



# TaDEM 2013

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

(Física atómica, molecular y óptica)

Departamento de Física, UAM -I  
el 22 de mayo, Auditorio Edif. C  
23 y 24 de mayo, Auditorio AT-003.  
México, D.F.  
2013

### Organizadores:

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

José Luis Hernández Pozos, *Departamento de Física, UAM-I*

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

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

 <b>INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS</b>		 <b>Casa abierta al tiempo</b>
Instituto de Ciencias Físicas	Instituto de Ciencias Nucleares	Departamento de Física, UAM-I

## Prefacio

Con esta, su 4a edición, el Taller de Dinámica y Estructura de la Materia (TaDEM) se consolida como un nicho importante donde la comunidad científica de México en el área de Física Atómica, Molecular y Óptica (FAMO) puede compartir, en un ambiente amigable y creativo, sus actividades científicas, inquietudes y visión del futuro. En esta ocasión, los organizadores tenemos el agrado de incluir una importante institución más, al equipo de organizadores: El Departamento de Física de la Universidad Autónoma Metropolitana (UAM-I). Este importante hito organizacional ilustra de manera clara que el objetivo inicial de este evento, que es coaligar y vincular a la comunidad de FAMO, se está cumpliendo con creces. En este mismo espíritu, y teniendo como sede a la UAM-I, este cuarto taller pretende seguir fomentando y construyendo la colaboraciones y fortalecimiento 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. El Cuarto 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 de todas las regiones de nuestro país. El dinamismo, calidad y entusiasmo de los 3 talleres anteriores nos da un ímpetu aún mayor por continuar esta labor.

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, nano estructuras) 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 cuarto taller. Es un motivo de orgullo el que una comunidad científica relativamente pequeña, como lo es la mexicana, esté participando y haciendo aportaciones importantes en estas áreas de estudio. 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 en esta nueva edición del taller, 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 taller hacemos votos porque esta reunión constituya, nuevamente y como en ocasiones anteriores, una clara señal de

continuidad para este proceso de comunicación, creación de vínculos y trabajo conjunto, del que se nutren las comunidades científicas de alto impacto en el mundo.

Los organizadores queremos agradecer enfáticamente a Adrián Dávila y Patricia Rodríguez del ICF-UNAM, Lily Jiménez del ICN-UNAM y Karina Ríos del DF-UAM-I por el apoyo administrativo para llevar a cabo este evento y a los directores del Instituto de Ciencias Nucleares e Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM, y el jefe de departamento de Física de la UAM-I por los recursos que nos han permitido realizar este taller.

Finalmente, como ya es tradición en este taller, celebramos la labor y trayectoria de los decanos en el área, este taller será en honor de nuestro querido colega, profesor y amigo, el Dr. Salvador A. Cruz Jiménez, Profesor Investigador del departamento de Física de la UAM-I y pionero en cálculos de poder de frenamiento y pérdida de energía (la escuela de Niels Bohr) en México.

¡Enhorabuena Chava!

México D.F. 22 de Mayo de 2013

Los organizadores

## Salvador A. Cruz Jiménez y el poder de frenamiento

Salvador Antonio Cruz Jiménez nació en la Ciudad de México el 25 de mayo de 1948. Su interés por la ciencia inició a los 9 años a raíz del lanzamiento del primer satélite artificial Sputnik en 1957 por la Unión Soviética y el inicio de la llamada carrera espacial. Este entusiasmo se mantuvo latente y tuvo un impulso mayor en 1961, cuando Yuri Gagarin se convirtió en el primer ser humano en viajar al espacio exterior. En ese entonces, Salvador apenas ingresaba a la escuela secundaria número 15 “Albert Einstein” y fue allí donde por primera vez se enteró sobre la actividad de los físicos, gracias a la excelente enseñanza de sus profesores. Desde entonces, decidió estudiar la carrera de Físico. En 1967 ingresó a la Facultad de Ciencias de la UNAM, en donde estudió la carrera de física. Su tesis de licenciatura la realizó bajo la asesoría del Dr. Eugenio Ley-Koo sobre el tema de “Coordenadas Hiperesféricas y el Problema Cuántico de Tres Cuerpos”, graduándose como físico en 1972. Entre enero y septiembre de 1973 colaboró en el estudio del espectro de átomos atrapados en mallas cristalinas con el grupo de espectroscopía atómica del Instituto Mexicano del Petróleo, dirigido entonces por el Dr. Salvador Malo Alvarez. En octubre de 1973 ingresó como investigador del Instituto de Física de la UNAM en el grupo de colisiones atómicas dirigido entonces por el Dr. Jorge Rickards Campbell, continuando a la vez con sus estudios de posgrado en la Facultad de Ciencias. Como investigador del IFUNAM, inició su trabajo teórico sobre pérdida de energía de iones en materia. Obtuvo el grado de maestría en 1975 habiendo aprobado los exámenes generales como requisito para optar posteriormente por el doctorado. En agosto de ese mismo año inició una estancia de investigación en el Instituto H. C. Oersted de la Universidad de Copenhague con el Prof. Peter Sigmund, como parte de su trabajo doctoral, con duración de un año. Al cabo de los primeros cuatro meses de haber iniciado esta estancia, Salvador se convenció de que sus intereses de investigación no coincidían con los de su asesor y decidió buscar su propio camino. El período restante de su estancia fue altamente motivante, gracias al decidido apoyo del Prof. Lewis T. Chadderton, quien era el Jefe del laboratorio. Este período definió en buena medida su independencia como investigador.



A su regreso a la Ciudad de México en agosto de 1976, continuó con su investigación iniciada en Dinamarca la cual fue publicada en Physical Review A con el título “Individual Orbital Contribution to the Electronic Stopping Cross Section in the Low Velocity Region” obteniendo el grado de doctorado en 1978 con la tesis "Contribución Orbital al Poder de Frenamiento de Iones Pesados", bajo la asesoría de los doctores Carmen Cisneros Gudiño e Ignacio Alvarez Torres. A raíz de este trabajo, en 1979 fue invitado a visitar los Laboratorios Sandia en Albuquerque, EUA para colaborar con el Dr. David Brice para extender la teoría de frenamiento de iones al caso de blancos moleculares. De esta colaboración se publicaron varios artículos que se convirtieron en referencia básica sobre los alcances de la teoría de Firsov para frenamiento de iones pesados de bajas energías.

Cabe mencionar que durante su estancia en Copenhague, Salvador tuvo la curiosidad de escudriñar sobre otros tópicos que tendrían un impacto posterior en su trabajo, como el tratamiento de potenciales interatómicos en la región repulsiva desde el punto de vista de la teoría de Thomas-Fermi en donde desarrolló un potencial repulsivo entre dos átomos considerando que las nubes electrónicas quedan limitadas por una frontera plana impenetrable, como la cara de un poliedro de Wigner-Seitz. Esta

búsqueda le llevó a conocer el trabajo de Feynman, Metropolis y Teller (1949) en el que obtienen la función de apantallamiento de un átomo de Thomas-Fermi en función de la presión. Al regresar a México (1976), planteó la idea a Eugenio Ley-Koo, quien la desarrolló formalmente desde el punto de vista cuántico para el átomo de hidrógeno, iniciando así la línea de investigación de átomos confinados. Eugenio le invitó a colaborar en ese trabajo, pero no lo hizo por tener que escribir su tesis doctoral. Casualmente en esa época, Eduardo Ludeña, investigador del IVIC (Venezuela) estaba de visita en el Instituto de Física, quien se interesó también en el problema y lo analizó desde el punto de vista de la química cuántica, publicando varios artículos sobre átomos confinados por cavidades esféricas impenetrables.

Posteriormente, en 1980, colaboraría con Eugenio Ley-Koo en el tratamiento exacto del átomo de hidrógeno y los iones  $H_2^+$  y  $HHe^{++}$  confinados en cajas esferoidales prolatas. Este trabajo constituye la primera solución exacta al problema y ha tenido una creciente atención en la literatura, debido al interés en el estudio de átomos y moléculas a altas presiones, problemas de astrofísica y actualmente de puntos cuánticos. En ese año, y con el afán de conocer sobre metodologías ab-initio para el cálculo de potenciales interatómicos e intermoleculares, Salvador colaboró con Octavio Novaro en el cálculo de contribuciones no-aditivas entre trimeros de amoníaco empleando el código GAUSSIAN-70. Con esta experiencia y aprovechando también la estancia de Jean Claude Barthelat y Jean Pierre Daudey (Universidad Paul Sabatier, Toulouse, Francia) aprendió sobre cálculos basados en pseudopotenciales, a partir de lo cual se generaron superficies de potencial para la interacción de átomos e iones con arreglos atómicos lineales y bidimensionales, útiles para el estudio del fenómeno de canalización (channelling) axial, planar y superficial para haces de iones incidentes sobre materiales cristalinos. A partir de estos cálculos se generaron expresiones analíticas para potenciales de interacción binarios, útiles para el estudio de dispersión de iones.

En agosto de 1980, Salvador inició su estancia sabática por un año en la Universidad de Salford, Inglaterra, invitado por el Prof. George Carter con cuyo grupo experimental trabajaría sobre erosionamiento y evolución de superficies bombardeadas por haces de iones. Su tarea teórica fue estudiar la eyección de material por impacto iónico viendo a éste como una fuente de energía no lineal, tipo onda de choque, que induce cambios de fase en la superficie así como la consecuente difusión no lineal de material, generando patrones topográficos específicos. También, a sugerencia de Salvador, se realizaron experimentos de dispersión superficial de iones de  $He^+$  a ángulo rasante sobre la superficie de un cristal de magnesio, para confirmar la teoría basada en potenciales generados ab-initio. Esta estancia sabática constituyó una experiencia muy positiva para comprender la relación teoría-experimento.

A su regreso de Salford, en agosto de 1981, conoció a Eduardo Montenegro (Universidad Católica de Río de Janeiro, Brasil), quien llegaba al IFUNAM para una estancia sabática para colaborar con el grupo de colisiones atómicas. La experiencia de Montenegro en procesos de excitación en hidrógeno y la de Salvador en frenamiento electrónico, les motivó a buscar una ecuación que incorporase, sobre argumentos físicos, tres procesos determinantes: los procesos de excitación e ionización inducidos por colisión, la carga efectiva promedio retenida por el proyectil a través de múltiples colisiones y los mecanismos de transferencia de ímpetu conducentes a efectos disipativos tipo “fricción” a bajas energías. Al poco tiempo, con la ayuda de Carlos Vargas, generaron una ecuación simple y autocontenida, pudiéndose evaluar en una calculadora de bolsillo. Esta ecuación ha sido verificada por múltiples experimentos en diversos laboratorios en el mundo, con consecuencias de interés en investigación y aplicaciones tecnológicas en implantación de iones.

Entre 1984 y 1986 fue investigador del departamento de energía de la Unidad Mérida del CINVESTAV para colaborar en investigación sobre celdas solares basadas en silicio amorfo. Posteriormente, entre mediados de 1986 y 1990 se incorporó al Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM para colaborar en el estudio de mecanismos de crecimiento de películas delgadas de silicio amorfo hidrogenado a partir de depósito asistido por plasmas. Durante estos años, su trabajo de investigación tuvo componentes multidisciplinarias, pues al mismo tiempo mantuvo colaboración con el grupo de propiedades ópticas de sólidos de la Universidad de Sonora en el estudio teórico de centros de color en halogenuros alcalinos tratando a estos como sistemas cuánticos confinados.

A partir de 1991, Salvador se incorporó al departamento de física de la unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, en donde pudo retomar su investigación sobre colisiones atómicas, misma que desarrolló con la colaboración de Jacques Soullard (IFUNAM) y con su entonces estudiante Remigio Cabrera Trujillo, quien actualmente se ha convertido en el líder nacional de este proyecto. También, a partir de su incorporación a la UAM, gracias a la entusiasta colaboración de su colega José Luis Marín (Universidad de Sonora), inició también la consolidación de otra línea de investigación sobre el uso de técnicas variacionales en el estudio de sistemas cuánticos confinados. Desde entonces y hasta la fecha, su trabajo de investigación ha estado vinculado con estas dos temáticas, estableciendo conexiones importantes entre las mismas, como el estudio de efectos de presión y de estado de condensación de la materia en la pérdida de energía de iones. Su actividad de investigación en estos dos campos le han valido para hacer contribuciones invitadas en compilaciones especializadas sobre penetración de partículas cargadas en materia, así como participar como Editor Huésped de *Advances in Quantum Chemistry* para la estructuración de dos volúmenes dedicados a la teoría de sistemas cuánticos confinados. Así mismo, partir de 2005 fue nombrado Editor Asociado de la revista *Radiation Effects and Defects in Solids*.

