

12^o Taller de Dinámica y Estructura de la Materia

TaDEM

3 - 5 agosto, 2022

www.fis.unam.mx/TaDEM



INSTITUTO DE
CIENCIAS
FÍSICAS

Instituto de
Ciencias
Nucleares
UNAM



IF



AAA
Casa abierta al tiempo

Este taller será totalmente transmitido en línea via ZOOM

Organizadores:

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

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

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

César Terán Cisneros, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM*

Colver E. De la Cruz Román, *Instituto de Ciencias Físicas, UNAM*

Agradecimientos

Este 12o taller de Dinámica y Estructura de la Materia (taDEM) no sería posible sin todo el apoyo logístico y administrativo proporcionado por las siguientes instituciones. El Instituto de Ciencias Físicas-UNAM, el Instituto de Física-UNAM, el Instituto de Ciencias Nucleares-UNAM, la Facultad de Ciencias-UNAM, la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, y la Universidad Autónoma de San Luis Potosí. En particular, queremos agradecer el apoyo de la C.P. Patricia Rodríguez y la Lic. Celia Herrera Zambrano quienes por su invaluable ayuda para la realización de este taller.

Prefacio

De entre los muchos privilegios y gustos que puede haber en la vida académica, uno de ellos es el de mirar hacia atrás y constatar que los planes que se han hecho se han seguido, a pesar de las vicisitudes y dificultades inherentes a nuestro quehacer. Este comentario es particularmente relevante al elaborar este prefacio a lo que será la décimo segunda edición del Taller de Estructura y Dinámica de la Materia. La primera edición de este taller fue hace ya 12 años y es agradable constatar, si uno revisa los prefacios de los talleres anteriores, que este taller ha ido evolucionado, desde la idea original de cohesionar a la comunidad, conocer nuestro trabajo y fomentar la interacción entre todos nosotros, a una reunión que se hace esencial para mantenernos en contacto y ampliar nuestros intereses académicos, docentes y de vinculación. Esta necesidad de mantenernos cohesionados, bien comunicados y abiertos a colaboraciones e intercambio de ideas se hace especialmente relevante en los tiempos actuales en los que el mundo sale de una pandemia global para encontrarse con nuevas dificultades e incertidumbres a nivel global y nacional. No está entre nuestras capacidades como académicos el cambiar las realidades del mundo. Sin embargo, nos corresponde algo probablemente más profundo: Mantener la creación de ideas frescas y novedosas en nuestras respectivas áreas de interés, comunicarlas y enriquecerlas entre nosotros, en comunidad y, finalmente, transmitir las a las generaciones jóvenes por medio del privilegio que tenemos al ser también maestros y profesores de estudiantes de nivel superior y posgrado. Es paradójico que, casi en contrasentido de los retos ambientales, geopolíticos y económicos que enfrentamos actualmente como especie, con un resurgimiento incomprensible de nacionalismos y conflictos entre varios países en el mundo, la Ciencia actual y la Física, en particular, experimentan uno de los desarrollos más dinámicos y emocionantes que ha habido en la historia de la humanidad. Desde los sorprendentes desarrollos en tecnologías Cuánticas, la comprensión profunda de los procesos fundamentales a nivel de quarks, el formidable nivel de interdisciplina que experimentamos actualmente e incluso el uso de la espectroscopía a años luz de distancia, para analizar atmósferas de planetas de otros sistemas solares, como lo está llevando a cabo el telescopio James Webb, todos estos y muchos otros logros más se están llevando a cabo en paralelo a eventos menos afortunados.

Como comunidad, es un privilegio estar en la parte creativa y positiva de la humanidad: Creando nuevos conceptos y técnicas, compartiéndolas entre nosotros de manera generosa y pasando la estafeta de la ciencia a las generaciones que vienen y que ya están aquí contribuyendo con su juventud al progreso de nuestra área.

A pesar de la pandemia global que lleva ya más de dos años, y que no muestra signos de abatirse o atenuarse, es un gusto enorme revisar las contribuciones y trabajos que la comunidad nos ha compartido para hacer posible esta doceava edición de nuestro TaDEM. Nuevamente, como en ediciones anteriores, sorprende de manera agradable la diversidad y calidad de los trabajos que se generan en el seno de nuestra comunidad.

Las contribuciones a esta doceava edición incluyen temas muy variados que van desde el desarrollo y estudio de MEMS basados en tecnologías cuánticas, pasando por imanes de una sola molécula, técnicas refinadas y precisas de estabilización de láseres, métodos teóricos cada vez más refinados para apoyar el estudio fundamental de moléculas y hasta llegar a temas de indudable valor interdisciplinario como las aplicaciones médicas de la física molecular. Esta riqueza y diversidad de nuestro taller son prueba fehaciente que, sin importar las condiciones externas, tenemos la capacidad como comunidad de mantener activa nuestra capacidad de crear, enseñar y empujar, con nuestro trabajo, a la creación de una de las más maravillosas actividades del ser humano: La de hacer ciencia y entender el mundo que nos rodea, la de crear y compartir asombros, la de compartir el conocimiento, difundirlo y compartirlo con las generaciones jóvenes.

Este taller no sería posible, aún en su versión a distancia, como lo será este por razones de la pandemia, sin el apoyo del comité organizador en donde sobresale nuestro querido colega, el Dr. Remigo Cabrera Trujillo, que a pesar de cualquier dificultad logística, financiera e incluso ante pandemias globales, no ha dejado de empujar y mantener este taller. Esta doceava versión del TaDEM no sería tampoco posible sin la valiosa y entusiasta colaboración de ustedes, los colegas y estudiantes que mandaron sus colaboraciones y que con sus presentaciones nos enriqueceremos todos. Solo queda desear un exitoso taller, lleno de interacciones y pláticas enriquecedoras, en la que podamos vernos, interactuar y aprender.

Dr. Antonio M. Juárez

Secretario académico del ICF

Miembro del comité organizador local

Cuernavaca, Morelos, a 3 de agosto del 2022

Programa 12o TaDEM 2022

HORARIO	3/08 Miércoles	4/08 Jueves	5/08 Viernes
9:00-9:30	(Chair: Cabrera-Trujillo) Inauguración	(Chair: J. I. Jiménez) O13 Rosa Reyes	(Chair: R. Mendez-F.) O26 José Roberto Reyes-García
9:30-10:00	O1 Antonio M. Juárez	O14 Oswaldo Alejandro Sandoval León	O27 Eugenio Ley Koo
10:00-10:30	O2 Héctor. M. Castro	O15 Horacio Olivares Pilon	O28 Diego Mora de la Fuente
10:30-11:00	O3 Alan D. Alcantar Vidal	O16 Colver E. de la Cruz Roman	O29 Aurea Nictcha Sánchez Espín
11:00-11:30	CAFÉ	CAFÉ	CAFÉ
11:30-12:00	(Chair: E. Gomez) O4 Daniel Sánchez-Terán	(Chair: M. Bastarrachea M) O17 <u>Oliver Franco Jandette Fuentes</u>	(Chair: R. Lemus) O30 Brandt Bertrand
12:00-12:30	O5 J. Jonathan Martínez	O18 César E. Terán-Cisneros	O31 César A. Guarín
12:30-13:00	O6 Christian Aguayo López	O19 Elizabeth Cruz Osorio	O32 Adriana Morales-Martínez
13:00-13:30	O7 A. López-Vázquez	O20 R. Méndez-Fragoso	O33 Mario Alan Covarrubias Morales
13:30-15:30	COMIDA	COMIDA	COMIDA
15:30-16:00	(Chair: S. A. Cruz) O8 César Martínez-Flores	(Chair: A. Juárez) O21 Olmo González-Magaña	(Chair: O. Gonzalez) O34 Juan F. Galicia-López
16:00-16:30	O9 M. A. Bastarrachea-Magnani	O22 Joshua Cornejo Gomez	O35 Pablo Luis Hernández-Adame
16:30-17:00	O10 Luis Guillermo Mendoza Luna	O23 Adrian Escobar-Ruiz	O36 Catalina Soriano-Correa
17:00-17:30	O11 R. Lemus	O24 Adalberto Corella Madueño	O37 Carolina Barrientos Salcedo
17:30-18:00	O12 José I. Jiménez Mier y Terán	O25 Eduardo Suárez	O38 CLAUSURA

Contenido

O1 Estudio del efecto auto-heterodino en H ₂ O usando un láser de Cascada Cuántica en modo de “gorjeo”	8
O2 Pulsaciones Cuánticas en la Fluorescencia Resonante de un Sistema $J=1/2 - J=1/2$	10
O3 Distribuciones de Saltos Cuánticos en la Fluorescencia Resonante de un Sistema de Momento Angular $J=1/2 - J=1/2$	11
O4 Corrección a las derivas térmicas de un gravímetro de MEMS.....	12
O5 Efecto de láser con emisores en clústeres de percolación.....	13
O6 Haces ópticos estructurados y su aplicación en pinzas ópticas.....	14
O7 Sistema de Modulación Laser para su aplicación en Tecnologías Cuánticas.....	15
O8 Imanes de una sola molécula: un estudio DFT de ftalocianinas de lantánidos de dos pisos.....	16
O9 Antiferromagnetismo cuántico y redes ópticas.....	17
O10 Comprobación experimental de la ley del gap en cianinas.....	18
O11 Estudio de las excitaciones vibracionales en la serie de isotopólogos asimétricos de CO ₂	19
O12 Del átomo de dos niveles a átomos multinivel.....	20
O13 Manipulación espectral del potencial de Rosen-Morse trigonométrico usando mecánica cuántica supersimétrica.....	21
O14 Visualización y calibración de un campo evanescente.....	22
O15 Espectro rovibracional de moléculas diatómicas.....	23
O16 Ionización de un ion molecular de hidrógeno en colisiones con un antiprotón.....	24
O17 Medición de la sección transversal de absorción para el Metanol en el infrarrojo medio.....	25
O18 Procesos de ionización en colisiones de un antiprotón con un átomo de hidrógeno	26
O19 Localización-deslocalización de un electrón sujeto a un potencial de oscilador armónico y un campo eléctrico constante confinado en una región circular.....	27
O20 Espectro de energía de dos pozos de potencial en una guía de onda de materia ultra-fría.....	28
O21 ¿Un cátodo virtual en la técnica pulsada de Townsend?.....	29
O22 Campos electromagneticos cuadrupolares electricos, magneticos y toroidales con fuentes confinadas en superficies esfericas.....	30
O23 Quantum generalized three-body closed chain harmonic system.....	31
O24 La molécula de hidrógeno confinada dentro de una cavidad esferoidal prolata con potencial finito.....	32
O25 Métodos algebraicos de variable discreta aplicados a potenciales escalón.....	33
O26 Efectos de confinamiento esférico sobre los estados más bajos con simetría esférica de la serie isoelectrónica del helio ($Z=1,2,3,4,5$).....	34

