



CENTRO DE CIENCIAS FÍSICAS

Dr. Jorge Andrés Flores Valdés
Director
(octubre de 1998)

En el Centro trabajaron 49 investigadores: 37 son miembros de planta y doce son becarios posdoctorales. Los apoyan nueve técnicos académicos. De los 37 investigadores, 17 son Titulares "C" –dos de ellos son eméritos– y 15 tienen el Nivel III del Sistema Nacional de Investigadores.

Aproximadamente dos terceras partes de los investigadores son teóricos y el resto se dedican a la física experimental en cuatro laboratorios: Biofísica, Ciencia de Materiales, Vibraciones Elásticas y Física Atómica, Molecular y Óptica. Está en proceso de montaje un nuevo laboratorio de Nanocompuestos Poliméricos.

Por sus merecimientos, muchos investigadores del CCF han recibido diversos premios, nacionales y extranjeros una quinta parte de los investigadores de planta del Centro han recibido uno o más premios. Es ésta una muestra más de la calidad de los científicos que trabajan actualmente en el CCF.

La producción científica del Centro de Ciencias Físicas es muy satisfactoria. Desde la creación del CCF hasta la fecha, la producción promedio por investigador por año oscila entre 1.6 y 2.3 artículos, en revistas indizadas, lo cual significa que la productividad del Centro es una de las más altas de la UNAM y del país. Además, este índice de productividad es análogo para las cuatro áreas de investigación.

En 2005 se sobrepasó por primera vez el centenar de publicaciones y que los investigadores de planta produjeron en promedio 2.45 artículos. Entre 1992 y 1998, el promedio del CCF era de 29 artículos por año y de 1999 a 2005, este número asciende a 75. Se ha multiplicado por un factor de 2.5, mucho mayor que el factor de crecimiento del número de investigadores.

Resulta interesante analizar la estadística de las revistas en las que se ha publicado, pues ello nos da idea de los campos de la ciencia que se cultivan en el Centro, es decir, como su nombre lo indica, la física y ciencias conexas como biofísica y astrofísica.

De los 358 artículos, 27% han aparecido en la principal revista de física, el *Physical Review*, y 11% han aparecido en las revistas especializadas en cartas, de publicación urgente dada la importancia y pertinencia de los resultados que en ellas se presentan. Este último dato nos da idea de lo cercanas que están de la frontera de la física las investigaciones que se realizan en el CCF.

En un artículo reciente (L. Gottdiener, *Revista Mexicana de Física*, 2006), se presenta una lista de los 63 trabajos hechos por físicos de México que han recibido más de 100 citas en toda la historia de la física profesional en nuestro país. Entre ellos aparecen cinco hechos por investigadores del CCF; en particular, uno que ha sido citado 1,100 veces, por mucho el que más referencias tiene en esa lista.

Las actividades docentes de los miembros del CCF es amplia. Todos imparten clases ya sea en la UNAM o en la UAEM.

Es de hacerse notar que el Centro tiene capacidad de atender a un mayor número de estudiantes. Sin embargo, éstos son escasos y se requiere un ambicioso plan de reclutamiento a nivel nacional y, tal vez, también en Latinoamérica y en el sur de los Estados Unidos.

El seminario Fronteras de la Física se lleva a cabo cada semana, en las cuales han presentado sus trabajos investigadores de muchas universidades, nacionales y extranjeras.

Los investigadores del CCF están consientes de la gran importancia que tiene divulgar la física al público, en particular a los jóvenes. En el marco del *Año Internacional de la Física 2005* se presentaron 15 conferencias en el CCF.

En cuanto a la investigación, en el CCF se realiza de alta calidad en todas las áreas. El número de publicaciones en revistas indizadas es amplio y la producción de artículos por año y por investigador es de las más altas del país. En cuanto a la formación de recursos humanos, el CCF podría hacer más, para lo cual se deben diseñar programas para atraer estudiantes de posgrado de otros Estados de la República Mexicana y también del extranjero.

A continuación se presenta una descripción cualitativa de los proyectos de investigación que se desarrollan en el Centro:

Biofísica y Ciencias de Materiales

✓ *Corrosión*

José Luis Albarrán, Bernardo Campillo, Jesús Colín de la Cruz, Lorenzo Martínez, Ramiro Pérez

Se estudian los procesos de interacción entre superficies y medios ambientes agresivos, los cuales conducen a la degradación y falla de los materiales. Se realiza investigación sistemática de formas de corrosión: electroquímica, microbiológica, corrosión por H₂S y CO₂ y también por alta

temperatura. Se estudian los mecanismos de propagación de grietas asistidas por la corrosión. Se investigan nuevas aleaciones de alta resistencia a la corrosión a alta temperatura incluyendo sistemas intermetálicos y recubrimientos metálicos y cerámicos. Se estudian sistemas de protección catódica, inhibidores de corrosión nanoestructurados, recubrimientos y otras formas de control de la corrosión.

