

70

Taller de Dinámica y Estructura de la Materia



13 al 16 de junio de 2016
Facultad de Ciencias, UNAM
Cd. de México



7° Taller de Dinámica y Estructura de la Materia

Facultad de Ciencias, UNAM

13 al 16 de junio de 2016

Ciudad Universitaria

Ciudad de México, México.

Comité Organizador Local:

- Dr. Fernando Ramírez Martínez, *Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM.*
- Dr. Ricardo Méndez Fragoso, *Facultad de Ciencias, UNAM.*

Comité Asesor:

- Dr. Antonio M. Juárez Reyes, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM.*
- Dr. Daniel Sahagún Sánchez, *Instituto de Física, UNAM.*
- Dr. Jorge A. Seman, *Instituto de Física, UNAM.*
- Dr. José Luis Hernández Pozos, *Departamento de Física, UAM-I.*
- Dr. Remigio Cabrera Trujillo, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM.*

Comité Académico Asesor:

- Carlos Bunge Molina, *Instituto de Física, UNAM.*
- Eugenio Ley Koo, *Instituto de Física, UNAM.*
- Jaime de Urquijo Carmona, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM.*
- Rocío Jáuregui Renaud, *Instituto de Física, UNAM.*
- Salvador A. Cruz Jiménez, *Departamento de Física, UAM-I.*

PREFACIO

El Taller de Dinámica y Estructura de la Materia (TaDEM) es un espacio de discusión e intercambio de ideas entre especialistas y estudiantes en las áreas de física atómica, óptica y molecular en México. En esta ocasión el 7° TaDEM se realiza por primera vez en la Facultad de Ciencias de la UNAM, misma que ha sido el semillero de muchos científicos en el país. La importancia del TaDEM se refleja en la activa participación de la comunidad que en esta ocasión presenta 63 trabajos en temas de investigación de vanguardia.

La versatilidad del TaDEM presenta diferentes tipos de ponencias. Entre ellas se encuentran las presentaciones tipo tutorial en las que especialistas explican detalles de varias líneas de investigación con la finalidad de que estudiantes e investigadores las puedan entender con mayor detalle y en futuro puedan establecer vínculos de colaboración. También están las conferencias plenarias en las que especialistas muestran los últimos avances de algunas líneas de investigación relacionadas con los temas del taller. En esta ocasión también habrá una conferencia plenaria y tutorial impartida por el Dr. Julio Barreiro de University of California San Diego, un reconocido investigador originario de México. Finalmente, se imparten conferencias cortas y presentaciones de carteles en las que investigadores y estudiantes muestran los últimos avances de investigaciones de alta calidad.

Como todos los años, el TaDEM otorga un galardón a un distinguido miembro de la comunidad científica en el área. En esta ocasión el Comité Académico conformado por los Doctores Carlos Bunge, Eugenio Ley Koo, Jaime de Urquijo, Rocío Jáuregui y Salvador Cruz, basándose en la distinguida trayectoria académica de diferentes propuestas hechas por la comunidad, decidió otorgar el galardón al Dr. José Ignacio Jiménez Mier y Terán. ¡Felicidades Pepe!, como muchos lo llamamos.

Finalmente queremos agradecer los recursos financieros y el apoyo administrativo por parte del Instituto de Ciencias Físicas (ICF-UNAM), Instituto de Ciencias Nucleares (ICN-UNAM), Instituto de Física (IF-UNAM), Universidad Autónoma Metropolitana (UAM) y la Facultad de Ciencias (FC-UNAM). Cabe destacar que el TaDEM es una actividad académica cuya importancia radica en sus participantes. Además, a lo largo de sus diferentes ediciones se ha conformado una comunidad en constante crecimiento, y como se puede observar en los trabajos, cada vez se tiene un mayor impacto a nivel internacional debido a la vinculación que se tiene con instituciones del extranjero. Los organizadores nos sentimos honrados de servirles como anfitriones en esta ocasión.

Ciudad de México, 9 junio de 2016.
Comité organizador local:

Dr. Fernando Ramírez Martínez
Dr. Ricardo Méndez Frago

Semblanza

JOSÉ IGNACIO JIMÉNEZ MIER Y TERÁN



Los miembros del Comité Académico Asesor han decidido de manera unánime celebrar la carrera del Dr. José Ignacio Jiménez Mier en reconocimiento a la calidad y a la constancia de su trabajo.

Nuestro galardonado nació en el entonces Distrito Federal en 1956 y estudió la carrera de física en la Facultad de Ciencias de la UNAM, al término de la cual (1981) recibió la medalla "Gabino Barreda", máximo reconocimiento al mérito universitario que esta casa de estudios otorga a sus alumnos con el más alto promedio de calificación. Es importante destacar que Pepe, como lo conocemos todos, fue discípulo del Dr. Virgilio Beltrán, de quien se expresa con gran cariño y respeto, como ahora nos referimos a Pepe todos los que hemos tenido la suerte de haber sido formados o que hemos colaborado con él. A continuación, Pepe realizó su maestría (1983) y después obtuvo su doctorado (1987) por la Universidad de Yale, E. U. A., con el trabajo "Angular Distribution of Fluorescence from Helium II ($n=2$) Produced by Photoionization" bajo la dirección de la profesora C. Denise Caldwell y en donde reporta el primer experimento "completo" de fotoionización en helio.

Tras terminar su doctorado, Pepe realizó una estancia posdoctoral en el Oak Ridge National Laboratory y posteriormente, en 1987, se incorporó al entonces Centro de Estudios Nucleares, el hoy Instituto de Ciencias Nucleares. Ha realizado estancias como investigador invitado en la Universidad Estatal de Nueva York, en Stony Brook; en la Universidad de Tulane en Nueva Orleans; en el Advanced Light Source (ALS) de la Universidad de California en Berkeley (numerosas ocasiones); en el Center for Advanced Microstructures and Devices (CAMD) en la Universidad Estatal de Luisiana; en el Synchrotron Radiation Center en Wisconsin; en el National Bureau of Standards (hoy NIST) en Gaithersburg; y en la Universidad Central de Florida. Es miembro regular de la Sociedad Mexicana de Física, de la American Physical Society, de la Academia Mexicana de Ciencias y de la American Chemical Society.

En sus trabajos de investigación, Pepe ha cubierto técnicas de resonancia electrónica paramagnética, resonancia magnética láser, radiación de sincrotrón, y en la década reciente estudios de espectroscopia láser con átomos a temperatura ambiente y confinados en trampas magneto-ópticas. Ha sido usuario de fuentes de radiación de sincrotrón por más de 27 años. Su trabajo en fase gaseosa incluye el primer experimento de fotoionización completa en helio (Phys. Rev. Lett. 57, 2260 1986. Phys. Rev. A 44, 5615, 1991), un estudio detallado de efectos intra-atómicos en la dinámica de fotoionización de capas internas de manganeso atómico (Phys. Rev. Lett. 61 2592, 1988, Phys. Rev. A 40, 3712, 1989, Phys. Rev. B 48, 12425, 1993), y efectos de polarización del carozo en la excitación resonante $1s \rightarrow np$ del berilio atómico (J. Phys. B 32, 4301, 1999, J. Phys. B 34, L693, 2001). Su trabajo de investigación en materia condensada incluye una comparación entre experimento y teoría para el estudio de la dispersión resonante inelástica de rayos X en la orilla L_{2,3} de compuestos de metales de transición (Phys. Rev. B 59 2649, 1999), la primera observación de la emisión no-dipolar de rayos X tras la producción de un agujero 2p en metales de transición (J. Phys. B36, L173, 2003), y la primera observación de la transición de Mott-Hubbard al aislante de transferencia de carga en metales de difluoruros de metales de transición (Phys. Rev. B 83, # 241102, 2011). Hoy en día Pepe es uno de los principales promotores del proyecto de desarrollo de una fuente de radiación de sincrotrón en México, proyecto al que le dedica toda su pasión y entusiasmo a pesar de los enormes obstáculos a los que un proyecto de esta envergadura se enfrenta en un país como el nuestro.

El es también el fundador y líder principal del Laboratorio de Átomos Fríos del Instituto de Ciencias Nucleares, el primer laboratorio de este tipo en la UNAM y el tercero en México. Bajo su liderazgo, en este laboratorio se ha desarrollado una amplia experiencia en el desarrollo y utilización de láseres de diodo para la realización de experimentos de espectroscopia de alta resolución en átomos de rubidio a temperatura ambiente (Opt. Commun. 282, 887, 2009. Phys. Rev. A 89, # 042502, 2014), incluyendo la primera observación de la transición cuadrupolar eléctrica $5p \rightarrow 6p$ en rubidio atómico (Phys. Rev. A 92, # 042511, 2015).

Su labor docente ha sido franca, constante y rigurosa. Sus cursos de Óptica y de Física Atómica y Materia Condensada se saturan cada semestre por la excelente reputación que se ha forjado entre los estudiantes de la Facultad de Ciencias de la UNAM. La eficiencia de aprobación en su curso es muy

alta comparada con el resto de las materias de la carrera de física debido a la claridad de sus explicaciones. Por si esto fuera poco, Pepe logra con enorme éxito contagiar a los estudiantes que asisten a sus cursos la gran pasión que siente por la física experimental y tiene como consecuencia un flujo continuo de estudiantes dispuestos a incorporarse a trabajar no sólo en el Laboratorio de Átomos Fríos, sino en cualquiera de los muchos laboratorios de investigación de la UNAM.

Una de las características principales que definen su trabajo consiste en que Pepe siempre ha acompañado sus trabajos y resultados experimentales con sus propios cálculos y análisis teóricos. Además de la alta calidad de su trabajo experimental, siempre suplementado por un pleno entendimiento teórico, ha contribuido fuertemente a la creación de infraestructura material y de recursos humanos en el área de la física atómica, de la materia condensada y del estudio de la interacción de la radiación con la materia durante décadas. En el Laboratorio de Átomos Fríos del ICN ha integrado un equipo con jóvenes colegas, e incorporado y preparado estudiantes de licenciatura y posgrado, mediante la construcción de un laboratorio en donde se realiza investigación de frontera, se forman jóvenes científicos en torno a esta misión y se fomenta una intensa y estrecha colaboración tanto con colegas teóricos como con otros grupos experimentales.

Los resultados recientes de este grupo de trabajo permitieron muy recientemente observar gases atómicos a temperatura ambiente realizando transiciones cuadrupolares eléctricas en una excitación de dos fotones. Este trabajo es novedoso, de frontera y cien por ciento realizado en México, desde su concepción. Pepe también se ha preocupado por apoyar el intercambio de ideas entre nosotros participando en la organización de talleres como el mismo TADEM.

En resumen, por ser un incansable promotor del desarrollo de la Física Atómica en general y de los átomos fríos en particular en México; un extraordinario maestro e implacable crítico de la barroca realidad de nuestro país; y un excelente colega y amigo, el Comité Académico Asesor del TaDEM presenta el reconocimiento de este año a la trayectoria del Dr. José Ignacio Jiménez Mier.

Ciudad de México, 9 junio de 2016.
Dr. Fernando Ramírez Martínez

PROGRAMA

Auditorio Yelizcalli, de la Facultad de Ciencias, UNAM.

	Lunes 13	Martes 14	Miércoles 15	Jueves 16
8:30 - 9:00	Registro	Registro	Registro	
9:00 - 9:30	Apertura			
9:30 - 10:00	P1: José I. Jiménez	T2: Andrea Valdés	T3: Jorge Seman	T4: Crescencio García Segundo
10:00 - 10:30				
10:30 - 11:00	O1: A. Camacho-Guardian	O6: Vahideh Abediyeh	O11: Eugenio Ley-Koo	O15: O. Lazo-Arjona
11:00 - 11:30	Café	Café	Café	Café
11:30 - 12:00	T1: Daniel Sahagún	P3: Mayo Villagrán	I: Julio Barreiro	P4: Karen Volke
12:00 - 12:30		O7: Adrian Ortega		O16: Ana Valdés
12:30 - 13:00		O8: John A. Franco		O17: J. Reyes-Gasga
13:00 - 13:30	O2: Saeed Hamzeloui			
13:30 - 14:00	Comida	Comida	Comida	Comida
14:00 - 14:30				
14:30 - 15:00				
15:00 - 15:30				
15:30 - 16:00				
16:00 - 16:30	O3: C. Martínez-Flores	Reunión	O12: Lina M. Hoyos	O18: Carlos F. Bunge
16:30 - 17:00	P2: Victor Velázquez	O9: R. Hernández Esparza	O13: M. A. García	O19: C. A. Ortiz Cardona
17:00 - 17:30		O10: A. F. Jiménez González	O14: C. Mojica-Casique	O20: J. García
17:30 - 18:00	O4: Beatriz Londoño	Carteles	Carteles	O21: M. A. Silva
18:00 - 18:30	O5: L.N. Trujillo-López			O22: Cristopher Hernández

Orales: 25 minutos + 5 de preguntas.
Plenarias: 1 hora.

Tutorial: 1 hora con 30 minutos.