O27 Reaccion de radiacion con enfoque de fuerza: soluciones exactas para electron y fuerza de oscilador armonico.....	35
O28 Transformaciones de lorentz de campos opticos invariantes en propagacion vectoriales.....	36
O29 Calibración de un espectrómetro Czerny-Turner para obtención de Raman de glóbulos rojos de personas con/sin diabetes tipo II.....	37
O30 Structural and Molecular Behavior Of Ascaphin-8 and Three Variants In Bacterial Membrane Models Using Molecular Dynamics.....	38
O31 Isómeros de nitroanilinas y sus propiedades ópticas: un estudio teórico-experimental.....	40
O32 Estudios por dinámica molecular de la interacción del péptido ascafina-8 con tres modelos de membranas lipídicas.....	41
O33 Física Computacional de Sistemas Cuánticos Confinados.....	43
O34 Calibración de un arreglo experimental para la detección de fluorescencia inducida por dos fotones para colorantes Rodaminas.....	44
O35 Análisis in silico de la formación de poro del péptido maximina 3 en una membrana lipídica modelo tipo bacteriana.....	45
O36 Evaluación de la estructura electrónica y las interacciones intermoleculares de péptidos derivados de p53 con efecto citotóxico: Estudios DFT y de acoplamiento molecular.....	47
O37 Estructura electrónica de péptidos antimicrobianos derivados de ascafina.....	48
Índice.....	50

O1 Estudio del efecto auto-heterodino en H_2O usando un láser de Cascada Cuántica en modo de “gorjeo”

A.M. Juárez, G. Bustos

Correo electrónico: amjuarez@icf.unam.mx

El láser de cascada cuántica de cavidad externa (EC-QCL) se ha convertido en una importante fuente de radiación en el rango de luz infrarroja media ($3\ \mu$ a $20\ \mu\text{m}$) del espectro electromagnético. Los EC-QCL se han implementado con éxito en una variedad de estudios espectrales para diferentes aplicaciones, como el monitoreo atmosférico y ambiental [1], la detección de trazas de explosivos [2] y el análisis del aliento humano [3]. Los EC-QCL generan luz láser sintonizable por medio de una serie periódica de capas de tamaño nanométrico que conduce a un confinamiento de pozo cuántico múltiple unidimensional. En el modo pulsado, se inyecta una alta corriente de electrones en el medio activo y, por lo tanto, se induce un calentamiento. Este calentamiento, a su vez, modifica el índice de refracción del medio QCL, lo que conduce a un ajuste rápido de la longitud de onda inducido por el pulso de corriente, lo que permite un funcionamiento "gorjeo" del láser. En nuestro trabajo, utilizamos un sintonizador Uber, EC-QCL pulsado y ampliamente sintonizable de Daylight Solutions con un rango de emisión en el IR medio sintonizable de $6,9$ a $8,7\ \mu\text{m}$. El ancho de pulso se puede seleccionar en un rango de $40\ \text{ns}$ a $500\ \text{ns}$ con una frecuencia de repetición variable de $100\ \text{Hz}$ a $100\ \text{KHz}$. El QCL ofrece una potencia de pulso máxima de hasta $350\ \text{mW}$ cerca de la mitad del rango de sintonización. La luz del laser se acopla una cavidad de Herriot que se coloca entre el EC-QCL y un medidor de infrarrojo medio (MCT). Con el fin de capturar la dependencia del tiempo del láser QCL para una frecuencia dada, utilizamos un integrador tipo “boxcar” (SRS 2000) con resolución de picosegundos. Con este arreglo hemos logrado medir la auto excitación Heterodina de la molécula de H_2O . Este fenómeno ocurre cuando se hace interactuar un pulso con un barrido de frecuencia rápido con un sistema resonante en fase gaseosa. Se puede obtener una imagen simple del proceso autoheterodino si se considera que el pulso original, que viaja a través de la cavidad, se suma linealmente con el pulso retardado producido por la muestra molecular, lo que da lugar a patrones de interferencia en la radiación total detectada al final del pulso láser [4]. Un análisis más completo de este proceso requiere el análisis de un sistema cerrado de dos niveles interactuando con un campo de barrido, en términos de las ecuaciones ópticas de Bloch. En el presente trabajo reportamos señales autoheterodinas dependientes de la presión producidas en la celda de Herriot por la absorción resonante de vapor de agua en la cavidad correspondiente a una transición rotación-rotación J-J' en el estado fundamental vibracional del H_2O . En la presentación discutiré las posibles aplicaciones de los láseres cuánticos en cascada en el autoseparamiento selectivo de estado de iones negativos, los estudios de la competencia de los canales de desprendimiento-disociación en iones moleculares negativos y el uso potencial de la

espectroscopia de infrarrojo medio intracavitaria como una herramienta de diagnóstico potencial en los anillos de almacenamiento de iones.

Este proyecto es financiado por el programa PAPIIT-DGAPA con el proyecto IN116920

Referencias

- [1] R. F. Curl, F. Capasso *et al* Chem. Phys. Lett. **487** 1-3 (2010).
- [2] R. Furstenberg *et al* Appl Phys. Lett. **93** 224103 (2008).
- [3] M. L. Silva *et al* *Appl Phys. B* **81** 5, 705-710 (2005).
- [4] J.E. Rothenberg, IEEE J. Quantum Electron. **QE22**, 174 (1986)

O2 Pulsaciones Cuánticas en la Fluorescencia Resonante de un Sistema $J=1/2 - J=1/2$

Héctor. M. Castro Beltrán¹, O. de los Santos Sánchez², L. Gutiérrez, A. D. Alcantar Vidal¹

¹ Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, 62209 Cuernavaca, Mor., México

² Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Ave. Carlos Lazo 100, Santa Fé, Mexico City, Mexico, 01389

³ Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 62210 Cuernavaca, Morelos, México

Estudiamos teóricamente efectos de interferencia cuántica en las transiciones π ($\Delta m=0$) de la fluorescencia de un átomo con momento angular $J=1/2$ en sus estados base y superior forzado por un láser linealmente polarizado. Bajo excitación láser fuerte y el desigual desdoblamiento Zeeman de los niveles por un campo magnético se tienen dos frecuencias de Rabi cercanas dominantes que producen pulsaciones en la fluorescencia con frecuencias media y de modulación bien definidas, en contraste con las pulsaciones por la interferencia por emisión espontánea de dos transiciones. Observamos pulsaciones en la intensidad, correlaciones del dipolo y correlaciones de dos fotones.

ADAV agradece beca Conacyt No. 804318.

O3 Distribuciones de Saltos Cuánticos en la Fluorescencia Resonante de un Sistema de Momento Angular $J=1/2 - J=1/2$

Alan D. Alcantar Vidal y Héctor M. Castro Beltrán

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

Usando teoría de trayectorias cuánticas discontinuas, estudiamos distribuciones del número de fotones y del retardo entre fotones consecutivos emitidos en las transiciones π ($\Delta m=0$) de la fluorescencia de un átomo con momento angular $J=1/2$ en sus estados base y superior forzado por un láser linealmente polarizado. Con estas distribuciones podemos calcular otras propiedades de la fluorescencia, tales como correlaciones de dos fotones y demostrar desviaciones respecto al caso de átomo de dos niveles.

ADAV agradece beca Conacyt No. 804318.

O4 Corrección a las derivas térmicas de un gravímetro de MEMS

D. Sánchez-Terán¹, V. M. Valenzuela², A. Sandoval¹, J. A. Franco-Villafañe³, E. Gómez¹.

¹Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, 78295, México.

²Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Sinaloa, 80013, México.

³CONACYT – Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

Un gravímetro MEMS es un dispositivo que mide variaciones locales en la aceleración gravitacional (g) mediante el uso de un sistema masa-resorte. En años recientes este tipo de dispositivos han alcanzado sensibilidades de unos pocos microgal por $\text{Hz}^{1/2}$ [1,2]. Esto se logra mediante un cuidadoso diseño utilizando la combinación de un anti-resorte (rigidez negativa) con un resorte tradicional (rigidez positiva) [3]. Sin embargo, la estabilidad de las mediciones de g en periodos prolongados de tiempo presenta problemas de deriva, principalmente causados por variaciones en la temperatura del sistema. Para ciertas aplicaciones, tales como la observación de las mareas de la tierra esto presenta un desafío, dado que se requiere el funcionamiento continuo del gravímetro por varios días. En este trabajo se presenta una solución que permite reducir la dependencia de temperatura del sistema, logrando así mejorar la estabilidad en periodos prolongados de tiempo. Nuestro diseño toma ventaja de la expansión térmica geométrica que sufre el sistema al cambiar la temperatura, ya que mediante el uso de un material de ultra baja expansión térmica es posible aplicar una compresión lateral al sistema MEMS, corrigiendo así las derivas causadas por los cambios térmicos.

Financiamiento: Copocyt, Fideicomiso 23871

Referencias

- [1] Shihao Tang, Huafeng Liu, Shitao Yan, Xiaochao Xu, Wenjie Wu, Ji Fan¹, Jinqun Liu, Chen-yuan Hu¹, and Liangcheng Tu¹. A high-sensitivity mems gravimeter with a large Dynamic range. *Microsystems and Nanoengineering*, 2019.
- [2] R. P. Middlemiss, A. Samarelli, D. J. Paul, J. Hough, S. Rowan, and G. D. Hammond. Measurement of the earth tides with a mems gravimeter. *Nature*, 2016.
- [3] Jin Qiu, Jeffrey H. Lang, and Alexander H. Slocum. A curved-beam bistable mechanism. *Journal Of Microelectromechanical Systems*, 13(2), 2004.

O5 Efecto de láser con emisores en clústeres de percolación

J.Jonathan Martínez¹, Gennadiy Burlak², Alfredo Díaz de Anda³

^{1,2}*Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Avenida Universidad 1001, Colonia Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Mor, México.*

³*Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas" Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur, Col. San Manuel Edificios IF1, IF2, IF3 y EMA1, Ciudad Universitaria, C.P. 72570, Puebla, Pue. México.*

En este trabajo se estudia el efecto láser sin espejos, el láser aleatorio de percolación en 3D. La diferencia con láser convencional es que el láser aleatorio contiene estructuras desordenadas que definen la frecuencia y la dirección en las que el láser aleatorio emite la luz, la emisión de este láser es coherente y estable. Se estudia el sistema semi clásico no lineal de las ecuaciones de Maxwell en 3D que se encuentran acopladas con las ecuaciones de polarización y las ecuaciones de cuatro niveles de los nano emisores. Para las soluciones del campo electromagnético se realizan simulaciones numéricamente en 3D con el método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD) con ayuda de los paquetes numéricos MICROSOFT VISUAL STUDIO (Visual C#).

Agradecimientos.

Este trabajo fue apoyado en parte por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) bajo la concesión No. A1-S-9201.

