

TaDEM 2019

10^o Taller de Dinámica y Estructura de la Materia

(Física atómica, molecular y óptica)



Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

10-12 de junio, Auditorio ICF

Cuernavaca, Morelos, México

Organizadores:

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

Abdel Gafour El Hachimi, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM*

Olmo González Magaña, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM*

Ricardo Méndez Fragoso, *Facultad de Ciencias, UNAM*



Instituto de Ciencias Físicas



Instituto de Ciencias Nucleares



Facultad de Ciencias

Prefacio

El Taller de Dinámica y Estructura de la Materia (TaDEM) surge para fomentar la difusión de la ciencia que se desarrolla en el área de Física Atómica, Molecular y Óptica (FAMO), con particular énfasis en la participación de la comunidad joven, el intercambio de estudiantes y crear redes de trabajo y proyectos.

La idea de tener un TaDEM surge cuando los Drs. J. I. Jiménez Mier y Terán, Antonio Juárez y Remigio Cabrera-Trujillo vieron en el 2009 la necesidad de tener un escaparate con estas características. Así el 1^{er} taller se lleva a cabo en el Instituto de Química (IQ), UNAM en el 2010. El 2^{ndo} TaDEM tiene como sede el Instituto de Ciencias Físicas (ICF), UNAM en el 2011. El 3^o se lleva a cabo en combinación entre el IQ y el Instituto de Ciencias Nucleares (ICN), UNAM en el 2012. En el 4^o taller se incorpora la UAM-Iztapalapa y se lleva a cabo en el 2013. El 5^o taller tiene como sede el ICF en el 2014. El 6^o taller se lleva a cabo en el Instituto de Física de la UNAM en el 2015. El 7^o lo lleva a cabo la Facultad de Ciencias, UNAM en el 2016. El 8^o taller es en la UAM-Iztapalapa en el 2017 y el 9^o taller lo lleva a cabo la Universidad Autónoma de San Luis Potosí en el 2018.

A diferencia de otros talleres y conferencias, TaDEM tiene como objetivo principal el proporcionar a los estudiantes de maestría, doctorado y postdoctorado un escenario donde presenten su trabajo de manera oral y desarrollen sus habilidades de exposición.

En esta, su 10^a edición, TaDEM se consolida como un nicho importante donde la comunidad científica de México en el área de FAMO puede compartir, en un ambiente amigable y creativo, sus actividades científicas, inquietudes y visión del futuro. TaDEM ilustra de manera clara que el objetivo inicial de este evento, que es coaligar y vincular a la comunidad de FAMO, se está cumpliendo con creces. En este mismo espíritu, este décimo taller pretende seguir fomentando y construyendo la colaboraciones y fortalecimiento de la comunidad mexicana que dedica su esfuerzo y afanes al estudio de la materia, en cualquiera de sus fases, y su interacción con la luz.

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

mencionar solo algunos de los temas que tendremos oportunidad de compartir en este 10^o TaDEM. Es un motivo de orgullo el que una comunidad científica relativamente pequeña, como lo es la mexicana, esté participando y haciendo aportaciones importantes en estas áreas de estudio. Es indudable que las contribuciones más profundas e importantes provienen del trabajo de grupos experimentales y teóricos que conjuntan sus capacidades y esfuerzos para contribuir con ciencia del más alto nivel. Un primer paso para fomentar estas colaboraciones consiste en conocerse y compartir con la comunidad las capacidades y planes de desarrollo de cada uno de los grupos que compartimos el entusiasmo e interés por el estudio de los átomos y las moléculas.

Esperamos que el presente taller contribuya a la cohesión y formación de nuevas colaboraciones entre los participantes y al fortalecimiento de las que ya existen actualmente. Los organizadores de este taller hacemos votos porque esta reunión constituya, nuevamente y como en ocasiones anteriores, una clara señal de continuidad para este proceso de comunicación, creación de vínculos y trabajo conjunto, del que se nutren las comunidades científicas de alto impacto en el mundo.

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

ICF, UNAM, Cuernavaca, Morelos 10 de junio
del 2019

Los organizadores

Programa TaDEM 2019

HORARIO	10/06 Lunes Auditorio ICF	11/06 Martes Auditorio ICF	12/06 Miércoles Auditorio ICF
8:30-9:00	Registro	Registro	Registro
9:00-9:30	(Chair: Olmo González) Inauguración y O1 Frank José Salas Sánchez	(Chair: R. Cabrera-Trujillo) O11 César Martínez Flores	(Chair: A. G. El Hachimi) O21 Mauricio García Vergara
9:30-10:00	O2 Guillermo Hinojosa	O12 Armando Ayala Moreno	O22 Diego Alejandro Lancheros Naranjo
10:00-10:30	O3 Abdel El Hachimi	O13 Adalberto Corella Madueño	O23 Gustavo Medina Ángel
10:30-11:00	O4 Ana Cristina Ramírez Gallardo	O14 Carlos Muñoz Garay	O24 Daniel Sahagún
11:00-11:30	CAFE	CAFE	CAFE
11:30-12:00	(Chair: G. Hinojosa) O5 Horacio Olivares Pílón	(Chair: Isidoro García) O15 Marco Antonio Villanueva	(Chair: D. Sahagún) O25 Heichi Horacio Yanajara Parra
12:00-12:30	O6 Marisol Rodríguez Arcos	O16 Socorro Valdez	O26 Alejandra López Vázquez
12:30-13:00	O7 Marisol Bermúdez Montaña	O17 Benita Turiján Clara	O27 Antonio A. Fernández-Marín
13:00-13:30	O8 J. Jiménez-Mier	O18 José Humberto Torres	O28 José Récamier
13:30-16:00	COMIDA (CAFÉ 15:30-16:00)	COMIDA (CAFÉ 15:30-16:00)	COMIDA
16:00-16:30	(Chair: J. I. Jiménez) O9 Griselda Domínguez Mandujano	(Chair: C. Martínez) O19 Ricardo Méndez Fragoso	
16:30-17:00	O10 Jesús Flores Mijangos	O20 Eugenio Ley Koo	
17:00-17:30	POSTERS (C1-C10)		
17:30-18:00	POSTERS (C1-C10)		COLOQUIO: O29 Rocío Jáuregui

Nota: Las comidas están cubiertas en su registro. Durante el taller se anunciará el lugar de la comida y se proporcionarán los boletos.

Las pláticas serán de 25 min + 5 min de preguntas.

Posters (carteles) tendrán una presentación de 3 min (oral) y al final los detalles se presentarán en los pánels.

INDICE

Programa TaDEM 2019	4
O1 Dinámica molecular en un ensamble supramolecular derivado de un ácido borónico con huéspedes aromáticos	7
O2 Avances sobre las propiedades colisionales de aniones moleculares simples	8
O3 Stopping cross section for H atoms colliding on H ₂ , N ₂ and O ₂ gases: Low energy electronic, nuclear, and rovibrational contributions	9
O4 Simulación DPD en el transporte de aceite crudo pesado.....	10
O5 Moléculas diatómicas: Curvas de energía potencial.....	11
O6 Estudio de potenciales generales en 2D mediante el grupo unitario U(3): Aplicación al subóxido de carbono	12
O7 Simulación del espectro Raman del dióxido de carbono	13
O8 La tabla periódica en rayos x	14
O9 Desarrollo del sistema experimental para la producción de átomos de Rydberg dentro de una trampa magneto óptica (MOT).	15
O10 Estudio de la fluorescencia de 780 nm generada por la excitación de luz láser a 420 nm y 780 nm en celdas de vidrio con vapores de rubidio atómico.	16
O11 Átomo de helio (He 1s ² 1s) confinado por una cavidad esférica impenetrable y penetrable 18	
O12 Estudio variacional del átomo de hidrógeno confinado por fronteras cerradas y abiertas ..	19
O13 Átomo de Helio confinado en una caja esferoidal penetrable	20
O14 Descripción del apagamiento de la fluorescencia de los aminoácidos tirosina y triptófano por ergosterol.	21
O15 Estudio de la interacción entre ZnO y TiO para determinar las propiedades electrónicas....	22
O16 Estudio por primeros principios de la transformación cristalina del aluminio	23
O17 Estudio teórico de la solvatación acuosa de SmCl ₂ a través del modelo de cúmulos a nivel DFT. 24	
O18 Soluciones Exactas y Completas de Antena y Cavidad de Resonancia Toroidal Dipolar T1...25	
O19 Soluciones Exactas y Completas de Antena y Cavidad de Resonancia Esferoconal Cuadrupolar Eléctrica E2.....	26
O20 Rompimiento y Restauración de Simetrías y Efectos Topológicos en Sistemas Cuánticos y Electromagnéticos	27
O21 Extracting an accurate model for permittivity from experimental data: hunting complex poles from the real line.....	28
O22 Método Analítico de correcciones perturbativas en Interferometría Atómica.	29
O23 Estructura de la radiación óptica de Cherenkov en un medio compuesto tridimensional de nanotubos de carbono.....	30

O24	Conversión ascendente en estructura de fase via mezclado de cuatro ondas en gases atómicos.....	31
O25	Estudio del ion molecular de Hidrógeno	33
O26	Diseño y caracterización de una cavidad de anillo con perfil plano	34
O27	Absorción acústica por meta-átomos hechos de aerogel.....	35
O28	Estudio de los efectos combinados de una no linealidad tipo Kerr y un átomo de dos niveles sobre un modo no estacionario de una cavidad.....	36
O29	Óptica cuántica y sistemas atómicos: un nuevo vistazo a fenómenos conocidos.....	37

CARTELES (POSTERS)

C1	Medición de las propiedades de ionización y transporte de electrones en THF mediante la técnica pulsada de Townsend.....	38
C2	Análisis de las Fluctuaciones en Correlaciones de Fotones.....	39
C3	Resultados Ilustrativos de Eigenenergías y Eigenfunciones en el Efecto Zeeman del Átomo de Hidrógeno Confinado en Ángulos Diedros.....	40
C4	Diseño, construcción y caracterización de un láser de cavidad extendida en configuración cat-eye con emisión en 780nm.	41
C5	Espectroscopia de fluorescencia saturada para la línea D2 en rubidio.....	42
C6	Estudio de potenciales efectivos en 3d mediante el grupo unitario U(4)	43
C7	¿Conviene tener un B.E.C. para gravimetría atómica?.....	44
C8	Sistema de Amarrado Absoluto de Frecuencia a una Cavidad de Ultra Baja Expansión	45
C9	Estudio de las propiedades electrónicas del $\text{TiO}_2:\text{Sm}^{3+}$	46
C10	Estudio teórico de la morfología del ZnO-M (M = Al, Ag) y de las propiedades electrónicas .	47
	Índice de participantes.....	48

O1 Dinámica molecular en un ensamble supramolecular derivado de un ácido borónico con huéspedes aromáticos

Frank José Salas Sánchez,¹ Eva Cecilia Vargas Olvera,¹ Braulio Rodríguez Molina,² Herbert Höpfel¹

¹ *Centro de Investigaciones Químicas, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, Cuernavaca, 62209, Morelos, México.*

² *Instituto de Química //Facultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México 04510, México*

En el presente trabajo se presentan los resultados de un estudio que ha explorado la dinámica reorientacional de moléculas de benceno confinadas dentro de las cavidades en un sólido cristalino formado de una molécula anfitrión (aducto entre el catecoléster del ácido 2,4-difluorfenilborónico y 4,4'-bipiridina). Para la creación de los campos de fuerza se emplearon los parámetros de Lennard-Jones (sigma y epsilon) del potencial OPLS/AA. La determinación de las dimensiones moleculares del anfitrión en el estado sólido ha permitido comparar las distancias de enlace e interatómicas, mostrando un buen acuerdo con el experimento (análisis por DRX). Se determinaron la energía de activación del proceso dinámico y la densidad del sólido a diferentes temperaturas.