ÍNDICE DE TRABAJOS

Prefacio	3
Semblanza: José Ignacio Jiménez Mier y Terán	4
Programa	7
Plenarias	
P1. Anisotropía en la interacción de átomos con luz	11
P2. Confinamiento e interacciones	12
P3. Aplicaciones atmosféricas, astronómicas y terrenales de láseres pulsados	12
P4. Trampas ópticas en el régimen mesoscópico	12
Conferencia invitada	
I. A fermionic simulator with ultracold atoms	13
Tutoriales	
T1. Técnicas para la Manipulación de Átomos Ultra-Fríos	14
T2. Una útil y sencilla herramienta para estudiar la dinámica de sistemas cuánticos abiertos	14
T3. Materia Ultrafría: cómo se produce y para qué sirve	15
T4. Interacción radiación materia y el fenómeno fototérmico a escala mesoscópica	16
Presentaciones orales	
O1. Fermiones dipolares en una bicapa de redes ópticas	17
O2. Dual atomic interferometry for reduced noise sensitivity	17
O3. Sección eficaz de fotoionización para el átomo de hidrógeno y litio bajo condiciones de confinamiento	18
O4. Formación y control de moléculas frías	19
O5. Estudio de la dinámica de moléculas diatómicas dentro del modelo de orbitales gaussianos esféricos flotantes	20
O6. Raman transitions using phase modulators	20
O7. Efficient quantum transport in disordered interacting many-body networks	21
O8. Microwave emulations and tight-binding calculations of transport in polyacetylene	21

O9. GPUAM: Una herramienta para el análisis de campos escalares y vectoriales derivados de la función de onda	22
O10. Interacción de una alanina con una superficie de grafeno	22
O11. Nuevas Relaciones de Recurrencia para Polinomios de Legendre con Asociatividad no Entera bajo Confinamiento Diédrico	23
O12. Estudio fundamental de la interacción de plasmas y gases con luz láser en el visible e infrarrojo medio	24
O13. Formación de Estructuras en Superficies de Ti y Ti-6Al-4V por el Bombardeo de Iones de Au	25
O14. Estudio de polarización por espectroscopia libre de Doppler de la transición prohibida $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$ en rubidio atómico	26
O15. Estudio experimental y teórico de la transición de dos fotones $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ en átomos fríos de Rubidio	27
O16. Fourier spectroscopy of a spin-orbit coupled Bose gas	28
O17. Microscopia electrónica del esmalte dental humano	29
O18. Estatus Actual de Interacción de Configuraciones para Átomos y Moléculas	31
O19. Towards High-Precision Measurement of Hyperfine Structure in the D2 Line of ^{133}Cs Atom Using an Ultra-Stable Laser	33
O20. Estructura electrónica del grafeno doble capa con dos aproximaciones	34
O21. Láseres de electrones libres y sus aplicaciones	35
O22. Effects of three-body collisions in a two-mode Bose-Einstein condensate	35

Posters

C1. Diseño de un láser de fabricación local en la configuración cat-eye	36
C2. Estados ligados y pares de Cooper de moléculas en redes ópticas en 2D	36
C3. Implementación del método de Kohn-Sham en un código diseñado para estudiar átomos confinados por paredes penetrables	37
C4. Global thermodynamics model for the critical properties of the superfluid (BEC) transition of a harmonically confined Bose gas	37
C5. Control para el Laboratorio de Átomos Fríos y Óptica Cuántica, IF-UNAM	38
C6. Sección eficaz para el proceso de Breit-Wheeler usando el Modelo Estándar Extendido (SME).	38
C7. Avances y Perspectivas del Laboratorio de Materia Ultrafría	39
C8. Trampa atómica con cavidad óptica para interferometría	40
C9. Corrimiento Stark AC dependiente del estado hiperfino	41

C10. Gravimetría con un modulador de fase	42
C11. Método de Hartree-Fock aplicado a átomos multielectrónicos confinados por un potencial finito	43
C12. Análisis de la transición $5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ en Rb para la optimización del anclado láser	44
C13. Estudio del efecto Autler-Townes en la transición cuadrupolar eléctrica $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$	45
C14. Observación y estudio de la transición prohibida $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{1/2}$ en rubidio atómico	46
C15. Comparación entre tres axicones utilizados para generar haces Bessel escalares	47
C16. Análisis experimental de una transición cuadrupolar eléctrica en átomos a temperatura ambiente usando un haz con estructura espacial	48
C17. Tercer coeficiente del virial para un sistema con interacciones de rango cero	49
C18. El efecto Autler-Townes en los espectros de ^{87}Rb atómico dentro de una trampa magneto-óptica (MOT).	50
C19. A DFT study of interaction between vanadium oxide and HY-zeolite	51
C20. Generalized absorption model for CO at high x-ray intensity	52
C21. Implementación de un tubo fotomultiplicador contador de fotones para la detección de la fluorescencia de 420 nm en experimentos de interacción multifotónica en rubidio atómico.	53
C22. Estudio de la interacción de líquidos Sinódicos con hidratos de metano con 15 y 20 moléculas de agua	54
C23. Identificación de operadores de desplazamiento de momento angular y cambio de especie entre polinomios de Lamé de una variable	55
C24. Interacción radiación-materia en nano-escala: fotones, termodinámica y coherencia	56
C25. Sistema Láser para Producir Luz Correlacionada Cuánticamente con Rubidio Atómico.	57
C26. Caracterización de un horno para calentar celdas de vidrio con vapor de rubidio	57

PLENARIAS

P1. Anisotropía en la interacción de átomos con luz

La radiación electromagnética es una de las herramientas más importantes con las que contamos para el estudio de la materia. La anisotropía que se puede generar en la interacción entre un átomo y la luz proporciona información especialmente relevante sobre el proceso. Esta anisotropía se debe a que tanto la dirección de propagación como la dirección de polarización de la luz juegan un papel determinante en el cálculo de los elementos de matriz de transición en estos procesos dinámicos. Esto ocurre aún en la región de validez de la aproximación dipolar eléctrica, en casos de excitación o decaimiento secuencial de los estados atómicos. En esta plática se presentarán ejemplos de la información que se obtiene del estudio de esta anisotropía y que puede ser observada en la distribución angular de los fragmentos o en la polarización de la luz que se emite en el decaimiento. Se mostrará cómo se pueden realizar “experimentos completos” de fotoionización acompañada de excitación del ion residual. También se discutirá un ejemplo de decaimiento Auger resonante en el que el electrón espectador polariza los electrones del carozo. Se presentarán también efectos de polarización de la luz en la distribución angular de los fotones que resultan del esparcimiento inelástico resonante en compuestos sólidos de metales de transición. Por último, se mostrarán resultados en los que la polarización en la excitación en dos pasos, en la que uno de ellos no corresponde a una transición dipolar eléctrica, permite el control de la población de estados magnéticos mediante el uso de reglas de selección más allá de la aproximación dipolar eléctrica.

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

Agradecimientos. Los resultados que aquí se presentan fueron posibles gracias al apoyo de varios proyectos de investigación del CONACyT y la DGAPA-UNAM. De igual manera, se agradece la participación entusiasta de estudiantes de licenciatura y posgrado en los cálculos y experimentos que se muestran.

P2. Confinamiento e interacciones

En esta contribución estudiamos el comportamiento de un sistema cuántico confinado bajo diferentes geometrías e interacciones. Estudiamos las transiciones entre varias estadísticas: Bose-Einstein a caótica, Poisson a caótica en función de la integrabilidad de la interacción y de la geometría del confinamiento. Hablamos de confinamientos óptico, nuclear y numérico para repasar la universalidad de la relación entre confinamiento e interacción.

Víctor Velázquez
Facultad de Ciencias, UNAM.

P3. Aplicaciones atmosféricas, astronómicas y terrenales de láseres pulsados

Al enfocar un pulso láser energético en el aire, se produce un plasma que se expande adiabáticamente. Este Plasma Inducido por Láser (PIL) lo hemos utilizado en el laboratorio de Fotofísica del CCADET para simular relámpagos, explosiones de estrellas y jets astrofísicos. Adicionalmente contaré aplicaciones más terrenales de estos PILs, en el crecimiento de películas delgadas, en la limpieza de superficies, en la propulsión láser y otras aplicaciones menos científicas pero más divertidas.

Mayo Villagrán Muniz
CCADET-UNAM.

P4. Trampas ópticas en el régimen mesoscópico

En esta plática se abordarán algunos aspectos de las fuerzas ejercidas por la luz. Se iniciará con una breve introducción de los principios físicos básicos en que se cimientan las trampas ópticas en el régimen mesoscópico y cómo el uso de haces de luz estructurados (haces con distribuciones complejas de intensidad y/o fase) ha permitido desarrollar nuevas técnicas de micromanipulación láser que superen en algún aspecto a sus predecesoras. Posteriormente, se discutirá una nueva trampa óptica: la trampa de haz Bessel enfocado (Focused-Bessel Trap), con la cual se pueden manipular en tres dimensiones partículas micrométricas de vidrio utilizando una lente de muy baja apertura numérica, en contraste con las pinzas ópticas convencionales. Por último, se discutirá el caso en que las fuerzas ópticas actúan sobre partículas nanométricas en una suspensión coloidal, lo cual induce comportamientos colectivos que dan lugar a efectos ópticos no-lineales. En particular, se mostrará la generación e interacción de haces de luz autocolimados en este tipo de medios, con fenómenos que hasta el momento no han sido reportados en otro tipo de sistemas.

Karen Volke Sepúlveda
Instituto de Física, UNAM.

CONFERENCIA INVITADA

I. A fermionic simulator with ultracold atoms

Exquisite individual control and imaging of ultracold fermionic atoms in optical lattices opens the door to powerful simulations of condensed-matter systems as well as for determining the electronic structure of molecules. In this brief workshop, starting from then fundamental concepts in the field of cold atoms, we will learn how to design this physical system in order to mimic and solve complex problems in physics and chemistry.

Julio Barreiro
*University of California,
San Diego, USA.*

TUTORIALES

T1. Técnicas para la Manipulación de Átomos Ultra-Fríos

A dos décadas de que fue lograda la Condensación de Bose-Einstein, han sido desarrollados varios métodos para manipular átomos ultra-fríos. El objetivo de éstas técnicas es crear elementos para manipular ondas de materia como fueron antes desarrollados para su contraparte de luz: divisores de haz, polarizadores y láseres. Con lo cual se han logrado avances importantes dentro de áreas de investigación como la metrología e información cuántica. Este taller es una introducción a dos de dichas técnicas: i. potenciales adiabáticos en promedio temporal [1] y ii. chips atómicos [2].

Daniel Sahagún Sánchez

Instituto de Física, UNAM.

[1] Lesanovsky, I., & Klitzing, von, W., Time-Averaged Adiabatic Potentials: Versatile Matter-Wave Guides and Atom Traps. *Phys. Rev. Lett.*, 99, 083001, (2007)

[2] Fortágh, J., & Zimmermann, C., Magnetic microtraps for ultracold atoms. *Reviews of Modern Physics*, 79, 235–283, (2007)

T2. Una útil y sencilla herramienta para estudiar la dinámica de sistemas cuánticos abiertos

La noción de sistemas cuánticos perfectamente aislados es una idealización que obstaculiza el estudio de un sinnúmero de fenómenos cuánticos interesantes, en particular aquéllos relacionados con la evolución del enredamiento bajo procesos de decoherencia. La inevitable interacción de un sistema con su entorno (o ambiente) lo convierte en un sistema abierto, cuya evolución temporal puede ser analizada empleando herramientas matemáticas apropiadas. Una de ellas es la llamada representación de Kraus, la cual es particularmente útil para estudiar la dinámica de sistemas enredados abiertos de varios qubits, en una amplia variedad de escenarios. En este tutorial se presentará una breve introducción a los operadores de Kraus y a los mapas cuánticos correspondientes. A manera de ejemplo, se mostrará su utilidad en el estudio de la distribución del enredamiento en sistemas abiertos sencillos de interés físico.

Andrea Valdés Hernández

Instituto de Física, UNAM.

T3. Materia Ultrafría: cómo se produce y para qué sirve

Desde su descubrimiento durante el primer tercio del siglo XX, los sistemas cuánticos macroscópicos se convirtieron en fenómenos paradigmáticos para la construcción de la Mecánica Cuántica. En efecto, su correcta descripción es considerada como un importante logro de la física moderna.

Jorge A. Seman
Instituto de Física, UNAM.

La física de bajas temperaturas recibió un nuevo impulso durante las décadas de los 80's y 90's cuando se desarrollaron nuevas técnicas de enfriamiento que permitieron alcanzar temperaturas tan bajas como algunos nanokelvin por encima del cero absoluto. Esto hizo posible la producción experimental de los gases cuánticos, tales como los condensados de Bose-Einstein y los gases degenerados de Fermi. Debido a su naturaleza cuántica y a su extraordinario nivel de control, los gases cuánticos han abierto escenarios únicos en la investigación de la superfluidez, de los sistemas cuánticos macroscópicos y de la física de la materia condensada.

En esta charla se presentarán los conceptos básicos de la física de la materia ultrafría y se describirán en modo general las técnicas actuales para producirlos. En particular, se explicará el fenómeno de la superfluidez y sus consecuencias. Finalmente, presentaremos algunos resultados recientes en el estudio de la dinámica de superfluidos a través de obstáculos.

T4. Interacción radiación materia y el fenómeno fototérmico a escala mesoscópica

La comprensión de los procesos de interacción radiación-materia van de la mano del nacimiento de la Mecánica Cuántica. Se asume que surge con el postulado que Planck hace para describir la radiación de cuerpo negro. A pesar de la dura crítica que Einstein hace a la Mecánica Cuántica, él mismo escribe un artículo publicado en 1916, en el cual de manera poco usual 'inventa' e introduce el sistema atómico de dos niveles. En el mismo artículo, de la mano del postulado del Principio del Balance Detallado, explica que dicho balance impone consideraciones de absorción y emisión de la radiación, como resultado de los procesos de interacción de la radiación con la materia. Para el efecto introduce los coeficientes A y B (coeficientes de Einstein) a partir de condiciones de necesidad y consistencia lógica con la ley de radiación de cuerpo negro. El resultado inesperado es que logra establecer una fina conexión entre los fundamentos de la teoría cuántica con la termodinámica: para que haya interacción se deben establecer condiciones de equilibrio termodinámico. Tomaron varios años y esfuerzos para entender el significado de esta afirmación y demostrar que la conexión postulada es correcta. Para ello fue necesario construir la Teoría de Electrodinámica Cuántica (QED). Las consecuencias de ese trabajo han sido muchas y han permitido realizar investigación profunda, así como abrir y responder un sinnúmero de interrogantes. Una de las preguntas más recurrentes que han resonado hasta nuestros días es: ¿qué tan pequeño puede ser un sistema para aún preservar la validez de la termodinámica clásica? Gemmer et.al., en 2004, responden parcialmente, indicando algunas de las condiciones cinéticas que se deben cumplir y proponen un método estadístico para poder responder que a nano-escala aún podemos hablar de temperatura en el sentido clásico. Es decir, ¿aún podemos hablar de temperatura clásica dentro del contexto de los nanomateriales? Sí, pero sólo parcialmente, pues necesitamos de una descripción granular cuya estadística parece no ser evidente. Hoy sabemos que, a partir de cierta escala, la conductividad térmica en el sentido clásico cambia con el tamaño del sistema y que cuando un nanomaterial está inmerso en un campo de radiación, las energías absorbida y emitida por éste sugieren que se produce un incremento local de la temperatura hasta alcanzar miles de grados centígrados y que dicho incremento depende tanto del tamaño del material como de la longitud de onda de excitación. Por su parte y de manera independiente Landau y Fröhlich, expresan la idea de que el proceso de interacción radiación materia implica la realización de trabajo sobre el sistema y que esto conlleva a un cambio en la energía interna del mismo, cuya persistencia es dependiente del tiempo de interacción.