O6 Haces ópticos estructurados y su aplicación en pinzas ópticas

Christian Omar Aguayo López, Aurea Nictcha Sánchez Espín, José Luis Hernández
Pozos

Av. San Rafael Atlixco 186, Leyes de Reforma 1ra Secc, Iztapalapa, 09340 Ciudad de México, CDMX

Los sistemas de atrapamiento por luz o trampas ópticas han sido muy útiles en las últimas 3 décadas para la investigación y manipulación de objetos con magnitudes entre los cientos de nm y algunas μm de tamaño, tanto objetos inanimados como objetos biológicos. Usando la longitud de onda apropiada estos sistemas no dañan la estructura de los objetos atrapados, pues se usan longitudes de onda que no son absorbidas por el objeto en cuestión, característica particularmente importante si se desea atrapar células, bacterias, etc. En éste trabajo buscamos medir las propiedades microreológicas de glóbulos rojos de personas con diabetes tipo 2 comparando con el de personas sin esta enfermedad. Para ello, se diseñó un sistema de pinzas ópticas que funciona gracias a un láser de Nd:YAG de 532nm y con un arreglo de lentes a modo de telescopio se hace incidir el haz sobre un axicon que enfoca fuertemente el haz sobre la muestra permitiéndonos manipularla. También, se espera que utilizando un polarizador $\lambda/4$ se transfiera cierta cantidad de momento angular de luz del láser haciendo rotar pequeñas partículas previamente introducidas en las células para, de esta forma, medir su viscosidad y tener comparaciones con glóbulos rojos de personas con y sin diabetes.

O7 Sistema de Modulación Laser para su aplicación en Tecnologías Cuánticas

A. López-Vázquez¹, F. Abdala-Martínez¹, N.V. Corzo-Trejo², E. DeCarlos-López³, E. O. Díaz-Pérez⁴, J. Flores-Mijangos, J.A. Franco-Villafañe⁵, E. Gómez-García¹, M.A. Gonzalez-Maldonado¹, K. Jiménez-García², J. Jiménez-Mier⁴, D. López-Jacinto⁴, C.J. López-Monjaraz², J.M. López-Romero², A. Medina-Herrera³, R. Méndez-Fragoso⁴, G. Olivares-Rentería⁶, C.A. Ortiz-Cardona³, H. Peña-Vega², J. Raboño-Borbolla², F. Ramírez-Martínez⁵ y V.M. Valenzuela-Jiménez⁷

¹Universidad Autónoma de San Luis Potosí. | ²Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN – Unidad Querétaro. | ³Centro Nacional de Metrología. | ⁴Universidad Nacional Autónoma de México. | ⁵CONACYT – Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí. | ⁶Avanzada 366, Col. Tequisquiapan, San Luis Potosí, SLP, México. | ⁷Universidad Autónoma de Sinaloa.

México incursiona actualmente en el desarrollo de Tecnologías Cuánticas, notablemente en el diseño y puesta en marcha de un gravímetro cuántico compacto y portátil cuyo funcionamiento se basa en el fenómeno cuántico de interferometría atómica. Este avance tecnológico se desarrolla desde el proyecto Grávico: una colaboración multistitucional que reúne a algunos de los principales grupos de investigación en manipulación atómica de México. El gravímetro cuántico portátil será el primer dispositivo fabricado en Latinoamérica que emplea Tecnologías Cuánticas para medir gravedad, en específico permitirá realizar mediciones absolutas de la aceleración de la gravedad con una nube de átomos fríos en caída libre. El Gravímetro Cuántico Portátil constará principalmente de tres módulos: una fuente láser estabilizada con un ancho de línea angosto, un sistema de modulación para la generación de múltiples haces, y una cámara de ultra alto vacío estabilizada a vibraciones mecánicas. El desarrollo de esta tecnología en el país dará paso a mejorar los modelos de predicción para la localización de mantos acuíferos, exploración de hidrocarburos, minerales, monitoreo de fallas tectónicas, así como el desarrollo de nuevos sensores y sistemas de navegación. En particular en este trabajo se habla sobre el sistema de modulación, al cual le llega una frecuencia de entrada (único haz láser) para generar a la salida 7 frecuencias ópticas diferentes con una separación de frecuencia en el rango de los GHz. El sistema de modulación está conformado por dos racks de 48cm, el primero contiene las componentes electrónicas y el segundo las componentes ópticas necesarias para realizar los experimentos de manipulación atómica. Las aplicaciones de este sistema de modulación pueden impactar tanto la parte de enseñanza como el desarrollo de nuevas tecnologías, ya que ofrece todo lo necesario para la realización de la manipulación atómica avanzada.

Agradecimientos. CONACyT FC 157, 316171 y Fordecyt 297126, COPOCYT Fideicomiso 23871, LANMAC 260704 y UASLP, proyecto PAPIIT IN117120.

O8 Imanes de una sola molécula: un estudio DFT de ftalocianinas de lantánidos de dos pisos

César Martínez-Flores*, Lina M. Bolívar-Pineda, Vladimir A. Basiuk

Instituto de Ciencias Nucleares

*Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior C.U., Ciudad de México,
04510, México*

Mediante el uso de la teoría de los funcionales de la densidad, estudiamos cómo una adición gradual de electrones $4f$ influye en las geometrías y propiedades electrónicas de los imanes de una sola molécula de lantánidos (LnPc_2). Para manejar los problemas de convergencia, que son comunes para los compuestos de lantánidos, probamos conjuntos de bases tipo: 6-31G (DN), 6-31G(d) (DND). Los cálculos para las quince bis-ftalocianinas fueron posibles de completar solo con el conjunto de base DN, para el cual las geometrías optimizadas están en un acuerdo razonable con los datos experimentales de difracción de rayos X; por otro lado, el uso de DND produce problemas de convergencia y geometrías poco realistas. Se analizaron parámetros electrónicos como: las energías de HOMO, LUMO, gap HOMO-LUMO, entre otros. En el caso de los iones de capa cerrada La^{3+} y Lu^{3+} no se observa transferencia de espín a los ligandos de ftalocianina. En la mayoría de los complejos (Ce, Pr, Tb–Yb) los electrones desapareados se transfieren a los ligandos de ftalocianina. La observación más inesperada es la pérdida del único electrón f desapareado del cerio, lo que significa que su estado de oxidación es Ce^{4+} y no Ce^{3+} : esto convierte a CePc_2 en una especie de capa cerrada.

Agradecimientos.

Se agradece el apoyo económico de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM, DGAPA-IN103622). CM.-F. agradece a la DGAPA-UNAM por la beca posdoctoral.

[*cesar.flores@correo.nucleares.unam.mx](mailto:cesar.flores@correo.nucleares.unam.mx)

O9 Antiferromagnetismo cuántico y redes ópticas

M. A. Bastarrachea-Magnani

Departamento de Física,

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Av. Ferrocarril San Rafael Atlixco, Núm. 186, Col. Leyes de Reforma 1 A Sección, Iztapalapa, C.P. 09310 CdMx, México

Los progresos recientes en arreglos experimentales de átomos fríos en redes ópticas ha hecho posible crear orden antiferromagnético de largo alcance [1]. Esto ha revivido la cuestión sobre el movimiento de dopantes en redes antiferromagnéticas, cuya respuesta se encuentra conectada con el problema de la superconductividad de alta temperatura [2]. En este trabajo presentaré una revisión del problema de un agujero móvil que se puede pensar como un holón interactuando con ondas de espín en la aproximación de fermión esclavo y que se describe mediante el Hamiltoniano de t - J [3]. Usando la aproximación auto-consistente de Born (SCBA) es posible estudiar la estructura espacial del holón [4] y plantear perspectivas sobre las interacciones relevantes que llevan estados ligados de holones [5].

[1] D. Greif, et al., Science 340, 1307 (2013); J. Koepsell, et al., Nature 572, 358 (2019).

[2] Y. A. Izyumov, Physics-Uspekhi 40, 445 (1997).

[3] C. L. Kane, et al., Phys. Rev. B 39, 6880 (1989); G. Martinez and P. Horsch, Phys. Rev. B 44, 317 (1991).

[4] A. Ramšak and P. Horsch, Phys. Rev. B 57, 4308 (1998).

[5] K. K. Nielsen, MABM, T. Pohl, and G. M. Bruun, Phys. Rev. B 104, 155136 (2021).

O10 Comprobación experimental de la ley del gap en cianinas

Luis Guillermo Mendoza Luna^{1,2,*}, César Augusto Guarín Durán^{1,2}, Emmanuel Haro Poniatowski², José Luis Hernández Pozos²

¹*Cátedras CONACYT (Investigadores por México) - Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 186 Col. Vicentina, C.P. 09340 México D.F., México.*

²*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 186 Col. Vicentina, C.P. 09340 México D.F., México.*

* luisgml@xanum.uam.mx

La ley del gap de energía (EGL) afirma que la tasa de las transiciones no radiativas tales como el cruce entre sistemas y la conversión interna decrece exponencialmente con el tamaño de la brecha (gap) de energía entre los estados cuando el sistema se encuentra en solución [1]. En el límite de acoplamiento débil, la EGL puede sintetizarse mediante la siguiente ecuación: Utilizando la información disponible en la literatura para 22 cianinas y las mediciones hechas en nuestro laboratorio, se dedujo una relación lineal entre el logaritmo de la constante de conversión interna (canal no radiativo) y la brecha de energía entre los estados S_1 y S_2 de dichas cianinas, lo cual confirmó que la EGL se cumple para las cianinas [2,3]. Se obtuvieron, además, los parámetros relevantes de la ecuación dada arriba. También se compararon estos resultados con los obtenidos para otros pigmentos, como las porfirinas y los azulenos.

Bibliografía

[1] Robert Englman & Joshua Jortner. *The energy gap law for radiationless transitions in large molecules*, Molecular Physics, 18:2, 145-164 (1970).

[2] Cesar A. Guarin, Luis Guillermo Mendoza-Luna, Emmanuel Haro-Poniatowski, José Luis Hernández-Pozos. Two-photon absorption spectrum and characterization of the upper electronic states of the dye IR780, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Volume 249, 119291 (2021).

[3] Luis Guillermo Mendoza-Luna, Cesar A. Guarin, Emmanuel Haro-Poniatowski, José Luis Hernández-Pozos. Experimental and computational data on two-photon absorption and spectral deconvolution of the upper excited states of dye IR780, Data in Brief, Volume 35, 106752 (2021).

Agradecimientos: Agradecemos a la Universidad Autónoma Metropolitana y al CONACYT el apoyo INFR-2015-255579 “Infraestructura para Laboratorio de Interacción Radiación Materia y Espectroscopía de Procesos Ultrarrápidos (<40 fs)” utilizado para la compra del equipo láser de femtosegundos. LGML y CAG agradecen a CONACYT por el Proyecto 683 en el marco del programa “Cátedras CONACYT”. Los autores agradecen el tiempo de cómputo otorgado por LANCAD (apoyo 20-2020).