Agradecimientos

FJSS agradece a PRODEP por la beca posdoctoral que hace posible la realización de este trabajo. ECVO agradece a CONACyT por la beca de doctorado.

O2 Avances sobre las propiedades colisionales de aniones moleculares simples

G. Hinojosa¹, A. Ramírez-Solís², A. Lira², A. A. Martínez²

¹*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Ap. Postal 43-8, Cuernavaca, 62251 Morelos, México*

²*Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca, Morelos 62209. México.*

Los aniones moleculares simples se forman cuando una molécula relativamente simple atrapa un electrón extra y su carga eléctrica neta es negativa. Estos iones son abundantes y tienen una función fundamental en plasmas fríos, en las atmósferas de los planetas, en la atmósfera terrestre y hasta en el espacio interestelar. Su estructura es difícil de predecir porque el potencial de amarre para estos iones es muy pequeño, decae rápidamente como función de la distancia y son especialmente sensibles a las reglas de exclusión. Además, la forma en que se crean no se conoce bien, el mecanismo por el cual sus poblaciones se mantienen no se sabe con certeza y son sorprendentemente estables tanto en la escala atómica como en la escala macroscópica.

Se presenta evidencia experimental de la meta-estabilidad de algunos aniones de CH_x^- , y reportamos dos propiedades colisionales que resultan de interacciones con gases de interés atmosférico: la formación de estados metaestables con tiempos de vida τ del orden de μs y su indivisibilidad a velocidades similares a las del viento solar.

Agradecimientos.

UNAM PAPITT IN 109-317. El apoyo técnico de Héctor Hinojosa, Armando Bustos, Guillermo Bustos, Ulises Anaya y Reyes García.

O3 Stopping cross section for H atoms colliding on H₂, N₂ and O₂ gases: Low energy electronic, nuclear, and rovibrational contributions

A.G. El Hachimi, R. Cabrera-Trujillo

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

In this work, we present a quantum-classical molecular dynamic study of hydrogen atoms interacting with H₂, N₂, and O₂ molecules in the gas phase. The collision energy is in the range of 1 to 100 eV. Our calculations were performed by two methods: a Density-Functional Tight-Binding (DFTB) method and an Electron-Nuclear Dynamic (END) calculation. A study of the potential energy curves allows us to determine the correct set of Slater-Koster parameters, to describe properly the collision, finding that the MIO-1-1 Slater Koster potentials provides a good agreement to ab initio DFT potential energy curves. Due to the symmetry of the diatomic molecules, we use three different orientation to determine the energy loss to carry out orientational averages. We decompose the projectile energy deposition as electronic, roto-vibrational, and nuclear energy gain into the target. Our results are compared with END calculation and experimental data. We find that for low energy DFTB+ and END are in good agreement, but as the projectile energy increases, DFTB+ theory cannot estimate the stopping power found by experimental and END calculations. This is due to the DFTB+ limitations to account for excitations in a dynamical process.

AGEH acknowledges support from DGAPA-UNAM for a postdoctoral fellowship. RCT acknowledges support from grant DGAPA-PAPIIT-UNAM IN-106-611.

O4 Simulación DPD en el transporte de aceite crudo pesado

Ana Cristina Ramírez Gallardo, Carlos Lira Galeana, Isidoro García-Cruz
Instituto Mexicano del Petróleo
Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152. Col. San Bartolo Atepehuacan, Deleg.
Gustavo A. Madero, CDMX 07730
igarcia@imp.mx

La dinámica de grano grueso y en específico la de partícula disipativa (DPD) es una metodología ampliamente utilizada en el estudio de sistemas complejos, desarrollado para estudiar el comportamiento hidrodinámico y termodinámico de fluidos. En este trabajo se llevó a cabo un estudio teórico sobre la estabilidad de emulsiones para dos aceites pesados (H) y uno extrapesado (EH), para estudiar el transporte del hidrocarburo. Para la simulación con dinámica de grano grueso se consideraron los datos de composición de SARA medidos para cada muestra de petróleo crudo. En los sistemas de emulsión estudiados se utilizaron tensoactivos basados en celobiosido y en etoxilato de nonilfenol.¹

Por otra parte, se implementó un nuevo enfoque a escala múltiple para el proceso de deposición de asfaltenos en tuberías de hematita en condiciones de flujo. Para ello, se usaron simulaciones DPD para describir la interacción entre fluido (hidrocarburos) y la superficie de hematita. Las simulaciones MD se implementaron para calcular la interacción superficie-asfalteno que describe la energía de adhesión, mientras que las simulaciones DPD se usaron para evaluar el espesor adsorbido de asfaltenos en función de la velocidad del flujo (resistencia frente a energía de adhesión). La energía de arrastre se representó utilizando el método de flujo Poiseuille a través de la resistencia al corte aplicada al sistema que simula las condiciones de flujo.²

Los modelos y métodos se validaron utilizando tres cálculos diferentes: la tensión interfacial, la interacción hematita-asfalteno y el espesor de adsorción de asfaltenos en la superficie. En todos los casos, los resultados fueron contrastados con mediciones experimentales obteniendo una excelente aproximación entre ellos. Los resultados también muestran que la capa adsorbida de asfaltenos en la superficie podría eliminarse a altas velocidades de flujo, ya que las energías de arrastre superan las energías de adhesión del asfalteno en la superficie.

¹ D. Valencia, J. Aburto, I. García-Cruz. *Molecules* **2013**, 18, 9441-9450

² I. Moncayo-Riascos, J. De León, B. Hoyos, J. García-Martínez, I. García-Cruz, C. Lira-Galeana. *Enviado al JPS&E*, **2019**.
Hoyos, J. García-Martínez, I. García-Cruz, C. Lira-Galeana. *Enviado*, **2018**

Agradecimientos

Los autores agradecen el soporte económico a través del proyecto Y.61023 CEMIE-Bioturbosina

O5 Moléculas diatómicas: Curvas de energía potencial

Horacio Olivares-Pilón

*Departamento de Física, Universidad Autónoma
Metropolitana-Iztapalapa, Apartado Postal 55-534, 09340 México,
D.F., Mexico*

Alexander Turbiner

*Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional
Autónoma de México, Apartado Postal 70-543, 04510 México,
D.F., Mexico*

En este trabajo se presentan los elementos de una teoría general para la construcción de la curva de energía potencial para moléculas diatómicas. La aproximación se basa en el análisis de los comportamientos de la energía como función de la distancia entre las moléculas R en dos dominios: *i)* $R \rightarrow 0$ y *ii)* $R \rightarrow \infty$. La forma analítica de la curva de energía de potencial se construye utilizando un aproximante de Padé $P[N/M]$ el cual reproduce los dos casos límites $R \rightarrow 0$ y $R \rightarrow \infty$. En general este procedimiento proporciona 3-4 cifras significativas en la energía total.

A partir de la expresión analítica de la curva de energía potencial, es posible resolver la ecuación de Schrödinger para el movimiento nuclear y obtener los estados vibracionales y rotacionales de estas moléculas. Se presentan algunos ejemplos explícitos para las moléculas diatómicas: H_2^+ , H_2 , He_2^+ y HeH .

O6 Estudio de potenciales generales en 2D mediante el grupo unitario $U(3)$: Aplicación al subóxido de carbono

Marisol Rodríguez Arcos, Renato Lemus Casillas

*Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México
Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria, Coyoacán, C.P. 04510, CDMX.*

El objetivo de este trabajo es el estudio de potenciales generales en 2D mediante el modelo algebraico basado en el grupo unitario $U(3)$. El procedimiento para obtener el grupo dinámico $U(3)$ consiste en agregar un bosón escalar al espacio del oscilador armónico bidimensional. Mediante un mapeo a la base de oscilador armónico es posible realizar la conexión del espacio de configuración con el espacio algebraico [1], lo cual es fundamental para la identificación de las tres cadenas del grupo $U(3)$ con la energía, la coordenada y el momento. Dada la realización de las coordenadas y momentos en el espacio algebraico es posible obtener una representación algebraica de cualquier Hamiltoniano en 2D mediante matrices diagonales.

Dentro de este modelo analizamos el potencial cuártico, el cual ha sido utilizado en el estudio de la transición lineal-no lineal para moléculas no-rígidas. Se parametriza el potencial para pasar de una descripción armónica a la de potencial cuártico, siendo posible encontrar los puntos críticos en los que el espectro de energías cambia y se define la transición lineal-no-lineal. Como aplicación del método se presentan el ajuste de los niveles de energía de flexión para el enlace CCC para la molécula de subóxido de carbono (C_3O_2) los cuales presentan buena concordancia con resultados experimentales [2].

1. Santiago, R.D.; Arias, J.M.; Gómez-Camacho J.; Lemus, R. An approach to establish the connection between configuration and $su(n + 1)$ algebraic spaces in molecular physics: application to ammonia. *Mol. Phys.* **2017**, 115, 3206-3223.

2. Rodríguez-Arcos, M.; Lemus, R. Unitary group approach for general potentials in 2D systems: application to carbon suboxide. *Chem. Phys. Lett.* **2018**, 713 266.

Agradecimientos

A DGAPA-UNAM con número de proyecto IN-227017. El primer autor agradece a CONACYT por la beca de posgrado (Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales). Los autores agradecen a Miguel Carvajal por las útiles discusiones.

07 Simulación del espectro Raman del dióxido de carbono

Marisol Bermúdez-Montaña^a, Miguel Carvajal^b, Francisco Pérez-Bernal^b,
Renato Lemus Casillas^c.

