynamics and representative of interaction energy and charge transference for the bond atom CC(6,5). The addition or insertion of the methylene group results in a process, where the inclusion of CH<sub>2</sub> into a fullerene bond produces the formation of several geometric deformation. All calculation were of all electron type employing DFT using exchange correlation functional implement in program NWChem.

## Espectroscopia por resonancia magnética láser de átomos ligeros

Lucía Cristina Contreras González<sup>\*</sup>, Jesús Flores-Mijangos<sup>+</sup>

<sup>\*</sup>Posgrado en Ciencias (Físicas) UNAM,

<sup>+</sup>Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM  
Ciudad de México, D. F.

Se diseñó un algoritmo capaz de predecir los espectros por resonancia magnética láser de sistemas atómicos ligeros de capa abierta tipo p. Para realizar el cálculo de elementos de matriz se incluyeron las interacciones espín-órbita, dipolar magnética hiperfina, cuadrupolar eléctrica hiperfina y el efecto Zeeman. Por otro lado, el cálculo de los campos magnéticos donde ocurren las resonancias se realiza mediante un barrido del campo de 0 a 20000 G y posteriormente se usa el método de Newton para determinar con mayor precisión la intensidad del campo.

Se estudiaron los sistemas atómicos  $^{14}\text{N}(\text{II})$ ,  $^{13}\text{C}(\text{I})$ ,  $^{29}\text{Si}(\text{I})$ ,  $^{19}\text{F}(\text{II})$  y  $^{17}\text{O}(\text{I})$ . Los resultados obtenidos a partir de usar valores ab initio de los parámetros hiperfinos son satisfactorios para campos por encima de los 10,000 G mientras que para campos menores si se tienen discrepancias por encima del error experimental. Una revisión detallada de los valores usados permitió identificar discrepancias entre los valores de los parámetros atómicos  $A_{J,J'}$  comúnmente utilizados en la literatura para caracterizar la contribución dipolar magnética de la estructura hiperfina. Aunque el modelo propuesto en este trabajo no usa explícitamente estos parámetros es posible identificar la inconsistencia en el juego de estos valores reportados. Se puede mostrar que entre los parámetros  $A_{J,J'}$  para átomos descritos por un nivel tipo  $^3\text{P}$  su ajuste se restringe a cumplir la relación:

$$\sqrt{\frac{3}{2}}(A_{1,1} - A_{2,2}) + 2A_{2,1} - A_{1,0} = 0$$

Tomando en cuenta este resultado se pudo verificar la calidad de los valores de los parámetros atómicos reportados en la literatura y de este ejercicio establecer que sistemas será necesario repetir los ajustes de los parámetros atómicos hiperfino a partir de la información experimental disponible hasta el momento. En este sentido está en proceso la construcción de los algoritmos que serán empleados para realizar el análisis de la información experimental registradas por la espectroscopia por resonancia magnética láser.

## **Usos avanzados de la Física Molecular en áreas estratégicas para México: Salud, alimentación, energía y medioambiente.**

Antonio Juárez Reyes  
Instituto de Ciencias Físicas,  
Universidad Nacional Autónoma de México

La Física Atómica y Molecular actual ha alcanzado un nivel sorprendente de desarrollo actualmente. Ese desarrollo ha sido motivado por la misión de esta área de contribuir a la comprensión fundamental de la materia y su interacción con la energía. El hecho que el área de FAMO se encuentra en pleno crecimiento y desarrollo se puede documentar en el gran número de áreas de gran impacto que actualmente están en la frontera de la física: El estudio de las moléculas en escalas de tiempo muy cortas ( Femto y atto segundos), en temperaturas muy bajas ( nanoKelvins, usando trampas ópticas) y en rangos de frecuencia previamente no explorados, como el lejano infrarrojo y los Terahertz. Este desarrollo ha sido posible, en gran medida, por la creación de instrumentación experimental y fuentes de luz avanzadas y que a su vez se encuentran al alcance de laboratorios –y presupuestos– de escalas modestas. Esta rica gama de herramientas que han sido desarrolladas en el área de la Física Molecular proporcionan posibilidades muy poderosas para solucionar y atender problemas de gran relevancia e impacto social y económico para nuestra sociedad, con tecnología propia, en México.