Se realizan estudios sobre diferentes composiciones de aceros para transporte de hidrocarburos a fin de establecer las interacciones entre el estado de esfuerzos, la deformación plástica y la difusión del hidrógeno producto de reacciones superficiales con el medio ambiente. En esta misma línea, se realiza la construcción de un mapa de precipitación en Inconeles 600 y 690 (temperatura-tiempo-precipitado), con el objetivo de analizar el efecto de estas fases secundarias sobre la densidad de sitios irreversibles susceptibles de atrapar hidrógeno, así como la influencia que tienen sobre las propiedades mecánicas y la susceptibilidad al agrietamiento.

Se abrió un laboratorio de campos eléctricos para la protección catódica de estructuras enterradas donde se inició una tesis doctoral. El laboratorio de protección catódica, único a nivel nacional, se instaló con donaciones de equipos y componentes de varias empresas e instituciones en el jardín lateral del Centro de Ciencias Físicas. El laboratorio ha servido además para investigación y prácticas de estudiantes e ingenieros de la Facultad de Química de la UNAM, así como de la UAEM, BUAP, la UAM, PEMEX, CFE, la Comisión Nacional del Agua, NACE International, empresas nacionales y varias entidades latinoamericanas.

✓ *Microestructura de Materiales Avanzados*

José Luis Albarrán, Bernardo Campillo, Lorenzo Martínez, Ramiro Pérez

Se investigan los efectos de la microestructura sobre las propiedades físicas y químicas de materiales avanzados. Se estudian también aleaciones base níquel utilizadas en la industria nuclear de generación de energía. Se analizan las interacciones del hidrógeno con los defectos de la matriz, precipitados, inclusiones y fronteras de grano. Mediante la adición de partículas de tamaño nanométrico en materiales amorfos, se ha logrado incrementar su resistencia a la fractura.

Se realiza la evaluación de las propiedades físicas y químicas de recubrimientos de NiCoB para aplicaciones en celdas combustibles de hidrógeno, además de recubrimientos de níquel producidos por PVD. También en esta línea se realiza el estudio de la modificación de la tenacidad de fractura de materiales intermetálicos debida a fenómenos de endurecimiento por precipitación y el análisis de los precursores de partículas nanométricas.

✓ *Síntesis y Procesamiento de Materiales*

José Luis Albarrán, Bernardo Campillo, Lorenzo Martínez

Se investigan los parámetros de procesamiento y síntesis de nuevos materiales con el objetivo de evaluar sus propiedades físicas y químicas. Se estudia también la modificación de las propiedades mecánicas, como el esfuerzo de cedencia, módulo de elasticidad, última resistencia a la tensión y porcentaje de deformación.

✓ *Programa de Doctorado en Tecnología de Corrosión y Materiales*

Lorenzo Martínez

El Grupo de Ciencia de Materiales del Centro de Ciencias Físicas colaboró con el Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos en la creación y la operación de una opción del Doctorado de Ciencia e Ingeniería de Materiales dedicado a la formación de doctores ingenieros de excelencia con una fuerte orientación a la creación de conocimiento de alto valor social, económico e industrial.

El programa tiene una base académica en matemáticas, termodinámica, estado sólido e instrumentación analítica. Contempla el entrenamiento y certificación de NACE International hasta los niveles de 2 en Protección Catódica, Recubrimientos y/o Corrosión Interior. Asimismo considera cursos internacionales en Integridad de Ductos y/o algunos programas de certificación de la American Welding Society. Las tesis doctorales versarán sobre aspectos de excelencia que surjan de la ejecución de proyectos al servicio de la industria evaluadas a través de publicaciones en las revistas especializadas de liderazgo internacional. Un objetivo importante del programa es dotar a los nuevos especialistas con certificación de amplia aceptación en el mercado laboral internacional.

En el presente se encuentran en proceso tesis doctorales en los campos de la protección catódica de tanques y turbosinoductos de los principales aeropuertos mexicanos, así como importantes gasoductos, oleoductos y poliductos de PEMEX.

✓ *Modelos Moleculares y Cálculos Ab Initio*

Omar González, Jorge Hernández, Iván Ortega, Humberto Saint-Martín

Se desarrollan potenciales refinados de la interacción inter e intra molecular a partir de cálculos ab initio para ser utilizados en simulaciones numéricas de diversos sistemas en el estado líquido. En particular, se estudian soluciones acuosas que sirven como modelos de la hidratación de iones y el efecto que tienen sus propiedades de coordinación en el transporte de éstos.