^a *Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Apto. Postal 70-543, 04510 México, DF, México*

^b *Dpto. Ciencias Integradas y Centro de Estudios Avanzados en Física, Matemáticas y Computación (CEAFMC); Universidad de Huelva, Unidad Asociada GIFMAN-UHU IEM-CSIC, 21071 Huelva, Spain.*

^c *Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Apto. Postal 70-543, 04510 México, DF, México*

En este trabajo presentamos la simulación del espectro Raman de la molécula de dióxido de carbono en el rango de 1150 – 1500 cm^{-1} , usando el álgebra dinámica $U_1(2) \times U(3) \times U_2(2)$ como modelo para la descripción de los modos de tensión y flexión. Se analizó el efecto en los valores propios y las funciones de onda de tres poliadas diferentes en el ajuste de 178 niveles de energía reportados en la literatura. A través de un conjunto de momentos de transición experimentales, se optimizó la polarizabilidad y se simuló el espectro Raman para las tres poliadas. Los resultados se comparan con el espectro experimental mostrando que el modelo reproduce muy bien el experimento. También se puede observar que no hay diferencias importantes entre las tres poliadas.

Este trabajo es parcialmente financiado por DGAPA-UNAM, México, bajo el proyecto IN-227017. También es financiado parcialmente por la Consejería de Conocimiento, Investigación y Universidad, Junta de Andalucía y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER), ref. SOMM17 / 6105 / UGR. Marisol Bermúdez agradece al Centro de Estudios Avanzados en Física, Matemáticas y Computación (CEAFMC) de la Universidad de Huelva por el financiamiento de una estancia de investigación y a la DGAPA-UNAM por la beca posdoctoral en la Facultad de Química.

O8 La tabla periódica en rayos x

J. Jiménez-Mier

Instituto de Ciencias Nucleares,

*Universidad Nacional Autónoma de México, Ap. Postal 70-543, Ciudad de México,
04510, México*

En este *Año Internacional de la Tabla Periódica* se hace una revisión de la interacción entre rayos x y los átomos. Esto se relaciona con la observación de Moseley de que hay una relación directa entre la raíz cuadrada de la frecuencia de emisión de rayos x y el número atómico (Z) del átomo emisor, que le permitió predecir la existencia de los últimos tres elementos con $Z < 93$ desconocidos hasta entonces (1912) y que fueron posteriormente observados (y dos de ellos fabricados) en laboratorios: Tc, Pm y Re. Se pone especial énfasis en la interacción entre rayos x blandos y átomos en las filas 2p (B – Ne) y metales de transición 3d (Sc – Cu) que dan lugar a espectros de absorción (XAS) y emisión (XES). Se dan ejemplos de la información que se puede obtener de los espectros XAS y XES de compuestos con metales de transición con la que se puede identificar el estado de oxidación o la simetría del entorno del átomo metálico. Con ejemplos se muestra que cálculos básicos de estructura atómica sirven para interpretar los espectros experimentales. Se concluye que los rayos x, especialmente los que se producen en fuentes de luz de sincrotrón o láseres de electrones libres, son herramientas indispensables para estudiar la estructura electrónica de compuestos complejos.

O9 Desarrollo del sistema experimental para la producción de átomos de Rydberg dentro de una trampa magneto óptica (MOT).

G. Domínguez-Mandujano, A. Arciniega-Gutiérrez , D. Alegria-Meza, J.E. Navarro Navarrete, D. López-Jacinto, J. Flores-Mijangos, F. Ramírez-Martínez , L. Marieth Hoyos, J. Jiménez-Mier.

Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria, Apartado Postal 70-543, Deleg. Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México.

Se presenta un sistema experimental para la generación y detección óptica de estados de Rydberg en una nube de átomos fríos de rubidio. El esquema de excitación propuesto se realizará en dos pasos: una primera transición $5S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$ (420 nm) y seguida de la segunda transición $6P_{3/2} \rightarrow 20S_{1/2}$ (1020 nm). La detección se realizará ya sea registrando cambios en la absorción de componentes de radiación resonantes con los átomos cuando pasan por el medio atómico o cambios en la radiación emitida por los átomos a causa de las cascadas de decaimientos.

Para generar los estados de Rydberg en la nube de átomos fríos se realizará primero la excitación de estos del estado base $5S_{1/2}$ al nivel $6P_{3/2}$, para lo cual es necesario hacer incidir en la nube de átomos atrapada en la MOT un láser de 420 nm. A continuación, se hará uso de un láser de 1050 nm que excite a los átomos del nivel $6P_{3/2}$ al estado de Rydberg $20S_{1/2}$.

Actualmente se cuenta con un sistema de generación y detección de átomos de Rydberg por medio de la excitación de una transición de dos fotones $5S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2} \rightarrow 20S_{1/2}$ en una celda con vapor de rubidio a una temperatura de alrededor de 100°C. Este sistema es el punto de partida para la estabilización de los láseres a las resonancias atómicas correspondientes y proceder a realizar dicha excitación en la nube de átomos confinados en la trampa magneto-óptica y, por ende, a la producción de los átomos de Rydberg fríos.

Agradecimientos.

Se agradece el apoyo a los proyectos: PAEP 2018 y PAEP 2019; PAPIIT, IN107317; SEP-CONACYT 285289; y Laboratorio Nacional de Materia Cuántica: Materia Ultrafría e Información Cuántica (LANMAC) No. 179616. L.M. Hoyos-Campo agradece a la UNAM-DGAPA CONACYT por la beca posdoctoral otorgada.

O10 Estudio de la fluorescencia de 780 nm generada por la excitación de luz láser a 420 nm y 780 nm en celdas de vidrio con vapores de rubidio atómico.

Jesús Flores-Mijangos, Lina Marieth Hoyos-Campo, José Ignacio Jiménez-Mier, José Eduardo Navarro-Navarrete, Gersain Gabriel Quiroz-Sánchez, Fernando Ramírez-Martínez.

*Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM
Facultad de Ciencias, UNAM
Posgrado de Ciencias Físicas, UNAM*

En este trabajo se estudia la fluorescencia producida por el decaimiento de átomos de rubidio del nivel $5P(3/2)$ al nivel base $5S(1/2)$ como resultado de haber sido excitados con un haz láser de 420 nm o 780 nm. Los átomos de rubidio están contenidos en una celda de vidrio a temperatura ambiente. La fluorescencia es observada en dirección perpendicular al haz de excitación.

En el caso de emplear un haz láser sintonizado a 420 nm, se bombean átomos de rubidio del nivel $5S(1/2)$ al nivel $6P(3/2)$. Dados los decaimientos en cascada a través de los niveles intermedios, los átomos que llegan al nivel $5P(3/2)$ decaen al nivel base emitiendo radiación de 780 nm que es registrada por un tubo fotomultiplicador. Si se emplea un haz láser sintonizado a 780 nm se tiene también una fluorescencia de 780 nm por el decaimiento espontáneo precisamente entre esos dos niveles.

Haciendo uso de las ecuaciones de Einstein para estos dos procesos es posible calcular la intensidad de la fluorescencia a 780 nm asumiendo que el sistema alcanza el estado estacionario. El cálculo se hace considerando la estructura hiperfina del átomo de rubidio para los isótopos 85 y 87 en las dos regiones de emisión F's grandes y F's pequeñas. A pesar de que los cálculos no consideran la polarización de los haces de excitación se puede cuantificar los "dips" en la señal de fluorescencia cuando se retrorefleja el haz de excitación. La simulación muestra con claridad la estructura hiperfina del nivel $6P(3/2)$ cuando se excita con 420 nm y del nivel $5P(3/2)$ con 780 nm junto con los entrecruzamientos producidos por la selección de velocidades.

Dado los resultados anteriores se está trabajando en la estimación de la fluorescencia para haces retroreflejantes considerando la polarización de los haces de excitación.

Agradecimientos.

Se agradece a los proyectos SEP-CONACYT CB-2016-01 285289, PAPIIT IN107317 y LANMAC No. 179616 por el apoyo para la realización de este trabajo. L. M. Hoyos-Campo agradece a la UNAM-DGAPA CONACYT por la beca posdoctoral otorgada.

O11 Átomo de helio ($\text{He } 1s^2 \ ^1\text{S}$) confinado por una cavidad esférica impenetrable y penetrable

César Martínez-Flores y J. Garza

Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Iztapalapa C.P. 09340, Ciudad de México, México

La implementación de conjuntos de base, métodos variacionales y numéricos para resolver las ecuaciones de Hartree-Fock con aplicaciones en el estudio de sistemas confinados, ha sido un tema de gran interés en los últimos años debido a los efectos que se han reportado en los niveles de energía y las funciones de onda. En este trabajo, se implementan dos métodos numéricos para resolver el estado fundamental del singulete del átomo de helio ($\text{He } 1s^2 \ ^1\text{S}$) confinado por una cavidad esférica impenetrable y penetrable. Los resultados mostrados están en función del radio de confinamiento R_c y la barrera potencial V_0 . Se muestran resultados para la energía orbital, total, de Coulomb y la entropía de Shannon mostrando un buen acuerdo con otros resultados teóricos obtenidos a través de conjuntos base (expansiones tipo Roothaan) y métodos variacionales para algunas regiones de confinamiento. De los enfoques numéricos, se encuentra la deslocalización del estado fundamental para barreras penetrables. La energía total de Hartree-Fock disminuye para valores más pequeños del radio de confinamiento y al incrementarse la barrera de potencial.

Agradecimientos.

CMF agradece a CONACYT la beca postdoctoral a través del proyecto FC-2016/2412.

O12 Estudio variacional del átomo de hidrógeno confinado por fronteras cerradas y abiertas

Armando Ayala Moreno¹, Salvador A. Cruz²

Departamento de Física,

*Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Ap. Postal 55 534, CDMX,
09340, México*

El estudio de efectos de limitación espacial en el comportamiento electrónico de átomos y moléculas ha sido un tópico de creciente interés en años recientes. En particular, el átomo de hidrógeno como el sistema atómico más simple, sigue siendo un referente importante para comprender estos efectos. En la literatura, existen tratamientos exactos y variacionales para este problema. Sin embargo, dentro de la gama de estudios variacionales, el caso de estados excitados en los que la función de onda presenta nodos, no ha sido lo suficientemente explorado. En este trabajo se presenta la implementación del método variacional directo para el estudio de efectos de confinamiento cuántico en diferentes tipos de geometría: i) Cavidades esféricas penetrables e impenetrables, ii) cavidades esféricas prolatas impenetrables y iii) átomo de hidrógeno limitado por fronteras planas paralelas infinitas. En todos los casos se presenta la evolución de las energías en función del tamaño de la cavidad y altura de barrera de confinamiento.

La utilidad de éste análisis radica en el uso de funciones de onda de expresión analítica para el estudio de propiedades electrónicas de sistemas hidrogenoides limitados por fronteras rígidas y permeables.