En esta contribución se presentará a la audiencia tres ejemplos concretos de trabajo actual que se está llevando a cabo en el laboratorio de Física Atómica y Molecular del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM, encaminados a explotar este rico acervo de herramientas experimentales para resolver problemas relevantes de nuestro país. El primer ejemplo se enfoca al desarrollo de distintas técnicas enfocadas a la detección ultrasensible ( partes por mil millón o menores) de metabolitos y marcadores moleculares que son indicativos de patologías en la población mexicana, y que pueden convertirse en herramientas de diagnóstico temprano de enfermedades, en particular de la diabetes. El segundo ejemplo, relacionado con el uso de sensores de moléculas y sus isótopos, mostrará las grandes posibilidades y técnicas que surgen del el área de FAMO, y que se pueden emplear en métodos innovadores de monitoreo ambiental, así como en procesos de diagnóstico en la extracción mejorada de petróleo. Finalmente, se comentará un tercer ejemplo del uso de sensores moleculares ( CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>, principalmente) para su uso en agricultura protegida. Estos tres ejemplos tienen como propósito mostrar a los estudiantes y jóvenes investigadores de estas áreas el enorme potencial económico y social que nuestra área tiene y tendrá en la solución de los problemas más apremiantes de nuestra sociedad mexicana. La plática tienen como objeto, también, mostrar con ejemplos concretos que estas soluciones se pueden implementar con eficiencia, a un alto nivel y en el corto plazo, así como la necesidad de crear equipos de trabajo multidisciplinarios con un énfasis en la innovación.

## Transiciones magnético-dipolares con desintonía dependiente del tiempo

Luis Octavio Castaños Cervantes y Eduardo Gómez  
Instituto de Física, UASLP

Presentamos un modelo de una nube de átomos que se mueve en un gradiente de campo magnético y que interactúa con un campo de microondas. Obtenemos soluciones analíticas que aproximan muy bien la evolución de la nube y que consideran la desintonía dependiente del tiempo debida al efecto Zeeman.

## Resonancia Magnética Nuclear en proteínas en México.

Carlos Amero

Centro de Investigaciones Químicas  
Universidad Autónoma del Estado de Morelos

La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una de las metodologías que más impacto ha tenido en los últimos años, como refleja el hecho de que 6 Premios Nobel, en distintas categorías, hayan sido otorgados al desarrollo directo de esta técnica: Física (Stern -- 1943; Rabi -- 1944; Bloch y Purcell -- 1952), Química (Ernst -- 1991; Wüthrich -- 2002) y Medicina (Lauterbur y Mansfield -- 2003).

La RMN se basa en el estudio de las pequeñas interacciones magnéticas entre los espines nucleares, sus alrededores y el campo magnético externo, brindándonos información molecular con resolución atómica. Junto con la difracción de rayos X, es la única metodología que puede usarse para determinar la estructura molecular de macromoléculas con alta resolución. Sin embargo, frente a la difracción de rayos X, la RMN presenta varias ventajas; una de ellas es que permite determinar la estructura molecular en solución. Además, permite estudiar de manera eficaz y sencilla las interacciones entre biomoléculas. Por último, la mayor ventaja de la RMN es la de ser la única metodología que permite el estudio de la dinámica de macromoléculas con resolución atómica en varias escalas de tiempos (ps, ns, ms, s, min). Dado que las biomoléculas no son entes estáticos, poder estudiar sus movimientos es indispensable para comprender su funcionamiento.

Debido a estas capacidades para monitorear los cambios estructurales, dinámicos y las distintas interacciones con resolución atómica, la RMN permite obtener información de distintos sistemas, difícilmente obtenida con otra metodología. En esta presentación se expondrá las bases generales del estudio de proteínas por RMN y su desarrollo en México.

## Que sabemos del Francio

Luis Orozco  
 Joint Quantum Institute  
 Physics Department  
 Universidad de Maryland, USA

Introducción a la espectroscopía del Francio, el alcalino mas pesado que estamos por utilizar para estudiar experimentalmente en TRIUMF.

## Espectroscopía de polarización con selección de velocidades para los esquemas de excitación en lambda y en escalera.

J. Jiménez-Mier, J. Flores-Mijangos, F. Ramírez-Martínez

Instituto de Ciencias Nucleares  
 Universidad Nacional Autónoma de México

Para empezar, se presentan resultados tanto teóricos como experimentales de la detección balanceada de la absorción producida por un vapor de rubidio sobre un haz de prueba tenue anclado a una transición hiperfina de la línea D2 del rubidio mientras un haz de bombeo intenso, circularmente polarizado y cuya frecuencia es barrida a través del mismo conjunto de transiciones es enviado ya sea copropagante o contrapropagante con el haz de prueba. A partir de un tratamiento semi-clásico que involucra la solución de las ecuaciones de evolución de los estados atómicos, calculamos por separado los coeficientes de absorción para las componentes de polarización circular del haz de prueba. En nuestro modelo evitamos tomar la aproximación de haz de prueba tenue que es usualmente utilizado por otros grupos para simplificar el sistema de ecuaciones y mostramos un acuerdo excelente con nuestros espectros experimentales, así como con aquellos reportados por otros autores.