En el 2006 Salvador fue el fundador de la serie internacional de Simposiums REM (Radiation Effects in Matter) que ya va en su 6a edición a nivel mundial. La primera se llevó a cabo en Playa del Carmen, México, la segunda en Creta, Grecia, la tercera en Rio Grande do Sul en Brazil, la cuarta en Padua, Italia y la quinta en Kona, Hawaii. Además, Salvador es el presidente del comite científico internacional de REM. También ha organizado el taller Werner- Brandt-Richie (WBR) en dos ocasiones en México. Este taller está dedicado al campo de pérdida de energía, un legado de Niels Bohr y que como sabemos él ha sembrado en México.

Salvador es investigador SNI III, con mas de 80 publicaciones internacionales referenciadas, mas de 10 doctorantes graduados con él y sobretodo, una persona que no sabe decir NO a nada! Su amabilidad, rectitud y honestidad le han ganado un lugar merecedor en la ciencia en México.

Feliz 65avo aniversario y esperamos que la ciencia en México se siga beneficiando de la productividad científica y el caracter humano de Chavo!

Eugenio Ley-Koo, IF  
Remigio Cabrera-Trujillo, ICF  
Universidad Nacional Autónoma de México  
mayo, 2013

### HORARIO TaDEM 2013

HORARIO	22/05 Miércoles Auditorio Edif. C	23/05 Jueves Auditorio AT-003	24/05 Viernes Auditorio AT-003
8:30-9:00	<b>Registro</b>	<b>Registro</b>	
9:00-9:30	(Chair: ) <b>Inauguración</b>	(Chair: J. I. Jiménez) O10 Rocío Jáuregui	(Chair: ) O20 R. Mendez-F.
9:30-10:00	O1 Salvador Cruz (9:30-10:15)	O11 Mónica Gutierrez	O21 R. Morales
10:00-10:30	O2 John R. Sabin (10:15-11:00)	O12 J. Flores-M.	O22 F. A. Batista
10:30-11:00	O2 John R. Sabin	O13 Gennadiy Burlak	O23 B. Ullrich
11:00-11:30	<b>CAFE</b>	<b>CAFE</b>	
11:30-12:00	(Chair: A. Juárez) O3 Ma. Esther	(Chair: ) O14 D. Castañeda	(Chair: ) O24 B. Zuñiga
12:00-12:30	O4 J. Soullard	O15 A. Camacho	O25 A. Amaya
12:30-13:00	O5 E. Ley-Koo	O16 H. Olivares-Pilón	O26 C. Acosta
13:00-13:30	O6 Guo-Hua Sun	O17 I. Garcia	(Mesa redonda) <b>CLAUSURA</b>
13:30-15:30	<b>COMIDA</b>	<b>COMIDA</b>	
15:30-17:00	<b>POSTERS (P1-P25)</b>	<b>POSTERS (P1-P25)</b>	
17:00-17:30	(Chair: ) O7 J. Garza	(Chair: ) O18 C. Lira	
17:30-18:00	O8 Cecilia Díaz	O19 J. I. Jiménez	
18:00-18:30	O9 V. Domínguez		

Nota: Las comidas están cubiertas en su registro. El miércoles habrá bocadillos y el jueves habrá taquiza. Durante el taller se anunciará el lugar.

## Contenido

Relato de mi recorrido por el camino de la ciencia.....	10
Energy Deposition by Swift Ions in Biomolecules.....	10
El Banco de Tejidos Radioesterilizados del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares.....	11
Pressure-induced metalization and vibrational spectra of doped hydrogen clusters under confinement	12
Presentación del capítulo “Surface effects in the hydrogen atom confined by dihedral angles”, editor Kalidas Sen.....	12
Supresión e intensificación de efectos superficiales en el átomo de hidrógeno confinado por ángulos diedros.....	13
Estimación de potenciales de ionización de átomos confinados usando la técnica del propagador implementado en GPUs.....	13
Átomos multielectrónicos confinados en cajas esféricas prolatas penetrables.....	14
Escalamiento en un sistema localmente periódico.....	15
Mechanical effects of structured light on ultracold atoms: semiclassical versus quantum descriptions.	15
Trampa magneto-óptica de dos isótopos de rubidio (DIMOT) con un solo laser. ....	16
Espectroscopías de fluorescencia y polarización con selección de velocidades en un vapor de rubidio atómico en el esquema de excitación en escalera $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ .....	16
Transición Fase en un Modelo Ising – Percolación Mediante un Método Numérico.....	17
Modelo solitónico para halos de materia oscura.....	17
Rapidez del sonido en un condensado de Bose–Einstein y la ecuación de Zaremba–Nikuni–Griffin....	18
The Three Body Coulomb Problem, Beyond the Static Approximation.....	18
Electronic structure in the bulk model of different crystalline-phases of alumina.....	19
Asphaltene particle adsorption on metals: theory and experiments .....	19
Soft x-ray absorption to determine the metal valence state of transition metal compounds.....	20
Estudio de la Ecuación No Lineal de Schrödinger para estados excitados en una guía de onda de materia.....	20
Substituent Effects on the Excited State Intramolecular Proton Transfer of (Salicylidene-1-naphthylamine): An experimental and TDDFT/PCM approach.....	21
Estudio de la predisociación vibracional en el complejo $Br_2-H_2O$ y cálculos de correlación local en agregados $Br_2(H_2O)_n$ , $n=4,5$ .....	22
Modeling the Stokes shift of PbS quantum dots.....	23
Cálculo de propiedades magnéticas con la teoría de los funcionales de la densidad auxiliar.....	23
Distribución en la energía de los electrones ionizados en la colisión proton-hidrógeno a 50 keV.....	24
Difracción de Luz, Una Herramienta para Grabar Nanoestructuras.....	25
Presentaciones Póster.....	26
Capas metálicas en el límite de percolación: efectos de plasmón superficial y posible material para transmisión extraordinaria de luz.....	26
Efecto de la simetría del estado base en el poder de frenamiento electrónico implementando el modelo del oscilador armónico: Fórmulas para $l = 0, 1$ y $2$ .....	26
Películas delgadas de nanopartículas de Bismuto depositadas en vacío por ablación laser usando un laser YAG:Nd.....	27
Estudio de las transiciones vibracionales anarmónicas en la segunda banda positiva de $N_2$ .....	27
Control de campo magnético a orden de micro-Gauss.....	28
Detección de la fluorescencia violeta resultado de la excitación con dos fotones del estado 5D en rubidio atómico.....	28
Sección eficaz de frenamiento de protones incidentes en nucleobases y ADN.....	29

LabVIEW control of camera and calibration.....	29
Simulación de la detección de iones generados en una Trampa Magneto-Óptica.....	29
Micro grabado en superficie de silicio, producido por un láser y un micro elemento difractor.....	30
Construcción de un modelo multinivel para el átomo.....	30
Sensor de campo magnético de magneto-resistencia.....	30
Efecto de un pulso láser en los procesos de captura electrónica y excitación en el sistema resonante $H^+$ + H.....	31
Diseño, implementación y calibración de un sistema de pinzas ópticas.....	31
Cavidades térmicamente ultra-estables.....	32
Software para la simulación del estado fundamental (ground state) de solitones de ondas de materia...32	32
Fotoionización de la capa de valencia del catión de cloro.....	33
Fotoionización del catión de fósforo.....	33
Secciones totales transversales de despojo electrónico por colisión con $N_2$ y $O_2$ de aniones de metano a energías de 0.4 a 10 keV.....	34
Trampa magneto-óptica basada en una celda de vidrio.....	35
Simulación monte carlo del transporte de radiación en un acelerador lineal de uso médico.....	35
Efectos de confinamiento en la polarización del espín en cationes de la primera fila de metales de transición.....	36
Proposed measurement of the expansion of an atomic wave packet.....	36
Estructura electrónica del óxido de itrio sintetizado por sustitución química.....	37
Diseño de un sistema para dosimetría de neutrones.....	37
Participantes.....	38
Índice.....	41

## Relato de mi recorrido por el camino de la ciencia

Salvador A. Cruz

Departamento de Física  
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

La motivación por la ciencia requiere de eventos que atraigan nuestra atención hacia aquello que nos sorprende y que, por su innegable armonía y misterio, nos capturan para estudiarlos y tratar de explicarlos. Ciertamente todos hemos tenido esta motivación. En la oportunidad que se me da esta ocasión platicaré sobre los eventos más importantes en mi vida que definieron mi carrera como investigador, los sabores y sinsabores que enfatizaron mi inclinación sobre los tópicos a los cuales he dedicado mi trabajo científico, el impacto del mismo, las recientes metas alcanzadas y aquellas por venir. Me referiré en particular a mis aportaciones en teoría de colisiones atómicas, así como a las relacionadas con el estudio de sistemas cuánticos confinados. También comentaré sobre mi incursión en trabajos interdisciplinarios que han sido muy enriquecedores, como modelos de mecanismos de contracción muscular y modelos de agregación de asfaltenos en procesos de extracción de crudos pesados.

## Energy Deposition by Swift Ions in Biomolecules

John R. Sabin

Department of Physics, Quantum Theory Project, University of Florida  
and  
Institute for Physics, Chemistry and Pharmacology, University of Southern Denmark

The effects of energy transfer from swift ion radiation to molecules are best described by the stopping cross section of the target for the projectile ion. In turn, the mean excitation energy of the target is the determining factor in the stopping cross section, as it governs the amount of energy transferred from the projectile to the target ion. Using polarization propagator methodology, the mean excitation energies of several biomolecular systems ranging from amino acids to nucleotides are reported. These can subsequently be used to determine the stopping cross sections of the various biomolecular systems.

## El Banco de Tejidos Radioesterilizados del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

María Esther Martínez Pardo  
*Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares*  
*Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, 52750 Ocoyoacac, Méx.*  
*esther.martinez @inin.gob.mx;*

En 1994 se iniciaron trabajos de investigación en el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) en colaboración con el Hospital Central Sur de Alta Especialidad de PEMEX, con objeto de determinar la dosis de esterilización de amnios, la capa interna de la placenta, para su aplicación clínica como cubierta temporal en pacientes con pérdida de piel. Los resultados fueron alentadores y así, el Banco de Tejidos Radioesterilizados (BTR) del ININ se estableció en 1997, como un banco sin fines de lucro, apoyado por el Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA), quien proporcionó equipo, capacitación y misiones de expertos. Como consecuencia, la Secretaría de Salud otorgó la licencia sanitaria al BTR el 7 de julio de 1999. Posteriormente, se desarrolló el proceso de piel de cerdo congelada y liofilizada, proporcionada por la empresa Abastos Cuautitlán, S.A. de C.V. Ambos tipos de tejidos, amnios y piel de cerdo, se utilizan como apósitos biológicos en pacientes con quemaduras, úlceras o en heridas difíciles de sanar. El amnios también se usa en Oftalmología para el tratamiento de daño en la superficie ocular.

El Sistema de Gestión de la Calidad del BTR tiene certificación ISO 9001:2008 desde 2003-08-01. Para ofrecer más tejidos radioesterilizados a la comunidad médica, en junio de 2007 el BTR firmó un convenio con la Secretaría de Salud del Estado de México a través del Centro Estatal de Trasplantes del Estado de México, para el proceso de tejido músculo-esquelético, piel y amnios. Actualmente, en el BTR también se dispone de hueso en polvo y en chips. El proceso de piel humana se encuentra finalizando la etapa de validación. Como una función social del ININ, el BTR ha contribuido al mejoramiento de la salud de pacientes de más de 50 instituciones hospitalarias, principalmente las que atienden a pacientes de bajos recursos en distintas ciudades del país, proporcionando los tejidos mencionados. También ha propiciado la formación de una red de cuatro bancos de hueso y tejidos, además del BTR, los cuales esterilizan sus tejidos y materiales de acondicionamiento en el Departamento del Irradiador Gamma del ININ.

## Pressure-induced metalization and vibrational spectra of doped hydrogen clusters under confinement

Jacques Soullard, Ruben Santamaria, Xim Bokhimi

Instituto de Física, UNAM, A.P. 20-364, Mexico D.F.