1) urmandoayalamoreno@gmail.com

2) cruz@xanum.uam.mx

O13 Átomo de Helio confinado en una caja esferoidal penetrable

Olga Oralia Arias Lara, Adalberto Corella Madueño, Rodrigo Arturo Rosas Burgos

Departamento de Física,

Universidad de Sonora, Ap. Postal 1626, Hermosillo, Sonora, México

En este trabajo se muestra el comportamiento de la energía del estado base del átomo de Helio, para los casos del átomo libre y del átomo confinado en una región esférica prolata de pared blanda, modelada con un potencial de escalón de altura finita, usando como método de solución de la ecuación de Schrödinger, el método variacional y la aproximación de Born-Oppenheimer; se usa el sistema de coordenadas esféricas prolatas, las cuales son compatibles con la geometría de la región de confinamiento. Se comparan los resultados de este trabajo con los encontrados en la literatura.

Agradecimientos: Trabajo apoyado por CONACYT (Proyecto No. 258366).

O14 Descripción del apagamiento de la fluorescencia de los aminoácidos tirosina y triptófano por ergosterol.

Sathishkumar Munusamy, Chávez María Isabel, Jorge Garza, Rubicelia Vargas and Carlos Munoz-Garay

1 Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 2001, Col. Chamilpa, 62210 Cuernavaca, México.

2 Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Circuito Exterior s/n, México, D.F. 04510, México.

3 Departamento de Química Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina Ciudad de México, C.P. 09340 México.

Este trabajo examina el comportamiento de la fluorescencia de los aminoácidos triptófano (trp) y la tirosina (tyr) en presencia del ergosterol, un sterol que reportamos aquí como un apagador de fluorescencia. Las propiedades de asociación de ergosterol con trp / tyr se analizaron y definimos un mecanismo estático de extinción por el cual la fluorescencia de trp / tyr se pierde en presencia del ergosterol. Los parámetros termodinámicos como el cambio de energía libre (ΔG), el cambio de entalpía (H) y el cambio de entropía (ΔS) para los sistemas trp-ergosterol y tyr-ergosterol se calcularon de acuerdo a la ecuación de Van't Hoff y estos confirman la interacción estática. La unión de ergosterol y colesterol con tirosina se analizó adicionalmente mediante 1H NMR, 1D NOESY y DOSY. Este análisis de RMN reveló que la interacción molecular de ergosterol y tirosina es más fuerte que el sistema de colesterol-tir. Esta interacción bimolecular se confirmó con un modelo peptídico (con una tirosina en la secuencia de aminoácidos) utilizando el tiempo de vida de fluorescencia y la RMN de ETS. Los resultados obtenidos se evaluaron mediante estudios computacionales, que confirman aún más el fuerte comportamiento de unión y extinción del ergosterol hacia la tirosina y el triptófano. Aunque se sabe que estos residuos de aminoácidos fluorescentes, en proteínas de membrana funcionan como anclas a la membrana ubicadas en la interfaz a nivel de los grupos fosfato, este trabajo sugiere una fuerte interacción de trp y tyr con esteroides en la membrana, identificando así un anclaje intramolecular de estos residuos a la membrana.

Agradecimientos.

Dirección General Asuntos del Personal Académico por el apoyo a Sathishkumar Munusamy con una beca postdoctoral.

O15 Estudio de la interacción entre ZnO y TlO para determinar las propiedades electrónicas

Marco Antonio Villanueva Castillo, Irineo Pedro Zaragoza Rivera

*Tecnológico Nacional de México, Campus Instituto Tecnológico de Tlalnepantla,
Av. Instituto Tecnológico S/N Col. La comunidad, Tlalnepantla de Baz Edo.
México.*

La representación atómica y molecular para un sistema de celdas fotovoltaicas donde sus componentes tipo N y tipo P son modelados por dos monocapas una de TlO y la otra de ZnO son consideradas para el estudio de las propiedades electrónicas, como inicio del estudio se establece una estructura molecular de un material conformado por los átomos de TlO que por su configuración electrónica y sus propiedades cristalográficas son basados en un tipo wurzita presenta un agregado de átomos que forman hexágonos describiendo una mono capa plana, tanto para el TlO, como para el ZnO, realizando cálculos de energía y de optimización de la energía. Las monocapas se colocaron a diferentes distancias de separación para determinar su energía de interacción como una primera aproximación. A partir de esta interacción obtenida por este sistema de capas atómicas en separado se realiza el cálculo de optimización de la geometría por cada estructura hexagonal determinando si existe otra estructura conformacional entre la monocapa de TlO y ZnO.

Los agregados de átomos como productos finales del cálculo de optimización de la geometría así como la distribución de carga por medio del análisis poblacional según Mulliken y los orbitales de frontera podrán proporcionar información útil. Los cambios de energía y transferencia de carga se determinan y se discutirá en términos de la distancia de interacción entre los compuestos. El tipo de interacción para el sistema conformado por ZnO y TlO. La metodología Teoría del Funcional de Densidad (DFT), con el funcional (M06-2x) con multiplicidad 1.

Agradecimientos. Los autores agradecen al Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS), perteneciente al padrón de laboratorios nacionales de CONACYT, por los recursos computacionales, el apoyo y la asistencia técnica brindados, a través del proyecto No. 201801072N.

O16 Estudio por primeros principios de la transformación cristalina del aluminio

J. H. Camacho García¹, S. Valdez², A. Bautista Hernández¹

Facultad de Ingeniería

*Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48, Puebla, Pue.,
72570, México*

Instituto de Ciencias Físicas,

*Universidad Nacional Autónoma de México, Ap. Postal 43-8, Cuernavaca, 62251
Morelos, México*

Las propiedades mecánicas en un material dependen tanto de su naturaleza química como de la distribución de sus átomos en estado sólido. Los átomos se agrupan en forma diferenciada propiciando la formación tanto de diferentes estructuras cristalinas, como diferentes fases en el contexto de la termodinámica clásica. La estructura cristalina fcc del Aluminio se transforma a hexagonal compacta a 217 ± 10 GPa [1]. Mediante estudios teóricos y en función de la presión se ha propuesto una secuencia de transformación de fcc \rightarrow hcp \rightarrow bcc [2]. En este trabajo y mediante cálculos de primeros principios se reporta que para una presión aproximada de 113GPa el Aluminio tiende a reducir su simetría, por medio de una transformación de fase tetragonal u ortorrómbica.

Agradecimientos

Se agradece el tiempo de trabajo al Centro Nacional de Supercómputo (CNS, México).

Referencias

[1] Y. Akahama, M. Nishimura, K. Kinoshita, H. Kawamura, and Y. Ohishi, Phys. Rev. Lett. 96 (2006) 045505.

[2] M. J. Tambe, N. Bonini, and N. Marzari, Phys. Rev. B **77** (2008) 172102.

O17 Estudio teórico de la solvatación acuosa de SmCl_2 a través del modelo de cúmulos a nivel DFT.

Benita Turiján Clara, Alejandro Ramírez Solís.

Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca, Morelos 62209. México.

La transferencia reductiva de electrones a sustratos orgánicos es una herramienta muy importante para reducciones altamente quimio-selectivas y reacciones de acoplamiento reductivo. La adición de agua a Sm(II) ha demostrado tener un impacto significativo en la reducción de sustratos orgánicos¹; el reactivo más prometedor y por ende más utilizado es el diioduro de Samario (SmI_2), el cual fue introducido por Kagan en 1977.² Existen varios trabajos en los cuales se encuentra que el agua desempeña un papel clave en la promoción de reducción, dada por la alta afinidad del samario.³

El trabajo presentado se centra en las capacidades reductoras del dicloruro de Samario (SmCl_2), cuyo objetivo es el estudio del desplazamiento de los ligandos cloruro por el agua, dado que se ha encontrado que tanto el SmBr_2 y el SmCl_2 no funcionan eficientemente como catalizadores para la transferencia reductiva de electrones como el SmI_2 . Para abordar la solvatación acuosa de SmCl_2 mediante el esquema de microsolvatación por cúmulos, se realizan simulaciones de la Dinámica Molecular Born-Oppernheimer a nivel DFT del sistema modelo $\text{SmCl}_2-(\text{H}_2\text{O})_n$ a 300 K. Se analiza la evolución temporal de las distancias Sm-Cl y Sm-O, y del ángulo Cl-Sm-Cl. Se reporta la función de distribución radial Sm-Cl y Sm-O lo que permite un análisis estructural detallado para ser comparado con los correspondientes para SmI_2^3 y SmBr_2 . Así también presentamos el espectro EXAFS obtenido de los últimos 10 ps de la simulación BOMD, el cual es comparado cualitativamente, con los sistemas antes mencionados, esto dado a no contar con datos experimentales del SmCl_2 en agua.

A lo largo de la simulación nos encontramos con un sistema muy estable, el cual muestra una interacción bastante fuerte entre el Sm y el agua, los dos átomos de Cloro permanecen coordinados a lo largo de la simulación, aquí los aniones de Cloro están fuertemente retenidos por el catión del samario, lo cuál impide observar la disociación de Sm-Cl. En comparación con la rápida disociación de los enlaces Sm-I en el sistema $\text{SmI}_2-(\text{H}_2\text{O})_n$. Pese a no tener una disociación se pueden apreciar claramente dos esferas de solvatación al rededor del samario, caso similar al de los otros dos sistemas. Para nuestro caso se encuentran esferas de solvatación más estrechas y números de coordinación más pequeños, este hecho está relacionado con el radio iónico del cloro, el cual es menor que el del Bromo que a su vez es menor al del yodo.

(1) Chatgililoglu, C., Studer, A., Eds. Encyclopedia of Radicals in Chemistry, Biology and Materials; Wiley-Blackwell: Chichester, UK, 2012.

(2) Girard, P.; Namy, J. L.; Kagan, H. B. Divalent lanthanide derivatives in organic synthesis. 1. Mild preparation of samarium iodide and ytterbium iodide and their use as reducing or coupling agents. J. Am. Chem. Soc. 1980, 102, 2693-2698.

(3) Ramírez-Solís, A.; Amaro-Estrada, J. I.; Hernández-Cobos, J.; Maron, L. Aqueous Solvation of SmI_2 : A Born-Oppenheimer Molecular Dynamics Density Functional Theory Cluster Approach. J. Phys. Chem. A 2017, 121 (11), 2293-2297.

(4) Ramirez-Solis, A.; Bartuvich, C. O.; Hernandez-Cobos, J.; Saint-Martin, H.; Maron, L.; Anderson, Jr., W.; Li, A. M.; Flowers, R. A. Experimental and theoretical studies on the implications of Halide-Dependent aqueous solvation of Sm(II) . J. Am. Chem. Soc. ; 2018, 140(48), 16731-16739.