A continuación mostraremos la extensión de este trabajo a una transición de dos fotones en la que se observa el fenómeno de transparencia electromagnéticamente inducida. Se presentan resultados experimentales que demuestran que un haz intenso, circularmente polarizado y en resonancia con la transición  $5p \rightarrow 5d$  en rubidio induce birrefringencia en la absorción de un haz de prueba linealmente polarizado y en resonancia con alguna de las componentes hiperfinas de la transición  $5s \rightarrow 5p$ . Se comparan los datos con el modelo de cuatro niveles en Y invertida y se muestran nuestras perspectivas de analizar este sistema en términos de los esquemas de excitación en lambda y en escalera.

## **Esparcimiento de haces de átomos fríos por haces de luz estructurados**

S. Bernon, H. Hattermann, J. Fortagh  
Center for Collective Quantum Phenomena and their Applications  
University of Tübingen, Germany

C. L. Hernández-Cedillo, R. Jáuregui  
Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

Se hace un estudio teórico y experimental del comportamiento de átomos fríos cuando estos interactúan con un haz de luz estructurado de simetría parabólica cilíndrica. Este tipo particular de haz presenta zonas oscuras rodeadas por lóbulos de luz en los que el gradiente de intensidad es inusualmente grande. La generación de estos se reporta por primera vez con una fidelidad constatada por su invariancia ante propagación a grandes distancias. Estas propiedades permiten que su interacción con átomos fríos en el régimen previo a condensación, como en el régimen BEC presente aspectos interesantes tanto desde el punto de vista fundamental como de aplicaciones. Por un lado se demuestra que variables dinámicas diferentes al momento lineal, angular y energía pueden ser transmitidas de la luz a la materia. Adicionalmente se demuestra la utilidad del arreglo experimental como divisor de haz para átomos térmicos. A temperaturas debajo de la crítica, se discuten aspectos importantes que diferencian teórica y experimentalmente la dispersión de la fracción térmica respecto a la condensada

## **Estudio de la colisión asistida por láser del sistema $\text{Li}^+ + \text{H}$ a energías intermedias**

Fco. J. Domínguez-Gutiérrez y R. Cabrera-Trujillo

Instituto de Ciencias Físicas,  
Universidad Nacional Autónoma de México,  
Ap. Postal 43-8, Cuernavaca, Morelos, 62251, México

Estudiamos la transferencia de carga en la colisión del sistema  $\text{Li}^+ + \text{H}$  para energías en el rango entre 100 eV/amu y 10 keV/amu. En la investigación utilizamos un potencial de apantallamiento para un sistema de dos partículas orbitando alrededor de un núcleo que modela el ión de Litio, el cual colisiona con un átomo de hidrógeno en su estado base.

Para analizar el comportamiento del sistema  $\text{Li}^+ + \text{H}$  resolvimos la ecuación de Schroedinger numéricamente. Usando el método de diferencias finitas encontramos los estados y energías asociados a  $\text{Li}^+$  y con el método de Crank-Nicolson podemos efectuar la dinámica de la colisión con el átomo de hidrógeno y calcular la sección eficaz de transferencia de carga a energías intermedias. Reportamos los resultados en una gráfica de la sección eficaz de colisión en función de la energía incidente para ser comparados con resultados obtenidos de métodos *ab-initio* así como experimentales. Verificamos que el canal de captura electrónica principal es en el estado  $n = 2$  del Li.

Finalmente usando parámetros realistas de un láser pulsado ultra-rápido (10 fs) e intenso ( $I_0 \sim 10^{13} \text{W/cm}^2$ ) de Ti:Safiro estudiamos la transferencia de carga asistida por láser en la aproximación semi-clásica de parámetro de impacto, con la polarización del láser paralela a la trayectoria del proyectil y analizamos el efecto de la intensidad moderada. Calculamos la sección eficaz total de colisión y la comparamos con los resultados sin láser.