Julius Jellinek

Chemistry Division, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois 60439, USA

Endohedrally encapsulated hydrogen clusters doped with inert helium ( $H_{24}He$ ) and ionic lithium ( $H_{24}Li^+$ ) are investigated. The confinement model is a nanoscopic analog of the experimental compression of solid hydrogen. The structural and electronic properties of the doped hydrogen clusters are determined under the effects of pressure. The results are compared with those of the isoelectronic (pure) hydrogen counterpart  $H_{26}$  under similar physical conditions. Pressure increase with respect to  $H_{26}$  is observed with the insertion of helium or lithium. The changes of geometrical structures, and HOMO - LUMO gap energies with the pressure point out a possible pressure-induced metalization of the  $Li^+$  doped cluster. The computations are performed using density functional theory within the gradient-correct level of theory, and include zero-point energy effects. Thus, the vibrational spectra of the isoelectronic hydrogen clusters  $H_{26}$ ,  $HeH_{24}$  and  $Li^+H_{24}$  under confinement are calculated. The harmonic vibrational modes and frequencies are discussed for every cluster as well as their evolution at gigapascal pressures. On the one hand, it is possible to identify common modes of vibration of the clusters and, on the other hand, their particular vibrational markers at every pressure. We find collective vibrations of cluster atoms that exhibit some analogy with the collective vibrations of plane atoms in the solid. The results are of help to identify either doping elements such as inert He or ionic  $Li^+$  in hydrogen under confinement, or establish the pressure of hydrogen when the vibrational spectrum is known. To our knowledge, this work is the first of its kind to analyze pressure effects on the electronic and vibrational properties of clusters.

## Presentación del capítulo “Surface effects in the hydrogen atom confined by dihedral angles”, editor Kalidas Sen

Eugenio Ley-Koo, Instituto de Física, UNAM,

Guo-Hua Sun, Centro Universitario Valle de Chalco, UAEMex.

El Profesor Kalidas Sen ha tomado la iniciativa de editar la Monografía mencionada en el título, invitando a varios colegas a escribir contribuciones sobre sus investigaciones recientes posteriores a la publicación de *Advances in Quantum Chemistry Vols. 57 y 58 “Theory of Confined Systems” Parts I and II* (2009). En esta contribución al TADEM 2013, los autores hacen una presentación del manuscrito recién enviado, con el siguiente contenido: 1. Introduction, 2. Updating and Extensions of

Comment and Preview in “The Hydrogen Atom Confined in Semi-Infinite Spaces with Conoidal Boundaries”, 3 Surface Effects in the Hydrogen Atom Confined by Dihedral Angles in Spherical, Parabolic and Prolate Spheroidal Coordinates, 4. Outlook for Multielectron Atoms and Molecules Confined by Dihedral Angles, 5. Discussion. La contribución y el Capítulo están dedicados al Profesor Salvador Cruz, colega, coautor y amigo.

O6

## Supresión e intensificación de efectos superficiales en el átomo de hidrógeno confinado por ángulos diedros

Guo-Hua Sun, Centro Universitario Valle de Chalco, UAEMex  
Eugenio Ley-Koo, Instituto de Física, UNAM

Se reportan efectos de supresión e intensificación en el átomo de hidrógeno confinado por ángulos diedros en su estructura hiperfina y en su efecto Zeeman orbital, en comparación con el átomo libre. Efectivamente, mientras la estructura hiperfina del átomo de hidrógeno libre en su estado base se debe a la contribución de contacto de Fermi y es isotrópica, el confinamiento del átomo por un ángulo diedro impide que el electrón se encuentre en la posición del núcleo suprimiendo dicha contribución, y además deforma los orbitales con la consecuente aparición de la contribución anisotrópica a la estructura hiperfina, y su intensificación al disminuir el ángulo de confinamiento. Por lo que se refiere al efecto Zeeman orbital con Hamiltoniano lineal en  $\hat{\ell}_z$ , el átomo libre tiene eigenfunciones del mismo operador y el desdoblamiento de los niveles es uniforme. En comparación, los eigenestados del átomo confinado son eigenfunciones de  $\hat{\ell}_z^2$ , sujetos a la condición de anularse en las fronteras del ángulo diedro  $\phi_1=0$  y  $\phi_2=\phi_0:\sin\mu\phi$  con eigenvalores  $\mu=n_\phi\pi/\phi_0, n_\phi=1,2,\dots$ . En consecuencia los elementos de matriz de la  $\hat{\ell}_z$  se anulan para  $n'_\phi=n_\phi\pm 2N$  y son distintos de cero para  $n'_\phi=n_\phi\pm(2N+1)$  con  $N$  entero, dependiendo sus valores de las integrales de traslape en los otros grados de libertad. El resultado es el siguiente: El efecto Zeeman se suprime en primer orden de teoría de perturbaciones, también se suprime en teoría de perturbaciones de estados degenerados para ángulos de confinamiento  $2\pi, 2\pi/3, \dots, 2\pi/(2N+1)$ ; y para otros ángulos de confinamiento el patrón de desdoblamiento no es uniforme. Ambos efectos son experimentalmente detectables y evidencia del confinamiento del átomo de hidrógeno por ángulos diedros.

O7

## Estimación de potenciales de ionización de átomos confinados usando la técnica del propagador implementado en GPUs

Jorge Garza,<sup>1</sup> Erwin García Hernández,<sup>1</sup> Roberto Flores Moreno<sup>2</sup> y Rubicelia Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Departamento de Química.  
San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, México D. F. C.P. 09340.

<sup>2</sup> Universidad de Guadalajara. Departamento de Química, CUCEI. Blvd. Marcelino  
García Barragán 1421, Col. Olímpica, Guadalajara Jalisco, C. P. 44430.

Haciendo uso de la técnica del propagador del electrón se estiman potenciales de ionización en átomos confinados por paredes rígidas. Para este fin se resuelven las ecuaciones de Hartree-Fock (HF) haciendo uso del método de Roothaan representando los orbitales de HF con funciones tipo Slater, implementando todo el código sobre GPUs. Mostramos que la técnica del propagador del electrón es la técnica más apropiada para estimar potenciales de ionización en átomos confinados y que los GPUs son una alternativa para acelerar este tipo de técnicas.

**O8**

## **Átomos multielectrónicos confinados en cajas esferoidales prolatas penetrables.**

Cecilia Díaz García, Salvador A. Cruz.

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

En este trabajo se estudian los efectos de confinamiento cuántico por cavidades esferoidales prolatas en la evolución de la energía del estado basal de átomos multielectrónicos. Se trata la situación en que el núcleo se encuentra anclado en uno de los focos de la cavidad esferoidal y la barrera de confinamiento es finita, lo cual permite que el análisis sistemático en la evolución de la energía del sistema sea más realista.

Empleamos el modelo estadístico de Thomas-Fermi-Dirac-Weizsäcker ( $TFD\lambda W$ ) para estudio de estos sistemas; así como el método variacional. La funcional de  $TFD\lambda W$  ha sido utilizada para átomos atrapados en cavidades esféricas [1-2] y en cavidades esferoidales prolatas impenetrables [3].

Es importante mencionar, en el marco de este evento, en honor al Dr. Cruz, que él ha sido el precursor para la adecuación de el modelo de  $TFD\lambda W$  para el estudio de átomos multielectrónicos confinados, así como un entusiasta propulsor del uso del método variacional para estudiar sistemas confinados, por mencionar sólo algunos de sus trabajos en su larga trayectoria como investigador.

[1] S.A. Cruz, C. Díaz-García, G. Covarrubias, Int. J. Q. Chem., 102, (2005).

[2] C. Díaz-García, S. A Cruz, Int. J. Q. Chem., 108 (2008) 1572.

[3] S.A. Cruz, Adv. Quantum. Chem. 57 (2009) 255.

**O9**

## **Escalamiento en un sistema localmente periódico**

V. Domínguez-Rocha y M. Martínez-Mares  
[vdr@xanum.uam.mx](mailto:vdr@xanum.uam.mx) y [moi@xanum.uam.mx](mailto:moi@xanum.uam.mx)

Estudiamos la evolución de la función de onda de una cadena lineal de dispersores localmente periódicos con el tamaño del sistema a través del formalismo matriz de dispersión  $\mathbf{S}$  [1]. Con sólo uno de los extremos abiertos de la cadena, la matriz  $\mathbf{S}$  del sistema es  $1 \times 1$  y satisface una relación de recurrencia cuando añadimos un dispersor individual a una cadena de  $N$  dispersores. Reducimos el problema a un mapa no lineal y encontramos una equivalencia entre sus regiones de energía de periodo uno y de caos débil, con las bandas prohibidas y permitidas del sistema completamente periódico, de la misma manera en que lo hace la conductancia para el árbol de Cayley doble [2]. Observamos que a tamaño finito la función de onda decae exponencialmente con el tamaño del sistema, así como en el espacio, cuando la energía esta en una banda de periodo uno; mientras que no decae para energías en alguna banda de caos débil. Cerca de la transición entre las bandas, por el lado caótico, encontramos que la función de onda también decae pero en la forma de una exponencial  $q$ . Adicionalmente nos es posible encontrar una longitud de decaimiento que es la mitad del camino libre medio, que resulta ser más grande que la constante de la red [3].

[1] P. A. Mello and N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations* (Oxford University Press, New York, 2005).

[2] M. Martínez-Mares and A. Robledo, *Phys. Rev. E* **80**, 045201(R) (2009).

[3] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).

O10

## Mechanical effects of structured light on ultracold atoms: semiclassical versus quantum descriptions

Rocio Jauregui

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

Apdo Postal 20-364, México D.F. 01000, México

rocio@fisica.unam.mx

We study the scattering effects on free falling ultra cold atom clouds that traverse a microscopically structured laser beam. In a first scenario, dilute thermal clouds are used to explore the dynamical properties of the light beam. In the second scenario, the atom cloud is in the Bose Einstein condensation regime. Under such conditions, a comparative analysis is performed on the quantum versus classical dynamics of the ground state fraction and of the thermal cloud respectively. This study help us to better understand the border between classical and quantum regimes.

## Trampa magneto-óptica de dos isótopos de rubidio (DIMOT) con un solo laser.

Mónica Gutiérrez, Víctor Valenzuela, Saeed Hamzeloui, Eduardo Gómez.

Instituto de Física, UASLP.

Presentamos un novedoso sistema para el atrapamiento de dos isótopos en una trampa magneto óptica (DIMOT). El sistema utiliza un solo laser de diodo y un modulador de fibra para generar todas las frecuencias requeridas. Amplificamos los haces simultáneamente en un amplificador óptico en configuración de doble paso. Con el sistema se mueve todo el control de los haces al mundo de la RF dando una enorme simplificación sobre sistemas tradicionales. Haces adicionales se añaden fácilmente con desintonías de hasta 10 GHz. Demostramos nuestro sistema atrapando  $87\text{Rb}$  y  $85\text{Rb}$  de manera simultánea.

## Espectroscopías de fluorescencia y polarización con selección de velocidades en un vapor de rubidio atómico en el esquema de excitación en escalera $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ .

Jesús Flores-Mijangos, Oscar López- Hernández, Cristian Mojica-Casique, Fernando Ramírez-Martínez and José Jiménez-Mier

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria,  
04510 México, D.F., México  
email: ferama@nucleares.unam.mx

En este trabajo presentamos la observación de cambios en la absorción de un haz láser de prueba sintonizado a una transición hiperfina en la línea  $D_2$  del rubidio mientras la frecuencia de un haz de bombeo circularmente polarizado, ya sea co- o contra-propagante con el haz de prueba, es barrida a través de la transición  $5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ . Por medio de un sistema de detección balanceada, se registran separadamente las variaciones en las intensidades de las componentes linealmente polarizadas y mutuamente ortogonales del haz de prueba, lo cual corresponde a medir la birrefringencia inducida en el vapor atómico por el haz de bombeo. Simultáneamente, en nuestros experimentos registramos la fluorescencia de 420nm producida en el segundo escalón del decaimiento espontáneo en cascada  $5D_{5/2} \rightarrow 6P_{3/2} \rightarrow 5S_{1/2}$ .

En el caso de haces contra-propagantes y manteniendo el haz de prueba anclado a una resonancia hiperfina en particular, se registran señales de absorción y polarización, correspondientes tanto a procesos atómicos como a entrecruzamientos, que revelan la estructura hiperfina del estado  $5D_{5/2}$ . Estos resultados han sido utilizados para el desarrollo de técnicas de estabilización libres de

modulación para anclar la frecuencia del haz de bombeo. En un experimento por separado, haces contra-propagantes de 776 nm estabilizados pasivamente están presentes en la celda de rubidio mientras las propiedades ópticas del medio son medidas por un haz de prueba de 780 nm que es barrido a través de las múltiples resonancias correspondientes al estado  $5P_{3/2}$ . En este caso observamos espectros de fluorescencia y polarización con selección de velocidades en el sistema en escalera. Los pozos de absorción con ensanchamiento Doppler de ambos isótopos,  $^{85}\text{Rb}$  y  $^{87}\text{Rb}$ , así como los picos de fluorescencia correspondientes exhiben trazas libres de ensanchamiento Doppler que evidencian los grupos de velocidades complementarios que interactúan simultáneamente con las componentes co- y contra-propagantes de la luz con longitud de onda de 776 nm.