O11 Estudio de las excitaciones vibracionales en la serie de isotopólogos asimétricos de CO₂

R.Lemus¹, M. Bermúdez-Montaña², Marisol Rodríguez-Arcos² y M.Carvajal³

¹*Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM*

²*Tecnológico de Monterrey*

³*Universidad de Huelva, España*

Se presenta un modelo algebraico para la descripción de las excitaciones vibracionales de la serie de isotopólogos asimétricos del bióxido de carbono. Primero se lleva a cabo un análisis vibracional que sólo toma en cuenta los fundamentales y el primer estado excitado de flexión, imprescindible debido a la fuerte interacción de Fermi. Esto permite estimar cuatro constantes de fuerza, así como la viabilidad de efectuar la descripción en un esquema local de los grados de libertad de tensión. Nuestro método consiste en establecer una transformación canónica de operadores normales a locales, los cuales son posteriormente anarmonizados mediante el mapeo de operadores locales a operadores generadores del grupo SU(2) asociados a los operadores de ascenso y descenso de Morse. Este mapeo junto con el modelo algebraico U(3) para las flexiones establecen el modelo $SU_1(2) \times U(3) \times SU_2(2)$ para la serie de isotopólogos. Los isotopólogos a ser considerados en nuestro análisis son $^{16}O^{12}C^{18}O$, $^{16}O^{12}C^{17}O$ y $^{16}O^{13}C^{18}O$ en sus estados base. La descripción vibracional se ha llevado a cabo con un Hamiltoniano que involucra 14 parámetros. Para el isotopólogo $^{16}O^{12}C^{18}O$ con 90 energías experimentales se obtuvo un rms=0.145 cm⁻¹. Para el isotopólogo $^{16}O^{12}C^{17}O$, con 57 energías experimentales se obtuvo un rms=0.099 cm⁻¹. Finalmente, para el isotopólogo $^{16}O^{13}C^{18}O$, con 40 energías experimentales se obtuvo un rms=0.067 cm⁻¹. En todos los casos el esquema de poliadas fue $P=2(v_1+v_3)+v_2$.

O12 Del átomo de dos niveles a átomos multinivel

J. Jiménez Mier y Terán, A. Díaz Calderón, J. Flores Mijangos, L. M. Hoyos Campo, R. Méndez Frago, C. Mojica Casique, E. Navarro Navarrete, F. Ponciano Ojeda, G. Quiroz Sánchez, F. Ramírez Martínez

Instituto de Ciencias Nucleares,

Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, Ciudad de México, 04510, México

La interacción entre un átomo estático de dos niveles y un campo de radiación clásico (onda electromagnética plana y monocromática) tiene una solución analítica simple. Se obtienen expresiones cerradas para todos los elementos de la matriz de densidad que se relacionan con cantidades que pueden ser medidas en el laboratorio. La fluorescencia se asocia con la población del estado excitado y la absorción con la parte imaginaria del elemento de matriz fuera de la diagonal (coherencia). Por otra parte, en el laboratorio es común lidiar con muestras de átomos en movimiento y con estructuras que tienen muchos niveles de energía. En este trabajo se demuestra la forma de extender los resultados del átomo de dos niveles para describir de manera aproximada a la interacción entre los átomos del laboratorio y dos o más ondas electromagnéticas. Se emplean las ecuaciones de Einstein para calcular las poblaciones de los estados atómicos y se describe la absorción en términos de las diferencias entre poblaciones. De esta manera se pueden calcular espectros de fluorescencia saturada cuando las dos ondas contrapropagantes tienen la misma frecuencia. Los resultados de estos cálculos están en muy buen acuerdo con datos experimentales para la fluorescencia en la transición D2 en rubidio. También se demuestra que el cálculo describe muy bien el caso en el que se observa la saturación en las cascadas de fluorescencia de átomos de rubidio expuestos a cuatro ondas electromagnéticas (dos pares contrapropagantes con modulación de frecuencia) que excitan la transición $5S \rightarrow 6P_{3/2}$ en rubidio. Por último, se presentan resultados en los que se aplica el modelo para calcular la emisión de la fluorescencia que resulta de la excitación de la transición cuadrupolar eléctrica $5P_{3/2} \rightarrow 6P_{3/2}$. En este caso el modelo describe muy bien el comportamiento tanto de las líneas principales de emisión para átomos con velocidad cero como para las líneas satélite que se ocurren por selección de velocidades.

Trabajo realizado con los apoyos: DGAPA PAPIIT Nos. IN114719 e IN117120; CONACyT y CTIC-UNAM No. 285289, y el Laboratorio Nacional de Materia Cuántica (LANMAC) proyectos 280181, 293471 y 299057. L.M. Hoyos-Campo agradece las becas posdoctorales otorgadas por UNAM-DGAPA y por CONACyT.

O13 Manipulación espectral del potencial de Rosen-Morse trigonométrico usando mecánica cuántica supersimétrica

David J Fernández y Rosa Reyes

Departamento de Física, Cinvestav, AP 14-740, Ciudad de México 07000, México.

El potencial de Rosen-Morse trigonométrico admite solución exacta, cuenta con un espectro discreto infinito de energías y tiene dos parámetros libres que permiten modificar grandemente su forma. Además, es un potencial con interacción de corto alcance y es uno de los pocos potenciales que presentan la famosa simetría de invariancia de forma. Las características del potencial, así como su posible aplicación en la descripción de algunos sistemas en diversas áreas de la Física (como Física Molecular y Cromodinámica Cuántica, entre otras), lo convierten en un potencial de gran interés, en particular para la Mecánica Cuántica Supersimétrica.

En esta charla se discutirán los resultados obtenidos al emplear las transformaciones supersimétricas de primero y segundo orden para generar nuevos potenciales con solución exacta, que tienen el mismo tipo y número de singularidades que el potencial de Rosen-Morse trigonométrico inicial. En la primera parte, se ofrecerá una breve revisión de las técnicas de la mecánica cuántica supersimétrica de primero y segundo orden. Posteriormente, se presentará la construcción de la solución general de la ecuación de Schrödinger estacionaria con energía arbitraria para el potencial de Rosen-Morse trigonométrico y se analizarán las características que son importantes para elegir las soluciones semilla que permiten implementar con éxito las diversas transformaciones supersimétricas. Finalmente, se presentarán los nuevos potenciales generados mediante las distintas transformaciones de primero y segundo orden.

Agradecimientos. Los autores agradecen el soporte de Conacyt a través del proyecto FORDECYT-PRONACES/61533/2020. Además, Rosa Reyes agradece a Conacyt por la beca con número de CVU483593.

Referencias

David J Fernández and Rosa Reyes, *Spectral manipulation of the trigonometric Rosen-Morse potential through supersymmetry*, Phys. Scr., **96** (2021) 125250.

Reyes R., Fernández D.J., Gasperín H., *Second-Order supersymmetric partners of the Trigonometric Rosen-Morse potential*, (2021) Second-Order Supersymmetric Partners of the Trigonometric Rosen–Morse Potential. In: Paranjape M.B., MacKenzie R., Thomova Z., Winternitz P., Witczak-Krempa W. (eds) Quantum Theory and Symmetries. CRM Series in Mathematical Physics. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-55777-5_22

O14 Visualización y calibración de un campo evanescente

Oswaldo Alejandro Sandoval León¹, Haydee Guadalupe Ochoa Campos¹, Karina Garay-Palmett², Rafael Salas-Montiel³, Eduardo Gómez¹

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

²Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, B.C., 22860, México.

³Light, nanomaterials, and nanotechnologies, L2n CNRS EMR 7004, Université de technologie de Troyes, Troyes, France.

Existe cierto interés de llevar a los dispositivos basados en mecánica cuántica a aplicaciones fuera del laboratorio. En esta dirección en nuestro grupo estamos desarrollando un dispensador de rubidio de bajo consumo para hacerlo compatible con aplicaciones de campo.

Una manera efectiva para liberar átomos de rubidio de manera controlada es mediante la técnica de LIAD (Light Induced Atomic Desorption). Esta consiste en arrancar átomos de una superficie de manera similar al efecto fotoeléctrico, y bastan tan solo 10 para desabsorber a los átomos.

Proponemos el uso de una guía de onda para iluminar la superficie de manera homogénea con poca potencia. Para esto fabricamos un acoplador de Bragg para mandar la luz hacia una guía de onda en forma de ‘flor’ para lograr una iluminación uniforme. Demostramos la visualización y calibración de un campo evanescente detectando la dispersión de fotones en una cámara.

Financiamiento: CONACYT y UASLP.

O15 Espectro rovibracional de moléculas diatómicas

Horacio Olivares Pilon^a y Alexander Turbiner^b

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

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

Dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer se propone una expresión analítica para la curva de energía potencial del estado base de moléculas diatómicas la cual es válida en todo el rango de distancias internucleares. Esta expresión se basa en la interpolación del comportamiento de la curva de energía potencial a distancias internucleares pequeñas (teoría de perturbaciones) y distancias internucleares grandes (expansión multipolar) mediante el uso de aproximantes de Padé de dos puntos. La expresión analítica permite obtener de manera simple el espectro rovibracional completo de la molécula al resolver la ecuación de Schrödinger para el movimiento nuclear. Como ejemplos específicos se consideran las moléculas fluoruro de hidrógeno HF y el fluoruro de cloro ClF.

O16 Ionización de un ion molecular de hidrógeno en colisiones con un antiprotón

C.E. de la Cruz Roman y R. Cabrera-Trujillo

Instituto de Ciencias Físicas,

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

En este trabajo, estudiamos la colisión de un antiprotón y un ion molecular de hidrógeno utilizando métodos numéricos tales como el método de Diferencias Finitas y el de Crank-Nicholson ya que con ellos podemos hacer evolucionar en el tiempo la dinámica de los sistemas aplicando el operador de evolución temporal. Debido a que los protones y su antipartícula son relativamente pesados podemos aproximarlos como partículas clásicas y solamente tratar el electrón como cuántico. Esto nos ayuda a reducir la complejidad del sistema. Sumado a ello, es necesario implementar una función de enmascaramiento para poder estudiar los canales de ionización debido a que el antiprotón y el electrón se describen en una caja numérica. Reportamos la sección transversal de ionización considerando trayectorias rectilíneas y núcleos fijos dentro del rango de energías de 1 a 1000 keV para diferentes orientaciones del blanco molecular. Finalmente comparamos los resultados obtenidos con otros métodos y datos experimentales.

Agradecemos el apoyo del proyecto DGAPA-PAPIIT IN-111-820.

O17 Medición de la sección transversal de absorción para el Metanol en el infrarrojo medio

Jesús Flores Mijangos, Oliver Franco Jandette Fuentes, Enrique López Moreno, Marcela Dolores Grether González

Instituto de Ciencias Físicas,

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

En este trabajo se presenta la medición del coeficiente de absorción, así como la sección transversal asociada al proceso de absorción de radiación en el infrarrojo medio de la transición roto-vibracional $|n, J_{K_a, K_c} \rangle : |0, 29_{1,29} \rangle \rightarrow |1, 28_{0,28} \rangle$ del alcohol metílico (CH_3OH), haciendo uso de un láser de CO_2 sintonizable y una celda fotoacústica. El experimento fue realizado a presiones por debajo de 1 Torr con una muestra de alta pureza de CH_3OH (99.9%). Dada la buena reproducibilidad alcanzada del barrido del láser de CO_2 , fue posible cuantificar la temperatura del vapor y la sección transversal del proceso de dispersión de la luz infrarroja, así como medir la posición de la resonancia molecular respecto de la línea láser 10R38 del CO_2 con una precisión del 6.5 %. De esta manera se logró cuantificar la contribución debida al efecto anarmónico a primer orden para el octavo modo normal de oscilación de la molécula $\nu_{8} = (7089.8 \pm 1.4) \text{ MHz} \rightarrow 0.236490(47) \text{ cm}^{-1}$. Para este estudio fue de gran importancia calcular la función de distribución que describe la proporción de población para el nivel $|n, J_{K_a, K_c} \rangle = |0, 29_{1,29} \rangle$ en función de la temperatura. Se comprueba la aproximación de Born-Oppenheimer para el estudio dinámico de este sistema molecular, así como constatar que bajo estas condiciones experimentales es válida la ley de Beer.