PAPIIT 101611

O18

## **Transmisión y guía de iones simples a través de capilares en PET**

Guillermo Hinojosa Aguirre  
Instituto de Ciencias Físicas (UNAM)  
guillermohin@gmail.com

Edgar Marcial Hernández Acevedo, Luis Antonio Hipólito  
Facultad de Ciencias (UAEM)

Nikolaus Stolterfoht  
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien and Energie

Los conductos capilares fabricados en el polímero PET, de dimensiones nanométricas tienen la extraordinaria propiedad de transmitir y guiar haces de iones. Se presentan resultados de mediciones realizadas con haces de iones positivos simplemente cargados a energías de entre 0.5 a 2 keV. Adicionalmente, se presentarán resultados preliminares sobre la conducción de iones negativos. Se discutirán aspectos del diseño experimental así como un análisis de los resultados. Investigación parcialmente financiada por proyectos DGAPA UNAM IN 113010 e IN 101611.

# Presentaciones Póster

P1

## **Obturador mecánico de rápido desempeño y bajo costo para láseres en una MOT**

José Ricardo Santillán Díaz, M. Carrillo Fuentes, Jesús Flores Mijangos, C. A. Mojica Casique, F. Ramírez Martínez, J. Jiménez Mier y Terán

Instituto de Ciencias Nucleares  
UNAM

Presentamos el diseño de un obturador mecánico basado en una pequeña bocina de computadora. El obturador es compacto y adecuado para aplicaciones que requieran bajas vibraciones. Este obturador es capaz de ocultar una apertura máxima de 5mm con una velocidad máxima de 1.5mm/ms y un retraso de 1.5ms. Este dispositivo se utilizará para interrumpir los láseres de atrapamiento y rebombeo en nuestra MOT en tiempos menores a 100 $\mu$ s con el objetivo de implementar la técnica de tiempo de vuelo.

P2

## **Microscopio confocal para el estudio de photon antibunching y de fuentes de fotones individuales**

Sayab Garcés Escamilla  
Taller de Luminiscencia de la Facultad de Ciencias,  
UNAM

A diferencia del photon bunching, fenómeno que acepta una interpretación semiclásica de la radiación electromagnética, el photon antibunching es un fenómeno que sólo se entiende en términos de un campo electromagnético cuantizado. Por otro lado, la comunicación y la criptografía cuántica, así como las computadoras cuánticas son tecnologías que se conciben a partir del desarrollo de fuentes de fotones individuales, o sea, fuentes de luz que presenten photon antibunching. En el presente trabajo se reproduce un experimento de photon antibunching. Se acopla y se monta un microscopio confocal. Éste cuenta con un objetivo de microscopio de 100x, un filtro pasa bajas y un pinhole de 25 micras. Se estudia una muestra coloidal luminiscente de puntos cuánticos (CdSe) potencialmente útil como fuente de fotones individuales. La muestra coloidal se obtiene a partir de depositar una solución coloidal de CdSe y empleando la técnica de spin-coating, ésta se bombea con luz UV pulsada (FWHM  $\sim$ 10 ns) a elevadas tasas de repetición (10-20 kHz). Como técnica de conteo de fotones (en coincidencias) se emplea un interferómetro de Hanbury-Brown & Twiss y se miden las correlaciones temporales.

## Operadores escalera para armónicos esferoconales

Ricardo Méndez Fragoso y Eugenio Ley Koo

Instituto de Física, UNAM

En esta contribución se identifican los operadores de momento angular  $\mathbf{L}$  y de cantidad de movimiento  $\mathbf{p}$  en bases de vectores unitarios cartesianos  $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$  y en coordenadas esferoconales  $(r, x_1, x_2)$ , y sus acciones sobre los armónicos esferoconales en sus ocho diferentes especies  $AB$ ,  $[A(l, cs, ds, dc; d, c, s, dcs)$   $B(l, cd, sd, sc; s, c, d, scd)]$ , en sus clases de paridad positiva y negativa, respectivamente, agrupadas de 4 en 4 antes y después del signo de punto y coma. Los armónicos esferoconales son eigenfunciones comunes de los operadores del cuadrado de momento angular  $L^2$ , del Hamiltoniano  $2H^* = e_1 L_x^2 + e_2 L_y^2 + e_3 L_z^2$  de la distribución de asimetría de moléculas asimétricas. Se muestran los efectos de desplazamiento de  $L_x, L_y, L_z$  entre los armónicos esferoconales con el mismo número cuántico  $l$  y entre especies de la misma paridad. También se muestra el efecto de los operadores  $p_x, p_y, p_z$  de ascenso y descenso en una unidad de  $l$  entre armónicos esferoconales de paridades opuestas. Partiendo del armónico más bajo con  $l=0$  se pueden generar todos los armónicos con  $l=1, 2, 3, \dots, 2n-1, 2n, 2+1, \dots$ .