**O13**

## **Transición Fase en un Modelo Ising – Percolación Mediante un Método Numérico.**

Gennadiy Burlak , Yessica Calderón-Segura  
Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas,UAEM.

En este trabajo se muestra el mapeo un modelo de percolación a un modelo de Ising, considerando la temperatura crítica, el sistema visita distintas partes de su espacio de configuraciones. Para bajas temperaturas,  $T \rightarrow 0$ , el entorno casi no afecta el sistema, si este busca en su estado base. Sin embargo, para altas temperaturas, cuando  $T \rightarrow \infty$ , el sistema visita todas las configuraciones posibles al azar, utilizando el Método Monte Carlo hasta alcanzar el equilibrio térmico y transmitir el líquido ferromagnético.

**O14**

## **Modelo solitónico para halos de materia oscura**

David Castañeda Valle y Eckehard W. Mielke  
Departamento de Física, UAM-I

Durante las colisiones de cúmulos galácticos, considerar un comportamiento solitónico podría explicar algunas de las observaciones realizadas. Estas colisiones, se piensa que están dominadas en su mayoría por materia oscura. Lo cual, permite despreciar el comportamiento de otros componentes y considerar el comportamiento para la materia oscura como único componente. Esto puede describirse utilizando la ecuación de Klein-Gordon no lineal, donde los campos escalares pueden presentarse como soluciones tipo solitón. Truncar un potencial periódico como el de axión, permite construir un modelo de juguete para estudiar los halos de materia oscura con dicho comportamiento. En cúmulos como el Bullet, considerar que los axiones forman un condensado de Bose-Einstein, podrían no solo dar una explicación a las observaciones, también ayudar a determinar algunas propiedades de la aun no descubierta materia oscura.

## Rapidez del sonido en un condensado de Bose-Einstein y la ecuación de Zaremba-Nikuni-Griffin

Abel Camacho Quintana

Departamento de Física,  
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa,  
Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina,  
Delegación Iztapalapa, México DF, México.

En el presente trabajo se muestra la posibilidad de emplear la llamada ecuación de Zaremba–Nikuni–Griffin para deducir la rapidez del sonido en un condensado. Concluiremos que la ecuación de Gross–Pitaevskii permite deducir de manera correcta el orden de magnitud de dicho parámetro pero no es capaz de resolver la discrepancia actual entre experimento y teoría.

## The Three Body Coulomb Problem, Beyond the Static Approximation

Horacio Olivares Pilón  
Université Libre de Bruxelles  
Instituto de Ciencias Nucleares

The non-relativistic three-body Schrödinger equation of  $H_2^+$  with Coulomb potentials is solved in perimetric coordinates using the Lagrange-mesh method [1]. This method is an approximative variational calculation with variational accuracy and the simplicity of a calculation on a mesh. Energies and wave functions can be calculated. With the corresponding wave functions, a simple calculation provides accurate quadrupole transitions probabilities per time [2]. The isotopomers  $D_2^+$  and  $HD^+$  are also considered [3,4].

- 1 M. Hesse and D. Baye, J. Phys. B , 139 (2003).
- 2 H. Olivares Pilón and D. Baye, J. Phys. B 45, 065101 (2012).
- 3 H. Olivares Pilón and D. Baye, submitted to J. Phys (2013).
- 4 H. Olivares Pilón and D. Baye, submitted to J. Phys (2013).

## Electronic structure in the bulk model of different crystalline-phases of alumina

S. Flores-López<sup>1</sup>, F. Álvarez-Ramírez<sup>1</sup>, D. Valencia<sup>1,2</sup>, and I. García-Cruz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Programa de Ingeniería Molecular, Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152, Colonia San Bartolo Atepehuacán, México D. F. 07730, MÉXICO

<sup>2</sup>Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Coyoacán, México D.F., 04510, MÉXICO

Alumina is a technologically-important ceramic material. Its resistance and insulating properties have led to its widespread use in electronic devices as a corrosion resistant film. It is also employed in catalysis, for example, in hydrodesulphurization process. Several alumina phases do exist. The thermodynamically-stable phase is the so-called  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, whose crystal structure is well known. However, the crystal structure of some of the transition phases has not yet been well understood. Alumina can also be stabilized in an amorphous state. The interest in this phase has increased considerably, because the amorphous phase is linked to many important applications, such as a high-k dielectric in catalysis and some optical devices, and as a precursor in the process of manufacturing well-defined crystalline materials.

In this work, we performed DFT calculations of the  $\alpha$ -,  $\eta$ -, and  $\gamma$ - forms of alumina. Electronic properties analyzed pointing out the importance of the different alumina crystalline phases. Density of States (DOS) display a metallic and insulating behavior depends on the crystalline structure.

Presenting author's email address:[igarcia@imp.mx](mailto:igarcia@imp.mx)

## Asphaltene particle adsorption on metals: theory and experiments

A. Ortega-Rodríguez<sup>1</sup>, S. A. Cruz<sup>2</sup>, I. García-Cruz<sup>1</sup> and C. Lira-Galeana<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Mexican Institute of Petroleum, Eje Central Lazaro Cardenas 152, Mexico 07730, Mexico

<sup>2</sup>Department of Physics, Autonomous Metropolitan -Iztapalapa, P.O, Box 55534, Mexico 09340, Mexico

Atomic Force Microscopy (AFM) is used for measuring the force-of-adhesion of asphaltene aggregates on raw metallic surfaces (Al and Fe) at room temperature and atmospheric pressure. To represent the data, a simple analytical expression for the force of adhesion between a spherical asphaltene particle and the metallic surface(s), based on the framework of Lindhard's Continuum Planar Potential (CPP) approximation, is developed and tested. The analytical expression, which accounts for the effect of a

surrounding medium (i.e. a solvent), may be used as a fitting equation to provide predictions in reasonable agreement with experimental measurements. These predictions point to the adequacy of the CPP approach for a proper representation of the interactions and force effects in asphaltene aggregates, and their metallic processing-equipment.

Presenting author's email: e-mail address: [clira@imp.mx](mailto:clira@imp.mx)

O19

## Soft x-ray absorption to determine the metal valence state of transition metal compounds.

J. Jiménez-Mier,<sup>1</sup> P. Olalde-Velasco,<sup>1,3</sup> G. Carabalí Sandoval,<sup>1</sup> G. Herrera-Pérez,<sup>1</sup> E. Chavira,<sup>2</sup> W. L. Yang,<sup>3</sup> and J. Denlinger.<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, 04510 México DF, México

<sup>3</sup>The Advanced Light Source, Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, CA 94720, USA

We present examples where x-ray absorption at the transition metal  $L_{2,3}$  edges is used to investigate the valence states of various strongly correlated (SC) and technological relevant materials. Comparison with ligand field atomic multiplet calculations is needed to determine the metal oxidation states. For  $\text{CrF}_2$  the results indicate a disproportionation reaction that generates  $\text{Cr}^+$ ,  $\text{Cr}^{2+}$  and  $\text{Cr}^{3+}$  in different proportions that can be quantified directly from the x-ray spectra. Similarly and relevant for battery research, manganese in different oxidation states is found in several manganese oxides. Additionally, it is shown that  $\text{Co}^{2+}$  is present in the catalytic  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$  perovskite family. Finally, surface effects that change the vanadium valence are also found in  $\text{YVO}_3$  nanocrystals.

O20

## Estudio de la Ecuación No Lineal de Schrödinger para estados excitados en una guía de onda de materia.

Ricardo Méndez Frago  
Facultad de Ciencias, UNAM  
[rich@ciencias.unam.mx](mailto:rich@ciencias.unam.mx)

y

R. Cabrera-Trujillo  
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

El estudio de los condensados de Bose-Einstein en chips atómicos se puede explicar utilizando la ecuación de Gross-Pitaevskii. Ésta es la ecuación no lineal de Schrödinger, NLS por sus siglas en inglés, y describe un ensamble de átomos que ocupan el mismo estado. En una buena aproximación los

chips atómicos, defectos en las guías de onda de materia y algunos efectos de borde, se pueden modelar con un potencial efectivo finito con diferentes geometrías. En la presente contribución se estudia la estructura de estados utilizando soluciones analíticas y simulaciones numéricas para la ecuación de Gross-Pitaevskii en una dimensión como modelo de una guía de onda de materia ultra fría. Los defectos que tiene dicha guía se modelan de manera efectiva por un potencial cuadrado para diferentes anchos y profundidades. Una de las características de NLS es que la parte no lineal es proporcional al cubo de la función de onda y tiene un parámetro de intensidad,  $g$ , que modela de manera efectiva las interacciones de las  $N-1$  partículas en el condensado. En este trabajo resulta de mucho interés el estudio de los estados excitados en el umbral de deslocalización, es decir, cuando éstos tienen energía tal que el estado pasa de un conjunto con espectro discreto al espectro continuo. Lo anterior sirve para caracterizar los parámetros geométricos necesarios de la trampa y/o defectos de la guía de onda para estados excitados que tienen una dinámica mas elaborada y que sus análogos en sistemas con mayores dimensiones exhiben vorticidad.

O21

## Substituent Effects on the Excited State Intramolecular Proton Transfer of (Salicylidene-1-naphthylamine): An experimental and TDDFT/PCM approach

Rodrigo Morales-Cueto,<sup>†</sup> Juan Manuel Junior Cervera-Villanueva<sup>†</sup> and William Rodríguez-Córdoba<sup>‡</sup>  
<sup>‡</sup> Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia, A.A. 3840, Medellín, Colombia  
<sup>†</sup> Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62209 Cuernavaca Morelos, México.

Due to their photochromism and intramolecular hydrogen bonding, Schiff bases have earned unquestionable importance in both experimental and theoretical studies about molecular phenomena in electronically excited states. Previous research on the photophysical properties of salicylidene-1-naphthylamine in acetonitrile solution concluded that the excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) takes place without an energy barrier and that the excited *trans*-enol form evolves through the potential energy surface towards the *cis*-keto tautomer with a time constant of about 30 fs ( $10^{-15}$ s). The ultrafast hydrogen transfer, high fluorescence yield and high solubility in several solvents of these compounds give the possibility to have a reference for more complicated systems subject to theoretical calculations on their molecular dynamics and their potential use for energy harvest devices.

Understanding the substituent effect on the excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) process is the goal of this study. For this reason, we studied the photophysics of seven analogues of salicylidene-1-naphthylamine through UV-Vis steady-state spectroscopy and computational calculations. We synthesized seven naphthalene-based salicylideneanilines which include different electron-donating or electron-withdrawing substituent in the *para* position of the aniline ring ( $R = -H, -COOH, -CH_3, -OH, -NO_2, -Br$  and  $-OCH_3$ ). All model compounds were synthesized from 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and their corresponding amines.

The spectral change of their ESIPT emissions was affected differently by the electron donating (or withdrawing) power of the substituents; a bathochromic shift for the electron donating group and a hypsochromic shift in electron withdrawing group. In addition, the changes in energy levels calculated by the TDDFT/PCM method were consistent with the spectral shifts of systems in acetonitrile solution.

## Estudio de la predisiociación vibracional en el complejo $\text{Br}_2\text{-H}_2\text{O}$ y cálculos de correlación local en agregados $\text{Br}_2(\text{H}_2\text{O})_{n=4,5}$

Fidel Alejandro Batista Romero, Ramón Hernández Lamonedá  
CIQ, UAEM, Morelos, México

Del complejo  $\text{Br}_2\text{-H}_2\text{O}$  se ha estudiado la superficie de energía potencial en dos dimensiones del estado fundamental y de los estados de valencia excitados, así como las geometrías de mínima energía de dicho sistema. También se han realizados estudios *ab initio* de los grandes corrimientos y pequeños ensanchamientos en las bandas de valencia del  $\text{Br}_2$  con respecto a la formación del dímero con el agua. Sin embargo no se conoce nada de los *tiempos de vida media* del complejo cuando se encuentra en un estado excitado. Esta información será de gran utilidad en la planeación de experimentos para determinar la dinámica de predisiociación vibracional del sistema. La metodología de las *trayectorias cuasi-clásicas* se puede emplear para determinar el tiempo que demora el complejo en disociarse. Las condiciones iniciales se toman según cálculos cuánticos debido a que el movimiento vibratorio del complejo es de naturaleza cuántica, sin embargo la propagación de las trayectorias se simulan de manera clásica, resolviendo las ecuaciones de Hamilton de la mecánica. Una vez obtenidas todas las trayectorias correspondientes a cada una de las poblaciones iniciales, entonces se determinan los tiempos de vida media para cada uno de los estados que se excitaron inicialmente, los principales mecanismos de transferencia de energía y los estados cuánticos finales. También estamos interesados en realizar cálculos *ab initio* para agregados de mayor tamaño incluidas celdas de agua características de clatratos de bromo, que han sido objeto de una gran variedad de estudios espectroscópicos. En estos experimentos se han medido corrimientos en los espectros vibracionales y electrónicos para el bromo en celdas de distintos tamaños así como en hielo y en solución acuosa. Todos estos resultados requieren de una interpretación teórica. Con el objetivo de determinar teóricamente el espectro de excitación electrónica se hace necesario encontrar cuál es la superficie de energía potencial para estos sistemas, para ello se han empleado métodos de *correlación local* y como una primera prueba se analiza el caso de agregados que ya han sido estudiados con métodos convencionales. Además se demuestra que con estos métodos se elimina el error de superposición de base, lo cual es imprescindible a la hora de realizar cálculos espectroscópicos. En esta presentación mostramos los avances obtenidos hasta el momento en los problemas mencionados anteriormente.