Crescencio García-Segundo

*Centro de Ciencias Aplicadas y
Desarrollo Tecnológico, UNAM.*

PRESENTACIONES ORALES

O1. Fermiones dipolares en una bicapa de redes ópticas

Se estudian las fases en un sistema de moléculas fermiónicas confinadas en redes ópticas paralelas en presencia de un potencial armónico externo. La repulsión y atracción de la interacción dipolo-dipolo entre las moléculas da lugar a la formación de distintas fases; fases aislantes, superfluidas, órdenes espacial (ondas de densidad) y fases supersólidas, así como la formación de dímeros moleculares.

A. Camacho-Guardian
R. Paredes

Instituto de Física, UNAM.

O2. Dual atomic interferometry for reduced noise sensitivity

A well designed gravimeter (atomic interferometer) should be sensitive to accelerations and insensitive to external fluctuations, such as those produced by magnetic field noise. We combine two independent Ramsey type interferometers working on the $F=1, m=0$ to $F=2, m=0$ (clock) transition and the $F=1, m=-1$ to $F=2, m=1$ (two photon) transition in 87Rb . This dual interferometer maintains the sensitivity to acceleration and it has a point of minimum magnetic sensitivity at a tunable value between 0 and 3.2 G, which can be varied by changing the fraction of atoms in each interferometer.

Saeed Hamzeloui¹
Daniel Martinez¹
Vahideh Abediyeh¹
Nieves Arias¹
Eduardo Gomez¹
Victor Valenzuela²

¹*Instituto de Física, Universidad Autónoma de SLP.*

²*Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Autónoma de Sinaloa*

Funding from CONACYT, Fundación Marcos Moshinsky and UASLP.

O3. Sección eficaz de fotoionización para el átomo de hidrógeno y litio bajo condiciones de confinamiento

La respuesta de los sistemas atómicos a la radiación ionizante es un proceso dominante en el universo que involucra a átomos neutros, moléculas y iones. Esta se lleva a cabo en una gran variedad de sistemas físicos en estado libre y bajo confinamiento. Estos sistemas atómicos bajo confinamiento muestran muchas propiedades interesantes con una aplicación tecnológica en crecimiento [1]. Así, en este trabajo se muestran los resultados de calcular la sección eficaz de fotoionización para el átomo de hidrógeno y litio sometidos a una presión isotrópica empleando el método numérico de diferencias finitas y el método de pseudo-potenciales [2]. Para esto colocamos al átomo dentro de una caja de confinamiento esférica penetrable de radio R_0 . Asumimos que el núcleo se fija en el centro de la esfera y se limita espacialmente dentro de una caja de confinamiento por una barrera de potencial constante de altura V_0 [3]. Estos resultados son comparados con los obtenidos para la fotoionización de sistemas atómicos libres o en estado gaseoso.

César Martínez-Flores
R. Cabrera-Trujillo

*Instituto de Ciencias Físicas,
UNAM.*

Referencias

- [1] Stephen Ornes. Proceedings of National Academy of Sciences, 113 (11), 2796, 2016.
- [2] J. C. Slater. Phys. Rev., 81, 385–390, 1951.
- [3] R. Cabrera-Trujillo y S. A. Cruz. Phys. Rev. A, 87, 012502, 2013.

O4. Formación y control de moléculas frías

La física atómica, molecular y óptica (AMO) ha vivido una auténtica revolución, gracias a la consecución del enfriamiento de átomos mediante su interacción con luz láser (premio Nobel en Física de 1997 a S. Chu, C. Cohen-Tannoudji y W. D. Phillips).

Rápidamente se empezó a trabajar para conseguir enfriar moléculas a temperaturas igualmente bajas. Sin embargo, debido a su gran número de niveles internos de energía (ligados a los grados de libertad de rotación y vibración), en general, no es posible utilizar los mismos métodos que con átomos. Se habla entonces de moléculas frías o ultrafrías, cuando su temperatura interna y externa se encuentra por debajo de 1 K o de 1 mK, respectivamente. En el primer caso, se consigue “congelar” toda dinámica interna ligada tanto a vibraciones (con energías asociadas cercanas a los 100 K) como a rotaciones (1 K), mientras que por debajo de 1 mK se hacen observables los efectos debidos a las muy débiles interacciones de tipo van der Waals.

Los estudios fundamentales y las diversas aplicaciones tecnológicas que posibilitan las moléculas frías hacen que día a día aumente el interés en estos sistemas. De la mano de los avances experimentales, están los cálculos teóricos rigurosos que facilitan el entendimiento y la predicción de mejores caminos hacia el control de moléculas en el régimen cuántico.

Motivaciones, usos y formas de obtener moléculas frías, desde las propuestas de estudio y análisis en el marco del proyecto “Formation and Control of Cold Molecules” son mostradas. Igualmente se mencionan generalidades sobre la dinámica molecular y ejemplos de control sobre moléculas como RbCs y KRb, mediante una representación espacial optimizada, como lo es el método de la rejilla transformada de Fourier con el cual se obtienen los espectros vibracionales en el problema multicanal acoplado y combinado esto con la evolución temporal mediante el uso de polinomios de Chebyshev se analiza la dinámica del sistema.

Agradecimientos.

COLCIENCIAS – Colombia, proyecto “Formation and control of cold molecules” 2015-2018.

Londoño Beatriz^{1*}
Rodríguez Karem¹
López Guillermo¹
Arce Julio¹
Arango Carlos²
Guerrero Rubén³
Luc-Koenig Eliane⁴

¹Universidad del Valle, Cali, Colombia.

²Universidad ICESI, Cali, Colombia.

³Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

⁴Laboratoire Aimé Cotton, Universidad Paris XI, Orsay, Francia.

O5. Estudio de la dinámica de moléculas diatómicas dentro del modelo de orbitales gaussianos esféricos flotantes

El estudio de la dinámica de sistemas moleculares ha sido de interés en la física y química para explicar fenómenos como disociación de moléculas, excitaciones, espectros vibracionales o pérdida de energía [1], por mencionar algunos. El modelo de orbitales gaussianos esféricos flotantes (FSGO) fue propuesto por Frost en 1967 para estudiar inicialmente, propiedades geométricas y de estructura electrónica de sistemas poliatómicos [2]. A la fecha, el modelo sigue siendo de gran utilidad debido a la facilidad con que se pueden describir sistemas moleculares grandes, como el caso del estudio de la sección eficaz de poder de frenamiento de nucleobases [3]. El modelo de FSGO es ahora introducido por primera vez, en un esquema de dinámica molecular. En este trabajo, se utilizaron los orbitales FSGO no solo para el cálculo de energías electrónicas de sistemas diatómicos, sino también, se calcularon las energías de los estados vibracionales y modos normales de vibración, a fin de validar el enfoque de dinámica molecular dentro del modelo de FSGO.

L.N. Trujillo-López
R. Cabrera-Trujillo

*Instituto de Ciencias Físicas,
UNAM.*

- [1] R. Cabrera-Trujillo, Rad. Eff. Def. Sol. (2016) 171, 146-153
[2] A. A. Frost, J. Chem. Phys., (1967), 47, 3707–3713.
[3] L.N.Trujillo-López et. al., Nuc. Inst. Met. Phys. Res. B (2013) 313, 5-13

O6. Raman transitions using phase modulators

The two beams for a stimulated Raman transition can be generated from a single laser and an electro-optical modulator (EOM). Using the EOM gives reduced phase noise and the capability of complex pattern generation. The phase modulation produces a series of sidebands that we use as the phase locked beams for the Raman transition. We use a long calcite crystal to rotate the polarization of the sidebands to turn the destructive interference that appears at high detunings into constructive interference. The same crystal can be used as a narrow frequency filter to eliminate one of the sidebands. We use the system to excite Raman transitions with minimum phase noise. We determined the scaling of the Rabi frequency of the Raman transition with detuning to show that is dominated by the vector contribution. The measured phase noise is limited by the quality of the microwave synthesizer.

Vahideh Abediyeh
Nieves Arias
Saeed Hamzeloui
Yasser Jerónimo
Eduardo Gómez

*Instituto de Física, Universidad
Autónoma de SLP.*

Funding from CONACYT, Fundación Marcos Moshinsky and UASLP

O7. Efficient quantum transport in disordered interacting many-body networks

The coherent transport of fermions in disordered networks of l single-particle states connected by k -body interactions is studied. These networks are modeled by embedded Gaussian random matrix ensembles (EGE). The conductance bandwidth of the ensemble averaged transmission as well as the total current increases with the number of fermions n in the network and is maximal for $k \sim n/2$. The transmission is peaked around the band center for $k = n$ making the transport efficient in a narrow energy band. We show that for all parameters the transport is enhanced significantly if only centrosymmetric ensembles (csEGE) are considered. In this case the transmission shows numerous resonances of perfect transport. Analyzing the transmission by spectral decomposition, we find that centrosymmetry induces strong correlations and enhances the extrema of the distributions. This suppresses destructive interference effects in the system and thus, causes backscattering-free transmission resonances which enhance the overall transport.

Adrian Ortega
Thomas Stegmann
Luis Benet

*Instituto de Ciencias Físicas,
UNAM.*

O8. Microwave emulations and tight-binding calculations of transport in polyacetylene

A novel approach to investigate the electron transport of cis- and trans-polyacetylene chains is presented by using microwave emulation measurements and tight-binding calculations. In the emulation we take into account the different electronic couplings due to the double bonds leading to coupled dimer chains. The relative coupling constants are adjusted by DFT calculations. For sufficiently long chains a transport band gap is observed if the double bonds are present, whereas for identical couplings no band gap opens. The band gap can be observed also in relatively short chains, if additional edge atoms are absent, which cause strong resonance peaks within the band gap. The experimental results are in agreement with our tight-binding calculations using the nonequilibrium Green's function method.

John Alexander Franco

*Instituto de Física, Universidad
Autónoma de SLP.*

O9. GPUAM: Una herramienta para el análisis de campos escalares y vectoriales derivados de la función de onda

Al resolver la ecuación de Schrödinger obtenemos la energía y la función de onda asociada; la función de onda contiene toda la información del sistema. Una cantidad comúnmente analizada es la densidad electrónica, la cual es la base del análisis de distintas metodologías [1].

En este trabajo presentamos GPUAM, una herramienta que toma como base los resultados de cálculos de estructura electrónica, para analizar la función de onda de sistemas multielectrónicos. El programa permite evaluar la densidad electrónica, orbitales, gradientes entre otras funciones, en un volumen que contenga al sistema de interés. Con esta información es posible encontrar y caracterizar puntos críticos de la densidad y de su laplaciano, que están asociados a la formación de enlaces y a la estructura de capas respectivamente.

Para sistemas de tamaño considerable, donde la evaluación de los campos escalares o vectoriales resulta extensa, hacemos uso de unidades de procesamiento gráfico (GPU) para la determinación de cada valor dentro de un volumen dado. GPUAM está escrito usando un esquema de programación de propósito general sobre unidades de procesamiento gráfico (GPGPU) [2] lo cual permite un excelente desempeño, comparado con unidades de procesamiento central.

[1] Bader, R. F. W., *Atoms in molecules: A Quantum Theory*, Oxford University Press, New York, 1990.

[2] Farber, R. *CUDA Application Design and Development*. Elsevier: Boston, 2011.

Raymundo Hernández Esparza
Jorge Garza Olguín

*Departamento de Química,
UAM-I.*

O10. Interacción de una alanina con una superficie de grafeno

La alanina es un aminoácido que constituye entre el 18% y el 30% de la composición total de la seda de la araña y se supone es la molécula responsable de la gran resistencia de dicho material. Por otro lado, el grafeno se distingue por su singular dureza y resistencia. Estudiamos la interacción de la alanina ($C_3H_7NO_2$) con una superficie de grafeno. Consideramos siete orientaciones diferentes de esta molécula con respecto a la superficie. Utilizamos el código Quantum Espresso para obtener la configuración más estable de cada una de las orientaciones iniciales de la molécula. En los cálculos utilizamos expresiones para interacciones Van der Waals. Por último, analizamos algunas características de la configuración con mayor energía de adsorción.

Ali Fransuani Jiménez González
Luis Fernando Magaña Solís

Instituto de Física, UNAM.

O11. Nuevas Relaciones de Recurrencia para Polinomios de Legendre con Asociatividad no Entera bajo Confinamiento Diédrico

Esta contribución está motivada por el interés de investigar las consecuencias del confinamiento diédrico en átomos multielectrónicos. En el proceso de calcular los elementos de matriz de la interacción Coulombiana repulsiva en su desarrollo multipolar esférico, entre estados bielectrónicos, hemos reconocido la necesidad de contar con relaciones de recurrencia para los polinomios de Legendre con asociatividad no entera y simetría de paridad rota y restituida [1,2].