## El átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros y el principio de Aufbau

Guo-Hua Sun,

ESFYM-IPN

y

Eugenio Ley Koo,

IFUNAM

Las soluciones de la ecuación de Schroedinger para el átomo de hidrógeno confinado en ángulos diedros están definidas por las condiciones de frontera de anulamiento de las funciones de onda en  $\varphi=0$  y  $\varphi_0=0$ . Los eigenvalores de la energía tienen la forma  $E_v = -e^2/2a_0 v^2$ , donde la etiqueta cuántica principal  $v = n_r + n_\theta + \mu + 1 = n_\xi + n_\eta + \mu + 1 = n_u + n_v + \mu + 1$  está expresada en términos de los pares de números cuánticos enteros esféricos  $(n_r, n_\theta)$ , parabólicos  $(n_\xi, n_\eta)$  y esferoidales prolatos  $(n_u, n_v)$ , respectivamente, y de la etiqueta cuántica común de la componente  $z$  del momento angular  $\mu = n_\varphi \pi / \varphi_0$  con valores enteros naturales de  $n_\varphi$ ; las eigenfunciones respectivas también comparten el factor común  $\sin(\mu\varphi)$  que satisface obviamente las condiciones de frontera. En esta presentación se identifica el orden de los niveles de energía y sus degeneraciones para diferentes valores del ángulo de confinamiento, reconociendo cambios muy notables en comparación con el caso familiar del átomo libre. Correspondientemente, el principio de aufbau anticipa cambios dramáticos en la definición de las capas electrónicas y su llenado para átomos con muchos electrones, incluyendo modificaciones esenciales en las propiedades de los elementos y sus familias según el ángulo de confinamiento.

P5

## **High NOON states in trapped ions**

D. Rodríguez-Méndez and H. Moya-Cessa  
INAOE, Apdo. Postal 51 y 216, 72000, Puebla, Pue., México.

We show how NOON states may be generated in ion traps. We use the individual interaction of light with each of two vibrational modes of the ion to entangle them. This allow us to generate NOON states with  $N=8$ .

P6

## **Diseño del sistema de detección por absorción saturada de nubes de rubidio en una trampa magneto óptica**

M. Carrillo Fuentes, C. Mojica Casique, R. Santillán Díaz, Jesús Flores Mijangos, F. Ramírez Martínez y J. Jiménez Mier y Terán

Instituto de Ciencias Físicas,  
UNAM

Las nubes atómicas atrapadas en nuestra MOT serán analizadas mediante un sistema de detección por absorción. Un haz resonante ilumina la nube de átomos fríos y proyecta una imagen de su sombra sobre un chip CCD, que es comparada con imágenes del haz de detección y del ruido de fondo para determinar parámetros como el número de átomos y la temperatura de la nube.

P7

## **Estudio numérico y analítico del comportamiento de una partícula cuántica confinada por una trampa armónica unidimensional y el efecto de un láser de Ti:Safiro en su propagación.**

Fco. J. Domínguez-Gutiérrez y R. Cabrera-Trujillo  
Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México  
Ap. Postal 43-8, Cuernavaca, Morelos, 62251.

En este trabajo, resolvemos de forma analítica el sistema de una partícula cuántica colisionando con una trampa, la cual modelamos por un oscilador armónico truncado, obteniendo los coeficientes de reflexión y transmisión. Luego, usando el método de diferencias finitas junto con Crank-Nicolson resolvemos el problema de manera numérica y hacemos una comparación con los resultados de los coeficientes de transmisión y reflexión analíticos obteniendo un buen acuerdo entre ellos. Además, estudiamos los efectos de un láser intenso ( $I \sim 10^{12}$  W/cm<sup>2</sup>) y ultrarápido (FWHM de 10 fs.) de Ti:Safiro, y con un rango de longitud de onda de  $10^{-5}$  a  $10^{-9}$  m en la propagación de la partícula cuántica. Mostramos nuestro resultado de forma tal que puedan ser comparados con los experimentales. Finalmente discutimos la importancia de la forma de la impureza y sus posibles aplicaciones.

P8

## **Nuevo sistema de vacío para MOT compatible con molasa óptica**

Eduardo Uruñuela, Eslava del Río y Eduardo Gómez

Instituto de Física, UASLP

Presentamos el nuevo diseño de la trampa magneto-óptica de rubidio basado en una celda de vidrio. La configuración elimina las corrientes de Eddy que nos limitan en la cámara actual para realizar molasa óptica. El sistema es compacto y tiene un acceso óptico superior.