O18 Soluciones Exactas y Completas de Antena y Cavity de Resonancia Toroidal Dipolar T1

José Humberto Torres Bustamante y Eugenio Ley Koo

Instituto de Física,

*Universidad Nacional Autónoma de México Ap. Postal 20-364, Ciudad de México,
01000, México*

Se construyen las soluciones de las ecuaciones de Maxwell para corrientes armónicas en el tiempo, dispuestas en espiras rectangulares uniformemente distribuidas en la superficie de un toroide y con variaciones espaciales armónicas: superposición de funciones Bessel radiales de primera y segunda especie para las tapas anulares superior e inferior, y de tipo coseno axial para las caras cilíndricas interna y externa; se utiliza un potencial de Debye escalar, continuo en la superficie del toroide, para obtener los campos de inducción magnética y de intensidad eléctrica. La aplicación del operador generador de rotaciones al potencial permite identificar al campo magnético con líneas circulares coaxiales, discontinuas en la superficie en consistencia con la ley de Ampere. El rotacional del campo de inducción magnética lleva a la identificación del campo eléctrico, vía la conexión de Maxwell, de naturaleza poloidal con líneas de campo con componente radial y axial en planos meridianos. Sus componentes normales a la superficie son discontinuas, indicando la presencia de una densidad superficial de carga cuya expresión es consistente con la ecuación de continuidad. Las soluciones de cavity de resonancia corresponden a la anulación del potencial de Debye en la superficie del toroide, y la anulación consecuente de los campos en el exterior.

Los autores agradecen a Conacyt por la beca otorgada al primer autor para la realización de sus estudios de maestría.

O19 Soluciones Exactas y Completas de Antena y Cavity de Resonancia Esferoconal Cuadripolar Eléctrica E2.

Ricardo Méndez Fragoso,

Facultad de Ciencias, UNAM

Eugenio Ley Koo,

Instituto de Física, UNAM

Se construyen las soluciones de las ecuaciones de Maxwell para corrientes que varían armónicamente en el tiempo, y con una distribución armónica esferoconal sobre una superficie esférica. La solución se basa en un potencial escalar de Debye que satisface la ecuación de Helmholtz en el interior: Función de Bessel esférica de orden dos, y en el exterior: Función de Hankel esférica saliente del mismo orden y continuo en la frontera. La aplicación del operador generador de rotaciones al potencial conduce a los campos de intensidad eléctrica toroidales en el interior y exterior. Sus componentes radiales son continuas porque no hay densidad de carga, y sus componentes tangenciales también son continuas consistente con la Ley de Faraday. El rotacional del campo de intensidad eléctrica conduce al campo de inducción magnética de tipo poloidal: Sus componentes radiales son continuas consistente con la Ley de Gauss y sus componentes tangenciales son discontinuas y consistentes con la distribución de las corrientes según la Ley de Ampère. Las soluciones de cavity de resonancia de resonancia están determinadas por lo nodo de la función de Bessel esférica. Se tienen familias de soluciones según el parámetro de asimetría de los armónicos esferoconales.

O20 Rompimiento y Restauración de Simetrías y Efectos Topológicos en Sistemas Cuánticos y Electromagnéticos

Eugenio Ley Koo,

Instituto de Física, UNAM

En esta contribución se ilustran dos ejemplos de rompimiento y restauración de simetría asociados respectivamente a sistemas confinados en ángulos diedros, y a la aplicación de armónicos esferoconales; y al fenómeno de toroidización como efecto topológico.

El confinamiento en ángulos diedros implica un rompimiento de simetría $O(2)$, con la consecuencia de que la componente del momento angular a lo largo de la arista común de los ángulos ya no es entera. Adicionalmente, los polinomios de Legendre de asociatividad no entera no tienen paridad definida: Se rompe su simetría de reflexión en el plano ecuatorial. La restauración de esta simetría se logra sumando o restando los polinomios del mismo grado y asociatividad bien comportados en las direcciones norte y sur, respectivamente.

El Hamiltoniano de rotaciones de moléculas asimétricas se puede descomponer en dos términos de rotador esférico, y de parámetro de magnitud de asimetría multiplicado por Hamiltoniano de distribución de asimetría. El segundo término rompe la simetría $O(3)$ separando los $2l+1$ niveles degenerados del rotador esférico. La simetría se restaura al escoger los momentos de inercia iguales, con la anulación del parámetro de la magnitud de simetría.

Los fenómenos de polarización y magnetización son manifestaciones de la respuesta de los materiales a la acción de campos eléctricos y magnéticos, y los momentos multipolares respectivos son los conceptos apropiados para la descripción de sus interacciones. Se presentan y explican el fenómeno de toroidización y los momentos multipolares toroidales electromagnéticos de la radiación electromagnética y los materiales.

O21 Extracting an accurate model for permittivity from experimental data: hunting complex poles from the real line

Mauricio Garcia Vergara¹, Guillaume Demésy², Frédéric Zolla²

¹Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Av. Universidad #3000, México D.F., 04510, México

²Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, Institut Fresnel, F-13013 Marseille, France

The problem of giving an accurate model for electric permittivity, specially at optical frequencies range, goes back to the works of Lorentz [1] and remains as a topic of interest until recent years, see for instance [2, 3]. Having as starting point tabulated experimental data [4, 5], which in the case of the optical range can be obtained using ellipsometry [6]. We have developed a mathematical procedure that allows to find analytical models that the frequency domain fulfills two fundamental physical properties: reality in time domain and causality [7]. Even more, well known models such as: Drude and/or Drude-Lorentz model, Debye model, critical points model [8], or a combination of these elementary resonances [2, 3], can be seen as particular cases of this new and general model.

[1] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. Wiley, Aug. 1998.

[2] D. Barchiesi and T. Grosge, “Errata: Fitting the optical constants of gold, silver, chromium, titanium and aluminum in the visible bandwidth,” *Journal of Nanophotonics*, vol. 8, no. 1, p. 089996, 2015.

[3] A. Deinega and S. John, “Effective optical response of silicon to sunlight in the finite difference time-domain method,” *Optics Letters*, vol. 37, pp. 112–114, Jan. 2012.

[4] E. D. Palik, *Handbook of optical constants of solids*, vol. 3. Academic press, 1998.

[5] M. J. Weber, *Handbook of optical materials*, vol. 19. CRC press, 2002.

[6] H. Tompkins and E. Irene, *Handbook of Ellipsometry*. Springer Berlin Heidelberg, 2005.

[7] M. Garcia-Vergara, G. Demésy, and F. Zolla, “Extracting an accurate model for permittivity from experimental data: hunting complex poles from the real line,” *Opt. Lett.*, vol. 42, pp. 1145–1148, Mar 2017.

[8] P. G. Etchegoin, E. Le Ru, and M. Meyer, “An analytic model for the optical properties of gold,” *The Journal of chemical physics*, vol. 125, no. 16, pp. 164705, 2006.

O22 Método Analítico de correcciones perturbativas en Interferometría Atómica.

D. A. Lancheros-Naranjo¹, G. A. Olivares-Rentería, E. Gómez ¹, J. A. Franco-Villafañe²

¹ *Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, 78290, México.*

² *CONACYT, Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, 78290, México.*

Se presenta un esquema de interferometría atómica insensible a fluctuaciones de campos electromagnéticos externos usando transiciones Raman dependientes de la velocidad. La intención es medir la aceleración gravitacional produciendo superposiciones en el mismo estado interno atómico pero con diferente estado de momento. En este trabajo se desarrolla un método analítico para el estudio de las transiciones no deseadas de manera sistemática a través de la Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo, para lo cual se realiza la expansión de Dyson, determinando una serie de potencias de un parámetro perturbativo que resuelve la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo. Se deducen tres parámetros perturbativos del esquema y determinamos expresiones aproximadas que validamos con soluciones numéricas. Nuestros resultados nos permiten identificar parámetros experimentales que inciden en la visibilidad de las franjas de interferencia.

Agradecimientos.

Financiamiento: CONACYT (Ciencia Básica, Fronteras de la Ciencia y Laboratorios Nacionales) y la UASLP (FAI, Fondos Concurrentes).

O23 Estructura de la radiación óptica de Cherenkov en un medio compuesto tridimensional de nanotubos de carbono.

Gustavo Medina-Ángel, Gennadiy Burlak

Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos 62210, México.

Estudiamos la radiación óptica de Cherenkov en un sistema compuesto tridimensional (3D) con una carga que se mueve sobre un sistema periódico de nanotubos de carbono paralelos. Consideramos un caso de nano-tubos de carbono de pared simple SWCNT y aplicamos la técnica de dominio de tiempo de diferencia finita numérica (FDTD). Encontramos que, debido a la radiación de banda ancha de una carga, el espectro del campo óptico en tal nano-sistema está determinado por las excitaciones de la superficie plasmon-polariton. Nuestro estudio del espectro de energía de campo como una función de la frecuencia de plasma detecta una dependencia no monotónica de doble pozo dentro del área de una resonancia de plasmon-polariton de superficie. Se registra un pico bien definido que indica una generación de excitaciones colectivas en nanotubos producidas por la radiación de Cherenkov.

O24 Conversión ascendente en estructura de fase via mezclado de cuatro ondas en gases atómicos

Jorge G. Acosta Montes, Luis. A. Mendoza López, Irvin F. Ángeles Aguillón, Diego Costa Sierra, Yaneth M. Torres García, Rocío Jáuregui and Daniel Sahagún

*Instituto de Física, Circuito de la Investigación Científica s/n,
Ciudad Universitaria, 04510 Ciudad de México*

Existe una tendencia mundial que pretende usar átomos neutros para jugar el papel de partículas masivas y de usar luz correlacionada para jugar el papel de mensajero en sistemas cuánticos híbridos. Dentro de nuestro laboratorio llevamos acabo dos líneas de investigación que apuntan en esta dirección. En esta charla hablaré de ambas pero me concentraré en la más avanzada. Ahí inducimos el proceso no lineal mezclado de cuatro ondas para producir luz convertida a alta frecuencia en un gas de rubidio atómico a temperaturas alrededor de 100 °C. Este es un marco experimental adecuado para generar haces gemelos, por ejemplo [1]. Usamos una configuración de transiciones del tipo “diamante” en lugar de la más comúnmente usada “doble lambda” porque la estructura atómica de los metales alcalinos nos provee con la posibilidad de generar luz correlacionada en frecuencias dentro de rangos muy distintos: el régimen de las telecomunicaciones (luz que puede ser enviada a distancias lejanas) y luz resonante con sus estados base (que puede ser almacenada escribiendo una memoria cuántica, por ejemplo) [2]. Recientemente hemos alcanzado resultados experimentales concluyentes mostrando que aún una estructura de fase compleja puede ser heredada de los haces que bombean el mezclado de cuatro ondas a la luz paramétrica. Demostramos que, si al menos uno de ellos ocupa un modo adifraccional la luz generada ocupará un modo de la misma naturaleza. Tomamos el ejemplo de los haces de Mathieu porque podrían ser una opción inteligente para llevar acabo medidas de ángulo y momento angular orbital de mínima incertidumbre [3] y uno puede crear arreglos de vórtices con ellos. De tal manera que también son un espacio de esparcimiento para estudiar al momento angular orbital como una variable local en lugar del tradicional enfoque global. Nuestro aprendizaje es una contribución a futuros desarrollos en aplicaciones en donde las correlaciones cuánticas en el dominio espacial son relevantes, como las tecnologías de imagen, información y metrología [4].