Este trabajo cuenta con el apoyo del proyecto PAPIIT **IN120920** "Espectroscopía de Absorción Resonante IR en Moléculas Orgánicas Ligeras", así como el proyecto PAPIIT **IN114821** "Transiciones de Fase Cuánticas: Sistemas Hamiltonianos y Singularidades en Teorías alternativas de la Relatividad General".

O18 Procesos de ionización en colisiones de un antiprotón con un átomo de hidrógeno

C. E. Terán-Cisneros y R. Cabrera-Trujillo

Instituto de Ciencias Físicas,

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

En este trabajo se estudia la dinámica de la colisión entre un antiprotón y un átomo de hidrógeno resolviendo la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con el método de diferencias finitas implementando la aproximación de Crank-Nicolson. Debido a las cargas del antiprotón proyectil y del electrón, la interacción entre estas partículas será descrita a través de un potencial coulombiano repulsivo, dando lugar al posible proceso de ionización donde el electrón es expulsado hacia el continuo. El electrón del átomo blanco se describe cuánticamente, mientras que el núcleo del blanco (el protón) y el antiprotón proyectil se tratan como partículas puntuales clásicas. Se reporta la sección eficaz de ionización en la colisión implementando paredes absorbentes mediante funciones de enmascaramiento. Los resultados obtenidos concuerdan bastante bien con otros modelos teóricos en el rango de energía de colisión de 0.1 keV a 1000 keV, así como con mediciones experimentales.

Agradecemos el apoyo del proyecto DGAPA-PAPIIT IN-111-820.

O19 Localización-deslocalización de un electrón sujeto a un potencial de oscilador armónico y un campo eléctrico constante confinado en una región circular

Elizabeth Cruz Osorio, Norberto Aquino Aquino

Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, 09340 Ciudad de México

El sistema que estudiamos en el presente trabajo es el de un electrón sujeto a un potencial de oscilador armónico y un campo eléctrico constante confinado en una región circular. Utilizando el método variacional lineal, construimos la función de onda aproximada como una combinación lineal de las funciones de onda del oscilador armónico isotrópico bidimensional confinado en una región circular. Como medidas de localización o deslocalización del electrón en el espacio de posiciones y en el espacio de momentos, calculamos las potencias de entropía de Shannon y la información de Fisher, estas medidas como función de la magnitud del campo eléctrico aplicado, para un radio de confinamiento fijo. Otros de los resultados obtenidos es la energía informacional o también llamado desequilibrio. Presentamos los resultados de manera gráfica, como función del campo eléctrico.

Agradecimientos.

A la Universidad Autónoma Metropolitana y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca de estudios de doctorado y al comite organizador del TaDEM por darnos la oportunidad de presentar el trabajo.

O20 Espectro de energía de dos pozos de potencial en una guía de onda de materia ultra-fría

R. Méndez-Fragoso¹ y R. Cabrera-Trujillo²

¹Facultad de Ciencias,

Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 3000, Circuito Exterior S/N
Alcaldía Coyoacán, C.P. 04510 Ciudad Universitaria, Ciudad de México, México

²Instituto de Ciencias Físicas,

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

La Ecuación No Lineal de Schrödinger (ENLS) describe un condensado de Bose-Einstein con interacciones entre sus partículas. Éstas se deben principalmente a colisiones binarias y se pueden ver como un campo medio que da lugar a la no linealidad proporcional a $| \psi |^3$ con intensidad g , misma que puede ser atractiva o repulsiva. Cuando el condensado se encuentra en presencia de un potencial externo, parte de éste queda atrapado o confinado. En particular no interesa el caso unidimensional que representa una guía de onda de materia ultra fría, y del que además podemos obtener algunas soluciones analíticas. Cuando g es positiva y se tiene un potencial atractivo, este paquete de ondas exhibe una estructura de niveles de energía. En reuniones anteriores hemos presentado resultados de un potencial con forma de pozo cuadrado con impurezas de contacto en su interior, y mostramos que la distribución espacial de éstas no afecta la relación entre los niveles de energía y el valor de g . En la presente contribución se utilizan dos pozos de potencial cuadrados de ancho R y profundidad V_0 separados por una distancia L . Se analiza la estructura de los primeros estados ligados con esta configuración como función de la relación de aspecto profundidad-ancho del potencial y la distancia relativa entre los potenciales. Se verifican los casos asintóticos: i) cuando se acercan los dos pozos de potencial y se obtiene un pozo cuadrado con una impureza en el centro; y ii) cuando los pozos de potencial se alejan infinitamente. La importancia de esta contribución permitirá estudiar la interacción de dos condensados cuasi-unidimensionales de Bose-Einstein conforme se van acercando.

Agradecimientos. Los autores agradecen el apoyo de los proyectos DGAPA PAPIIT IN-112721 y IN-111820.

O21 ¿Un cátodo virtual en la técnica pulsada de Townsend?

Olmo González-Magaña, Antonio Marcelo Juárez y Jaime de Urquijo

Instituto de Ciencias Físicas,

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

En esta charla se presenta el estudio de la movilidad electrónica en el seno de una descarga en oxígeno gaseoso (O_2), en el régimen de Townsend [1]. En la geometría tradicional, los electrones iniciales se liberan de la superficie del cátodo de un capacitor de placas paralelas. En cambio, en este trabajo, los electrones se generan por la ionización de un gas cuando un pulso láser, sin enfocar, de 355 nm lo atraviesa a la mitad de la separación del capacitor, formando una especie de cátodo virtual. La intensidad, I , del pulso utilizado fue de 16.2 MW/cm^2 por lo que, preliminarmente, atribuimos la formación del cátodo virtual a la fotoionización en O_2 [2]. Para confirmar esta hipótesis, se verificó este mismo fenómeno en muestras gaseosas de N_2 y Xe. Estas mediciones se realizaron con un atenuador y una lente de $f = 30 \text{ cm}$ para enfocar el haz en el centro del capacitor. Con este arreglo es posible incrementar la intensidad hasta $9.1 \times 10^{11} \text{ W/cm}^2$.

En este trabajo se presentan e interpretan los resultados de los tres sistemas mencionados (O_2 , N_2 y Xe) como función de la intensidad del pulso y del parámetro de Keldysh [3]. Se reportan las mediciones de los coeficientes de ionización efectiva y la velocidad de arrastre electrónica a partir del análisis de avalanchas generadas desde este cátodo virtual, y se comparan y discuten las similitudes y diferencias con mediciones hechas con cátodos reales. Finalmente, se discuten las implicaciones y limitaciones del uso del cátodo virtual en la técnica Pulsada de Townsend[4].

Investigación realizada gracias a los Programas UNAM-PAPIIT IA 101922, IN 118520, IN 116920. Agradecemos el apoyo técnico de A Bustos, G Bustos y H Hinojosa.

[1] Suplemento del Bol. Soc. Mex. Fís, pp 137 (2021)

[2] Suplemento del Bol. Soc. Mex. Fís, pp 101(2020)

[3] J. Chem. Phys, 108, pp7739 (1998)

[4] IEEE Conf Electr Insulation Dielectr Phenom (CEIDP) 130 (2014)

O22 Campos electromagneticos cuadrupolares electricos, magneticos y toroidales con fuentes confinadas en superficies esfericas

Joshua Cornejo Gomez,
Facultad de Ciencias UNAM
Eugenio Ley Koo
Instituto de Fisica UNAM

Se reportan resultados preliminares sobre la construccion de soluciones exactas de las ecuaciones de Maxwell para campos electromagneticos cuadrupolares Electricos E2, Magneticos M2 y Toroidales T2, dentro y fuera de superficies esfericas donde se confinan las fuentes con las multipolaridades y direccionalidades respectivas, para antenas de eficiencia optima con condiciones de frontera de Neumann, y cavidades de resonancia con condiciones de Dirichlet. Se usa el formalismo de Debye para identificar las fuentes sucesivas a partir de un potencial escalar cuadrupolar ($2, m = 2, 1, 0, -1, -2$) de Debye comun para la densidad superficial de carga, y conectadas entre si por operadores de momento angular orbital de ascenso y descenso en m para E2. La ecuacion de continuidad permite construir las respectivas densidades de corriente longitudinal como el gradiente del potencial de Debye. El producto vectorial del vector de posicion con el gradiente es equivalente al operador de momento angular, y asi de la corriente longitudinal se genera la corriente transversal, fuente del campo transversal de intensidad electrica para E2. Las leyes de Faraday y Maxwell acoplan los campos de intensidad electrica y de induccion magnetica, donde la aplicacion del operador permite reconocer sus paridades diferentes; y tambien permite generar e identificar las fuentes transversales para los momentos sucesivos M2 y T2. En cada caso, E y B heredan las propiedades de multipolaridad y direccionalidad de sus fuentes en la ecuacion de onda. Este trabajo es importante porque permite explicar las diferencias de puntos de vista sobre momentos electricos y toroidales en la literatura sobre metamateriales y nanomateriales.

O23 Quantum generalized three-body closed chain harmonic system

A. Escobar-Ruiz, H. Olivares-Pilón and F. Montoya

Departamento de Física,

Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa,

San Rafael Atlixco 186, 09340 Cd. Mx., México

In this study, the quantum three-body harmonic system with finite rest length R and zero total angular momentum $L=0$ is considered. It governs the near-equilibrium S -states eigenfunctions $\psi(r_{12}, r_{13}, r_{23})$ of three identical particles interacting by means of any pairwise confining potential $V=V(r_{12}, r_{13}, r_{23})$ which solely depends on the relative distances between bodies. In the superintegrable and exactly-solvable case $R=0$, a detailed comparison between two Lie-algebraic representations of the corresponding reduced Hamiltonian is carried out. At $R>0$, no exact solutions have been found so far and its classical counterpart turns out to be a chaotic system. In this case, accurate results with not less than twelve significant digits for the energy E of the lowest quantum states of the system are obtained. It is shown that $E=E(R)$ develops a global minimum as a function of the rest length R . Just as for the ground state level, perturbative (small- R domain) and two-parametric variational results (arbitrary R) are presented as well.