P9

## **Sistema de micro-ondas sintonizable para oscilaciones de Rabi**

Víctor Valenzuela, Lorenzo Hernández y Eduardo Gómez

Instituto de Física, UASLP

Presentamos un sistema de micro-ondas para inducir oscilaciones de Rabi entre niveles hiperfinos de rubidio. Consideramos el caso cuando la frecuencia de resonancia varía en el tiempo. La frecuencia de las micro-ondas se ajusta con una forma temporal arbitraria para permanecer siempre en resonancia.

## Conducción de protones a través de nanocapilares en PET

Edgar Marcial Hernández Acevedo

*Facultad de Ciencias (UAEM)*

Nikolaus Stolterfoht

Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien and Energie

Guillermo Hinojosa Aguirre

Instituto de Ciencias Físicas (UNAM)

Se estudió la conducción del ión atómico  $H^+$  a través de nanocapilares de Tereftalato de Polietileno (PET) a energías de 0.5 - 2.0 keV. Estos capilares que tienen un diámetro de 200 nm y una longitud de 10  $\mu\text{m}$  aproximadamente, tienen la propiedad sorprendente de guiar iones en un proceso de auto-organización casi sin importar el ángulo de inclinación de la muestra de PET con respecto al haz incidente. En el acelerador del ICF realizamos pruebas de principio para la conducción del ión atómico  $H^+$  a una inclinación de  $3^\circ$  para la lámina de PET. Se reporta satisfactoriamente la conducción y la conservación de la carga, los valores de la trasmisión y del ancho de los perfiles son de Gauss y los valores medidos son consistentes con valores reportados.

Proyecto DGAPA IN 113010-3.

## Cálculo del poder de frenamiento electrónico molecular para protones utilizando el modelo del oscilador armónico y los orbitales moleculares FSGO

Natalia Trujillo López y R. Cabrera-Trujillo

Instituto de Ciencias Físicas

Universidad Nacional Autónoma de México

Apdo. Postal 48-3, 62210, Cuernavaca. Morelos, México.

Se estudia el poder de frenamiento electrónico de protones incidentes en blancos moleculares dentro del modelos de Bethe. Para ello asumimos una descripción esférico-gaussiana de los orbitales moleculares que conforman la molecula, para lo cual utilizamos los Orbitales Gaussianos Esféricos Flotantes (FSGO, por sus siglas en inglés). Esta descripción permite utilizar de manera natural el modelo del oscilador armónico para describir la transferencia de energía electrónica de forma analítica. La pérdida de energía electrónica queda así determinada exclusivamente en términos del radio del orbital FSGO y de ahí se determina la energía media de excitación. Presentamos resultados para

protones incidentes en He y las moléculas de N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O. Los resultados teóricos se comparan con los datos experimentales de la compilación de Helmut Paul mostrando un buen acuerdo.  
PAPIIT 101611

P12

## **Ecuación universal del poder de frenamiento electrónico utilizando el modelo del oscilador armónico**

César Martínez Flores y R. Cabrera-Trujillo

Instituto de Ciencias Físicas  
Universidad Nacional Autónoma de México  
Apdo. Postal 48-3, 62210, Cuernavaca. Morelos, México.

Mediante la implementación del modelo del Oscilador Armónico se estudia el poder de frenamiento electrónico dentro del modelos de Bethe. Con ayuda del teorema del Virial calculamos la energía media de excitación  $I_o$ . Presentamos nuestra fórmula analítica de tal forma que es universal, es decir, una sola curva describe todos los poderes de frenamiento de blancos. Así, para un blanco dado con solo proporcionar la energía media de excitación se puede obtener el poder de frenamiento de esta fórmula analítica. Presentamos resultados para protones incidentes en He, Ne, Ar, Xe, y Rd, es decir, blancos nobles. Los resultados teóricos se comparan con los datos experimentales de la compilación de Helmut Paul mostrando un buen acuerdo. PAPIIT 101611

P13

## **Propuesta para un sistema de detección de iones en una MOT**

Cristian Adán Mojica Casique, José Ricardo Santillán Díaz, Miriam Carrillo Fuentes, Jesús Flores Mijangos, Fernando Ramírez Martínez, José Ignacio Jiménez Mier y Terán  
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Se presenta la propuesta de diseño y construcción de un sistema de detección de iones generados en una trampa magneto-óptica (MOT). Los experimentos en los que será utilizado este sistema están enfocados en el estudio de producción de transiciones prohibidas (cuadrupolares eléctricas) y de obtención de átomos de Rydberg.