Eugenio Ley-Koo¹
Salvador A. Cruz²

¹*Instituto de Física, UNAM.*
²*Depto. de Física, UAM-I.*

Se reportarán las formas explícitas de relaciones de recurrencia que conectan estados con asociatividades con ordenes que difieren en una unidad. El uso recursivo de estas relaciones permite conectar estados con ordenes de asociatividad que difieren en cualquier número entero.

Referencias.

- [1] E. Ley-Koo and G.H.Sun, “Surface Effects in the Hydrogen Atom Confined by Dihedral Angles”, in “Electronic Structure of Quantum Confined Atoms and Molecules”, K. D. SEN (ed.), Springer, Switzerland, 2014, Chap. 1, p 1.
- [2] E. Ley-Koo and G.H.Sun, “ Ladder Operators for Quantum Systems Confined by Dihedral Angles”, SIGMA 8 (2012) 060.

O12. Estudio fundamental de la interacción de plasmas y gases con luz láser en el visible e infrarrojo medio

Este trabajo se enfoca al estudio de la interacción de láseres con plasmas y gases, y al desarrollo de una técnica novedosa, basada en algoritmos de súper-resolución, para extraer información espectral de estas interacciones. Para este propósito se realizó el diseño y montaje experimental de un sistema para generar descargas luminiscentes utilizando gases atómicos y moleculares así como el arreglo de detección necesario para registrar los eventos inducidos por la radiación láser al incidir sobre las muestras gaseosas. Específicamente, en el presente estudio se realizaron mediciones de efecto optogalvánico (EOG) en descargas de Ne, Ar, N y aire seco, en una configuración de electrodos paralelos. Adicional al trabajo instrumental y experimental, se utilizó un novedoso algoritmo numérico. Este algoritmo, conocido como Super-Resolución (SR) permitió mejorar de manera dramática la resolución experimental de los resultados de EOG obtenidos permitiendo así diferenciar con mayor claridad los picos optogalvánicos anteriormente poco definidos debido a la falta de resolución de nuestros instrumentos. La técnica de SR se utilizó en los gases atómicos Ne y Ar en la región de los 413-423 nm lográndose una mejora de 70 veces en la resolución de los picos presentes en la señal. Adicional a esto, se mostrará el estudio realizado en el infrarrojo medio utilizando un láser de cascadeo cuántico (QCL). Por tratarse de radiación en el infrarrojo medio, la adquisición de un equipo de calibración de la longitud de onda emitida por el QCL puede resultar costoso. Sin embargo, es posible prescindir de estos instrumentos de calibración mediante el uso de espectroscopia de absorción a presión y temperatura ambiente. Se mostrará la base metodológica e instrumental para realizar este tipo de calibraciones y estudios subsecuentes en el rango de infrarrojo medio.

Lina M. Hoyos
A. M. Juárez

*Instituto de Ciencias Físicas,
UNAM.*

Agradecimientos.

La investigación desarrollada fue realizada gracias al apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) a través de una beca doctoral nacional y posteriormente una beca nivel III del proyecto CB2011/167631. De igual forma, los autores agradecen el soporte recibido por parte del proyecto número IT100613 del Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM.

O13. Formación de Estructuras en Superficies de Ti y Ti-6Al-4V por el Bombardeo de Iones de Au

El presente trabajo se enfoca en el estudio de la formación de patrones en superficies de los biomateriales Ti y Ti-6Al-4V. Iones de Au son implantados en estos dos materiales a energías del orden de MeV. Dependiendo de las condiciones experimentales se observan distintos tipos de morfologías. Esta dependencia es explorada con respecto al ángulo de incidencia, la fluencia y tipo de material. La formación de estructuras periódicas desde un punto de vista teórico es conocida basándose en modelos de medio continuo. Los modelos teóricos del tipo Bradley-Harper resultan de gran ayuda para describir nuestro sistema. Una aplicación en particular es su uso en los implantes ortopédicos para una mejor adhesión del tejido óseo al metal.

Agradecimientos

Los autores agradecen la asistencia técnica de M. Galindo, K. Lopez, F. Jaimes, M. Escobar, J. G. Morales y L. Lartundo-Rojas.

Miguel Angel García¹
Jorge Rickards¹
Rebeca Trejo-Luna¹
Jaqueline Cañetas-Ortega¹
Luis De la Vega²
Luis Rodríguez-Fernández¹

¹*Instituto de Física, UNAM.*
²*Universidad Autónoma de la Ciudad de México.*

O14. Estudio de polarización por espectroscopia libre de Doppler de la transición prohibida $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$ en rubidio atómico

En este trabajo se estudian los cambios en la fluorescencia del decaimiento espontáneo de 420 nm producidos al girar la dirección de polarización de los haces que excitan al rubidio atómico vía dos fotones del nivel $5s_{1/2}$ al $6p_{3/2}$, pasando por el nivel $5p_{3/2}$. En particular se analiza la dependencia de la intensidad de la fluorescencia como función del ángulo θ de polarización entre la radiación correspondiente al segundo paso, la transición cuadrupolar eléctrica $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$ (911 nm), y la radiación del primer paso $5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$ (780 nm). Se presentan espectros donde se muestran claramente estos efectos y de su análisis se comprueba como las reglas de selección $\Delta M_F = \pm 1$ y $\Delta M_F = \pm 2$ para la transición cuadrupolar son separables, respectivamente, para $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 90^\circ$. Se comparan estos espectros con un modelo de tres pasos donde se calculan: a) poblaciones en el nivel $5p_{3/2}$, b) probabilidades de transición $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$, y c) probabilidades de decaimiento $6p_{3/2} \rightarrow 5s_{1/2}$. El acuerdo del modelo teórico con los resultados experimentales confirman que el fuerte acoplamiento establecido en la transición $5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$ por el primer fotón de la escalera (780 nm) prepara una distribución de poblaciones que a su vez es monitoreada vía la fluorescencia de 420 nm producida al sintonizar el segundo fotón a la transición cuadrupolar eléctrica $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$.

Se agradece el apoyo de los proyectos SEP-CONACYT 168451-11, PAPIIT IN110812, PAPIIT IN112516, y del Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC) No. 232652 por el apoyo otorgado para la realización de este trabajo.

C. Mojica-Casique
F. Ponciano-Ojeda
S. Hernández-Gómez
O. López-Hernández
J. Flores-Mijangos
F. Ramírez-Martínez
D. Sahagún
R. Jáuregui
J. Jiménez-Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

O15. Estudio experimental y teórico de la transición de dos fotones $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ en átomos fríos de Rubidio

Se presenta un sistema experimental para medir espectros de fluorescencia espontánea generada a partir de la excitación de dos fotones $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ en átomos fríos en una trampa magneto-óptica (MOT). Estos espectros se obtienen como función de la desintonía de la segunda excitación con respecto a la resonancia atómica, y muestran la estructura hiperfina del multiplete $5D_{5/2}$. Se presenta un modelo basado en la evolución temporal de la matriz de densidad de un sistema atómico multinivel interactuando con múltiples componentes de radiación, y se usa para calcular espectros teóricos a partir de los parámetros de operación del experimento. En el límite de los estados estacionarios se obtienen espectros teóricos que coinciden dentro del error experimental con los espectros experimentales para el rango de parámetros considerados. Gracias a este buen acuerdo, la inspección cuidadosa de los resultados obtenidos mediante el análisis teórico permite extraer información detallada tanto de los estados atómicos observados como de la variación esperada de estos espectros con la variación de los parámetros experimentales, como la amplitud del campo eléctrico y la desintonía. Cabe resaltar que el análisis incorpora las contribuciones de todos los estados de la estructura hiperfina y magnética del átomo, así como el ensanchamiento Doppler de las líneas espectrales. Este ancho Doppler se usa para estimar la temperatura de la nube atómica.

O. Lazo-Arjona
G. Domínguez-Mandujano
O. López-Hernández
C. Mojica-Casique
J. Flores-Mijangos
F. Ramírez-Martínez
J. Jiménez-Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

Agradecemos a los siguientes mecanismos de financiamiento por su apoyo:

- Al CONACYT por las becas de Posgrado Nacional y de ayudante de investigador que me dio.
- PAPIIT IA101714, “Excitación de átomos de rubidio a estados de Rydberg con tres fotones”
- SEP-CONACYT 168498-11, “Producción de estados de Rydberg en átomos de Rb por medio de la excitación con tres fotones”
- SEP-CONACYT 168451-11, “Medición de la transición cuadrupolar eléctrica $5p_2 P_{3/2} - 6p_2 P_{1/2}$ en rubidio en una trampa magneto-óptica”.
- Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMUIC)

O16. Fourier spectroscopy of a spin-orbit coupled Bose gas

We generate spin-orbit coupling in a spin-1 Bose-Einstein condensate using Raman transitions. We are able to measure the system's spin and momentum dependent energy spectrum by looking at the time evolution of the three spin states. We drive transitions at different values of detuning from Raman resonance and extract the Fourier components of the time dependent evolution to reconstruct the spectrum. We also add a periodic modulation to one Raman field which allows us to have a fully tunable spin-orbit coupling dispersion that can be measured using our spectroscopy technique.

Ana Valdés Curiel
Dimitris Trypogeorgos
Erin E. Marshall
Ian B. Spielman

*Joint Quantum Institute,
University of Maryland, USA.*

O17. Microscopia electrónica del esmalte dental humano

El esmalte y la dentina (parte de los tejidos dentales humanos) son de gran relevancia en la odontología, ya que por una parte son los sustratos que con mayor frecuencia se encuentran afectados (lesiones cariosas, fracturas, anomalías dentales, hipersensibilidad, dientes manchados, desmineralización, etc.) y por la otra, desde el punto de vista estructural, son los sustratos adherentes básicos para realizar diversas reparaciones en la dentadura, aunado a que tendrán un contacto directo con los diversos biomateriales dentales. En este trabajo se describe el estudio realizado en el Instituto de Física de la UNAM sobre la estructura del esmalte dental humano desde 1992 y sobre el defecto observado en el centro de los cristales de hidroxiapatita del esmalte dental humano llamado “línea oscura”. Y la microscopía electrónica ha jugado un papel preponderante.

José Reyes-Gasga
Instituto de Física, UNAM.

La parte inorgánica de la pieza dental se conforma principalmente de un fosfato cálcico llamado hidroxiapatita ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$), sin embargo, los estudios han mostrado que no se trata de una hidroxiapatita pura, sino que se encuentra con impureza de sodio, magnesio y cloro, principalmente.

A nivel micrométrico, el esmalte dental humano está compuesto de pequeños motivos en forma de cerradura compactados en un arreglo hexagonal. Si partiéramos el diente de tal manera que se observe al mismo tiempo la dentina y el esmalte, veríamos que estos motivos corresponden a unas “líneas” que corren de la unión amelodentinaria hacia la superficie y se les conoce con el nombre de “prismas”. La microscopía electrónica de barrido (MEB) nos ha permitido estudiar en detalle la superficie y la estructura del esmalte dental, en particular el arreglo de los prismas que conforman el esmalte tanto en sección transversal (tal y como se observan en la superficie del esmalte) como en sección longitudinal (de la superficie a la unión amelodentinaria).

Si observamos uno de estos prismas a mayor amplificación podremos ver que se componen de millones de cristalitos a escala nanométrica. Estos son los cristalitos de hidroxiapatita y están unidos lo más junto posible, pero siempre rodeado de material orgánico. Por lo tanto, podemos decir que el esmalte dental está formado por cristales de hidroxiapatita dentro de una matriz orgánica, por lo cual lo podemos clasificar como un material compósito.

O17. Microscopia electrónica del esmalte dental humano *(continuación)*

Para estudiar los cristales que conforman al prisma, y debido a su dimensión a escala nanométrica, es necesario usar el microscopio electrónico de transmisión (MET). Los cristallitos de hidroxiapatita tienen una forma alargada en forma de ladrillos. De hecho, debido a este alargamiento que presentan, se dice que éstos forman una estructura tipo texturizada. El MET permite seleccionar uno de los cristales que se muestran en la figura y obtener su patrón de difracción.

Cuando una muestra no conductora es observada por microscopía electrónica, el haz electrónico, debido a que los electrones incidentes no son conducidos a “tierra”, los electrones “atrapados” en la muestra comienzan a destruirla. Por lo tanto, el problema que representa el hecho de que el esmalte dental humano no es conductor es el proceso de daño electrónico que se aprecia en las imágenes de MET como “parches”. Esto representa una limitante en el tiempo de observación de la muestra ya que después de un rato la muestra comienza a destruirse y estos “parches” cubren la totalidad del área de observación.

En las imágenes de MET del esmalte dental humano siempre se observa que los cristales presentan un “defecto” en el centro al cual se le ha dado el nombre de “la línea oscura”. El estudio de este defecto es muy importante ya que cuando el esmalte se somete a un proceso de disolución por medios ácidos, como en el caso del proceso carioso, éste se comienza a disolver exactamente en el lugar donde se encuentra este “defecto”. En este trabajo presentaremos el estado del arte en el que se encuentra el estudio por microscopía electrónica de alta resolución de este defecto estructural.

Agradecimientos

Agradezco al Dr. Ramiro García García por haber colaborado conmigo en la preparación de varios trabajos escritos sobre este tema. Agradezco también a Samuel Tehuacanero, Roberto Hernández, Cristina Zorrilla, Jaqueline Cañetas, y Manuel Aguilar, por el apoyo técnico que recibimos durante la elaboración de este trabajo. Agradezco a todos mis estudiantes por el trabajo y análisis que han realizado durante la elaboración y desarrollo de este tema en sus tesis profesionales; queda mucho por estudiar, analizar y descubrir. Este trabajo fue apoyado económicamente por la DGAPA-UNAM con el proyecto IN- 109516.