Referencias

- [1] Kumar, P., & Kolobov, M. I. (1994). Degenerate four-wave mixing as a source for spatially-broadband squeezed light. *Optics Communications*; Boyer, V., Marino, A., & Lett, P. (2008). Generation of Spatially Broadband Twin Beams for Quantum Imaging. *Phys. Rev. Lett.*, 100(14), 143601.
- [2] Chaneliere, T., Matsukevich, D., Jenkins, S., Kennedy, T., Chapman, M., & Kuzmich, A. (2006). Quantum Telecommunication Based on Atomic Cascade Transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 96(9), 093604.

[3]Hradil, Z., Řeháček, J., Bouchal, Z., Čelechovský, R., & Sánchez-Soto, L. L. (2006). Minimum Uncertainty Measurements of Angle and Angular Momentum. *Phys. Rev. Lett.*, 97(24), 243601.

[4] Kolobov, M. I. (1999). The spatial behavior of nonclassical light. *Reviews of Modern Physics*, 71(5), 1539.

Agradecimientos.

Los autores agradecen a los proyectos PAPIIT nos. IA103216 y IN108018; Ciencia Básica Fondo SEP-CONACYT no. 285387; y Programa CONACyT de Laboratorios Nacionales nos. 232652, 260704, 271322, 280181 y 293471.

O25 Estudio del ion molecular de Hidrógeno

Heichi Horacio Yanajara Parra y Rodrigo Arturo Rosas Burgos

*Departamento de Investigación en Física,
Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México*

Se estudia el ion molecular de Hidrógeno en la aproximación de Born-Oppenheimer resolviendo de forma analítica su correspondiente ecuación de Schrödinger usando coordenadas esféricas prolatas. Se obtienen las energías tanto del estado base como de estados excitados al resolver el problema de valores propios. Se calculan las distancias internucleares de equilibrio en el caso de existir estados ligados y se señalan casos en los que no se pueden presentar dichos estados. Se muestran gráficas para las funciones de onda de los estados ligados y se enfatiza en la metodología utilizada para obtener los resultados.

O26 Diseño y caracterización de una cavidad de anillo con perfil plano

Alejandra López-Vázquez¹, Yaneth Torres¹, Marisol Billon¹, Wanderson Pimenta¹, John Franco², Eduardo Gómez¹

¹*Instituto de Física,*

Universidad Autónoma de San Luis Potosí, 78290 San Luis Potosí, SLP, México.

²*CONACyT-Instituto de Física,*

Universidad Autónoma de San Luis Potosí, 78290 San Luis Potosí, SLP, México.

En nuestro laboratorio trabajamos con mediciones de gravedad usando interferometría atómica. Con esta técnica medimos la fase de interferencia entre los átomos debido al campo gravitacional, el cual está dado por $\Delta\phi = 2kgT^2$ donde T es el tiempo en caída libre de los átomos. Por lo tanto para mejorar la medición gravimétrica, proponemos aumentar el tiempo en caída libre mediante oscilaciones de Bloch. Proponemos ocupar una cavidad de anillo con un perfil plano y generar una red de difracción para los átomos. Esta red tendrá la particularidad de cambiar la posición de la onda estacionaria respecto a la posición de los átomos sin mover físicamente la cavidad. En este trabajo presentamos el diseño y caracterización de la cavidad de anillo, la cual tiene dos espejos esféricos y dos planos de alta reflectividad, también cumple con las restricciones geométricas impuestas por la cámara de vacío y tiene un perfil plano unidimensional el cual se logra mediante la suma en intensidad de dos modos Hermite Gauss (HG); HG₀₀ y HG₁₀ ó HG₀₁.

CONACYT (Ciencia Básica, Fronteras de la Ciencia y Laboratorios Nacionales) y UASLP (FAI, Fondos Concurrentes).

O27 Absorción acústica por meta-átomos hechos de aerogel.

Antonio A. Fernández-Marín^{1,3)}, Noé Jiménez^{2,1)}, Jean-Philippe Groby¹⁾, José Sánchez-Dehesa³⁾ y Vicente Romero-García¹⁾

¹⁾ *Laboratoire d'Acoustique de l'Université du Mans, LAUM - UMR 6613 CNRS, Le Mans Université, Avenue Olivier Messiaen, 72085 LE MANS CEDEX 9, Francia.*

²⁾ *Instituto de Instrumentación para Imagen Molecular (i3M), CSIC-UPV, Camino de Vera s/n, 46022 València, España.*

³⁾ *Wave Phenomena Group, Departamento de Ingeniería Electrónica, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera s/n, 46022 València, España.*

Los aerogeles de silicio son nanoporosos, materiales ligeros cuya estructura consiste en un ensamblaje de pequeñas secciones transversales conectadas, elementos similares a vigas que resultan de las nanopartículas fusionadas. Este conjunto particular proporciona adicionalmente al aerogel una rigidez elástica muy baja en comparación con una estructura rígida de silicio de porosidad similar. Por lo tanto, cuando las placas de aerogel logran ser ancladas, son excelentes candidatos para diseñar metamateriales acústicos, ya que presentan resonancias de longitud de onda media y presentan capacidades de absorción eficientes. En este trabajo estudiaremos una meta-superficie acústica hecha de meta-átomos que combinan placas fijas de aerogel y cavidades de impedancia para obtener una perfecta absorción acústica a una frecuencia dada. Nuestros resultados experimentales concuerdan bien con los obtenidos de forma analítica y por simulación numérica.

Este trabajo ha sido financiado por la RFI Le Mans Acoustique, Région Pays de la Loire. N.J agradece el apoyo recibido por la Generalitat Valenciana a través del programa APOSTD/2017/042. J.-P.G y V.R.G. agradecen el financiamiento de los proyectos ANR-RGC METARoom (ANR-18-CE08-0021) y el HYPERMETA fundados bajo el programa Etoiles Montantes de la Région Pays de la Loire. J.S-D. agradece el apoyo recibido por parte del Ministerio de Economía y Competitividad del gobierno de España y de la Unión Europea FEDER a través del proyecto TEC2014-53088-C3-1-R.

O28 Estudio de los efectos combinados de una no linealidad tipo Kerr y un átomo de dos niveles sobre un modo no estacionario de una cavidad

Alejandro Paredes y José Récamier

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

Estudiamos una versión simple del efecto Casimir Dinámico en una cavidad electromagnética de un solo modo que contiene un medio de Kerr y un átomo de dos niveles. Obtenemos una expresión aproximada para el operador de evolución temporal y calculamos la generación de fotones a partir del estado de vacío. Encontramos que la presencia del medio no lineal hace que la generación de fotones disminuya mientras que la presencia del átomo tiende a incrementarla. Cuando existe el término no lineal, éste acaba siendo el preponderante en la evolución de la generación de fotones.

Agradecimientos: Agradecemos a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico de la UNAM por medio del proyecto PAPIIT 111119

O29 Óptica cuántica y sistemas atómicos: un nuevo vistazo a fenómenos conocidos

R. Jáuregui

Instituto de Física, UNAM, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, 04510 México D.F., México.

Conversaremos sobre algunos experimentos recientes donde se exploran fenómenos interesantes que involucran sistemas atómicos y campos electromagnéticos cuantizados en configuraciones o contextos no convencionales. Iniciamos por la observación en el Laboratorio de Átomos Fríos del ICN-UNAM de transiciones atómicas prohibidas en el contexto dipolar eléctrico en gases atómicos de Rubidio. Aquí nos concentraremos en la interpretación de estos experimentos como realizaciones de la conversión paramétrica ascendente espontánea y exploraremos el efecto Autler Townes. Por otra parte, el mezclado de cuatro ondas en la configuración diamante en gases atómicos permite generar fotones individuales descritos en forma compacta por modos de luz estructurada, tal y como lo muestran en el Laboratorio de átomos fríos y óptica cuántica del IF-UNAM. Adicionalmente la medición de las correlaciones cuánticas de los fotones puede también establecer una cota superior a la duración de un salto cuántico, según pudimos constatar en un experimento realizado en Singapur. El énfasis de esta presentación se dará en los aspectos teóricos asociados a estos tres experimentos.

C1 Medición de las propiedades de ionización y transporte de electrones en THF mediante la técnica pulsada de Townsend

Gerson Pérez^{1,2}, Jaime de Urquijo¹ y Olmo González-Magaña¹

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

2. *Centro de investigación en Ciencias,
Universidad Autónoma del Estado de Morelos,
Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa Cuernavaca, 62210 Morelos, México*

El Tetrahidrofurano (THF, C_4H_8O) es una molécula orgánica que, en cuanto a su sección transversal y su geometría se refiere, es muy parecida a la 2-Desoxirribosa, un azúcar presente en la cadena principal del ADN, que genera el cuerpo de esta macromolécula mediante la unión de grupos fosfato. Se utiliza el THF como un modelo para estudiar la interacción de electrones con biomoléculas en la fase gaseosa, del cual se obtienen parámetros de ionización y transporte electrónico, los que se pretende correlacionar con la fase condensada y con ello obtener mejores modelos de dosimetría. Esto último se debe a que los electrones de subionización de baja energía, generados por procesos de radiación provenientes de distintos tratamientos o toma de imágenes, se termalizan en algunas moléculas del cuerpo humano y a largo plazo pueden generar daño biológico.

Para obtener los parámetros de ionización y transporte en THF se utilizó la técnica pulsada de tipo Townsend, consistente en generar un enjambre de electrones iniciales mediante efecto fotoeléctrico, al hacer incidir un haz de luz láser ultravioleta sobre una placa metálica. Una vez generados los electrones iniciales, éstos son acelerados por un campo eléctrico uniforme generado mediante una diferencia de potencial entre un par de electrodos paralelos, donde interaccionan con las moléculas del gas THF a baja presión. El movimiento de los portadores de carga genera una corriente de desplazamiento que es amplificada y medida en un osciloscopio como transitorios electrónicos, los cuales son analizados para obtener los parámetros de ionización, captura y transporte electrónico.

En este trabajo se presentan y discuten dichos parámetros de ionización y transporte electrónico en THF en un intervalo del campo eléctrico normalizado a la densidad del gas, E/N , entre 10 y 400 Td ($1 \text{ Td} = 10^{-17} \text{ V cm}^2$) y presiones del gas entre 0.75 y 20 Torr.