Mediante un campo eléctrico externo se ionizaran algunos átomos excitados de la trampa. Los iones generados recorrerán una trayectoria curva hacia un channeltron para su detección. La detección de

iones y el valor del voltaje de ionización se correlacionan con el estado de excitación de los átomos antes de su ionización.

En este trabajo se muestran los resultados de las primeras pruebas del funcionamiento de la MOT donde se implementará el sistema de detección. Se describe una propuesta para el primer arreglo experimental de las partes eléctricas y mecánicas del sistema de generación y detección de iones. Igualmente se presentan los primeros cálculos de las trayectorias de los iones y de los tiempos de detección.

P14

## Vibronic oscillator strengths for the $A^1 \Pi - X^1 \Sigma^+$ band system of carbon monoxide

M. Majumder,

Department of Chemistry, Indian Institute of Technology  
Kanpur, 208016 Kanpur, India

N. Sathyamurthy,

Indian Institute of Science Education and Research  
Mohali, 140306 Manauli, India

H. Lefebvre-Brion,

Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91405  
Orsay Cedex, France

G. J. Vazquez,

Instituto de Ciencias Físicas,  
Universidad Nacional Autónoma de México, 62210 Cuernavaca, México

As a by-product of our ongoing theoretical study of carbon monoxide, [1,2] we report in this contribution ab-initio oscillator strengths ( $f_{v_0}$ ) of the  $A^1 \Pi (v' = 0-10) \leftarrow X^1 \Sigma^+ (v'' = 0)$  transition of carbon monoxide. The agreement with the experimental  $f_{v_0}$  values of Field et al. [3] and Eidelsberg et al. [4] for  $^{12}\text{C}_{16}\text{O}$  is very good, and quite good for the  $^{13}\text{C}_{16}\text{O}$  isotopologue [5]. Our  $f_{v_0}$  values are employed in a time-dependent quantum mechanical study of the  $A \leftarrow X$  photoabsorption of CO. [6]

### Referencias

1. Eidelsberg, M.; Jolly, A.; Lemaire, J. L.; Tchang-Brillet, W.; Breton, J. y Rostas, F.: *Astron. Astrophys.*, 1999, 346, p. 705.
2. Field, R. W.; Benoist d'Azy, O.; Lavollee, M.; Lopez-Delgado, R. y Tramer, A.: *J. Chem. Phys.*, 1983, 78, p. 2838.
3. Lefebvre-Brion, H.; Liebermann, H. P. y Vazquez, G. J.: *J. Chem. Phys.*, 2010, 132, p. 24311.
4. Majumder, M.; Sathyamurthy, N.; Lefebvre-Brion, H. y Vazquez, G. J.: *J. Phys. B., At. Mol. Opt. Phys.* (submitted).
5. Morton, D. C. y Noreau, L.: *The Astrophys. J Supp. Series*, 1995, 95, p. 301.
6. Vazquez, G. J.; Amero, J. M.; Liebermann, H. P. y Lefebvre-Brion, H.: *J. Phys. Chem.*, 2009, 113, p. 13395.

## New bound electronic states of CF<sup>+</sup>

J. M. Amero,

Instituto de Física Luis Rivera Terrazas,  
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), 75570 Puebla, México

G. J. Vázquez,

Instituto de Ciencias Físicas,  
Universidad Nacional Autónoma de México,  
62210 Cuernavaca, México

The CF<sup>+</sup> cation has recently been observed in space for the first time, in the Orion Bar [1]. The CF free radical is a pollutant in the Earth's atmosphere; the CF<sup>+</sup> itself has not yet been observed, but since the upper atmosphere is bombarded by energetic radiation (UV, X-rays), its existence is plausible, probably produced in the reaction  $CF + h\nu \rightarrow CF^{++} + e$ . CF<sup>+</sup> is also relevant in plasmas employed to etch silicon semiconductors in the manufacturing of electronic devices, and also in lithography applications. In this contribution we report quantum chemical ab initio calculations of the electronic structure of CF<sup>+</sup> which we employ to study its electronic spectroscopy. We computed a relatively large number of electronic states (22 singlets, 19 triplets, 14 quintets). The present work [2] represents an improvement over previous ab initio calculations [3], because we employed a larger basis set, a more extensive treatment of electron correlation, and computed more electronic states.