## Modeling the Stokes shift of PbS quantum dots

B. Ullrich and A. Antillón  
Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos,  
México C.P. 62210

The energy redshift of the emission maximum with respect to the fundamental absorption transition is called Stokes shift. The phenomenon rules the emission chromaticity and is therefore of considerable importance for the design of light emitting QD devices. For PbS quantum dots (QDs), Stokes shift energies of a few meV up to 150 meV and more have been observed [1,2]. Hence, it is difficult to conceive a general model for the shift, which apparently depends on specific PbS QD features such as surface traps. Additional complexity is added by the extrinsic character of the photoluminescence of PbS QDs [1,3]. Here, we present our progress to theoretically describe and predict the Stokes shift by a model based on the competition of many body effects and band filling (Burstein-Moss shift).

[1] B. Ullrich and J. S. Wang, Appl. Phys. Lett. **102**, 071905 (2013).

[2] J. S. Wang, B. Ullrich, and G. J. Brown, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **1409** © 2012 Materials Research Society, DOI: 10.1557/opl.2012.755.

[3] B. Ullrich, J. S. Wang, and G. J. Brown, Appl. Phys. Lett. **99**, 081901 (2011).

O24

## Cálculo de propiedades magnéticas con la teoría de los funcionales de la densidad auxiliar

Bernardo Antonio Zúñiga Gutierrez, Gerald Geudtner y Andreas M. Köster

Centro de Investigaciones y Estudios Avanzados del I. P N., Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, Col, San Pedro Zacatenco, Delegación Gustavo A. Madero, México D. F.

El cálculo de propiedades magnéticas de moléculas conteniendo cientos o miles de átomos es una tarea que demanda muchos recursos de cómputo para realizarlo en un tiempo razonable. Una contribución importante en este sentido ha sido el desarrollo reciente de la metodología ADFT-GIAO, siglas del inglés Auxiliary Density Functional Theory – Gauge Including Atomic Orbital. Esta metodología está implementada en el código deMon2k [1] el cual puede evaluar propiedades magnéticas tales como apantallamiento magnético, magnetizabilidad, acoplamiento entre espines nucleares, tensor rotacional-g y constante de espín-rotación. Todas las propiedades mencionadas con excepción del acoplamiento entre espines nucleares son calculadas con la metodología ADFT-GIAO. La formulación de esta metodología está libre de integrales numéricas para las contribuciones del intercambio y correlación. La desviación con respecto a datos experimentales es la misma que cualquier otra implementación basada en la teoría de los funcionales de la densidad. Además, las integrales moleculares involucradas en el cálculo de propiedades magnéticas han sido implementadas y paralelizadas eficientemente lo cual contribuye a reducir considerablemente el tiempo de cómputo. En general, el cálculo de tensores de apantallamiento magnético o magnetizabilidad pueden ser calculados en un tiempo menor al cálculo de la energía del mismo sistema [2,3].

Un acuerdo aceptable entre predicción teórica de parámetros espectroscópicos de RMN y los medidos experimentalmente requiere considerar un promedio ponderado de dicha propiedad en cada uno de los conformeros posibles del sistema bajo estudio. Este promedio implica que el cálculo de la propiedad magnética debe realizarse cientos o miles de veces. La eficiencia de la metodología ADFT-GIAO permite el cálculo en pocos minutos de los desplazamientos químicos en moléculas que contienen

aproximadamente cien átomos. Entonces, es posible realizar esta tarea al promediar el apantallamiento magnético isotrópico de la molécula sobre la trayectoria de una dinámica molecular de tipo Born-Oppenheimer en un tiempo razonablemente corto. Otra forma de realizar este promedio es realizando un análisis conformacional de la molécula y posteriormente promediar la propiedad en cada uno de los conformeros mediante una estadística de Boltzmann.

La presentación demostrará la eficiencia y precisión de nuestra metodología de las propiedades implementadas y ejemplos de la predicción teórica de los desplazamientos químicos de una molécula orgánica con más de 70 átomos.

[1] [www.demon-software.com](http://www.demon-software.com)

[2] B. Zuniga-Gutierrez, G. Geudtner y A. M. Köster, J. Chem. Phys. **134**, 124108 (2011).

[3] B. Zuniga-Gutierrez, G. Geudtner y A. M. Köster, J. Chem. Phys. **137**, 094113 (2013).

O25

## Distribución en la energía de los electrones ionizados en la colisión proton-hidrógeno a 50 keV

A. Amaya Tapia y A. Antillón

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México,  
AP 48-3, Cuernavaca, Mor., 62251

En esta presentación se discuten los alcances del método de *Acoplamiento Cercano (CCM)* [1] para describir las secciones diferenciales en energía del proyectil y en energía de los electrones ionizados, de la colisión  $p^+ + H \rightarrow e^-$ . Usando este método ha sido posible calcular la sección de ionización total con bastante éxito en un intervalo de energías amplio, excepto alrededor de los 50 keV, en donde persisten diferencias sin explicación con los datos medidos. Sin embargo, ha sido muy difícil obtener valores relativamente precisos de las distribuciones en energía electrónica.

En este trabajo se usa la aproximación de parámetro de impacto en el modelo de partícula independiente, y se considera una base de funciones centradas en cada núcleo, para tomar en cuenta la influencia de ambos centros sobre los electrones ionizados. Como es usual, el continuo se representa con pseudoestados de energía positiva, resultantes de la diagonalización de los átomos aislados. Este conjunto de pseudoestados puede ser visualizado como una representación discreta del continuo, en la energía. Esto dificulta el diseño de una estrategia para calcular la contribución de estos estados a las secciones, en un rango determinado de energía [2]. En esta presentación se discuten los resultados que se obtienen calculando las secciones en el espacio de las energías.

Las secciones obtenidas en el marco de referencia del proyectil muestran una estructura de anchura muy pequeña, que podemos asociar con los electrones que salen en la dirección del proyectil incidente y a velocidades similares a la de éste. Este fenómeno, que se ha observado en otros sistemas, es conocido como *captura de electrones al continuo*.

La distribución calculada, en energía del proyectil y en energía de los electrones ionizados, reproduce los datos experimentales [3] en el rango de energías electrónicas desde 10 a 30 eV. Sin embargo, a energías mayores, las secciones obtenidas presentan una estructura amplia por encima de los datos

medidos. Esta discrepancia parece surgir de los electrones que son lanzados a ángulos menores a  $15^\circ$  con respecto a la dirección del proyectil incidente, los cuales no fueron registrados por el dispositivo experimental. Esta estructura amplia parece jugar un papel importante en la diferencia entre las secciones de ionización totales calculadas y medidas. A energías menores a 10 eV, el método usado no puede reproducir los datos experimentales.

[1] W. Fritsch y C. D. Lin, *Physics Reports* 202, 1(1991); R. Cabrera, A. Amaya-Tapia y A. Antillón, *Phys. Rev. A* 79, 012712 (2009).

[2] J. F. Reading, A. L. Ford, G. L. Swafford y A. Fitchard, *Phys. Rev. A* 20, 130 (1979).

[3] G. W. Kerby III, M. W. Gealy, Y.-Y. Hsu, M. E. Rudd, D. R. Schultz y C. O. Reinhold, *Phys. Rev. A* 51, 2256 (1995).

Se agradece el apoyo recibido de PAPIIT, proyecto IN-109511

O26

## **Difracción de Luz, Una Herramienta para Grabar Nanoestructuras.**

C. Acosta-Zepeda, J. Mecalco-López, Haro-Poniatowski

Universidad Autónoma Metropolitana, San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Iztapalapa, 09340, México DF.

Las nanopartículas metálicas han sido ampliamente estudiadas debido a sus numerosas aplicaciones en diversos campos de la ciencia y la tecnología. Debido a sus propiedades ópticas han sido utilizadas para fabricar sensores, biomateriales, cristales fónicos, aparatos electrónicos, etc. Una de las técnicas para la fabricación de nanopartículas metálicas es mediante el uso de radiación láser. Otra cuestión muy importante en el control del tamaño y morfología, es la habilidad de ordenar a las nanopartículas en patrones regulares. En este póster mostramos las bases matemáticas de la difracción de luz, la cual nos permite grabar nano y micro patrones en películas delgadas de diversos materiales.

## Presentaciones Póster

P1

### Capas metálicas en el límite de percolación: efectos de plasmón superficial y posible material para transmisión extraordinaria de luz.

Eva Mayra Rojas Ruiz, José Luis Hernández Pozos\*.  
Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.  
Av. San Rafael Atlixco No 186. Col Vicentina. C.P. 09340 México D.F.

Se presentan los resultados del crecimiento de capas delgadas de dieléctrico-metal-dieléctrico por la técnica de ablación láser. Se muestra como, con la apropiada elección de parámetros experimentales, se puede controlar las propiedades de transmisión de luz en este tipo de muestras. También mostramos que, para capas de cobre en el régimen de percolación, en la región espectral donde aparece el plasmón superficial, tenemos una *disminución* de la intensidad de luz transmitida, lo cual puede estar relacionado al llamado fenómeno de transmisión extraordinaria de luz.

\*Autor para correspondencia: jlhp@xanum.uam.mx

P2

### Efecto de la simetría del estado base en el poder de frenamiento electrónico implementando el modelo del oscilador armónico: Fórmulas para $l = 0, 1$ y $2$ .

César Martínez Flores y R. Cabrera-Trujillo

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

Mediante la implementación del modelo del oscilador armónico (OA) se estudia el efecto de la simetría orbital del estado base en el poder de frenamiento electrónico. Se presentan las fórmulas analíticas encontradas bajo el modelo del OA cuando el momento angular es  $l = 0, 1$  y  $2$ , es decir, para los orbitales  $s$ ,  $p$  y  $d$  del blanco. Utilizando el teorema del Virial calculamos la energía media de excitación. Presentamos resultados de protones en gases nobles: He, Ne, Ar, Kr y Xe. Los resultados teóricos se comparan con los datos experimentales de la compilación de Helmut Paul mostrando buen acuerdo.

Trabajo bajo el auspicio del proyecto PAPIIT 101611 y CONACyT.

P3

## **Películas delgadas de nanopartículas de Bismuto depositadas en vacío por ablación laser usando un laser YAG:Nd**

J. G. Morales-Méndez, I. Morales Reyes, N. Batina, L. Escobar Alarcon\*, E. Haro-Poniatowski

Departamento de física  
Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa  
San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Iztapalapa, 09340, México  
\*Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares  
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa Ocoyoacac, México

En el presente trabajo se describe la preparación de películas delgadas de nanopartículas de Bismuto (Bi) mediante la interacción con un laser pulsado YAG:Nd con línea de 355 nm. La morfología de las películas se investiga por microscopía electrónica de barrido (TEM) y microscopio de fuerza atómica (AFM) en función del número de pulsos emitidos por el laser. Nuestros resultados muestran que las películas depositadas con número pequeño de pulsos (20), no son continuas, formando nanopartículas esféricas, aisladas con diámetros entre 10 nm a 27 nm. El efecto de incrementar el número de pulsos (35) aumenta el diámetro promedio de las nanopartículas esféricas y aumenta la densidad del área superficial de la película de Bi. Mayor incremento del número de impulsos (300) se obtienen películas de Bi en estado cuasipercolado.