Se agradece al CONACyT la beca de maestría otorgada a G.Pérez, y la asistencia técnica de G. Bustos, A. Bustos y H. Hinojosa. Este trabajo ha sido apoyado por el Proyecto PAPIIT IN 108417

C2 Análisis de las Fluctuaciones en Correlaciones de Fotones

Alan D. Alcantar Vidal, Héctor M. Castro Beltrán

*Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas,
Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas,
Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, 62209
Cuernavaca, Morelos, México*

Presentamos dos métodos complementarios del análisis de las fluctuaciones en mediciones de correlaciones de los fotones de la fluorescencia resonante de un átomo iluminado por un láser. En el primero los operadores del campo (dipolo) se sustituyen por su valor medio mas un operador de fluctuaciones, lo que lleva a una descomposición de la correlación en términos de segundo y tercer orden en los operadores de fluctuación del dipolo. Cuando el átomo es excitado por un láser débil el término dominante es el de segundo orden, mientras que si la excitación es fuerte domina el término de tercer orden. En el segundo método utilizamos la teoría de brincos cuánticos para reconstruir la estadística del número de fotones emitidos en un tiempo fijo en el que el sistema llega al estado estacionario. La distribución del número de fotones es reflejo de la intensidad de la excitación del átomo por el láser.

C3 Resultados Ilustrativos de Eigenenergías y Eigenfunciones en el Efecto Zeeman del Átomo de Hidrógeno Confinado en Ángulos Diedros

Rodrigo Emanuel Albarrán Ruiz,
Facultad de Ciencias, UNAM

Eugenio Ley Koo,
Instituto de Física, UNAM

El Átomo de Hidrógeno confinado en ángulos diedros ha sido investigado como un ejemplo de rompimiento de simetría $O(2)$, que se manifiesta en la reducción del número de estados degenerados en comparación con el sistema libre, en la supresión del término de contacto en la estructura hiperfina, en la aparición de un momento dipolar eléctrico, etc. [1] En la primera referencia también se planteó la investigación del Efecto Zeeman, pero su implementación se retomó en el IX TaDEM, usando el método de teoría de perturbaciones para estados degenerados y se incluyen explícitamente las reglas de selección sobre los números cuánticos polares y radiales, y de paridad. En la presente contribución se presentan resultados numéricos y gráficos que ilustran los desdoblamientos Zeeman de los estados orbitales degenerados y también el desdoblamiento por el espín. Los niveles desdoblados mantienen su centro de energía orbital en la posición común de la energía degenerada original, y por cada estado desplazado hacia arriba se tiene un compañero con desplazamiento de la misma magnitud hacia abajo. Las funciones de onda de tales pares de niveles son complejos conjugados entre sí. Sus gráficas ilustran los efectos del rompimiento de simetría.

Referencias

[1] "Ley-Koo, Eugenio and Sun, Guo-Hua", "Sen, K.D.", "Surface Effects in the Hydrogen Atom Confined by Dihedral Angles", "Electronic Structure of Quantum Confined Atoms and Molecules", "2014", "Springer International Publishing", pages="1--29", url="https://doi.org/10.1007/978-3-319-09982-81"

C4 Diseño, construcción y caracterización de un láser de cavidad extendida en configuración cat-eye con emisión en 780nm.

Diego Alegria-Meza, Dai López-Jacinto, J. Flores-Mijangos, Lina M. Hoyos, Saeed Hamze, F. Ramírez-Martínez, J. Jiménez Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
Universidad Nacional Autónoma de México, Ap. Postal 70-543, Del. Coyoacán,
C.P. 04510 Ciudad de México, México*

Se presenta y describe el diseño, construcción y caracterización de un láser de cavidad extendida en configuración cat-eye con emisión en 780 nm capaz de estimular la transición $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$ en átomos de rubidio. El sistema, un diseño propio del equipo del laboratorio de átomos fríos del ICN de la UNAM, emplea un diodo con emisión central en 785nm como fuente de luz,. Adicional a esto un filtro dieléctrico con un ancho de banda de 3nm y con transmisión de radiación 785 nm a incidencia normal, se encarga de la selección de longitud de onda. El retroreflector cat-eye, conformado por dos lentes convergentes y un espejo semireflejante con una relación transmisión/reflexión de 70%/30%, es el encargado de la retroalimentación y forma, junto con el diodo, la cavidad resonante. El resultado es un láser compacto, estable y cuya longitud de onda de emisión puede ser finamente modificada. Esto último se logra ya sea mediante variaciones en la corriente suministrada al diodo, cambios en la temperatura del sistema, o bien, modificando la longitud de la cavidad al aplicar un voltaje a un piezoeléctrico de anillo que se encuentra pegado al espejo del retroreflector. Además, esta configuración presenta la gran cualidad de contar con un sistema de selección de onda completamente desacoplado del sistema de retroalimentación.

Este láser será una parte esencial del primer gravímetro cuántico diseñado y construido en México por la colaboración inter-institucional Gravico.

Agradecimientos.

Se agradece a los proyectos Fordecyt 297126 "*Desarrollo de Sensores Interferométricos Atómicos Basados en Tecnologías Cuánticas*" y PAPIIT 28171 por el apoyo para la realización de este trabajo. Agradecemos a J. Rangel por su ayuda en la construcción de las piezas diseñadas. L.M. Hoyos-Campo agradece a la UNAM-DGAPA CONACYT por la beca posdoctoral otorgada.

C5 Espectroscopia de fluorescencia saturada para la línea D2 en rubidio.

G. G. Quiroz Sánchez, L. Marieth Hoyos, J. Flores Mijangos, F. Ramírez Martínez, J. Jiménez Mier

*Instituto de Ciencias Nucleares,
Universidad Nacional Autónoma de México, Ap. Postal 70-543, Del. Coyoacán,
C.P. 04510 Ciudad de México, México*

Se presenta un esquema experimental para realizar la espectroscopia de fluorescencia libre de doppler de la transición $5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$ con una longitud de onda de 780 nm en vapor de rubidio atómico a temperatura ambiente.

Para producir la transición $5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$ se utiliza un láser de diodo de cavidad extendida (ECDL) de 780 nm construido en el laboratorio de Átomos Fríos del ICN. El haz de este láser se hace pasar dos veces en configuración contra-propagante a través de una celda de vidrio que contiene vapor de rubidio. El haz incide por primera vez en la celda con una potencia y polarización controladas mediante un arreglo de cubo divisor polarizador y una placa de media onda. Luego, el mismo haz incide normalmente a un espejo que se encarga de reflejarlo de vuelta a la celda formándose así la configuración de haces contra-propagantes. La fluorescencia producto del decaimiento del estado $5p_{3/2}$ al estado $5s_{1/2}$ es detectada por un fotodiodo de silicio de uso comercial de la marca Vishay (modelo BPW34) colocado en dirección perpendicular a los haces de excitación. La corriente generada por el fotodiodo debida a la fluorescencia es amplificada mediante un circuito conversor de corriente a voltaje de diseño y fabricación casera. Con este sistema es posible observar y estudiar la estructura hiperfina del nivel $5p_{3/2}$ y su dependencia con la potencia del láser.

Los datos obtenidos son analizados y comparados con los cálculos realizados en el trabajo "Estudio de la fluorescencia de 780 nm generada por la excitación de luz láser a 420 nm y 780 nm en celdas de vidrio con vapores de rubidio atómico".

Agradecimientos.

Se agradece a los proyectos SEP-CONACYT CB-2016-01 285289, PAPIIT IN107317 y (LANMAC) No. 179616 por el apoyo para la realización de este trabajo. L.M. Hoyos-Campo agradece a la UNAM-DGAPA CONACYT por la beca posdoctoral otorgada.

C6 Estudio de potenciales efectivos en 3d mediante el grupo unitario $U(4)$

M. Rodríguez-Arcos¹, R. Lemus¹, J.M. Arias^{2,3}, and J. Gómez-Camacho^{2,4}

¹ *Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México
Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria, Coyoacán, C.P. 04510, CDMX.*

² *Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Facultad de Física,
Universidad de Sevilla, C.P. 1065,41080 Sevilla, España.*

³ *Instituto Carlos I (iCI) de Física Teórica y Computacional, Universidad de Sevilla,
C.P. 1065,41080 Sevilla, España.*

⁴ *CN de Aceleradores (U. Sevilla, J. Andalucía, CSIC), C. P. 41092 Sevilla, España.*

Se propone un enfoque basado en el álgebra unitaria $U(4)$ para describir sistemas 3D con potenciales efectivos. Nuestro método se basa en el modelo vibrónico en 3D (3DVM) y consiste en la adición de un bosón escalar al espacio del oscilador armónico en 3D, considerando la restricción del número total de bosones N constante. Sin embargo, en lugar de tratar directamente con las simetrías dinámicas, procedemos a identificar las coordenadas y los momentos en el espacio algebraico. Nuestra propuesta se basa en el mapeo entre la simetría dinámica $U(4) \supset U(3) \supset O(3)$ y los estados del oscilador armónico. Se utiliza un procedimiento de minimización para determinar los coeficientes involucrados en la expansión algebraica de las coordenadas y los momentos [1], el cual permite que los kets asociados con las diferentes cadenas de subgrupos se vinculen a representaciones de energía, coordenadas y momento. Esta identificación proporciona herramientas poderosas para obtener la representación matricial de hamiltonianos en 3D asociados a cualquier potencial en una forma simple a través del uso de los paréntesis de transformación que conectan las diferentes bases. La energía exacta y las funciones de onda se obtienen en el límite cuando N tiende a infinito.

Como aplicación del método, se analiza el sistema asociado al potencial de Morse en 3D, cuyas funciones de onda contrastan con las soluciones analíticas aproximadas para momento angular cero. También se incluye el análisis de los momentos de inercia y las intensidades de transición dipolares. Este enfoque proporciona resultados que contrastan con el 3DVM donde las funciones de Morse se identifican con una simetría dinámica. Como una aplicación real, se presenta la comparación de nuestro método con un cálculo a primeros principios para los niveles de vibración y rotación de la molécula de O_2 . Además, se realiza una prueba tipo "notch test" para mostrar cómo el formalismo permite verificar la sensibilidad de los resultados en función de la superficie de energía potencial (PES)[2].

1. Santiago, R.D.; Arias, J.M.; Gómez-Camacho J.; Lemus, R. An approach to establish the connection between configuration and $su(n + 1)$ algebraic spaces in molecular physics: application to ammonia. *Mol. Phys.* **2017**, 115, 3206-3223.

2. Rodríguez-Arcos, M.; Lemus, R.; Arias, J.M.; Gómez-Camacho J. Unitary group approach for effective potentials in 3D systems. Work in progress.

Agradecimientos

A DGAPA-UNAM (IN-227017), a la Consejería Española de Economía, Innovación, Ciencia y Empleo (FQM-160). El primer autor agradece a CONACYT por la beca de posgrado (Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales). Los autores agradecen a Octavio Castaños por las útiles discusiones.

C7 ¿Conviene tener un B.E.C. para gravimetría atómica?