O18. Estatus Actual de Interacción de Configuraciones para Átomos y Moléculas

Carlos F. Bunge

Instituto de Física, UNAM.

Las bases matemáticas para interacción de configuraciones (IC) se conocen desde hace más de 60 años. El IC unireferencial (UR) fue relegado por cúmulos acoplados (CA) UR a comienzos de los 80s. Hace 10 años, el repentino abaratamiento de memorias de acceso aleatorio impulsó la formulación de IC seleccionado (ICS) con error de truncamiento [1] e IC por partes [2]. Cualquier estado estacionario Ψ puede expandirse en términos de configuraciones k y correspondientes elementos degenerados g :

$$\Psi = \sum_{k,g} \Phi_{k,g} C_{k,g} = \sum_{k=1}^{k_x} \sum_{g=1}^{g_k} \sum_{i=1}^{n_k} D_{ik} c_{ik}^g C_{k,g}, \quad (1)$$

donde el número de $\Phi_{k,g}$ puede exceder 10^{21} , los $C_{k,g}$ son coeficientes variacionales, y el c_{ik}^g del determinante D_{ik} asegura simetría de N electrones. Para propósitos de preselección y de selección de k , la Ec. (1) se pone como:

$$\Psi = \sum_{K=1}^{k_x} \Phi_K C_K. \quad (2)$$

La preselección de K se logra seleccionando productos ordenados de números de ocupación de orbitales naturales pertinentes por debajo de ciertos umbrales, lo que define un análisis de sensibilidad de errores de truncamiento. La selección de K dentro del conjunto preseleccionado se hace con la fórmula de Brown:

$$\Delta E_K = (E - H_{KK}) C_K^2 / (1 - C_K^2), \quad (3)$$

donde los elementos diagonales de la matriz hamiltoniana H_{KK} son aproximados mediante cualquier elemento diagonal entre determinantes D_{ik} de k :

$$H_{KK} \approx \langle D_{ik} | H | D_{ik} \rangle, \quad (4)$$

ya que $(E - H_{KK})$ es del orden de unos pocos Hartree para aquellos ΔE_K del orden de un μ Hartree o menores, por lo que ΔE_K puede ser evaluado para **cualquier** valor de n_k en la Ec.(1). La suma de los ΔE_K descartados es el error de truncamiento de la energía, que puede ser rápidamente calculado una y otra vez antes de enfrentar la Ec.(1). Existen relaciones aproximadas entre los coeficientes de las expansiones determinantaes de IC y CC que se usan para desarrollar fórmulas para C_K de excitaciones n -tuplas de k en términos de los coeficientes de excitaciones simples, dobles y triples. Las fórmulas generadas por computadora ocupan 78,000 líneas de código Fortran compacto. IC por partes [2] permite incluir explícitamente billones (gringos!) y cientos de billones de determinantes en cálculos moleculares y atómicos, respectivamente.

O18. Estatus Actual de Interacción de Configuraciones para Átomos y Moléculas (continuación)

Para Ne y H₂O, ICS hasta excitaciones séxtuples con grandes bases orbitales de 338 funciones radiales hasta $\ell=20$, y 412 orbitales de simetría C_{2v}, respectivamente, han sido publicadas [3, 4]. Las energías variacionales son las más bajas de la literatura. Los errores de esas energías están dominados por los errores de truncamiento en la base de orbitales, que están localizados en las excitaciones dobles. Discutiré mejoras actuales y planeadas para ICS e ICS- MR en conexión con el desarrollo de un programa paralelo apropiado para sistemas con un mayor número de electrones.

Referencias

- [1] C.F. Bunge, J. Chem. Phys. **125**, 014107 (2006).
- [2] C.F. Bunge y R. Carbó-Dorca, J. Chem. Phys. **125**, 014108 (2006).
- [3] C.X. Almora-Díaz, J. Chem. Phys. **140**, 184302 (2014).
- [4] C.X. Almora-Díaz, H.I. Rivera-Arrieta y C.F. Bunge, Adv. Quant. Chem. **72**, 129 (2016).

O19. Towards High-Precision Measurement of Hyperfine Structure in the D2 Line of ^{133}Cs Atom Using an Ultra-Stable Laser

High-resolution measurements of hyperfine structure in the excited states of alkali atoms provides a strongest testing ground for state-of-the-art atomic calculations based on the best wavefunctions [1]. In particular measurements of ^{133}Cs hyperfine structure are often limited by the linewidth of the transition, which is about 5 MHz for the D2 line. We present the implementation of an Ultra-Stable Laser (USL) in order to achieve a linewidth less than 500 Hz using an Extended Cavity Diode Laser (ECDL) coupled to an Ultra-Low Expansion (ULE) optical cavity. Then, the USL is used to determine the hyperfine coupling constants (magnetic dipole – A, electric quadrupole – B and magnetic octupole – C) of the D2 line of ^{133}Cs using Modulation Transfer (MT) spectroscopy [3], which generates dispersive-like lineshapes, which sit on a flat, zero background. Consequently, the zero-crossings of the modulation transfer signals are accurately centered on the corresponding atomic transitions.

The master laser is a commercial AlGaAs equipped with a low loss interference filter, 852 nm wavelength (near to Cs-133's D₂ line) and 20 kHz linewidth. The ULE Fabry-Pérot cavity has a free spectral range of 1.49 GHz and a linewidth less than 2.3 kHz. In order to stabilize the ECDL to the optical cavity and reduce its linewidth, the Pound-Drever Hall technique is used [2].

The D₂ line of ^{133}Cs is routinely used around the world to manipulate and cool Cs atoms in order to materialize the SI time unit, the second. In Mexico, this experiment is performed by the Centro Nacional de Metrología (CENAM) where Cs atoms are manipulated using an USL. In order to maximize the interaction between light and atoms, the laser frequency should be stabilized precisely. Therefore, an accurate characterization of the ^{133}Cs atoms is particularly important in this kind of experiments. Additionally, a stability analysis of the USL is presented and it exhibits better results for averaging times less than 30 s in comparison with data reported for high performance commercial Cs clocks.

Referencias

- [1] M.S. Safronova, W.R. Johnson and A. Derevianko, Phys. Rev. A 60 (1999) 4476–4487.
- [2] Black E. D., Am. J. Phys. 69 (2001) 79–87.
- [3] McCarron D. J., King S. A. and Cornish S. L., Meas. Sci. Technol. 19 (2008) 8.

C. A. Ortiz Cardona^{*,+}
 E. de Carlos López^{*}
 L. Hernández^{*}
 R. Gutiérrez Gómez^{*,+}
 J. M. López Romero^{*,+}

**Dirección de Metrología de
 Tiempo y Frecuencia, CENAM.
 +CINVESTAV, Unidad Querétaro.*

O20. Estructura electrónica del grafeno doble capa con dos aproximaciones

En este trabajo se estudia un modelos de doble lámina de grafeno, que se obtiene a partir de la estructura del grafito: En este caso, se ha estudiado a las hojas de grafeno solas, saturadas con H y con un hueco o vacancia, eliminado un átomo de C, por medio de dos aproximaciones, el modelo de Kroning-Penney y la teoría de funcionales de la densidad (DFT).

Los resultados obtenidos, muestran un gap electrónico de 1.81 eV para las hojas de grafeno solas, de 2.18 eV para las hojas de grafeno saturado con H, mientras que para las hojas de grafeno con defecto, no hay brecha electrónica. La reactividad que presenta el grafeno saturado con H, nos indica que puede ser un material que tiene un potencial importante para capturar CO₂, un los gases de efecto invernadero causante del calentamiento global.

Agradecimientos.

Agradecemos el apoyo del proyecto D.61015 que actualmente se desarrolla en el IMP.

Juan García^a
Roberto García de León^b
Isidoro García-Cruz^c

^aPosgrado en Ciencias Físicas,
UNAM.

^bGerencia de Refinación de
Hidrocarburos, IMP.

^cGerencia de Refinación de
Hidrocarburos, IMP.

O21. Láseres de electrones libres y sus aplicaciones

En física, química y biología, la fuente de rayos X de alta brillantez más utilizada es la luz de sincrotrón. Sin embargo, ésta tiene sus limitaciones, pues además de que genera radiación incoherente, la duración mínima de los pulsos emitidos es del orden de picosegundos y el número de fotones que se pueden enfocar en una muestra es reducido, dificultando así la obtención de espectros con alta resolución. Los láseres de electrones libres (FEL) mejoran considerablemente las propiedades de la luz de sincrotrón. La radiación FEL es coherente, los pulsos con duraciones van desde los sub-femtosegundos a algunos femtosegundos y son al menos ocho órdenes de magnitud más brillantes que los pulsos emitidos por sincrotrones.

En esta plática expondré algunos de los experimentos que se han llevado a cabo en los últimos años con láseres pulsados ultra cortos y ultra intensos de rayos X. Entre ellos se encuentran la creación de una película a escala atómica de un proceso químico; la capacidad para desentrañar la estructura compleja molecular de proteínas y virus; la primera realización de un láser de rayos X en el régimen de keV de energía; así como también el estudio de la materia en condiciones extremas (similar a la existente en el interior de los planetas), y del origen de la superconductividad en los materiales. Estas investigaciones han desencadenado nuevos trabajos sobre femtoquímica, óptica cuántica de rayos X, biología estructural, materia densa caliente y física de estado sólido, las cuales pueden conducir al desarrollo de nuevos medicamentos, energías alternativas sustentables y dar lugar a la creación de nuevos materiales con propiedades optimizadas.

Miguel A. Silva^{1,2*}

¹*Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie, Germany.*

²*Ascripción actualenter for Free-Electron Science (CFEL), Germany*

O22. Effects of three-body collisions in a two-mode Bose-Einstein condensate

We study the effects of three-body collisions in the physical properties of a two-mode Bose-Einstein condensate. The model introduced here includes two-body and three-body elastic and mode-exchange collisions and can be solved analytically. We will use this fact to show that three-body interactions can produce drastic changes in the probability distribution of the ground state and the dynamics of the relative population. In particular, we find that three-body interactions under certain circumstances may inhibit the collapse of the relative population.

Carlos Sabin
Pablo Barberis-Blostein
Christopher Hernández
Robert B. Mann
Ivette Fuentes

Instituto de Física, UNAM.

<http://dx.doi.org/10.1063/1.4936314>

PÓSTERS

C1. Diseño de un láser de fabricación local en la configuración cat-eye

En el presente trabajo se expondrá el diseño de un láser de fabricación local en configuración cat-eye. Dicha configuración utiliza un espejo semireflejante con una relación transmisión/reflexión de 70%/30%, generando así una cavidad resonante. La selección de longitud de onda se realiza mediante un filtro de interferencia dieléctrico, cuya curva de transmisión es de forma rectangular con centro en 785 nm, ancho de banda de 3 nm y transmisión mayor al 90%, con su normal orientada un ángulo de 13.2° respecto a la dirección de propagación emitida por el diodo para obtener una longitud de onda de 780.2 nm. De esta forma se desacopla el selector de longitud de onda de la longitud de la cavidad óptica obteniendo así una gran estabilidad mecánica del láser. El diseño usa tornillos milimétricos para rotar el filtro permitiendo así que el ajuste grueso de la longitud de onda sea menor a 0.3 nm. Así mismo, mediante un piezoeléctrico de anillo se realiza un control fino de la longitud de la cavidad resonante, lo cual induce ajustes en la longitud de onda equivalentes a 0.02 nm. Esto permitirá sintonizar el láser para obtener un barrido de frecuencia de 10 GHz con el objetivo de observar los cuatro pozos Doppler debido a las transiciones dipolares eléctricas de $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$ en el rubidio.

V. Samayoa-Donado
J. Flores-Mijangos
F. Ramírez-Martínez
J. Jiménez-Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

Se agradece el apoyo de los proyectos Ciencia Básica SEP-CONACYT No. 168451-11; PAPIIT IA101714; PAPIIT IN112516; y del Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC) No. 232652.

C2. Estados ligados y pares de Cooper de moléculas en redes ópticas en 2D

Se estudia la formación de pares de Cooper y dímeros de moléculas dipolares fermiónicas confinadas en un par de redes ópticas paralelas con geometría cuadrada y triangular, cuyo momento dipolar se alinea perpendicularmente al plano de las redes ópticas. La formación del dímero se analiza desde el enfoque del método variacional estándar mientras que el par de Cooper se formula de manera semejante al trabajo original de Cooper.

Gustavo A. Domínguez Castro
Rosario Paredes Gutiérrez
Arturo Camacho Guardian

Instituto de Física, UNAM.

El desarrollo de este trabajo fue financiado por los proyectos de investigación: DGAPA-PAPIIT (UNAM) IA101716, Estudio de turbulencia cuántica en superfluidos atómicos y DGAPA-PAPIIT (UNAM) IN107014 Líquidos cuánticos de Bose y Fermi.

C3. Implementación del método de Kohn-Sham en un código diseñado para estudiar átomos confinados por paredes penetrables

Esta contribución al 7o Taller de Dinámica y Estructura de la Materia presenta un estudio acerca de la solución de las ecuaciones de Kohn-Sham empleando el método de Roothaan y un nuevo conjunto de funciones de base para átomos confinados por paredes penetrables. El nuevo conjunto de funciones de base empleado en este trabajo fue diseñado dentro de la aproximación Hartree-Fock para asegurar un comportamiento asintótico adecuado de la densidad electrónica. Se utilizaron dos funcionales para modelar el potencial de intercambio (Dirac y Becke88) y los resultados fueron comparados con el método Hartree-Fock (intercambio exacto) siendo este último tomado como referencia. Los átomos analizados en este estudio son He, Be, Ne, Mg y Ar, todos sometidos a dos potenciales finitos y diferentes radios de confinamiento.