O24 La molécula de hidrógeno confinada dentro de una cavidad esferoidal prolata con potencial finito

Olga Oralia Arias Lara, Adalberto Corella Madueño

Departamento de Física, Universidad de Sonora

Hermosillo, Sonora, México, C.P. 83000

Se usa el modelo de ligadura de valencia, propuesto por W. Heitler y F. London en 1927, para construir una función de prueba variacional que permite obtener una buena estimación de la energía del estado base de la molécula de hidrógeno confinada en una cavidad esferoidal prolata de paredes penetrables. Con dicha función se realizó una estimación de la energía del estado base y de la longitud de enlace; se calculó la presión debida al confinamiento y la dependencia de la longitud de enlace de la molécula como una función de dicha presión. Se investigó el caso de la molécula confinada en cavidades esferoidales con paredes impenetrables y, también, el caso de cavidades con paredes penetrables. En el cálculo se usaron coordenadas esferoidales prolatas que son compatibles con la geometría del confinamiento. Los resultados obtenidos se compararon con resultados numéricos existentes en la literatura y con valores experimentales.

Agradecimientos al programa de becas para estudios de posgrado del CONACYT.

O25 Métodos algebraicos de variable discreta aplicados a potenciales escalón

Eduardo Suárez¹; Rubén Darío Santiago Acosta²; Renato Lemus¹

¹*Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, A.P. 70-543, Circuito Exterior, C.U., Ciudad de México, C.P. 04510, México.*

²*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, Edo. de México, C.P. 64849, México;*

Un método de aproximación por representación de variable discreta se basa en la búsqueda de una base discreta en la que cualquier función de las coordenadas es diagonal. La ventaja de dichas aproximaciones radica en que la representación del Hamiltoniano se simplifica en gran medida. En años recientes, se introdujeron nuevos métodos algebraicos de representación por variable discreta (ADVR) en los que la base discreta se obtiene a partir de la diagonalización de las representaciones matriciales de la coordenada y el momento. Ahora estos nuevos métodos de cálculo se aplican en la solución de potenciales escalonados 1D y 2D [1]. A pesar de la aparente sencillez de este tipo de potenciales, en ciertos casos como los pozos de potencial infinito en dos dimensiones cuadrado y rectangular, existe cierta degeneración accidental en el espectro energético con respecto al grupo de simetría geométrico. Uno de los objetivos es estudiar las soluciones de este tipo de potenciales en términos de los métodos ADVR con el fin de analizar la degeneración antes mencionada, así como usar herramientas de la teoría de representaciones de grupos para identificar el grupo de simetría completo de un pozo de potencial cuadrado. Establecer la solución ADVR para potenciales escalón es un primer acercamiento para un futuro estudio de sistemas atómicos o moleculares con confinamiento espacial.

[1] Suárez E, Santiago-Acosta RD, Lemus R. Algebraic DVR Approaches Applied to Piecewise Potentials: Symmetry and Degeneracy. *Symmetry*. 2022; 14(3):445. <https://doi.org/10.3390/sym14030445>

Financiamiento: Este trabajo esta parcialmente financiado por DGAPA-UNAM México, con el proyecto IN-212020.

O26 Efectos de confinamiento esférico sobre los estados más bajos con simetría esférica de la serie isoelectrónica del helio ($Z=1,2,3,4,5$)

José Roberto Reyes-García y Salvador A. Cruz-Jiménez

Departamento de Física

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

*Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Del. Iztapalapa, C.P. 09340,
Ciudad de México*

Se estudia la evolución energética de los estados singulete ($1s^2$, $1s2s$ y $2s^2$) y triplete ($1s2s$) de la serie isoelectrónica del helio con $Z=1,2,3,4,5$, limitado espacialmente por una cavidad esférica impenetrable de radio r_0 . Para ello se emplean tres metodologías: el método perturbativo, el variacional perturbativo y el variacional directo. En todos los casos, las funciones de onda de dos electrones no incluyen términos de correlación electrónica y se construyen a partir de orbitales tipo hidrogenoide de partícula independiente debidamente ortogonalizados. La importancia de este análisis se centra en el efecto del potencial coulombiano debido a la carga nuclear Z sobre la evolución de la energía en función del tamaño de la caja, en donde se manifiesta su competencia con la energía cinética electrónica. Así mismo, estos resultados se comparan con aquellos reportados en la literatura obtenidos a partir de metodologías más sofisticadas y precisas como es el caso de los cálculos Hylleraas Generalizado [1] los cuales incorporan correlación electrónica obteniéndose un excelente acuerdo con los resultados de este trabajo empleando el método variacional directo.

Agradecimientos.

José Roberto Reyes-García agradece al CONACyT el apoyo brindado a través de la beca de posgrado CVU-819058 para la realización de este trabajo.

Referencia.

[1] A. Flores-Riveros and A. Rodríguez-Contreras, Physics Letters A 372 (2008), 6175–6182.

O27 Reaccion de radiacion con enfoque de fuerza: soluciones exactas para electron y fuerza de oscilador armonico

Eugenio Ley Koo,

Instituto de Fisica, Universidad Nacional Autonoma de Mexico, Ap. Postal 20-364, CP
01000 CDMX, Mexico

El enfoque de fuerza para la reaccion de radiacion remedia las limitaciones del enfoque de Abraham y Lorentz con efectos de preaceleraciones, y su validez se demostro para el caso de una fuerza constante [1]. En la presente contribucion para el 12 TADEM se reporta la construccion de soluciones exactas de la ecuacion de movimiento propuesta en [1], con una fuerza de reaccion de radiacion cuadratica en la fuerza aplicada e inversamente proporcional a la velocidad de la particula cargada, para una fuerza aplicada de oscilador armonico en una dimension. Efectivamente, la ecuacion admite soluciones exponenciales en el tiempo con exponentes complejos, cuya parte real describe el efecto de amortiguamiento asociado a la reaccion de radiacion, y cuya parte imaginaria determina la frecuencia de oscilacion del electron. Se anticipan extensiones para fuerzas de oscilador en dos y tres dimensiones, y en coordenadas cilindricas circulares y esfericas según los valores de las frecuencias.

[1] Gustavo V. Lopez, Annals of Physics **365** (2016) 1-6.

O28 Transformaciones de lorentz de campos opticos invariantes en propagacion vectoriales

Diego Mora de la Fuente,
Facultad de Ciencias UNAM
Eugenio Ley Koo,
Instituto de Fisica UNAM

La construccion general de campos opticos invariantes en propagacion vectoriales para Modos Transversales y Estados de Polarizacion Lineales y Circulares en geometrias cilindricas circulares, elipticas y parabolicas, en terminos de ondas que se propagan en la direccion axial z , y funciones de ondas estacionarias en planos transversales de Bessel – Fourier,

de Mathieu y de Weber, respectivamente, fue presentada en [1] con base en el tratamiento de Stratton. El interes de la presente contribucion para el 12 TADEM se ejemplifica con la pregunta que se hizo Einstein sobre como se ve la luz en un sistema de referencia inercial que se mueve con respecto al sistema en que se produce la luz. La pregunta tiene un interes practico al reconocer que la luz misma se puede explorar con electrones de altas energias como en la Espectroscopia de Perdida de Energia Electronica. La respuesta se tiene en el titulo de esta platica, donde el carácter de

cuadritensor antisimetrico del campo electromagnetico se traduce en que las componentes longitudinales de E y B a lo largo de la direccion de la velocidad entre sistemas inerciales S' y S son iguales, y sus componentes transversales se ven afectadas por el factor de dilatacion del tiempo y mezcladas con menos o mas el producto vectorial de v/c con el otro campo y el factor de dilatacion del tiempo, para cada Modo Transversal o Estado de Polarizacion. Se presentan resultados generales para movimientos en la direccion axial z y transversales x o y .

[1] Karen Volke-Sepulveda y Eugenio Ley Koo, Journal of Optics A: Vol. 8 867-877 (2006).

O29 Calibración de un espectrómetro Czerny-Turner para obtención de Raman de glóbulos rojos de personas con/sin diabetes tipo II

Aurea Nictcha Sánchez Espín, Christian Omar Aguayo López, José Luis Hernández Pozos

Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa,

Departamento de Física, Área de Fenómenos Ópticos y Transporte en la Materia.

Iztapalapa Av. San Rafael Atlixco 186, C.P. 09340, Ciudad de México, México.

Se ha diseñado y construido un espectrómetro de Czerny-Turner simétrico para ser utilizado en espectroscopia Raman de glóbulos rojos de personas diagnosticadas con diabetes Mellitus tipo II y personas sin esta enfermedad. Se busca estudiar la posibilidad de usar esta técnica para evaluar el daño producido por la diabetes en eritrocitos. La resolución teórica de nuestro instrumento es de aproximadamente 1.5 cm^{-1} y, hasta el momento, hemos obtenido una resolución experimental de poco menos de 10 cm^{-1} . Las pruebas preliminares han arrojado señales Raman de diversos compuestos () usando como bombeo un láser de 532 nm. La versión final de este instrumento deberá trabajar con luz a 1064 nm ya que el fin último de la construcción de este espectrómetro es acoplarlo a un sistema de pinzas ópticas ya presente en el laboratorio y llevar a cabo el estudio Raman bajo condiciones de atrapamiento de los glóbulos rojos, en donde es mejor usar un láser en IR para minimizar el posible daño a los eritrocitos.

O30 Structural and Molecular Behavior Of Ascaphin-8 and Three Variants In Bacterial Membrane Models Using Molecular Dynamics

Brandt Bertrand, Adriana Morales-Martínez, Juan M. Hernández-Meza, Pablo L. Hernández-Adame, Ramón Garduño-Juárez, Carlos Munoz-Garay

Instituto de Ciencias Físicas,

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

Ascaphin-8 is an antimicrobial peptide (AMP) with potent activity against multidrug-resistant pathogenic microorganisms. This peptide has barely been studied and until recently the main cellular target was unknown. One of our objectives is to elucidate its mechanism(s) of action. In this study, three variants of ascaphin-8 were designed to evaluate the structure-activity relationship, i.e., tune activity and selectivity. The following ascaphin-8 variants were designed (using the ascaphin-8 structure as a template): 1.- Var-K5 variant-GFLDKLKGAALKVKT VLF, where lysine (K3) was switched with leucine (L5). 2.- Var-D4 variant-DFKGLLKGAALKVKT VLF, where aspartate (D4) position was exchanged with glycine (G1). 3.- Var-Y variant-GYKDLLKGAALKVKT VLY, where phenylalanine F2 and F19 were substituted by tyrosine (Y). K residues convey positive charge that influence electrostatic interactions with negatively charged bacterial membranes. The D residue conveys negative charge, but its' role in membrane activity of AMPs has never been evaluated before. F and Y are aromatic in nature and play a role in membrane insertion due to their hydrophobicity. After peptide structure prediction, molecular dynamics (DM) were used study interactions between the peptide variants and lipids of the bacterial membrane model, 1-Palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine:1-Palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3 phosphatidyl- glycerol (POPC:POPG, 8:2) where the Var-D4 and Var-Y variants presented a discrete reduction in activity, unlike like Var-K5 that presented similar activity to ascaphin-8. The membrane patches containing 240 lipid molecules were assembled using the CHARMM-GUI server, and a monomer of ascaphin-8 or each variant were embedded the membrane. The systems were solvated with TIP3 and 150 mM NaCl. The systems were minimized and two NPT equilibrations were performed. Four simulation replicas of each system were carried out in Gromacs 2019.6, using the Charmm36m force field. All production steps were performed with a time step of 0.2 fs under NPT conditions using semi-isotropic coupling with Parrinello-Rahman and the Nose-Hoover thermostat to maintain the temperature at 315K (i.e. above the system's T_m), for 250 ns. MD simulations were carried out on the Miztli supercomputer of the National Autonomous University of Mexico. The results of the MD simulations showed all the peptides presented alpha helix structures throughout the simulation. We concluded that ascaphin-8 and Var-K5 presented similar structural

behavior and molecular interactions with the membrane lipids. While Var-D4 and Var Y showed similar behavior. These results correlate well with *in vitro* activity experiments carried out in our laboratory. Ascaphin-8 and Var-K5 presented similar changes in secondary structure, radial diffusion coefficient and tilt angle, unlike Var-D4 and Var-Y, which were different from ascaphin-8. The peptide that most recruited the negative lipid (POPG) was ascaphin-8. This peptide was also the one that induced the greatest change in the inclination angle of the lipids in its vicinity, generating greater thinning of the lipid membrane. No peptide-induced water flow was observed in any case.