**P4**

## **Estudio de las transiciones vibracionales anarmónicas en la segunda banda positiva de N<sub>2</sub>**

Adriana Lozano F. y A.M Juárez  
Instituto de Ciencias Físicas,  
Universidad Nacional Autónoma de México,  
Ap. Postal 43-8, Cuernavaca, Morelos, 62251, México

Se presenta el estudio experimental y teórico de los eigenvalores vibracionales de potenciales anarmónicos (Potencial de Morse) de una molécula diatómica. La medición experimental de estos eigenvalores se realizó empleando un monocromador óptico de alta resolución y una descarga luminiscente de Nitrógeno. Específicamente, con este arreglo se mide la energía de transiciones vibracionales en N<sub>2</sub>, entre los estados electrónicos C <sup>3</sup>Π<sub>u</sub> - B <sup>1</sup>Π<sub>g</sub>. Esta transición es conocida como la segunda banda positiva del nitrógeno. Por otra parte, se estudian las intensidades relativas de estas transiciones calculando los factores de Franck-Condon y se evalúan teóricamente los eigenvalores anarmónicos haciendo uso de la función de Wigner para el potencial de Morse. Para el cálculo de los FFC y la simulación del espectro vibracional se utilizó el software Mathematica. Basados en las mediciones experimentales, y haciendo uso de los cálculos de factores de Franck-Condon y los eigenvalores es posible extraer información directa de las propiedades de los estados excitados de esta

molécula diatómica. En particular se calcula la separación internuclear entre los estados excitados, asociados a las transiciones vibracionales observadas, así como las propiedades paramétricas del potencial de Morse de los estados electrónicos involucrados.

Agradecimientos al proyecto PAPIIT IT100613 y CONACYT CB-2011/167631

**P5**

## **Control de campo magnético a orden de micro-Gauss**

*Ma. Nieves Arias, María del Carmen Ruiz, Jonathan Espinoza, Eduardo Gomez  
Instituto de Física de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí*

Presentamos un sistema para controlar pequeñas variaciones del campo magnético que se requiere para la medición del momento anapolar de francio. El sistema consta de cinco partes: sensores de magneto-resistencia, convertidor analógico-digital, procesado digital en un FPGA, convertidor digital-analógico y fuentes de corriente de bajo ruido. El sistema tiene un ancho de banda de retroalimentación de 10 kHz para poder atenuar el ruido de línea y sus armónicos que son las componentes dominantes. El objetivo es lograr un control a 10 micro-Gauss.

**P6**

## **Detección de la fluorescencia violeta resultado de la excitación con dos fotones del estado 5D en rubidio atómico.**

Oscar López Hernández, Jesús Flores Mijangos, Fernando Ramírez Martínez, Cristian Mojica Casique, Iván Galinskiy, Santiago Hernández Gómez y José Jiménez Mier y Terán

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

En este trabajo se estudia la excitación de dos fotones  $5s \rightarrow 5p \rightarrow 5d$  en rubidio atómico mediante la detección de la fluorescencia a 420 nm generada en el segundo paso del decaimiento en cascada  $5d \rightarrow 6p \rightarrow 5s$ . Los espectros reportados se obtuvieron haciendo pasar haces contrapropagantes a 780 nm y 776 nm a través de una celda con vapor de rubidio atómico a temperatura ambiente. De esta manera se obtienen espectros libres de ensanchamiento Doppler. La detección de fotones a 420 nm se realiza con un fotomultiplicador 1P28 de Hamamatsu cuyo máximo de sensibilidad es en 420 nm. Estos resultados, además de proveer un método de detección alternativo al monitoreo de los cambios en la absorción del primer fotón de la escalera, nos permiten realizar la calibración del fotomultiplicador para su utilización en la detección de la misma excitación multifotónica en una nube de átomos fríos. Un montaje equivalente, con un segundo láser sintonizado a 917.5 nm, servirá para estudiar la transición prohibida por la aproximación dipolar eléctrica  $5p \rightarrow 6p$ , tanto en celda de espectroscopia como en una nube de átomos fríos.

## Sección eficaz de frenamiento de protones incidentes en nucleobases y ADN

L. N. Trujillo-López y R. Cabrera-Trujillo  
ICF-UNAM

Bajo la primera aproximación de Born, la teoría de Bethe calcula el mecanismo mediante el cual un ion pierde energía al penetrar diversos materiales (poder de frenamiento) en el rango de altas energías. La sección eficaz de frenado queda altamente determinada por la energía de excitación media del blanco,  $I_0$ . En este trabajo se estudia el poder de frenamiento electrónico de protones incidentes en moléculas simples utilizando el enfoque del modelo de oscilador armónico y los orbitales Gaussianos moleculares flotantes (FSGO). Se presentan los resultados para las moléculas  $N_2$ ,  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ , hidrocarburos y bases nitrogenadas - guanina, citosina, timina, adenina y uracilo- y ADN.

Se agradece el apoyo otorgado de parte de PAPIIT 101611 y CONACYT.

## LabVIEW control of camera and calibration

Vahide Abediyeh, Eduardo Uruñuela, Eduardo Gómez  
Instituto de Física, UASLP

We present a LabVIEW based program to control two cameras. We use the cameras to monitor the atoms and to extract different parameters from the images. In particular we measure the number of atoms using the camera and for that we follow a calibration procedure.

## Simulación de la detección de iones generados en una Trampa Magneto-Óptica

Cristian Mojica, Fernando Ramirez, Jesus Flores, Jose Jimenez.  
ICN - UNAM

Se simularon trayectorias de iones producidos en una trampa magneto-óptica para determinar tiempos característicos en un experimento de detección de átomos de Rydberg. Se considera un ensamble de  $n \sim 2,000$  átomos fríos con una distribución de posición gaussiana ( $\sigma = 1 \text{mm}$ ) y una distribución de velocidades Maxwelliana ( $T = 1 \text{mK}$ ). Los iones son generados por un campo eléctrico relacionado con los estados de Rydberg. La trayectoria se calcula usando dinámica molecular tomando la interacción de

los átomos con el campo eléctrico y la repulsión coulombiana entre ellos. Los datos de las trayectorias permiten analizar el flujo de iones para determinar la geometría del arreglo experimental.

**P10**

## **Micro grabado en superficie de silicio, producido por un láser y un micro elemento difractor**

J. Giovanni Mecalco-López<sup>1</sup>, C. Acosta-Zepeda<sup>1</sup>, J. L. Hernández-Pozos<sup>1</sup>, N. Batina<sup>2</sup>, I. Morales-Reyes<sup>2</sup>, E. Haro-Poniatowski<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, <sup>2</sup>Departamento de Química

Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, C.P. 09340, México D. F. México  
haro@xanum.uam.mx

Se llevaron a cabo micro grabados en la superficie de una oblea de silicio, haciendo pasar un sólo pulso láser, generado por un YAG, (con  $\lambda=532\text{nm}$ , y  $6\text{ns}$  de duración) a través de un medio difractor, en este caso, un micro agujero (de  $69\mu\text{m}$  de diámetro). Los patrones obtenidos fueron analizados mediante microscopía electrónica de barrido y microscopía de fuerza atómica. Los resultados de los estudios realizados, fueron comparados con la teoría de difracción de Fresnel. Así mismo se discuten los procesos físicos involucrados.

**P11**

## **Construcción de un modelo multinivel para el átomo**

Jorge Oswaldo Gómez Muñoz  
FC, UNAM

Durante la presente investigación, se desarrolla un modelo computacional para modelar un átomo multinivel en interacción con campos electromagnéticos. Primero se presenta un átomo de dos niveles y se resuelven las ecuaciones diferenciales involucradas. Para finalizar, se presentan las ecuaciones diferenciales a resolver para un sistema multinivel, así como los resultados experimentales que se quieren modelar.

**P12**

## **Sensor de campo magnético de magneto-resistencia**

María del Carmen Ruiz González, Nieves Arias Téllez, Jonathan Espinoza, Eduardo Gómez  
Instituto de Física, UASLP

Se presenta un sensor de campo magnético de dos ejes, con una resolución de  $27\mu\text{G}$ , un ancho de banda de  $5\text{MHz}$  y un rango de  $\pm 2\text{G}$ . El sensor es un puente de Wheatstone con elementos hechos de

un material magneto-resistivo. Un cambio en el campo magnético resulta en una variación del valor de las resistencias del puente. Esto ocasiona que el voltaje a la salida cambie proporcionalmente con el campo magnético. El sensor se instalará en un sistema de control de campo magnético para la medición del momento anapolar en francio.

**P13**

## **Efecto de un pulso láser en los procesos de captura electrónica y excitación en el sistema resonante $H^+ + H$ .**

F. J. Domínguez-Gutiérrez y R. Cabrera-Trujillo  
Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad s/n, col.  
Chamilpa, Cuernavaca, Morelos, 62210, México.  
javier@fis.unam.mx

El estudio del sistema  $H^+ + H$  lo realizamos por medio de la solución directa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo usando el método de diferencias finitas y el método de parámetro de impacto. Reportamos nuestros resultados graficando la sección eficaz de captura electrónica para los estados  $n = 1, 2$  y  $3$ , así, como los resultados obtenidos para el proceso de excitación para los estados  $n = 2$  y  $3$  en función de la energía del proyectil, en un intervalo de energías de colisión de  $0.5-35$  keV. Después, usando un pulso láser de  $10$  fs de *FWHM*, longitud de onda de  $800$  nm e intensidad de  $\sim 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> mostramos que el efecto de la asistencia del pulso láser en la colisión es notorio en los estados  $p$  y  $d$  respecto a los resultados sin láser en ambos procesos. Para asegurar la veracidad de nuestro método comparamos nuestros resultados sin láser con los resultados de varios métodos teóricos y datos experimentales reportados en la literatura.

**P14**

## **Diseño, implementación y calibración de un sistema de pinzas ópticas**

N. Méndez-Alba y J. L. Hernández-Pozos  
Departamento de Física, UAM-I

Presentamos un sistema de pinzas ópticas (optical tweezers) que hemos construido en los últimos meses y que es completamente funcional. Como es sabido, cuando se enfoca radiación electromagnética fuertemente (por ejemplo con un objetivo de microscopio con apertura numérica 1), al colocar cerca del foco una partícula de un material dieléctrico, la luz, al ser refractada por la partícula, cambia de dirección. Dicho cambio va acompañado por un cambio de momento. La partícula dieléctrica sufre un cambio de momento de igual magnitud y sentido contrario al experimentado por el haz de luz. La fuerza asociada a dicho cambio de momento es capaz de atrapar partículas que se mueven hacia los máximos de intensidad.

Con un aparato de este tipo, hemos atrapado partículas esféricas de óxido de silicio de 7  $\mu\text{m}$  de diámetro usando el segundo armónico ( $\lambda = 532 \text{ nm}$ ) de un láser continuo de Nd:YAG con potencia máxima de hasta  $\approx 500 \text{ mWatts}$ .

También presentamos los resultados de una calibración de fuerzas basada en la medición de la fuerza de arrastre hidrodinámico ejercida sobre una esfera que se mueve en un fluido que presenta un flujo laminar. Las mediciones hasta ahora obtenidas están en concordancia con lo reportado en la literatura.

**P15**

## **Cavidades térmicamente ultra-estables**

Francisco Salces, Cristina Martínez, Eduardo Gómez  
Instituto de Física, UASLP

Las cavidades de Fabry-Pérot han sido ampliamente utilizadas como referencia para amarres en frecuencia. La estabilidad de la referencia depende de la temperatura ya que la expansión térmica cambia la separación entre los espejos. Presentamos un diseño de cavidades fabricadas con materiales comunes como el hierro y el aluminio que producen un coeficiente de expansión térmico efectivo cercano a cero. Adicionalmente, optimizamos su comportamiento dinámico de manera que permanezca estática aún fuera de equilibrio termodinámico.

**P16**

## **Software para la simulación del estado fundamental (ground state) de solitones de ondas de materia.**

Salomón García Paredes, Gennadiy Burlak  
Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas (CIICAp)  
Universidad Autónoma del Estado de Morelos.  
Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa. Cuernavaca, Morelos.  
C.P. 62209. México.  
salomon.garcia@uaem.mx, gburlak@uaem.mx

Resumen. En este artículo se informa sobre los resultados de los estudios sistemáticos para solitones de ondas de materia de dos dimensiones, asimismo se demuestra que el cálculo y la estabilidad de una onda solitaria, sí se puede obtener. Además en nuestra investigación lo hacemos utilizando el Método de Evolución de Tiempo-Imaginario acelerado (AITEM, por sus siglas en inglés), mismo que, ha sido mejorado por los físicos Yang y Lakoba utilizando Matlab, pero en este artículo lo hemos desarrollado utilizando el lenguaje C#, el cual por ser un lenguaje orientado a objetos, nos permite simular de una manera más eficiente, rápida y modelar en todos sus ejes la simulación de los estados fundamentales de los solitones. La técnica de este método radica en introducir un operador de aceleración en cada iteración a la ecuación de tiempoimaginario, esto hace que bajo estas condiciones este método converja en muchas ondas solitarias sin nodos.