Michael Adán Martínez Sánchez
Mariano Rodríguez Bautista
Rubicelia Vargas
Jorge Garza

*Departamento de Fisicoquímica
Teórica, UAM-I.*

Las tendencias en las energías (orbital y total) y en el potencial de intercambio por parte de los funcionales son muy parecidas entre ellos pero muy distintas a aquellas predichas por Hartree-Fock especialmente a radios cortos de confinamiento, por ende, estos funcionales no son adecuados para el estudio de átomos confinados. Con esta implementación hay una posibilidad de examinar el desempeño de funcionales de intercambio y correlación y el diseño de nuevos funcionales adecuados para la descripción de átomos confinados.

Agradecimientos.

CONACyT por la beca de maestría otorgada para la realización de este proyecto.

C4. Global thermodynamics model for the critical properties of the superfluid (BEC) transition of a harmonically confined Bose gas

To study the normal gas to BEC (superfluid) phase transition of a Bose gas in a harmonic potential we propose a model for the local chemical potential as a function of density. With this model we get the complete global thermodynamics of the system, particularly we calculate its susceptibilities and its derivatives. Susceptibilities do not show divergences unlike its derivatives, which suggests that we have a “third order” transition.

I. Reyes-Ayala
F. J. Poveda-Cuevas
J. A. Seman
V. Romero-Rochín

Instituto de Física, UNAM.

C5. Control para el Laboratorio de Átomos Fríos y Óptica Cuántica, IF-UNAM

Estamos desarrollando sistemas de control basados en freeware y hardware de bajo costo para diversas aplicaciones dentro de nuestro laboratorio. El sistema principal controlará a una trampa magneto-óptica para producir fotones correlacionados capaces de interactuar con átomos. Este software fue desarrollado en Python y es capaz de producir pulsos digitales hasta con 2 ms de resolución temporal y analógicos con resolución de 16 bits por medio de una tarjeta de bajo costo (Labjack T7). Fue desarrollado de forma modular de tal manera que se le pueden añadir un número de tarjetas limitado por la capacidad de la PC utilizada. Además del sistema principal de control hemos desarrollado un sensor 3D de campo magnético con resolución de +/- 1 mT con un lector basado en Arduino. También basado en Arduino, estamos desarrollando un lector múltiple de termopares.

Julio C. Izquierdo Azuara¹
 Juan José Basagoiti¹
 Carlos L. Hernández Cedillo²
 Daniel Sahagún¹

¹*Instituto de Física, UNAM.*
²*Physikalisches Institut,
 Universität Tübingen, Germany.*

Agradecemos el apoyo del CONACyT por medio del programa de Laboratorios Nacionales (proyecto no. LN260704), a la Coordinación de la Investigación Científica de la UNAM por la aportación de recursos concurrentes y a la DGAPA, UNAM (proyecto IA103216).

C6. Sección eficaz para el proceso de Breit-Wheeler usando el Modelo Estándar Extendido(SME).

Se calculó la sección eficaz para el proceso de creación de pares electrón- positrón como función de las frecuencias de los fotones incidentes (ω_1, ω_2), y un ángulo de incidencia α ; usando un modelo no invariante de Lorentz. Se encontró que la sección eficaz contiene términos de la forma $\omega_1^p \omega_2^q + \omega_1^q \omega_2^p$, que son consecuencia directa de la violación a la simetría de Lorentz, y que dominan el comportamiento de la sección eficaz a muy altas energías. Observamos que para energías mayores a 10 TeV hay un incremento de la sección eficaz, con respecto al caso invariante de Lorentz.

Salvador Ramírez Acosta
*Instituto de Ciencias Nucleares,
 UNAM.*

C7. Avances y Perspectivas del Laboratorio de Materia Ultrafría

En el Laboratorio de Materia Ultrafría se producirán gases ultrafríos fermiónicos y bosónicos de 6Li y 7Li , respectivamente. En este trabajo presentamos el diseño de alguna de las partes fundamentales de nuestro sistema experimental, específicamente: el sistema de ultra alto-vacío, las trampas magnéticas, el sistema de control y la instrumentación para la caracterización de éstos.

E. Carro
D. Hernández
E. Ibarra
M. Mendoza
F. J. Poveda
J.A. Seman

Instituto de Física, UNAM.

Una parte del trabajo realizado consistió en el diseño del sistema de ultra-alto vacío. Para el diseño de este sistema fue considerada la analogía que existe entre las ecuaciones que describen los sistemas de ultra-alto vacío y aquellas que describen circuitos eléctricos, lo cual nos permitió modelar la respuesta de las componentes que integran al sistema. Por otro lado, se trabajó en el diseño y proyección del sistema de enfriamiento y confinamiento que se empleará en el experimento. Las partes que se desarrollaron incluyen una fase de desaceleración de un haz de átomos por medio de un desacelerador tip Zeeman y una fase de enfriamiento y captura por una trampa magneto-óptica. Además del diseño se implementó la instrumentación necesaria para la caracterización de las bobinas del desacelerador tipo Zeeman y de las bobinas de Feshbach. Finalmente, se puso en funcionamiento una versión preliminar del software del sistema de control, así como del hardware requerido para el control de diversas salidas digitales y analógicas.

Agradecemos el financiamiento proporcionado por DGAPA-PAPIIT IN107014 "Líquidos cuánticos de Bose y de Fermi" y IA101716 "Estudio de turbulencia cuántica en superfluidos atómicos" y al proyecto de Laboratorios Nacionales CONACyT LN-271322.

C8. Trampa atómica con cavidad óptica para interferometría

La gravimetría utiliza el método de campos separados de Ramsey para medir con gran precisión fuerzas gravitacionales. La función de onda del átomo se parte en dos y se mantiene una diferencia de altura entre ambas, lo que resulta en la sensibilidad a potenciales gravitacionales. Cada átomo solamente interfiere consigo mismo, de tal manera que la incertidumbre en la medición decrece como $N^{-1/2}$, con N el número de átomos. Se obtendría una señal más fuerte si se usaran partículas con mayor masa. Nuestro objetivo es lograr interferometría colectiva, de manera que todos los átomos contribuyan de manera coherente a la señal y con esto lograr una incertidumbre que decrece más rápidamente (como N^{-1}).

Estamos implementando un sistema de vacío basado en una cámara metálica con múltiples accesos ópticos. El vacío se logra con una bomba de absorción combinada con iónica. Cuenta con ventanas reentrantes para variar rápidamente el campo magnético desde el exterior. La óptica se monta directamente a la cámara de vacío y se envía por medio de fibra óptica. Monitoreamos los átomos con un sistema de imagen de doble relevo que envía la luz tanto a una cámara como a un fotodiodo. El sistema de control está basado en una tarjeta digital de 32 canales y una analógica de 64 canales que almacena toda la secuencia y pasa de un valor a otro mediante un pulso TTL. La cavidad de anillo se monta dentro de la cámara y cuenta con espejos controlados de manera remota.

Financiamiento de CONACYT, Fundación Marcos Moshinsky y UASLP

M. A. González
M. S. Billion
W. M. Pimenta
G. A. Olivares-Rentería
J. A. Franco-Villafañe
E. Gómez

*Instituto de Física, Universidad
Autónoma de SLP.*

C9. Corrimiento Stark AC dependiente del estado hiperfino

La interferometría atómica es una técnica muy apropiada para el estudio de las fuerzas gravitacionales. Estos experimentos aplican la técnica de campos separados de Ramsey para comparar la diferencia de fase adquirida al estar a diferentes alturas del potencial gravitacional. Debido a que los átomos no interactúan entre ellos, la interferencia se da a nivel de cada átomo individual. Nos interesa lograr una interferometría donde los átomos se exciten de manera colectiva (formando un estado tipo NOON), con lo que se lograría una mejoría en la sensibilidad del gravímetro, dado que la fase acumulada en el proceso escalaría con el número de átomos.

Para implementar estos estados tipo NOON vamos a inducir un corrimiento de luz en los niveles de energía de los átomos, donde el corrimiento dependerá del número de átomos en el estado hiperfino superior. Esta interacción se puede entender como un acoplamiento entre los átomos mediado por el campo de la cavidad. La cavidad utiliza espejos de alta reflectividad para lograr altos factores de cooperatividad. Tiene una configuración de anillo para tener una onda viajera (en lugar de estacionaria) y con esto tener un corrimiento más homogéneo.

Presentamos la propuesta para el caso en que se tiene un número muy bajo de átomos en la cavidad y analizamos las dificultades que se presentan con el escalamiento a un número mucho mayor de átomos.

Financiamiento CONACYT

M. S. Billion
M. A. González
W. M. Pimenta
G. A. Olivares-Rentería
J. A. Franco-Villafañe
E. Gómez

*Instituto de Física, Universidad
Autónoma de SLP.*

C10. Gravimetría con un modulador de fase

La gravimetría requiere de transiciones Raman estimuladas donde dos haces de luz amarrados en fase generan una transición de dos fotones en un sistema de niveles en configuración lambda. Para generar los haces requeridos utilizamos un solo láser en combinación con un modulador de fibra de fase. La portadora junto con una de las bandas laterales producen el par Raman deseado, y en este trabajo analizamos los efectos que introducen los haces adicionales.

G.A. Olivares-Rentería
Yasser Jerónimo-Moreno
E. Gomez

*Instituto de Física, Universidad
Autónoma de SLP.*

Para un implementar un gravímetro se requiere de haces Raman contra-propagantes, con los que se realiza una secuencia de pulsos. Dado que el modulador de fase genera haces co-propagantes, se requiere añadir un espejo retro-reflejante. Esto produce el par deseado, pero genera otro par adicional con los vectores de onda invertidos. Se puede sintonizar a los átomos en resonancia con solo una de las dos configuraciones anteriores dado que tienen un corrimiento Doppler opuesto. Aquí presentamos un estudio del efecto que tiene el par no resonante sobre la señal de interferometría atómica.

Se obtuvieron soluciones numéricas y se compararon con soluciones analíticas bajo ciertas aproximaciones para el caso de evolución con un campo resonante y otro simultáneo fuera de resonancia. Se identificó al parámetro perturbativo que corresponde al cociente de la frecuencia de Rabi con la desintonía. Se identificaron las condiciones experimentales que se tienen que cumplir para que el campo desintonizado cause una contribución despreciable a la señal de gravimetría.

Financiamiento de CONACYT

C11. Método de Hartree-Fock aplicado a átomos multielectrónicos confinados por un potencial finito

El trabajo está centrado en el estudio de átomos multielectrónicos confinados por una esfera de pared penetrable (confinamiento por un potencial finito), donde el núcleo se encuentra en el origen. Este trabajo fue realizado bajo el contexto de Roothaan utilizando la metodología de Haartree-Fock. Se analiza la importancia de tomar en cuenta las condiciones a la frontera y el comportamiento asintótico correcto que debe cumplir la densidad electrónica en el átomo confinado [1-3]. Dentro de la metodología se propone un nuevo conjunto de funciones base [1]. Usualmente, un átomo confinado por una pared impenetrable ha sido usado como un modelo para estudiar efectos de confinamiento de energías orbitales, la principal conclusión alcanzada por este modelo es que las energías orbitales siempre se incrementan cuando el radio de confinamiento es reducido. Sin embargo, tal observación no es necesariamente válida para átomos confinados por una pared penetrable. La principal razón detrás de estos resultados es que para átomos con polarizabilidad grande como litio, berilio o fósforo, los electrones externos son deslocalizados cuando el confinamiento se impone y consecuentemente, los orbitales internos se comportan como en un átomo ionizado. Así mismo, no sólo basta argumentar cualitativamente (función de distribución radial) la deslocalización sino cuantitativamente, para esto hemos obtenido resultados empleado la entropía Shannon, cuantificando la localización y la deslocalización de la densidad electrónica de los átomos multieléctronicos confinados por ambas paredes (penetrable e impenetrable) en diferentes radios de confinamiento.

Agradecimientos a la beca otorgada por Conacyt Becario Núm. Becario 283261, a mi asesor de doctorado Dr. Jorge Garza Olguín y a las instalaciones de supercómputo y visualización en paralelo de UAM-Iztapalapa.

[1] M. Rodriguez-Bautista, C. Díaz-García, A. Navarrete-López, R. Vargas and J. Garza, *The Journal of Chemical Physics*, 143, 034103 (2015).

[2] E. Ley-Koo and S. Rubinstein, *J. Chem. Phys.*, 71, 351-357 (1979).

[3] J. L. Marin and S. A. Cruz, *J. Phys B: Atom. Mol. Opt. Phys.*, 25, 4365 (1992).

Mariano Rodriguez-Bautista¹
Norberto Aquino²
Rubicelia Vargas¹
Jorge Garza¹

¹*Departamento de Química,
UAM-I.*

²*Departamento de Física,
UAM-I.*

C12. Análisis de la transición $5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ en Rb para la optimización del anclado láser

Se presenta el análisis de los espectros de fluorescencia y absorción de la transición $5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ en rubidio, cuyo fin es el optimizar la señal de dispersión en función de la potencia de los láseres. Esta señal es usada para el anclado del láser de 776 nm que induce dicha transición.

O. López-Hernández
F. Ponciano-Ojeda
S. Hernández-Gómez
J. Flores-Mijangos
F. Ramírez-Martínez
J. Jiménez-Mier

El dispositivo experimental empleado para obtener estos espectros consiste en dos láseres contrapropagantes que inciden sobre una celda de átomos de rubidio a temperatura ambiente, excitando la transición de dos fotones $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$. Un láser de 780 nm induce el primer paso de la transición y el láser de 776 nm induce el segundo paso.