Acknowledgements. Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT), grant number IN210921.

Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación, UNAM for computer time in Miztli.

DGAPA-UNAM, for the postdoctoral fellowship awarded to AMM and PLHA.

O31 Isómeros de nitroanilinas y sus propiedades ópticas: un estudio teórico-experimental

César A. Guarín^{1,2}, Javier Alejandro Díaz-Ponce

¹*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Mexico City, C.P. 09340, México.*

²*Catedrático-CONACyT. email: cesar.guarin@conacyt.mx*

Se estudió el efecto de los isómeros meta, orto y para de las nitroanilinas (NA) en las propiedades ópticas no lineales de estas moléculas. Para investigar éstos efectos, se empleó de manera combinada experimentos y cálculos de estructura electrónica[1], donde para éste último, se usó la aproximación de Hückel-Agrawal (HuA). Se discutirán los resultados encontrados, que incluyen espectros UV-vis de los tres isómeros de NA, absorptividad molar para las diferentes bandas, estados de transferencia de carga, corrientes de anillo del benceno, coeficientes de las funciones de onda de los orbitales de frontera, distribución de cargas y los momentos de transición interbandas en la zona de Brillouin. Con base en lo anterior, fue posible describir propiedades ópticas para la m-NA, y también desentrañar la influencia de cada uno de los átomos y grupos funcionales NO₂ y NH₂ en las propiedades ópticas lineales y no-lineales, como son la susceptibilidad de segundo y de tercer orden, la polarizabilidad e hiperpolarizabilidad molecular, las energías de las transiciones, los momentos dipolares de transición, los tiempos de vida media y los máximos de absorción. Los resultados implican que las NA pueden ser usadas como bloques de construcción en sistemas donde las propiedades ópticas no lineales sean relevantes[2].

Referencias:

[1] Yates, Keith. Hückel molecular orbital theory. Elsevier, 2012.

[2] Guarín, Cesar A., and Javier Alejandro Díaz Ponce. ACS omega 5.1 (2019): 518-528.

Agradecimientos a LANCAD, LSVP UAM-Iztapalapa y CONACyT por el tiempo de cómputo en el cluster-Yoltla (proyecto 26-2022). Los autores agradecen al Laboratorio de Docencia-Química de la UAM Iztapalapa.

*Catedrático CONACyT (Joven Investigador por México)

O32 Estudios por dinámica molecular de la interacción del péptido ascafina-8 con tres modelos de membranas lipídicas

Adriana Morales-Martínez, Juan M. Hernández-Meza, Brandt Bertrand, Pablo L. Hernández-Adame, Ramón Garduño-Juárez, Roberto Carlos Muñoz-Garay

Instituto de Ciencias Físicas,

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

La ascafina-8 es un péptido antimicrobiano con potente actividad contra microorganismos patógenos, como *Klebsiella pneumoniae*, *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa*, y *Candida albicans*. Nuestro grupo de trabajo demostró experimentalmente que uno de los blancos de ascafina-8 es la membrana biológica, y que las propiedades bioquímicas conferidas por la secuencia de aminoácidos, son de gran relevancia para su actividad. Sin embargo, se desconocen los detalles moleculares de la interacción lípido-péptido y el nivel de perturbación que el péptido puede generar en la bicapa lipídica. Los estudios por dinámica molecular (DM) son actualmente una de las estrategias con alta resolución espacio temporal (fracción de nanómetros y picosegundos) que ayuda a determinar los mecanismos moleculares de la interacción lípido-péptido. Con estos estudios se ha logrado observar la unión de péptidos a la membrana, formación de oligómeros e incluso la formación de poros en membranas. Por lo tanto, en este trabajo se evaluó el comportamiento de la ascafina-8, en su forma monomérica, en membranas de composición lipídica distinta mediante simulaciones de DM. Para ello se construyeron parches de membrana que mimetizan la composición de lípidos de membranas de mamífero, 1-Palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine: Cholesterol (POPC: CHL, 7:3), bacterianas, POPC: 1-Palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphatidylglycerol (POPC: POPG 8:2) y de hongos, POPC: Ergosterol (POPC: ERG, 7:3). Los parches se ensamblaron en el servidor CHARMM-GUI, donde se agregó un monómero embebido en cada tipo de membrana, y se solató con TIP3 y NaCl 0.15 M. Se minimizaron los sistemas y se realizaron dos equilibrios NPT (N=número de partículas, V= volumen y T= temperatura constante). Todas las etapas de producción se realizaron con un paso de tiempo de 0.2 fs en condiciones NPT utilizando un acoplamiento semi-isotrópico con Parrinello-Rahman y el termostato Nose-Hoover para mantener la temperatura a 315K, por arriba de la T_m , durante 250 ns. Se corrieron cuatro réplicas de simulación de cada sistema en Gromacs 2019.6, en la supercomputadora Mitzli de la Universidad Nacional Autónoma de México, usando el campo de fuerza Charmm36m. A diferencia de lo ocurrido en la membrana tipo bacteriana, ascafina-8 presentó cambios en la estructura secundaria, el coeficiente de difusión radial y el ángulo de inclinación en los sistemas que contienen esteroides (POPC: CHL, POPC: ERG), que son modelos en los que tiene actividad disminuida. Con estos estudios se pudo demostrar que la interacción de ascafina-8, en su membrana blanco (bacteriana), establece interacciones más estrechas

y estables que en las membranas tipo mamífero y hongo, sugiriendo que este nivel de interacción influye en su selectividad entre las distintas membranas biológicas. Además, en estudios futuros estos parámetros pueden ser empleados como predictores de especificidad de nuevos péptidos.

Agradecimientos.

Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación, UNAM por el tiempo de cómputo en Miztli.

Proyecto del Laboratorio Nacional de Cómputo de Alto Desempeño LANCAD-UNAM-DGTIC-203

Proyecto del Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica PAPIIT UNAM-DGAPA- IN210921

DGAPA-UNAM, por la beca de posdoctorado otorgada.

O33 Física Computacional de Sistemas Cuánticos Confinados

Mario Alan Covarrubias Morales^{1,2}, R. Cabrera-Trujillo¹

¹*Instituto de Ciencias Físicas,*

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

²*Facultad de Ciencias Físico Matemáticas,*

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, 72570 Puebla, México

Se estudian las soluciones de la ecuación de Schrödinger para los casos dependiente e independiente del tiempo de distintos potenciales aplicando condiciones de confinamiento. Los potenciales de interés son: partícula en una caja, oscilador armónico, y átomo de hidrógeno. La obtención de soluciones de forma analítica en términos de funciones especiales requiere de cálculos algebraicos complicados y poco ortodoxos. Una alternativa para la obtención de estas soluciones son los métodos numéricos, como las diferencias finitas, el método de Cranck-Nicholson, entre otros. Es posible su obtención para cualquier potencial con un grado de precisión dependiente de los parámetros establecidos en la simulación y los algoritmos usados. Se realiza una comparativa de tiempo de ejecución y precisión entre distintos métodos usando Mathematica y Python, así como una comparativa teórica y numérica.

Trabajo realizado durante la estancia de verano de la DICU. RCT agradece PAPIIT-DGAPA IN-111-820.

O34 Calibración de un arreglo experimental para la detección de fluorescencia inducida por dos fotones para colorantes Rodaminas.

Juan F. Galicia-López ¹

Felipe Neri Navarro ¹

César A. Guarín ¹

José Luis Hernández - Pozos ¹

¹Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana

Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco No. 186 Col. Vicentina, C.P. 09340 México D.F., México

La absorción de dos fotones tiene ventajas importantes sobre la absorción convencional de un fotón, por ejemplo, el volumen reducido de excitación o la selectividad de los estados electrónicos que son excitados. Materiales con elevadas secciones transversales de absorción de dos fotones (2PA) pueden ser empleados en microscopía, microfabricación, almacenamiento de datos tridimensionales, absorbedores saturables, terapia fotodinámica o para la liberación localizada de bio-especies activas [1].

En el presente trabajo se revisa la teoría detrás de 2PA, así como el procedimiento que se llevó a cabo para la elaboración y calibración de un experimento de detección de fluorescencia inducida por dos fotones (TPIF), donde se usa el láser de femtosegundos. Dicho arreglo, ya calibrado, se usará para medir propiedades ópticas de diferentes compuestos en disolución y en película delgada. Se usarán rodaminas (B y 6G) para esta calibración [2]. En adición, se mostrarán simulaciones a nivel DFT de 2PA para las rodaminas medidas, con el fin de determinar cuáles son los estados involucrados en estas transiciones [3].

Agradecemos a LANCAD y LSVP UAM-Iztapalapa por apoyar con horas de cómputo el proyecto 26-2022.

Referencias

- [1] Pawlicki, M., Collins, H. A., Denning, R. G., & Anderson, H. L. (2009). Two-photon absorption and the design of two-photon dyes. *Angewandte Chemie International Edition*, 48(18), 3244-3266.
- [2] Makarov, N. S., Drobizhev, M., & Rebane, A. (2008). Two-photon absorption standards in the 550–1600 nm excitation wavelength range. *Optics express*, 16(6), 4029-4047.
- [3] Guarín, C. A., Mendoza-Luna, L. G., Haro-Poniatowski, E., & Hernández-Pozos, J. L. (2021). Two-photon absorption spectrum and characterization of the upper electronic states of the dye IR780. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 249, 11929.