Only three electronic states are known experimentally, namely, the ground state  $X^1\Sigma^+$  and the first two excited states,  $a^3\Pi$  and  $A^1\Pi$ . Our computations revealed the existence of several new bound states, whose potential energy curves (PECs) and spectroscopic constants are reported here. We found a good agreement with experiment for these three states. We hope that the present theoretical data could be instrumental as a guide to search for the new bound states.

We also computed the Franck-Condon factors (FCFs) for the  $a \rightarrow X$  and  $A \rightarrow X$  emission transitions. To obtain the vibrational wavefunctions we solved the nuclear Schrödinger equation employing the electronic PECs of X, a and A. The vibrational wavefunctions were employed to calculate the FCFs for the above vibronic transitions. Our FCFs for the  $a^3\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$  emission are in good agreement with the corresponding theoretical values reported in the literature [4]

[1] Neufeld, D. A.; Schilke, P.; Menten, K. M.; Wolfire, M. G.; Black, J. H.; Schuller, F.; Müller, H. S. P.; Thorwirth, S.; Güsten, R. y Philipp, S.: *Astron. Astrophys.*, 2006, p. L37

[2] Amero, J. M.: *Espectroscopia Electronica y Factores de Franck-Condon de CF<sup>+</sup>*. M. Sc. Thesis, Benemerita Universidad Autonoma de Puebla, Puebla, Mexico, 2012

[3] Petsalakis, I. D. y Theodorakopoulos, G.: *Chem. Phys.*, 2000, 254, p. 181

[4] Peterson K. A.; Woods, R. C.; Rosmus, P. y Werner, H.-J.: *J. Chem. Phys.*, 1990, 93, p. 1889

## **Estados coherentes no lineales con fotones añadidos para el potencial de Pöschl-Teller trigonométrico**

C. González-Gutiérrez, R. Román-Ancheyta, J. Récamier  
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

Los estados coherentes con fotones añadidos se definen como la aplicación sucesiva del operador de creación a un estado coherente del oscilador armónico. Generalizamos esta definición mediante el uso del formalismo del f-oscilador y construimos los estados correspondientes para el potencial de Pöschl-Teller trigonométrico. Dichos estados presentan comportamiento no clásico reflejado en su estadística sub-poissoniana.

## Índice alfabético

Amero, Carlos.....	15	Jáuregui, R.....	17
Amero, J. M.....	26	Jiménez Mier, J.....	16, 21
Bartolomei, M.....	10	Juárez Reyes, Antonio.....	14
Bernon, S.....	17	Juárez, A. M.....	10
Bunge, Carlos F.....	8	Lefebvre-Brion, H.....	25
Cabrera-Trujillo, R.....	9, 17, 21, 23, 24	Ley Koo, Eugenio.....	12, 20
Campos, J.....	10	Majumder, M.....	25
Carmona, E.....	10	Martínez Flores, César.....	24
Carrillo Fuentes, M.....	21	Méndez Frago, R.....	9, 20
Castañón Cervantes, Luis Octavio.....	15	Miranda L., O.....	12
Contreras González, Lucía Cristina.....	13	Mojica Casique, C. A.....	21, 24
Cruz, Salvador A.....	11	Moya-Cessa, H.....	21
del Río, Eslava.....	22	Orozco, L.....	8, 16
Domínguez-Gutiérrez, Fco. J.....	17, 21	Pedro Zaragoza, P.....	12
Echevarría Chan, I.....	12	Pérez, J.....	10
Flores Mijangos, J.....	13, 16, 19, 21	Ramírez Martínez, F.....	16, 21
Fortagh, J.....	17	Récamier, R.....	27
Gómez, Eduardo.....	9, 15, 22	Rodríguez-Méndez, D.....	21
González-Gutiérrez, C.....	27	Román-Ancheyta, R.....	27
Hattermann, H.....	17	Santillán Díaz, J. R.....	19, 21, 24
Hernández Acevedo, E. M.....	18, 23	Sathyamurthy, N.....	25
Hernández L, Ramón.....	10	Siegel, T.....	10
Hernández-Cedillo, C. L.....	17	Stolterfoht, N.....	18, 23
Hernández, Lorenzo.....	9, 22	Sun, Guo-Hua.....	12, 20
Hernández, M.....	10	Trujillo López, N.....	23
Hinojosa Aguirre, G.....	18, 23	Uruñuela, Eduardo.....	22
Hipólito, L. A.....	18	Valenzuela, Víctor.....	9, 22
Hoyos, Lina.....	10	Vázquez, G. J.....	25, 26