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

Variando la potencia y la polarización de los láseres se obtuvieron espectros bajo una amplia variedad de condiciones. La región de potencias exploradas va de los $20 \mu\text{W}$ a 3.1 mW para el láser de 780 nm y de $33 \mu\text{W}$ a 160 mW para el de 776 nm. El estudio consistió en hallar los valores óptimos para tener un anclado que se ajuste a los requerimientos de nuestro laboratorio. Adicionalmente se exploraron los fenómenos de ensanchamiento en las líneas atómicas (EIT, Autler-Townes) ya que se consiguieron potencias muy altas en el láser de 776 nm.

Se agradece al CONACYT por el apoyo brindado por medio de los proyectos de Ciencia Básica SEP-CONACYT 168498-11 y 168451-11; al PAPIIT por apoyo en el marco de los proyectos IA101714 y IN112516; así como al Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC) No. 232652.

C13. Estudio del efecto Autler-Townes en la transición cuadrupolar eléctrica $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$

Se estudia el efecto Autler-Townes en la transición prohibida $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$ en rubidio atómico. Para observar este efecto se utilizó un esquema de tres niveles en escalera $5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2} \rightarrow 6p_{3/2}$ en el cual el primer paso es una transición dipolar eléctrica (E1, línea D2) que se acopla fuertemente con un campo de radiación externo y el segundo es la transición prohibida (E2, cuadrupolar eléctrica) que es ~ 6 órdenes de magnitud menos probable que el paso E1. Este esquema de excitación se realizó mediante una espectroscopia de dos fotones libre de Doppler, dando así una señal de fluorescencia a 420 nm que resulta del decaimiento espontáneo $6p_{3/2} \rightarrow 5s_{1/2}$. Los espectros se tomaron en función de la potencia del primer láser ($5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$), registrándose primero un ensanchamiento de cada línea y luego un desdoblamiento típico del efecto Autler-Townes. Se realizaron ajustes a los espectros usando una expresión basada en un modelo teórico para estudiar la dependencia de los anchos y alturas de las líneas y las frecuencias de Rabi para los tres niveles. Se encontró un excelente acuerdo entre la teoría y las tendencias experimentales.

Se agradece el apoyo de los proyectos SEP-CONACYT 168451-11, PAPIIT IN110812, PAPIIT IN112516, y del Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC) No. 232652 por el apoyo otorgado para realización de este trabajo.

F. Ponciano-Ojeda
C. Mojica-Casique
S. Hernández-Gómez
O. López-Hernández
J. Flores-Mijangos
D. Sahagún
R. Jáuregui
F. Ramírez-Martínez
J. Jiménez-Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

C14. Observación y estudio de la transición prohibida $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{1/2}$ en rubidio atómico

Se presenta en este trabajo el registro de la transición prohibida $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{1/2}$ en rubidio atómico. Los experimentos se llevaron a cabo en una celda de vapor de rubidio a temperatura ambiente empleando un esquema de espectroscopia de dos fotones libre de Doppler. Uno de los haces excita el paso de preparación $5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$ (~ 780.2 nm) anclando la frecuencia del láser a la transición cíclica de la línea D2 del rubidio. El segundo haz incide de manera contra-propagante al primero y excita la transición $5p_{3/2} \rightarrow 6p_{1/2}$ (~ 917.5 nm), la cual está prohibida bajo las reglas de selección de la aproximación dipolar eléctrica. La producción de átomos en el estado $6p_{1/2}$ se determinó mediante la detección de la fluorescencia azul a 421 nm que resulta del decaimiento espontáneo al estado base $5s_{1/2}$. Se obtuvieron espectros con resolución de la estructura hiperfina del estado $6p_{1/2}$ y evidencia de excitación de distintos grupos de velocidad en el vapor de rubidio. Un modelo teórico de tres pasos (preparación, excitación prohibida y decaimiento) se utilizó para comparar las intensidades relativas de los picos experimentales, encontrando un buen acuerdo entre los valores teóricos y experimentales.

F. Ponciano-Ojeda
C. Mojica-Casique
S. Hernández-Gómez
O. López-Hernández
J. Flores-Mijangos
F. Ramírez-Martínez
D. Sahagún
R. Jáuregui
J. Jiménez-Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

Se agradece a los proyectos SEP-CONACYT 168451-11, PAPIIT IN110812, PAPIIT IN112516, y del Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC) No. 232652 por el apoyo otorgado para la realización de este trabajo.

C15. Comparación entre tres axicones utilizados para generar haces Bessel escalares

En este trabajo se presentan los distintos tipos de haces Bessel escalares generados con tres axicones distintos (uno fabricado en INAOE y dos comerciales de Altechna) así como algunas de sus características. La motivación del proyecto es promover la transición cuadrupolar eléctrica ($5P_{3/2} \rightarrow 6P_{3/2}$) en átomos de rubidio utilizando haces estructurados.

P. Ortega-Escorza
S. Hernández-Gómez
K. Volke-Sepúlveda
R. Jáuregui-Renaud
F. Ramírez-Martínez
J. Jiménez-Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

El montaje experimental consta de un láser de Titanio-Zafiro operando a 911 nm, un axicón que genera un haz Bessel de orden cero y un modulador de fase espacial (LCOS - SLM) que induce un vórtice en la fase del haz, modificando así el orden del Bessel. El diagnóstico de los haces se logra mediante un detector CCD, filtros de densidad neutra y en algunos casos un sistema de lentes.

Se agradece el apoyo de los proyectos:

- PAPIIT IN112516, “Estudio teórico y experimental de la interacción entre dos campos de radiación y átomos multinivel”.
- SEP-CONACYT 168451-11, “Medición de la transición cuadrupolar eléctrica $5p_{2P_{3/2}} - 6p_{2P_{1/2}}$ en rubidio en una trampa magneto-óptica”.
- Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC, No. 232652).

C16. Análisis experimental de una transición cuadrupolar eléctrica en átomos a temperatura ambiente usando un haz con estructura espacial

La línea D2 de rubidio permite poblar el estado $5P_{3/2}$ desde el cual, a través de una transición cuadrupolar eléctrica, es posible bombear electrones hasta el estado $6P_{3/2}$ ($\lambda=911$ nm). Esta transición ha sido estudiada ampliamente en el Laboratorio de Átomos Fríos del Instituto de Ciencias Nucleares utilizando haces gaussianos [Phys. Rev. A, 92, 042511 (2015)]. La motivación de este proyecto es substituir el haz gaussiano de 911 nm por un haz Bessel y detectar el efecto de la transferencia del momento angular orbital entre la luz y las coordenadas internas de los átomos fríos de rubidio que la absorben.

S. Hernández-Gómez
P. Ortega-Escorza
F. Ponciano-Ojeda
C. Mojica-Casique
F. Ramírez-Martínez
J. Flores-Mijangos
K. Volke-Sepúlveda
R. Jáuregui-Renaud
J. Jiménez-Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

En este trabajo se presenta el análisis de los espectros de fluorescencia azul (420 nm) generada a partir del decaimiento espontáneo $6P_{3/2} \rightarrow 5S_{1/2}$, para átomos en celda a temperatura ambiente excitados por un láser (haz gaussiano) con su frecuencia fija en la transición $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$ y otro láser (haz Bessel) cuya frecuencia se varía cerca de resonancia.

Los dos láseres inciden en la celda de manera contrapropagante y ambos con polarización lineal. Se tomaron espectros para distintos tamaños del haz Bessel y variando el ángulo relativo entre la dirección de la polarización de los dos haces de excitación. Dado que el experimento es muy sensible a fluctuaciones en la frecuencia de los láseres, cada espectro se tomó cerca de setenta veces, de modo que se pudo hacer un análisis estadístico de los mismos.

Para detectar los fotones azules utilizamos un tubo fotomultiplicador colocado a un costado de la celda conectado a un sistema de detección en fase (Lock-In) que filtra y amplifica la señal. El haz Bessel es generado a partir de un haz gaussiano amplificado que pasa por un modulador de fase espacial (SLM) y un axicón.

Se agradece el apoyo de los proyectos:

- PAPIIT IN112516, “Estudio teórico y experimental de la interacción entre dos campos de radiación y átomos multinivel”.
- SEP-CONACYT 168451-11, “Medición de la transición cuadrupolar eléctrica $5p2P_{3/2} - 6p2P_{1/2}$ en rubidio en una trampa magneto-óptica”.
- Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC, No. 232652).

C17. Tercer coeficiente del virial para un sistema con interacciones de rango cero

Recientemente desarrollamos un formalismo cuántico para calcular el tercer coeficiente del virial en términos de las energías de los estados ligados y de los corrimientos de fase, variables físicas que caracterizan la región asintótica de las colisiones entre los sistemas atómicos que constituyen el gas en estudio. El formalismo se obtuvo con un método hiperesférico y adiabático. En esta presentación se ilustra el formalismo para un sistema en una dimensión compuesto por partículas idénticas que interactúan con potenciales de rango cero. Las reacciones se estudian con el método hiperesférico y adiabático y se discuten las propiedades físicas del sistema atómico. En particular se calculan sus estados ligados y sus corrimientos de fase en una aproximación adiabática.

Para el caso de interacciones repulsivas en el modelo, se reproduce el primer término, en un desarrollo en potencias del momento relativo, del tercer coeficiente de la fugacidad exacto. En el caso de interacciones atractivas se calcula el tercer coeficiente de la fugacidad, en la aproximación adiabática, resultado no reportado en la literatura. Es importante señalar que el método hiperesférico y adiabático usado no está limitado a estudiar sistemas en una dimensión o formado por tres o menos partículas.

A. Amaya-Tapia¹
S. Y. Larsen²
M. Lassaut³

¹*Instituto de Ciencias Físicas,
UNAM,*

²*Department of Physics,
Temple University, USA.*

³*Institut de Physique Nucléaire,
CNRS-IN2P3,
Université Paris-Sud,
Université Paris-Saclay, Francia.*

C18. El efecto Autler-Townes en los espectros de ^{87}Rb atómico dentro de una trampa magneto-óptica (MOT).

El presente trabajo muestra dos series de espectros en los cuales es observable el efecto Autler-Townes o efecto Stark AC, así como su dependencia con respecto a la potencia y desintonía de los láseres utilizados para los procesos de excitación en los experimentos de espectroscopia realizados en el laboratorio de átomos fríos del ICN-UNAM para la transición de dos fotones $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$ en ^{87}Rb atómico dentro de la trampa magneto óptica (MOT).

G. Domínguez-Mandujano
O. Lazo-Arjona
O. López-Hernández
C. Mojica-Casique
J. Flores-Mijangos
F. Ramírez-Martínez
J. Jiménez-Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

El efecto Autler-Townes o efecto Stark AC consiste en el desdoblamiento de los niveles de energía de un sistema atómico cuando éste interactúa con un intenso campo de radiación. La trampa magneto óptica hace uso de dos láseres de 780 nm: uno de ellos conocido como láser de enfriamiento y el otro llamado de rebombeo, que enfrían y atrapan a los átomos de rubidio excitándolos repetidamente del estado base $5S_{1/2}$ a un primer estado excitado en el multiplete $5P_{3/2}$. Para lograr una transición de dos fotones se necesita excitar los átomos del estado $5P_{3/2}$ a un nivel superior. En el presente trabajo dicho nivel superior fue el estado excitado $5D_{5/2}$ por lo que se hizo incidir en la nube de átomos atrapada en la MOT un láser de 776 nm para generar la segunda transición.

El desdoblamiento de las líneas espectrales es causado por la fuerte intensidad del haz de enfriamiento dando como resultado una separación de los niveles hiperfinos de energía entre el estado base y el estado $5P_{3/2}$. En este caso, dicho desdoblamiento se observó al registrar la fluorescencia de 420 nm proveniente de la nube de átomos, la cual es producida cuando una parte de los átomos en el estado $5D_{5/2}$ decaen al nivel $6P_{3/2}$ y posteriormente al estado base $5S_{1/2}$.

En los espectros registrados se aprecian los dobletes generados en cada camino de transición, debidos al vestimiento de los niveles hiperfinos del estado $5P_{3/2}$ por el campo eléctrico de la radiación. Particularmente el doblete más evidente se da en el primer pico de transición; que corresponde al camino $5S_{1/2}; F=2 \rightarrow 5P_{3/2}; F'=3 \rightarrow 5D_{5/2}; F''=4$.

Las series de espectros de la transición de dos fotones fueron generadas al variar la frecuencia de la segunda componente de radiación (láser de 776 nm) y fueron obtenidas para dos situaciones experimentales: 1) variando la intensidad del haz de enfriamiento mientras se mantiene fija su desintonía y variando la sintonía de ese mismo dejando fija su intensidad.

C18. El efecto Autler-Townes en los espectros de ^{87}Rb atómico dentro de una trampa magneto-óptica (MOT).

(continuación)

Así mismo se presentan las gráficas de las alturas relativas de cada pico, el ancho del primer miembro del doblete y de la separación entre los dos miembros del doblete, ésta última junto con su función de ajuste obtenida del análisis teórico del átomo de dos niveles, como función de la potencia y de la desintonía del primer campo de radiación.

Agradecimientos.

Se agradece el apoyo a los proyectos: Ciencia Básica CONACyT 168451-11 y 168498-11; Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC No. 232652); PAPIIT IA101714 e IN112516, para la realización de este proyecto.

C19. A DFT study of interaction between vanadium oxide and HY-zeolite

The study of the interaction between vanadium oxide and the HY-zeolite using molecular dynamics interaction was carried out for two systems: i) when vanadium oxide penetrates a zeolite ring at its center, and ii) when vanadium oxide impacts the zeolite surface model. The dynamical effects are used to investigate the reduced activity and eventual degradation of the catalyst for the vanadium oxide presence. In the first case, we observe the breaking of an OH-bond that belongs to the acid site. This is related to an initial destruction stage of the catalyst crystal structure. In the second case, vanadium oxide is weakly adsorbed onto the zeolite surface. Density functional theory, with nonlocal exchange and correlation functionals and basis set of double numerical accuracy, is used to analyze the electronic structure. It was used in combination with Born-Oppenheimer dynamics to perform calculations.