O35 Análisis *in silico* de la formación de poro del péptido maximina 3 en una membrana lipídica modelo tipo bacteriana

Pablo Luis Hernández-Adame, Adriana Morales-Martínez, Brandt Bertrand,

Carlos Munoz-Garay

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

La resistencia de microorganismos patógenos (bacterias y hongos) a múltiples antibióticos ha creado una crisis sanitaria creciente a nivel mundial. Los péptidos antimicrobianos (PAMs) son una promesa altamente efectiva debido a que presentan un amplio espectro de actividad contra diferentes organismos patógenos y nula o reducida actividad en tejidos de mamífero. La familia de PAMs provenientes del sapo de vientre rojo chino, *Bombina maxima*, son una familia de interés, ya que se ha demostrado que algunos péptidos presentan actividad antibacterial, antifúngica, antiviral, antitumoral y espermicida. Maximina 3 (Max 3) presenta adicionalmente actividad contra el virus de la inmunodeficiencia humana (VIH). Es un péptido de 27 aminoácidos de longitud (GIGGKILSGLKTALKGAAKELASTYLH), catiónico con carga neta de +3 e hidrofobicidad de ~40 %; cualidades que se han asociado a la actividad lítica en células de origen bacteriano. Por otro lado, Max 3 cuenta con una baja actividad hemolítica o citotóxica, propiedad importante que necesita ser comprendida para el diseño de nuevos péptidos con iguales y mejores características de especificidad. Sin embargo se desconoce la organización molecular del péptido entre él y con los péptidos para lograr su efecto desestabilizador de la membrana celular de interés. En este trabajo mediante simulaciones de dinámica molecular (DM) se analiza, por primera vez para un miembro de la familia maximina, los mecanismos de acción y/o la formación de poro en una membrana lipídica modelo tipo bacteriana. La estructura del péptido se obtuvo con ayuda del predictor de estructura de proteínas y predicción compleja mejor conocido como AlphaFold2. La bicapa lipídica bacteriana POPC:POPG [80:20] y el sistema en general, se construyó con ayuda de la plataforma web CHARMM-GUI. Se dispuso previamente un oligo de Max 3 dentro de un arreglo hexagonal, con una separación de ~2 nm entre péptidos, solicitando al servidor CHARMM-GUI configurara un poro de agua dentro del espacio hexagonal formado por los péptidos. Las simulaciones de DM se realizaron considerando todos los átomos y se corrió con ayuda del software GROMACS 2021.2 usando el campo de fuerza CHARMM36m a 303.15 °K dentro de un ensamble con número de partículas, volumen y temperatura constante (NVT). Se realizaron un total de cuatro simulaciones (4n), tres de ellas a un tiempo de 500 ns, y una cuarta a 1 µs con la finalidad de confirmar que para 500 ns se llegó a cierta estabilidad del sistema. Los análisis de la DM muestran que, con el paso del tiempo, el poro de agua formado inicialmente por el oligo de Max 3, tiende a formar un poro toroidal desordenado tal y como se ha reportado anteriormente por DM para otros péptidos antimicrobianos

relacionados. El poro es asimétrico y dos de los péptidos se disponen casi de forma paralela a la membrana. Los residuos cargados positivamente quedan expuestos hacia el vestíbulo del poro por el cual fluyen moléculas de agua y iones Cl^- , principalmente.

Agradecimientos

Pablo Luis Hernández-Adame agradece a la beca Posdoctoral de DGAPA-UNAM. Se agradecen a la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación, UNAM, por el tiempo de supercomputo en MIZTLI con el proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-203. Carlos Munoz-Garay agradece al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) con número de proyecto IN210921.

O36 Evaluación de la estructura electrónica y las interacciones intermoleculares de péptidos derivados de p53 con efecto citotóxico: Estudios DFT y de acoplamiento molecular

^aCatalina Soriano-Correa, ^bCarolina Barrientos-Salcedo.

^aÁrea de Química Computacional, Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM.

^bLaboratorio de Química Médica y Quimiogenómica, Facultad de Bioanálisis, Universidad Veracruzana.

El cáncer es una de las principales causas de muerte en todo el mundo y en su Biología involucra la desregulación de diversas vías de señalización. Conocer a las moléculas implicadas en los procesos tumorales permite identificar dianas terapéuticas para desarrollar nuevos fármacos. En esta investigación evaluamos y analizamos la estabilidad, las propiedades fisicoquímicas y la reactividad química de péptidos derivados de p53 con efecto citotóxico en el cáncer de mama, utilizando descriptores de química cuántica: dureza química, ionización potencial, índice de electrofilia, cargas atómicas y orbitales moleculares al nivel de DFT-B3LYP en solución acuosa, y sus interacciones intermoleculares por acoplamiento molecular. Los resultados mostraron que los aminoácidos hidrófobos mejoran el efecto citotóxico. Los péptidos con tres mutaciones son menos estables que los péptidos con dos mutaciones; aclarando que un péptido más estable no implica necesariamente un mayor efecto terapéutico. Los residuos: F19, W22, W23 y sus respectivas cargas atómicas del nitrógeno y sus hidrógenos (NH) en los grupos amida de estos aminoácidos. Siendo determinantes dichos átomos para las interacciones inter e intramoleculares, contribuyendo a la estabilidad y a la reactividad química y, en consecuencia, a la afinidad de unión de los péptidos derivados de p53 con la proteína MDM2.

Agradecimientos. Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC) por el tiempo de cómputo en la supercomputadora Mitzli (LANCAD-UNAM-DGTIC-203).

O37 Estructura electrónica de péptidos antimicrobianos derivados de ascafina

^aCarolina Barrientos, ^bAdriana Morales-Martínez, ^bBrandt Bertrand, ^bCarlos Munoz-Garay, ^cCatalina Soriano.

^aFacultad de Bioanálisis, Universidad Veracruzana.

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

^cFacultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM.

En la búsqueda de nuevos antibióticos alternativos que actúen sobre los microorganismos patógenos multiresistentes a los antibióticos comerciales, los péptidos antimicrobianos (PAMs) han surgido como una opción viable. Estos péptidos están presentes en una gran variedad de organismos vivos y forman parte de la defensa inmune innata. Un grupo grande de PAMs tiene como blanco de acción las membranas celulares de bacterias y hongos, teniendo poco efecto sobre membranas de células de animales. En el intento de entender el mecanismo de acción de estos péptidos y comprender la especificidad a sus membranas blanco se han analizado las propiedades fisicoquímicas, la geometría y la estructura electrónica de una serie de péptidos derivados de asacafina, un péptido con actividad antimicrobiana conocida. Con la finalidad de comprender las características fisicoquímicas que regulan la actividad de estos péptidos en la membrana bacteriana, sobre todo de aquellos con cambios discretos analizamos a nivel atómico las características de estos péptidos con el método Hartree-Fock a nivel 631Gdp empleando Gaussian 09. Pudimos establecer diferencias en la distribución de sus orbitales moleculares frontera (HOMO-LUMO) así como la diferencia de energía entre estos orbitales (GAP), la carga, el y índice de electrofilia. La información analizada puede explicar las diferencias en la interacción con átomos específicos de los lípidos de la membrana blanco. En función de esta distribución de los orbitales y el conocimiento obtenido por dinámica molecular de asacafina y sus variantes, en cuanto a su disposición espacial en el ancho de la membrana, la estabilidad estructural y la movilidad, podremos establecer la contribución de las cargas en su interacción con los lípidos y la actividad del péptido.

Agradecimientos. Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC) por el tiempo de cómputo en la supercomputadora Mitzli.

Índice alfabético

Abdala-Martínez, F.....	15	Grether González, Marcela Dolores.....	25
Aguayo López, Christian Omar.....	14, 37	Guarín, César A.....	18, 40, 44
Alcantar Vidal, A. D.....	10, 11	Gutiérrez, L.....	10
Aquino Aquino, Norberto.....	27	Haro Poniatowski, Emmanuel.....	18
Arias Lara, Olga Oralia.....	32	Hernández Pozos, José Luis.....	14, 18, 37, 44
Barrientos-Salcedo, Carolina.....	47	Hernández-Adame, Pablo L.....	38, 41, 45
Barrientos, Carolina.....	47, 48	Hernández-Meza, Juan M.....	38, 41
Basiuk, Vladimir A.....	16	Hoyos Campo, L. M.....	20
Bastarrachea-Magnani, M. A.....	17	Jandette Fuentes, Oliver Franco.....	25
Bermúdez-Montaña, M.....	19	Jiménez Mier y Terán, J.....	15, 20
Bertrand, Brandt.....	38, 41, 45, 48	Jiménez-García, K.....	15
Bolívar-Pineda, Lina M.....	16	Juárez, A. M.....	8, 29
Burlak, Gennadiy.....	13	Lemus, Renato.....	19, 33
Bustos, G.....	8	Ley Koo, Eugenio.....	30, 35, 36
Cabrera-Trujillo, R.....	24, 26, 28, 43	López Moreno, Enrique.....	25
Carvajal, M.....	19	López-Jacinto, D.....	15
Castro Beltrán, Héctor M.....	10, 11	López-Monjaraz, C.J.....	15
Corella Madueño, Adalberto.....	32	López-Romero, J.M.....	15
Cornejo Gomez, Joshua.....	30	López-Vázquez, A.	15
Corzo-Trejo, N.V.....	15	Martínez-Flores, César.....	16
Covarrubias Morales, Mario Alan.....	43	Martínez, J. Jonathan	13
Cruz Osorio, Elizabeth.....	27	Medina-Herrera, A.....	15
Cruz-Jiménez, Salvador A.....	34	Méndez-Fragoso, R.....	15, 20, 28
de la Cruz Roman, C.E.....	24	Mendoza Luna, Luis Guillermo.....	18
de los Santos Sánchez, O.....	10	Mojica Casique, C.....	20
de Urquijo, Jaime.....	29	Montoya, F.....	31
DeCarlos-López, E.....	15	Mora de la Fuente, Diego.....	36
Díaz Calderón, A.....	20	Morales-Martínez, Adriana.....	38, 41, 45, 48
Díaz de Anda, Alfredo.....	13	Munoz-Garay, Carlos.....	38, 41, 45, 48
Díaz-Pérez, E. O.....	15	Navarro Navarrete, E.....	20
Díaz-Ponce, Javier Alejandro.....	40	Neri Navarro, Felipe.....	44
Escobar-Ruiz, A.....	31	Ochoa Campos, Haydee Guadalupe.....	22
Fernández, David J.....	21	Olivares-Pilón, H.....	23, 31
Flores Mijangos, J.....	15, 20, 25	Olivares-Rentería, G.....	15
Franco-Villafañe, J. A.....	12, 15	Ortiz-Cardona, C.A.....	15
Galicia-López, Juan F.....	44	Peña-Vega, H.....	15
Garay-Palmett, Karina.....	22	Ponciano Ojeda, F.....	20
Garduño-Juárez, Ramón.....	38, 41	Quiroz Sánchez, G.....	20
Gómez, E.....	12, 15, 22	Raboño-Borbolla, J.....	15
González-Magaña, Olmo.....	29	Ramírez-Martínez, F.....	15, 20
Gonzalez-Maldonado, M.A.....	15	Reyes-García, José Roberto.....	34

Reyes, Rosa.....	21	Santiago Acosta, Rubén Darío.....	33
Rodríguez-Arcos, Marisol.....	19	Soriano, Catalina.....	47, 48
Salas-Montiel, Rafael.....	22	Suárez, Eduardo.....	33
Sánchez Espín, Aurea Nictcha.....	5, 14, 37	Terán-Cisneros, C. E.....	26
Sánchez-Terán, D.....	12	Turbiner, Alexander.....	23
Sandoval, A.....	12, 22	Valenzuela-Jiménez, V. M.....	12, 15