J.M. Cervantes Martínez¹, E. Gómez¹, J. A. Franco-Villafañe²

¹ *Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, 78290, México*

² *CONACYT, Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, 78290, México*

¿Qué tanto importa la velocidad en la gravimetría? Pareciera que la velocidad de los átomos no importa debido a que uno siempre puede escoger un sistema de referencia inercial donde la velocidad sea cero y lo que uno mide es la fuerza gravitacional que es independiente del marco de referencia inercial. Sin embargo lo que se tiene es una distribución de velocidades, es decir, si seleccionamos una velocidad, las demás estarán desintonizadas debido al efecto Doppler, lo cual causa pérdidas de transferencia de poblaciones. En este trabajo buscamos responder a las siguientes preguntas ¿Cómo afecta la distribución de velocidades a las mediciones de la gravimetría?, ¿Cuáles son los efectos secundarios?, ¿Qué se puede hacer al respecto para contrarrestar los efectos?

La metodología consiste en el uso del método de elemento finito para resolver la dinámica de un átomo con dos niveles. El trabajo a presentar mostrara los resultados de dicho análisis.

Agradecimientos.

Financiamiento: de CONACYT (Ciencia Básica, Fronteras de la Ciencia y Laboratorios Nacionales) y la UASLP (FAI, Fondos Concurrentes).

C8 Sistema de Amarrado Absoluto de Frecuencia a una Cavity de Ultra Baja Expansi3n

J. A. D1az-Zaragoza¹, J. Ruiz¹, W. M. Pimenta¹, L. J. Gonz1lez¹, E. G3mez¹ y J. A. Franco-Villafa1e²

¹ *Instituto de F1sica, Universidad Aut3noma de San Luis Potos1, San Luis Potos1 78290, M1xico.*

² *CONACYT - Instituto de F1sica, Universidad Aut3noma de San Luis Potos1, San Luis Potos1 78290, M1xico.*

jadiaz@mail.ifisica.uaslp.mx

Los avances en interferometr1a at3mica requieren de l1seres con una mejor precisi3n en frecuencia, y que esta se mantenga estable por tiempos muy largos. Para ello, es necesario contar con una referencia de mayor estabilidad que el propio laser, como es el caso de una cavity 3ptica. Presentamos un sistema para amarrar un l1ser utilizando una cavity de ultra baja expansi3n (ULE, por sus siglas en ingl1s) como referencia para incrementar la precisi3n [1], con el cual comprobaremos la estabilidad en el tiempo esperada de 10 kHz por d1a de nuestro sistema al comparar con el espectro de saturaci3n de una transici3n at3mica de rubidio 87.

Referencias:

[1] N. Arias, L. J. Gonz1lez, V. Abediyeh, and E. Gomez; Frequency locking of multiple lasers to an optical cavity.

Agradecimientos:

CONACYT (Ciencia B1sica, Fronteras de la Ciencia y Laboratorios Nacionales).

UASLP (FAI, Fondos Concurrentes).

C9 Estudio de las propiedades electrónicas del $\text{TiO}_2:\text{Sm}^{3+}$

Naranjo Castañeda Felix Antonio¹, Zaragoza Rivera Irineo Pedro¹, Palacios Grijalva Laura Nadxieli^{1*}, Martínez Jiménez Anatolio², Chávez Sandoval Blanca Estela³.

¹*Tecnológico Nacional de México Campus Instituto Tecnológico de Tlalnepantla, Div. Estudios de Posgrado e Investigación. Av. Instituto Tecnológico S/N, La Comunidad, Tlalnepantla de Baz, Edo. México, 54070, México.*

²*UAM-Azcapotzalco, Área. Física Atómica Molecular Aplicada, Av. San Pablo 180, Azcapotzalco, CDMX, 02200, México.*

³*UAM-Cuajimalpa, Depto CNI, Vasco de Quiroga 4871, Col. Santa Fe, Cuajimalpa de Morelos, CDMX, 05348, México.*

Las superficies de potencial electrostático como una propiedad electrónica puede analizarse en nuevos materiales como es el caso para el óxido de titanio $\text{TiO}_2:\text{Sm}^{3+}$ dopado con Samario, además conocer la distribución de carga en el agregado de átomos compuesto por oxígeno, titanio y samario. El objetivo es determinar los efectos estructurales que produce el Sm^{3+} a TiO_2 , así como, analizar las propiedades electrónicas. La metodología permite obtener las energías totales de la molécula mostrando los cambios estructurales, la distribución de la carga y los orbitales de frontera. Para una razón considerable de intercambio atómico. Los cálculos de optimización de la geometría y propiedades electrónicas se desarrollaron mediante el código NWChem, a nivel de teoría DFT, utilizando las funciones bases DZVP con funcionales de intercambio y correlación B3LYP.

Agradecimientos: A CONACYT México, beca otorgada. No. 706588 a FANC, en el programa de Maestría en Ciencias de la Ingeniería.

C10 Estudio teórico de la morfología del ZnO-M (M = Al, Ag) y de las propiedades electrónicas

Cristian Eduardo García López, Irineo Pedro Zaragoza Rivera

Tecnológico Nacional de México, Campus Instituto Tecnológico de Tlalnepantla, Universidad Nacional Autónoma de México, Ap. Postal 43-8, Cuernavaca, 62251 Morelos, México

Los cálculos energía y optimización fueron realizados para determinar en un modelo de agregados de ZnO mediante un intercambio de ión (**Al, Ag**) por un **Zn** determinar el modelo estructural y electrónico con menor energía. El modelo inicial está conformado por dos monocapas de átomos colocadas de forma paralela para buscar una estructura tridimensional. Cada monocapa por separado presenta estructura hexagonal. La interacción de las monocapas a una distancia menor de 2 Å de separación por medio de la optimización se determinó la energía de interacción para obtener finalmente la estructura. Los efectos que produce la interacción generan enlaces en los átomos extremos. Los intercambios atómicos de los iones propuestos de Al y Ag producen nuevas formas estructurales y cambian la estructura inicial. Los agregados de átomos como productos finales del cálculo de optimización de la geometría proporcionan los valores de la distribución de carga por medio del análisis poblacional según Mulliken y los orbitales de frontera, esta información es útil a partir de unas condiciones iniciales para los modelos propuestos. La interacción y la sustitución son importantes para entender la modificación en la estructura y en las propiedades electrónicas del sistema conformado por capas de ZnO. La metodología Teoría del Funcional de Densidad (DFT), con el funcional (M06-2x) es la utilizada en esta investigación.

Agradecimientos. Los autores agradecen al Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS), perteneciente al padrón de laboratorios nacionales de CONACYT, por los recursos computacionales, el apoyo y la asistencia técnica brindados, a través del proyecto No. 201801072N

Índice de participantes

A	
Acosta Montes, Jorge G.	31
Albarrán Ruiz, Rodrigo Emanuel.....	40
Alcantar Vidal, Alan D.	39
Alegria-Meza, Diego.....	15, 41
Ángeles Aguillón, Irvin F.....	31
Arciniega-Gutiérrez, A.....	15
Arias Lara, Olga Oralia	20
Arias, J.M.....	43
Ayala Moreno, Armando	19
B	
Bautista Hernández, A.....	23
Bermúdez-Montaña, Marisol.....	13
Billon, Marisol.....	34
Burlak, Gennadiy	30
C	
Cabrera-Trujillo, Remigio.....	9
Camacho García, J. H.	23
Carvajal, Miguel	13
Castro Beltrán, Héctor M.....	39
Cervantes Martínez, J.M.	44
Chávez Sandoval, Blanca Estela	46
Chávez, María Isabel	21
Corella Madueño, Adalberto	20
Costa Sierra, Diego	31
Cruz, Salvador A.....	19
D	
de Urquijo, Jaime.....	38
Demésy, Guillaume	28
Díaz-Zaragoza, J. A.	45
Domínguez-Mandujano, G.	15
E	
El Hachimi, Abdel G.	9
F	
Fernández-Marín, Antonio A.....	35
Flores-Mijangos, Jesús.....	15, 16, 41, 42
Franco-Villafañe, John A.	29, 34, 44, 45
G	
García López, Cristian Eduardo	47
García Vergara, Mauricio.....	28
García-Cruz, Isidoro	10
Garza, J.....	18
Garza, Jorge	21
Gómez, Eduardo	29, 34, 44, 45
Gómez-Camacho, J.....	43
González, L. J.	45
González-Magaña, Olmo	38
Groby, Jean-Philippe.....	35
H	
Hamze, Saeed.....	41
Hinojosa, Guillermo	8
Höpfel, Herbert	7
Hoyos-Campo, Lina Marieth.....	15, 16, 41, 42
J	
Jáuregui, Rocío	31, 37
Jiménez, Noé.....	35
Jiménez-Mier, José Ignacio....	14, 15, 16, 41, 42
L	
Lancheros-Naranjo, D. A.	29
Lemus Casillas, Renato	12, 13, 43
Ley Koo, Eugenio.....	25, 26, 27, 40
Lira Galeana, Carlos.....	10
Lira, Antonio.....	8
López-Jacinto, Dai	15, 41
López-Vázquez, Alejandra	34
M	
Martínez Jiménez, Anatolio	46
Martínez, Aldo Ángel	8
Martínez-Flores, César	18
Medina-Ángel, Gustavo.....	30
Méndez Fragoso, Ricardo	26
Mendoza López, Luis. A.	31
Munoz-Garay, Carlos	21
N	
Naranjo Castañeda, Felix Antonio.....	46
Navarro-Navarrete, José Eduardo	15, 16
O	
Olivares-Pilón, Horacio	11

Olivares-Rentería, G. A.29

P

Palacios Grijalva, Laura Nadxieli.....46

Paredes, Alejandro36

Pérez, Gerson38

Pérez-Bernal, Francisco13

Pimenta, Wanderson M.34, 45

Q

Quiroz-Sánchez, Gersain Gabriel16, 42

R

Ramírez Gallardo, Ana Cristina.....10

Ramírez-Martínez, Fernando..... 15, 16, 41, 42

Ramírez-Solís, Alejandro.....8, 24

Récamier, José36

Rodríguez Molina, Braulio7

Rodríguez-Arcos, Marisol.....12, 43

Romero-García, Vicente35

Rosas Burgos, Rodrigo Arturo.....20, 33

Ruiz, J.45

S

Sahagún, Daniel..... 31

Salas Sánchez, Frank José..... 7

Sánchez-Dehesa, José 35

Sathishkumar Munusamy 21

T

Torres Bustamante, José Humberto 25

Torres García, Yaneth M. 31, 34

Turbiner, Alexander 11

Turiján Clara, Benita..... 24

V

Valdez, S...... 4, 23

Vargas Olvera, Eva Cecilia..... 7

Vargas, Rubicelia 21

Villanueva Castillo, Marco Antonio 22

Y

Yanajara Parra, Heichi Horacio 33

Z

Zaragoza Rivera, Irineo Pedro 22, 46, 47

Zolla, Frédéric..... 28