## Fotoionización de la capa de valencia del catión de cloro

Edgar Hernández<sup>1,6</sup>, A. Aguilar<sup>2</sup>, Olmo González<sup>3</sup>, D. Macaluso<sup>4</sup>, A. Antillón<sup>1</sup>, A. Morales-Mori<sup>1</sup>, A. M. Juárez<sup>1</sup>, D. Hanstorp<sup>5</sup> y G. Hinojosa<sup>1†</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>2</sup>Laboratorio Nacional de Livermool Lawrence, Berkeley, CA, EEUU.

<sup>3</sup>Universidad de Groningen, Holanda.

<sup>4</sup>Universidad de Montana, EEUU.

<sup>5</sup>Universidad de Gothenburg, Suecia.

<sup>6</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

La fotoionización de electrones ubicados en la capa de valencia provee valiosa información sobre la estructura electrónica de los átomos y es por ello que es de gran interés en el campo de la física atómica. El cloro es un caso muy interesante ya que se trata de un ión originado de un átomo de capa abierta que aún no había sido estudiado con luz sincrotrón de alta resolución. Adicionalmente, en astrofísica el ión de Cloro se usa como marcador del proceso estelar de la nucleosíntesis y también se usa para derivar abundancias. Se presentan resultados del proceso fundamental de la pérdida de un electrón de la capa de valencia del ión  $\text{Cl}^+$  por absorción de un fotón:  $\text{Cl}^+ + h\nu \rightarrow \text{Cl}^{2+} + e^-$  en el intervalo de energía  $h\nu$  de los fotones de 19.5 eV a 28 eV con una resolución de 20 meV. En un intervalo 22.8 eV a 25 eV se midió con una mejor resolución de 5 meV. El espectro consta de un conjunto de series de Rydberg sobrepuestas a un fondo originado por el proceso de ionización directo cuyo umbral está poblado de estructuras resonantes originadas desde el estado base y desde algunos estados metaestables del ión paterno. Adicionalmente se midieron las secciones transversales para este proceso de manera absoluta. Estos estudios se realizaron en la estación terminal IPB 10.0.1 del Advanced Light Source del Laboratorio Nacional Livermool Lawrence, Berkeley. <sup>†</sup>hinojosa@fis.unam.mx.

Financiamiento de DGAPA IN 113010, IN106813 y CONACYT CB-2011/167631.

## Fotoionización del catión de fósforo

Edgar Hernández<sup>1,6</sup>, A. Aguilar<sup>2</sup>, Olmo González<sup>3</sup>, D. Macaluso<sup>4</sup>, A. Antillón<sup>1</sup>, A. Morales-Mori<sup>1</sup>, A. M. Juárez<sup>1</sup>, D. Hanstorp<sup>5</sup> y G. Hinojosa<sup>1†</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>2</sup>Laboratorio Nacional de Livermool Lawrence, Berkeley, CA, EEUU.

<sup>3</sup>Universidad de Groningen, Holanda.

<sup>4</sup>Universidad de Montana, EEUU.

<sup>5</sup>Universidad de Gothenburg, Suecia.

<sup>6</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

Desde que Einstein propuso su famosa explicación del efecto fotoeléctrico y de su espectacular demostración por Millikan, la fotoionización es el fenómeno arquetipo de la física atómica. En este trabajo se presenta un estudio experimental con luz de sincrotrón del proceso fundamental de la pérdida de un electrón de la capa de valencia del ión  $P^+$  por absorción de un fotón:  $P^+ + h\nu \rightarrow P^{2+} + e^-$ . En astrofísica, la identificación espectroscópica de los iones originados de iones de la tercera fila como  $S^+$ ,  $P^+$ ,  $Cl^+$  y  $Ar^+$  es importante en la determinación de las abundancias de estos elementos que a su vez son resultado del proceso de nucleosíntesis de las estrellas. Estos estudios se realizaron en la estación terminal IPB 10.0.1 del Advanced Light Source del Laboratorio Nacional Livermool Lawrence, Berkeley. Al momento de escribir este resumen se tienen resultados preliminares en el intervalo de energía de los fotones de 20 eV a 60 eV con una resolución de 100 meV. En el intervalo de 18 eV a 25 eV se midió con una mayor resolución de 35 meV. El espectro consta de un fondo aparentemente anómalo que exhibe un estructura pronunciada cerca del umbral y que probablemente se deba a la ionización directa no resonante o a la acumulación de picos en esta región específica del espectro. Se planea en breve refinar estas mediciones a mayor resolución, así como de obtener la sección eficaz total de este proceso.

†hinojosa@fis.unam.mx

Financiamiento de DGAPA IN 113010, IN106813 y CONACYT CB-2011/167631.

P29

## Secciones totales transversales de despojo electrónico por colisión con $N_2$ y $O_2$ de aniones de metano a energías de 0.4 a 10 keV

L. Hernández<sup>1</sup>, Edgar Hernández<sup>1,3</sup>, M. Salazar<sup>2</sup>, A. Chávez<sup>2</sup>, C. Martínez-Flores<sup>1</sup>, L. N. Trujillo-López<sup>1</sup>, L. Hipólito<sup>3</sup> y G. Hinojosa<sup>1†</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>2</sup>Centro de estudios Universitarios en Ciencias e Ingenierías de la Universidad de Guadalajara.

<sup>3</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

Se presenta una técnica nueva para generar haces de iones negativos con una fuente de iones de filamento tipo colutrón<sup>®</sup>. Con esta técnica se generó un haz de  $CH_4^-$  que se usó para medir secciones totales  $\sigma_{-10}$  de despojo electrónico por colisión con  $N_2$  y  $O_2$ , por ejemplo:  $CH_4^- + N_2 \rightarrow CH_4^0 + N_2^* + e^-$ . Las secciones son absolutas y se verificaron con tres métodos de medición diferentes: (1) el método del aumento de la señal con la combinación de dos multiplicadores de electrones (ME), (2) de atenuación del haz y (3) de aumento de señal con la combinación de un ME y un detector de Faraday. Adicionalmente, para comprobar la reproducibilidad del método, se midió  $\sigma_{-10}$  para el sistema  $H^- + O_2 \rightarrow H^0 + O_2^* + e^-$ . Se presentan resultados en el intervalo de energía de 400 eV a 10000 eV que muestran un comportamiento que se aleja del modelo lineal con la energía de colisión. Las secciones en  $N_2$  y  $O_2$  muestran una diferencia significativa a bajas energías. Este proceso es una fuente de electrones en plasmas y también es de relevancia en el modelaje de plasmas de bajas energías y en particular en el modelaje de la atmósfera de Titán.

Financiamiento de DGAPA IN 113010 y IN IN106813.

## **Trampa magneto-óptica basada en una celda de vidrio.**

Eslava del Río Argüelles, era\_xd8@hotmail.com, (Instituto de Física UASLP); Eduardo Uruñuela Castillero, jeuc233@gmail.com, (Universidad de Guadalajara); Saeed Hamzeloui, s.hamzeloui@gmail.com, (Instituto de Física UASLP); Mónica Gutiérrez, monicag@ifisica.uaslp.mx, (Instituto de Física UASLP); Eduardo Gómez García, egomez@dec1.ifisica.uaslp.mx, (Instituto de Física UASLP); Instituto de Física, UASLP

El interés actual del laboratorio es estudiar la interacción de átomos fríos con materiales en bulto. La implementación de una nueva trampa magneto-óptica es esencial para esto. Este nuevo sistema cuenta con un tamaño muy conveniente y nos permite liberarnos de las corrientes de Eddy que se generan al apagar el campo magnético rápidamente. La trampa está basada en una celda de vidrio que nos brinda un mejor acceso óptico para experimentos posteriores. El sistema de imagen aumenta la eficiencia de colección un factor de 3 y la resolución en un factor de 2.

## **Simulación monte carlo del transporte de radiación en un acelerador lineal de uso médico**

José M. Lárraga Gutiérrez  
Laboratorio de Física Médica, Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía  
Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

En el presente trabajo se muestra la simulación Monte Carlo de un acelerador lineal de uso médico. La geometría y los materiales del acelerador (proporcionados por el fabricante) se incluyeron en detalle en la simulación. Para la simulación del transporte de radiación se usó la biblioteca EGSnrc y BEAMnrc (<http://www.irs.inms.nrc.ca/EGSnrc>). Se determinó que el haz primario de electrones que incide en el blanco tiene una energía cinética de 6.1 MeV con una dispersión gaussiana en intensidad de 1.8 mm (FWHM). Se registró un espacio fase con la información del estado (posición, energía y dirección) de las partículas que emite el acelerador. Se obtuvo información física como la distribución espectral, espacial y angular de las partículas. Los resultados de la simulación Monte Carlo se verificaron indirectamente comparando cálculos de distribuciones de dosis en agua con medidas experimentales encontrando un excelente acuerdo entre la dosis calculada y medida (< 2%). Finalmente, se muestra las aplicaciones de los resultados de la simulación en la comprensión de la simetría de campos de radiación en condiciones de no referencia.

## Efectos de confinamiento en la polarización del espín en cationes de la primera fila de metales de transición

*Mayra Lozano Espinosa, Jorge Garza Olguín, Marcelo Galván Espinosa*

Departamento de Química,  
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa,  
Av. San Rafael Atlixco, CP 09340, México D. F.

Por medio de un método basado en la solución numérica de las ecuaciones de Kohn-Sham espín polarizado no relativistas para átomos, se estudiaron cationes de la primera fila de metales de transición. Se utilizó una aproximación no local (Becke88) para el potencial de intercambio y correlación. Para todos los cationes estudiados en este trabajo ( $\text{Sc}^{3+}$ ,  $\text{Ti}^{4+}$ ,  $\text{V}^{2+}$ ,  $\text{V}^{3+}$ ,  $\text{V}^{4+}$ ,  $\text{V}^{5+}$ ,  $\text{Cr}^{2+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Cr}^{6+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{1+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{5+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{3+}$ ,  $\text{Cu}^{1+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ), se realizaron cálculos variando el radio de confinamiento ( $R_c$ ) desde 2 hasta 12 u.a. A diferencia de los átomos neutros cuyas propiedades convergen a las del sistema no confinado para valores de  $R_c$  de alrededor de 12 u.a., los cationes alcanzan dicha convergencia para valores de  $R_c$  cercanos a 6 u.a.. Se presentan resultados comparativos de energías de apareamiento y de potenciales de espín para los iones libres ( $R_c=12$  u.a.) y en condiciones de confinamiento extremo ( $R_c=2$  u.a.). En lo que se refiere a la polarizabilidad y de acuerdo con lo esperado intuitivamente, los resultados indican una dependencia menos marcada con el confinamiento para los iones si se compara con el comportamiento de los átomos neutros.

## Proposed measurement of the expansion of an atomic wave packet

S. Hamzeloui, M. Gutiérrez, V. Valenzuela, L. Castaños, E. Gomez  
Instituto de Física, UASLP, San Luis Potosí, SLP, México

Quantum Mechanics determine the expansion of an atomic wave packet. The expansion looks quite different for an initial pure state compared to a mixed state. The thermal atoms in a MOT expand as a mixed state, but a projective measurement can change that into something closer to a pure state expansion. We propose using cold atoms in free fall in the presence of a magnetic field gradient. We drive transitions between hyperfine levels that work as a projective position measurement. The wave packet expansion will be determined by the visibility of the Rabi oscillations of a second microwave pulse.

## **Estructura electrónica del óxido de itrio sintetizado por sustitución química.**

Isaac Enrique Díaz Ramos, S. Valdez

Instituto de Ciencias Físicas-UNAM Campus Morelos. Av. Universidad s/n. Col. Chamilpa. CP 62210. Cuernavaca, Morelos México.

El óxido de itrio es un material con buena estabilidad química, alta rigidez dieléctrica y una alta resistencia a la degradación electroquímica. De tal manera que el óxido de itrio, promete evitar la degradación electroquímica en la forma de películas delgadas. Polvos de óxido de itrio han sido sintetizados mediante una reacción química de sustitución entre el nitrato de itrio e hidróxido de amonio y una posterior oxidación a 800°C. La estructura electrónica y cristalina del óxido de itrio estequiométrico es estudiada experimentalmente comparándose con resultados reportados para el óxido de itrio obtenido por presión isostática en caliente (PIC). El análisis experimental de la estructura electrónica ha sido realizado mediante espectroscopía de rayos X, mientras que mediante difracción de rayos X de polvo por el método de Rietveld se ha determinado la estructura cristalina. El rendimiento total en los bordes K y L de los átomos de itrio, y en el borde K de los átomos de oxígeno, a través de las mediciones del rendimiento total ha dado acceso a estados vacíos de diferentes orbitales en la banda de conducción, en particular para el óxido de itrio obtenido por PIC.