Keywords: HY-Zeolite, vanadium oxide, density functional theory, molecular dynamics.

Acknowledgment. IPZR thanks Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México.

Irineo Pedro Zaragoza Rivera

*Instituto Tecnológico de
Tlalnepantla, Division de
Posgrado e Investigación.*

C20. Generalized absorption model for CO at high x-ray intensity

Understanding the ultrafast motion of electrons and holes after the interaction with ultra- intense x-ray radiation is fundamental to a broad range of applications.

In this work we study the ultrafast electronic response of a molecular gas of carbon monoxide (CO) to the interaction with a x-ray Free-Electron Laser (XFEL) beam. X-ray Free-Electron Lasers (XFELs) are novel laser sources that produce x-ray pulses of unprecedented high intensity and in the femtosecond range.

A theoretical approach based on a molecular rate equation model enables us to determine for a single molecule the time-dependent probabilities of all the energetically accessible involved electronic states. Our model keeps track of the photoionization, fluorescence decay and Auger decay events. We couple the rate equations to the evolution of the XFEL photon flux to account for the attenuation of the pulse as it propagates along the gas- phase medium. By considering the evolution of the photon flux, we therefore simulate the electronic dynamics for each molecule in the medium.

Numerical simulations predict sequential multi-photoionization of the sample, which depends on XFEL beam parameters, such as the photon fluence, pulse duration and photon energy. It is found that CO under the influence of a XFEL beam interacts several times with a single x-ray pulse, by a sequence of inner-shell photoionization events followed by Auger decay. Pulses with comparable energy but decreasing pulse duration favor the production of lower charge states, whereas pulses with increasing duration lead to severe electronic damage and therefore to higher charge states. Moreover, CO becomes quasi-transparent at high intensities, owing to core-hole formation and to the reduction of the absorption probability of the created ion.

ACKNOWLEDGEMENTS

We acknowledge the financial support from the Max-Planck-Gesellschaft and from the excellence cluster “The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging –Structure, Dynamics and Control of Matter at the Atomic Scale” of the Deutsche Forschungsgemeinschaft.

Miguel A. Silva^{1,2*}
Ludger Inhester^{2,3}
Sang-Kil Son^{2,3}
Robin Santra^{2,3}
Nina Rohringer^{1,2}

¹*Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie, Germany.*

²*Center for Free-Electron Science (CFEL), Germany.*

³*The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging, Germany.*

**Current address: Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM.*

C21. Implementación de un tubo fotomultiplicador contador de fotones para la detección de la fluorescencia de 420 nm en experimentos de interacción multifotónica en rubidio atómico.

En este trabajo se presenta la puesta en operación de un sistema de detección de fotones (Hamamatsu) formado por una cabeza contadora H8259 y una unidad contadora C8855-01. El objetivo es utilizar este sistema para registrar la luz de 420 nm producida por el decaimiento $6P_{1/2} \rightarrow 5S_{1/2}$ en rubidio atómico. En particular se trabajó para que el sistema pudiera ser utilizado en los experimentos donde la fluorescencia es generada por la transición prohibida $5P_{3/2} \rightarrow 6P_{3/2}$ y que hemos podido estudiar empleando la técnica de detección en fase con muy buenos resultados. Ahora con el contador de fotones se espera mejorar la sensibilidad de nuestro sistema para poder aplicarlo en varios experimentos de espectroscopia multifotónica donde destacan: el estudio de la transición prohibida $5P_{3/2} \rightarrow 6P_{3/2}$, producción de átomos Rydberg y formación de iones de Rb. Presentamos avances en el montaje y la operación del contador de fotones así como el desarrollo del software diseñado para registrar y almacenar las cuentas.

Los resultados expuestos ilustran con claridad las ventajas y desventajas del nuevo sistema.

Se agradece el apoyo otorgado para la realización de este trabajo a los proyectos: de Ciencia Básica CONACyT 168451-11 y 168498-11; el Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC, No. 232652), y los proyectos PAPIIT IA101714 y IN112516.

E. Ruiz-Martínez
C. Mojica-Casique
J. Flores-Mijangos
F. Ramírez-Martínez
J. Jiménez- Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
UNAM.*

C22. Estudio de la interacción de líquidos Sinódicos con hidratos de metano con 15 y 20 moléculas de agua

En este estudio, hemos considerado dos clatratos de metano formados por una jaula de 15 y 20 moléculas de agua ($n=15$, $n=20$) respectivamente, junto con una molécula huésped de CH₄, en interacción con un líquido iónico (LI), que en este caso es el bromuro de 1-hexil-3-metil-imidazolina. La estructura del clatrato $n=15$ previamente fue obtenida por Bravo y Saint-Martín¹, incluidos efectos dispersivos y resultó ser muy estable. Este clatrato es precursor del clatrato $n=20$, donde cinco de las moléculas de agua yacen en la segunda esfera de hidratación y es 1.2 kCal/mol más estable que la estructura 5¹² (dodecaedro), bien conocida por ser la unidad del cristal I. En este trabajo, hemos puesto en interacción a los clatratos $n=15$ y $n=20$ con un LI usando un funcional de la densidad con fuerzas de dispersión tipo van der Waals (vdW).

La correcta descripción de las fuerzas de dispersión (vdW) es crucial en este tipo de sistemas, con interacciones intermoleculares, en macromoléculas y nanopartículas.^{2,3} Hemos considerado tres orientaciones en la interacción: una vertical y otra horizontal, ambas apuntando al hidrato hacia una de sus caras hexagonales y siendo respectivamente una perpendicular tomando el eje mayor del LI y la otra paralela. Se llevó a cabo además una tercera orientación, con una interacción lateral del LI hacia el hidrato de metano, acercándose lateralmente a la misma cara hexagonal. Los resultados muestran que la interacción horizontal y lateral tiende a estabilizar al hidrato, mientras que la interacción vertical, desestabiliza notablemente a la jaula de agua. En el sistema LI con el clatrato $n=20$ solo hay una interacción, ya que todas las caras de este clatrato están formadas con cinco moléculas de agua, la cual muestra una gran desestabilización.

1. G. Bravo, H. Saint-Martin. *Int. J. Quant. Chem.* **2012**, 112, 3655
2. A. Tkachenko, M. Scheffler. *Phys. Rev. Lett.* **2009**, 102, 073005
3. E. R. McNellis, J. Myer, K. Reuter. *Phys. Rev. B.* **2009**, 80, 205414

Agradecimientos.

Agradecemos el apoyo del proyecto D.61017 que actualmente se desarrollan en el IMP.

Graciela Bravo-Pérez^a
Ascención Romero-Martínez^b
Isidoro García-Cruz^c
Humberto Saint-Martin^d

^aGerencia de Desarrollo de
Materiales y Productos Químicos,
IMP.

^bGerencia de Herramientas y
Sistemas para Pozos e
Instalaciones, IMP.

^cGerencia de Refinación de
Hidrocarburos, IMP.

^dInstituto de Ciencias Físicas,
UNAM.

C23. Identificación de operadores de desplazamiento de momento angular y cambio de especie entre polinomios de Lamé de una variable

En el desarrollo de la teoría de momento angular esferoconal [1], la identificación de tres familias de operadores que conectan eigenfunciones de Lamé $\Lambda_{n_1}^{\ell[A]}(\chi_1)\Lambda_{n_2}^{\ell[B]}(\chi_2)$ con diferentes valores de momento angular ℓ , especies $[AB]$ y excitaciones energéticas $n_1 n_2$ [2], ha jugado un papel muy importante. En esta contribución se reporta la identificación de operadores para las funciones de Lamé individuales $\Lambda_{n_i}^{\ell[A]}(\chi_i)$ para $i=1,2$, que conectan estados vecinos con $\ell' = \ell \pm 1$, paridades opuestas, y especies complementarias $[1,dc,ds,cs] \rightleftharpoons [dcs,s,c,d]$, respectivamente.

Eugenio Ley Koo¹
Ricardo Méndez-Fragoso²

¹Instituto de Física, UNAM.
²Facultad de Ciencias, UNAM.

Los elementos claves en estos operadores son el operador de derivada y la multiplicación por los factores de remoción de singularidades, $[A]$, detrás de la clasificación por paridad de estados. Se ilustran ejemplos explícitos de las conexiones proporcionadas por estos elementos y sus combinaciones de operadores.

[1] R. Méndez-Fragoso y E. Ley-Koo. Angular Momentum Theory in Bases of Lamé Sphericoonal Harmonics. *Advances in Quantum Chemistry* 71, Ch. 6 (2015) 115.

[2] R. Méndez-Fragoso y E. Ley-Koo. Ladder Operators for Lamé Sphericoonal Harmonic Polynomials. *SIGMA* 8 (2012), 074.

C24. Interacción radiación-materia en nano-escala: fotones, termodinámica y coherencia

La interacción de la radiación con la materia a nano-escala es un campo emergente en el que se estudian fenómenos cuya descripción no es totalmente cuántica, ni totalmente clásica. Un ejemplo es el caso en el que los fotones absorbidos dan lugar a fenómenos termodinámicos (fenómeno fototérmico) que a escalas mayores no son tan evidentes. Otro ejemplo es aquel en el cual un medio fotónico desordenado aprovecha la propiedad anterior para disipar calor y permite la amplificación estimulada de la luz y con ello la formación de un campo coherente. Enseguida describimos como estos ejemplos se manifiestan en la práctica.

En el primer ejemplo, cuando el nanomaterial es un conductor con propiedades plasmónicas y sus dimensiones son menores o cercanas a la escala de Mie, la conductividad térmica decae con las dimensiones de la partícula y los fenómenos termodinámicos se vuelven más notorios aún con una menor absorción de energía. En esas condiciones, ocurre un incremento local de temperatura como función del tamaño de la partícula, así como de su conductividad térmica y sección transversal de absorción. Dicho gradiente térmico se estima estadísticamente asumiendo una colectividad canónica y discretización de estados de energía. El segundo ejemplo se ilustra en nanomateriales dieléctricos diluidos en una matriz también dieléctrica pero ópticamente activa: medio desordenado. En este medio el incremento de la radiación de excitación da lugar a procesos de absorción y emisión de fotones de manera aleatoria con disipación de calor. Cuando la densidad de fotones, el número de partículas y el número de absorbentes saturables alcanza valores críticos (condición de Letokhov), ocurre que las ganancias (emisión estimulada) superan a las pérdidas (decaimientos espontáneos, radiativos y no-radiativos) y el campo emergente resulta con propiedades de coherencia óptica similares a las de un láser con cavidad resonante, con la variante de que el campo emergente se propaga como función de la geometría del medio activo.

En el presente trabajo, mostramos resultados teóricos respecto al primer caso y resultados experimentales respecto al segundo.

Agradecimientos.

*Al CCADET por el apoyo económico proporcionado para realizar este proyecto.

**Al posgrado de Ingeniería Eléctrica y a CONACyT por el apoyo económico de becas nacionales.

Ángel E. Escárcega-Mendicuti^{1*}
Marcela Rodríguez-Matus^{2**}
Crescencio García-Segundo²

¹*Facultad de Ciencias, UNAM.*

²*Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM.*

C25. Sistema Láser para Producir Luz Correlacionada Cuánticamente con Rubidio Atómico

El objetivo del Laboratorio de Átomos Fríos y Óptica Cuántica, IF-UNAM, es crear sistemas cuánticos híbridos que permitan realizar estudios de información, tomografía y/o metrología cuántica. Nuestro primer proyecto es construir una fuente de fotones correlacionados cuánticamente a partir de rubidio atómico. Con este fin crearemos un repetidor cuántico en un proceso mezclado de cuatro ondas para una configuración diamante. En este trabajo presentamos nuestros avances en la construcción y estabilización del sistema láser de dicho aparato experimental. Este sistema será capaz de crear trampas magneto-ópticas y excitar las cuatro transiciones que hemos elegido para este proceso.

Luis A. Mendoza López
 Jorge G. Acosta Montes
 Irvin F. Aguillón Ángeles
 Adrián Vallejo Martínez
 Diego Sierra Costa
 Diego Martínez Cara
 Luis Y. Villegas Aguilar
 Yaneth M. Torres García
 Daniel Sahagún

Instituto de Física, UNAM.

Agradecemos el apoyo del CONACyT por medio del programa de Laboratorios Nacionales (proyecto no. LN260704), a la Coordinación de la Investigación Científica de la UNAM por la aportación de recursos concurrentes y a la DGAPA, UNAM (proyecto IA103216).

C26. Caracterización de un horno para calentar celdas de vidrio con vapor de rubidio

En este trabajo se presenta la caracterización de un horno que será empleado para calentar celdas de vidrio con vapor de rubidio. El propósito es calentar y controlar la temperatura de la celda para llevar a cabo experimentos de espectroscopia láser multifotónica en rubidio atómico. El propósito de este sistema es incrementar la densidad atómica en el interior de la celda y así aumentar la probabilidad ya sea de la producción de átomos Rydberg o de la observación de transiciones prohibidas. El sistema puede calentar una celda partiendo de temperatura ambiente (19°C) hasta 120° C usando un sistema de control que emplea la lógica difusa para mantener la celda a una temperatura fija. Se presentan varios espectros de absorción a diferentes temperaturas entre 20°C y 60°C y del análisis se estima el incremento en la densidad de átomos como función de la temperatura.

Alcántar Villegas Luis Enrique
 Espino Núñez Arturo
 Flores-Mijangos Jesús
 Ramírez- Martínez Fernando
 Jiménez-Mier José

*Instituto de Ciencias Nucleares,
 UNAM.*

Se agradece el apoyo otorgado para la realización de este trabajo a los proyectos de Ciencia Básica CONACyT 168451-11 y 168498-11; el Laboratorio Nacional de Materia Cuántica, Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC, No. 232652), y los proyectos PAPIIT IA 101714 Y IN112516.