P25

## **Diseño de un sistema para dosimetría de neutrones**

Pablo Cerón<sup>a</sup>, Teodoro Rivera<sup>a</sup>, Lydia Paredes<sup>b</sup>, José Díaz-Góngora<sup>a</sup>, Álvaro Sánchez<sup>c</sup>, Hector René Vega-Carrillo<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada-IPN Legaria 694 Col. Irrigación, México, D.F., 11500, Mexico.

<sup>b</sup>Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares Carretera Mexico-Toluca s/n, Ocoyoacac, 52750, México.

<sup>c</sup>Escuela Superior de Física y Matemáticas Av. Instituto Politécnico Nacional s/n Edificio 9, U.P. Adolfo López Mateos Col. San Pedro Zacatenco, Del. Gustavo A. Madero, México, D.F

<sup>d</sup>Universidad Autónoma de Zacatecas Unidad Académica de Estudios Nucleares, Zacatecas, Zac., México

Actualmente se dispone de varios sistemas de detección de neutrones, tales como contadores proporcionales basados en BF<sub>3</sub>, He<sub>3</sub> y espectrómetros de esferas Bonner para caracterizar el espectro de diversas fuentes de neutrones. Sin embargo, el costo y la complejidad de la implementación de dichos sistemas los hace poco asequibles para fines dosimétricos. Por estas razones se propone un sistema de detección de neutrones compuesto por un medio moderador de parafina que forma un arreglo 4 $\pi$  (esferas) y de varios pares de dosímetros termoluminiscentes TLD 600/TLD 700. Para conocer la

respuesta de los dosímetros se irradiaron con una fuente de Co 60 (radiación gamma), con una dosis absorbida de 1 Gy y con una fuente de neutrones de PuBe con dosis de 800 pGy. También se caracterizó la respuesta del sistema dosimétrico (dosímetros y moderador) ante la presencia de la fuente de neutrones. Estos detectores serán empleados como monitores pasivos de radiación en una sala de radioterapia con acelerador lineal.

[victceronr@hotmail.com](mailto:victceronr@hotmail.com)

## Participantes

Vahide Abediyeh  
vahide,abediye@gmail.com  
Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP)

Acosta Zepeda Carlos  
carloze.caz@gmail.com  
Universidad Autónoma Metropolitana  
*Me interesa hacer mi tesis en el tema interacción de radiación-materia y también hacer una estancia en algún laboratorio dedicado a nanoestructuras donde pueda estudiar este tipo de interacción.*

Alejandro Amaya Tapia  
jano@fis.unam.mx  
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM  
Av. Universidad s/n, Col. Chamilpa, Cuernavaca, Morelos, CP 62251

Ma. Nieves Arias Tellez  
ntellez.005@gmail.com  
Instituto de Física de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Fidel Alejandro Batista Romero  
fabr@uaem.mx  
Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Yessica Yazmin Calderon Segura  
ycalderons@uaem.mx  
CIICAp-UAEM

David Castañeda Valle  
casvada@gmail.com

Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa

Luis Octavio Castaños Cervantes  
loccj@yahoo.com  
Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas (IIMAS), UNAM

Eslava del Río  
eslavaxd@gmail.com  
Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

Pablo Víctor Cerón Ramírez  
[victceronr@hotmail.com](mailto:victceronr@hotmail.com)  
CICATA-IPN Legaria  
Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada-IPN Legaria 694 Col. Irrigación, México, D.F.

Cecilia Díaz García  
cecy@xanum.uam.mx  
UAM-Iztapalapa

Isaac Enrique Díaz Ramos  
isaacdiaz22@gmail.com  
Instituto de Ciencias Físicas. UNAM.

F. Javier Domínguez Gutiérrez  
javier@fis.unam.mx  
Instituto de Ciencias Físicas – UNAM

Isidoro García Cruz  
igarcia@imp.mx  
Instituto Mexicano del Petróleo

*Se solita estudiantes de Posgrado para hacer investigación en:*

*1. Dinámica molecular cuantica de hidratos de metano y CO<sub>2</sub>.*

*2. Dinàmica molecular y estructura electrnic de Líquidos Iónicos para inhibir la interacción lignina-celulosa.*

*3. Modelaciòn se soporte y catalizadores para hidrodesulfuración.*

Mónica Gutiérrez Galán  
monicag@ifisica.uaslp.mx

Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Arturo Guzman  
soho60@hotmail.com  
Facultad de Ciencias UNAM

Saeed Hamzeloui  
[s.hamzeloui@gmail.com](mailto:s.hamzeloui@gmail.com)  
Instituto de Fisica, Universidad Autonoma de San Luis Potosi (UASLP)  
Nahúm Méndez Alba  
nahum@xanum.uam.mx  
Universidad Autónoma Metropolitana. Unidad Iztapalapa

M.I. Salomón García Paredes  
salomon.garcia@uaem.mx  
Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

Jorge Oswaldo Gómez Muñoz  
osw.gom89@gmail.com  
Facutad de Ciencias, UNAM

Lorenzo Hernández Díaz  
lorentz@fis.unam.mx  
Instituto de Ciencias Físicas – UNAM

Jose Luis Hernández Pozos  
jllhp@xanum.uam.mx  
Universidad Autonoma Metropolitana-Iztapalapa

*Se busca colaboraciones tanto a nivel investigador, así como estudiantes de posgrado, interesados en los siguientes temas:*

*i) Cálculo y/o realización de experimentos de transmitancia de capas delgadas de nanoestructuras amorfas o cilíndricas embebidas en diferentes matrices dieléctricas.*

*ii) Modelación y construcción de un láser de Ti:zafiro para producir pulsos de femtosegundos creando el amarre de modos por efecto Kerr.*

*Se busca colaboraciones tanto a nivel investigador, así como estudiantes de posgrado, interesados en los siguientes temas:*

*i) Cálculo y/o realización de experimentos de transmitancia de capas delgadas de nanoestructuras amorfas o cilíndricas embebidas en diferentes matrices dieléctricas.*

*ii) Modelación y construcción de un láser de Ti:zafiro para producir pulsos de femtosegundos creando el amarre de modos a partir de efecto Kerr.*

Rocio Jauregui Renaud  
rocio@fisica.unam.mx  
Instituto de Fisica, Universidad Nacional Autonoma de Mexico

José Jiménez Mier y Terán  
jimenez@nucleares.unam.mx  
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Jose Manuel Larraga Gutierrez  
jlarraga@innn.edu.mx  
Instituto Nacional de Neurologia y Neurocirugia

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

Carlos Lira Galeana  
clira@imp.mx  
Instituto Mexicano del Petróleo

Oscar Lopez Hernandez  
oscar.lopez@ciencias.unam.mx

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Mayra Lozano Espinosa  
mlozanoespinosa@gmail.com  
Universidad Autónoma Metropolitana

Adriana Milena Lozano Fomtalvo  
alozanofomtalvo@gmail.com  
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM.

César Martínez Flores  
cesar@fis.unam.mx  
Instituto de Ciencias Físicas – UNAM

Mecalco López Jesús Giovanni  
servero\_x2001@hotmail.com  
Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa  
(UAM-I)

Nahum Mendez Alba  
nahum@xanum.uam.mx  
Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa

Morales Mendéz José Guadalupe  
jose\_gmm@hotmail.com  
UAM Iztapalapa  
*Me encuentro en el proceso de admisión al posgrado en ciencias física de la UAM, y me interesa saber sobre temas como espectroscopia, física de plasma por citar los de mayor interés.*

Cristian Mojica  
xtianadan@gmail.com  
Instituto de Ciencias Nucleares. UNAM

Rodrigo Morales Cueto  
rmcueto@uaem.mx  
Centro de Investigaciones Químicas, UAEMor

Horacio Olivares Pilón  
horop@nucleares.unam.mx

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Esteban de Jesús Pardo Luengaz  
esteban.pardo@uaem.mx  
Centro de investigación en ingeniería y ciencias aplicadas del (CIICAp) de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM)

Fernando Ramírez Martínez  
ferama@nucleares.unam.mx  
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

María del Carmen Ruiz González  
m.ruiz.g@outlook.com  
Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Francisco Salces Cárcoba  
pacosalces@gmail.com  
Instituto de Física UASLP

Jacques Soullard  
soullard@fisica.unam.mx  
Instituto de Física, UNAM

Dr. Guo-Hua Sun  
sunghdb@yahoo.com  
Centro Universitario Valle de Chalco Universidad Autónoma del Estado de México

Natalia Luisa Trujillo Lopez  
natalia@fis.unam.mx  
Instituto de Ciencias Físicas – UNAM

Bruno Ullrich  
bruno.ullrich@yahoo.com  
UNAM

Bernardo Antonio Zúñiga Gutiérrez  
bzuniga.51@gmail.com  
Centro de Investigaciones y Estudios Avanzados del I. P N. unidad Zacatenc

## Índice alfabético

Abediyeh, V.....	29	Hanstorp, D.....	33
Acosta-Zepeda, C.....	25, 30	Haro-Poniatowski, E.....	25, 27, 30
Aguilar, A.....	33	Hernández Gómez, S.....	28
Alvarez-Ramírez, F.....	19	Hernández Lamonedá, R.....	22
Amaya Tapia, A.....	24	Hernández-Pozos, J. L.....	26, 30, 31
Antillón, A.....	22, 24, 25, 33	Hernández, E.....	33, 34
Arias, Ma. N.....	28, 30	Hernández, L.....	30, 31, 34
Batina, N.....	27, 30	Herrera-Pérez, G.....	20
Batista Romero, F. A.....	22	Hinojosa, G.....	33, 34
Bokhimi, X.....	12	Hipólito, L.....	34
Burlak, G.....	17, 32	Jauregui, R.....	15
Cabrera-Trujillo, R.....	26, 29, 31	Jiménez-Mier, J.....	16, 20, 28, 29
Calderón-Segura, Y.....	17	Juárez, A. M.....	27
Camacho Quintana, A.....	18	Köster, A. M.....	23
Carabalí Sandoval, G.....	20	Lárraga Gutiérrez, J. M.....	35
Castañeda Valle, D.....	17	Ley-Koo, Eugenio.....	12
Castaños Cervantes, L. O.....	36	Lira-Galeana, C.....	19
Cervera-Villanueva, J.M. Jr.....	21	López-Hernández, O.....	16, 28
Chávez, A.....	34	Lozano Espinosa, M.....	36
Chavira, E.....	20	Lozano F., A.....	27
Cruz, S. A.....	4, 10, 14, 19	Macaluso, D.....	33
del Río Argüelles, E.....	35	Martínez Pardo, M. E.....	11
Denlinger, J.....	20	Martínez-Flores, C.....	26, 34
Díaz García, C.....	14	Martínez-Mares, M.....	14
Díaz Ramos, I. E.....	37	Martínez, C.....	32
Díaz-Góngora, J.....	37	Mecalco-López, J. G.....	25, 30
Domínguez-Gutiérrez, F. J.....	31	Méndez Fragoso, R.....	20
Domínguez-Rocha, V.....	14	Méndez-Alba, N.....	31
Escobar Alarcon, L.....	27	Mielke, E. W.....	17
Espinoza, J.....	28, 30	Mojica, C.....	16, 28, 29
Flores Moreno, R.....	13	Morales Reyes, I.....	27
Flores-López, S.....	19	Morales-Cueto, R.....	21
Flores-Mijangos, J.....	16, 28, 29	Morales-Méndez, J. G.....	27
Galinskiy, I.....	28	Morales-Mori, A.....	33
Galván Espinosa, M.....	36	Morales-Reyes, I.....	30
García Hernández, E.....	13	Olalde-Velasco, P.....	20
García Paredes, S.....	32	Olivares Pílon, H.....	18
García-Cruz, I.....	19	Ortega-Rodríguez, A.....	19
Garza, J.....	13, 36	Paredes, L.....	37
Geudtner, G.....	23	Ramírez-Martínez, F.....	16, 28, 29
Gómez Muñoz, J. O.....	30	Rivera, T.....	37
Gómez, E.....	16, 28, 29, 30, 32, 35, 36	Rodríguez-Córdoba, W.....	21
González, O.....	33	Rojas Ruiz, E. M.....	26
Gutiérrez, M.....	35, 36	Ruiz, Ma. del C.....	28, 30
Hamzeloui, S.....	16, 35, 36	Sabin, John R.....	10

Salazar, M.....	34	Uruñuela Castellero, E.....	29
Salces, F.....	32	Valdez, S.....	37
Sánchez, A.....	37	Valencia, D.....	19
Santamaria, R.....	12	Valenzuela, V.....	16, 36
Soullard, J.....	12	Vargas, R.....	13
Sun, Guo-Hua.....	13	Vega-Carrillo, H. R.....	37
Trujillo-López, L. N.....	29	Yang, W. L.....	20
Ullrich, B.....	22	Zúñiga Gutierrez, B. A.....	23