✓ *Transporte y Membranas Biológicas*

Armando Antillón, Iván Ortega

Se realizan estudios electrofisiológicos de canal unitario para buscar las bases moleculares de la acción de translocadores iónicos transmembranales. En particular, se ha estudiado la acción molecular de antibióticos poliénicos y cómo ésta es modulada por procesos estructurales de la membrana. El entendimiento a nivel molecular de procesos fisiológicos, como la selectividad a membranas con distintos esteroides, ayuda para desarrollar análogos de baja toxicidad.

✓ *Fisicoquímica de Procesos no Covalentes*

Ramón Garduño, Guillermo Ramírez

Se estudia el impacto que tienen los procesos no covalentes al nivel molecular en varios procesos biológicos, en particular aquellos relacionados con las relaciones estructurales entre biomoléculas. Nuestro enfoque emplea principalmente las técnicas del modelado molecular. Los estudios se centran en a) la predicción de la estructura terciaria de proteínas a partir de la secuencia de sus

aminoácidos, b) el empleo de modelos para entender el proceso de la selectividad quirál mostrada por receptores biológicos sobre compuestos con actividad farmacológica y c) el empleo de técnicas quimométricas para la predicción de la actividad biológica de nuevos compuestos farmacológicos. Para llevar a cabo la predicción de estructura terciaria empleamos métodos metaheurísticos evolutivos tales como los algoritmos genéticos, la búsqueda tabú, el recocido simulado, el hormiguero, las redes neuronales y otros más. Nuestra meta es la coadyuvar a resolver el problema del plegado de proteínas y participar en el desarrollo de la proteómica. La selectividad quirál es un aspecto muy importante para la administración correcta de fármacos. La gran mayoría de los fármacos que consumimos son quirales y sólo uno de los enantiómeros posee el efecto deseado; los otros generalmente son nocivos para la salud. Para entender cómo se lleva a cabo este proceso al nivel molecular, empleamos las técnicas de la dinámica molecular a partir de las cuales obtenemos datos termodinámicos que pueden ser comparados con aquellos que se obtienen de los experimentos, y así plantear la mejor forma de seleccionar el isómero correcto. La investigación sobre nuevos compuestos farmacológicos etnobotánicos ha tenido un impacto muy importante sobre nuestra calidad de vida. Sin embargo, el desarrollo comercial de estos compuestos sólo está en manos de muy pocas industrias farmacológicas, la mayoría de éstas transnacionales. México tiene una gran riqueza etnobotánica que no ha sido explotada adecuadamente. Por lo tanto, hemos incursionado en la aplicación de las técnicas estadísticas al estudio de las relaciones estructura – actividad biológica de compuestos con actividad biológica aislados de plantas mexicanas. Con el propósito de realizar una búsqueda eficiente se usan las técnicas de la minería de datos y la elaboración de programas basados en el High Throughput Screening, o Química Combinatoria de Alto Rendimiento.

Física Atómica, Molecular y Óptica Experimentales

✓ *Plasmas de Baja Temperatura*

Jaime de Urquijo, Guillermo Hinojosa, Antonio Juárez

Los procesos fundamentales de ionización, transporte y transferencia de carga influyen fuertemente en el comportamiento de los plasmas de baja temperatura (.025-200 eV). La medición y cálculo de los coeficientes y tasas relativas a los procesos mencionados es el objetivo fundamental de este programa. Los proyectos a largo plazo comprenden el estudio a fondo de los procesos que dan origen a la formación de cúmulos iónico-moleculares, los procesos de relajación de la movilidad en los plasmas y, en particular, en aquellos que están compuestos de mezclas gaseosas. A la fecha se trabaja en estrecha colaboración con grupos teóricos para conseguir una interpretación profunda de la dinámica de los fenómenos multicollisionales. Paralelamente a lo anterior, se encuentra en etapa de desarrollo el proyecto de espectrometría de masas por movilidad iónica.

En el caso de la movilidad iónica, pudimos medirla y calcularla en términos de un potencial de interacción y derivando de este cálculo, al comparar con las movilidades medidas, diversas secciones eficaces de procesos que tienen un papel relevante en la interacción. Aun más, el cálculo pudo hacerse también fuera del intervalo de medición, proporcionando ahora un grupo de datos que cubren un intervalo de energías muy amplio. Por lo que respecta a la movilidad electrónica, se encontró que la ley de Blanc no puede predecir las movilidades en mezclas gaseosas que muestran una región de conductividad diferencial negativa, aun cuando sus componentes no la tienen. El método de Monte Carlo utilizado permitió calcular con mucha precisión la velocidad de arrastre de los electrones en la mezcla Xe-He, a partir del coeficiente de movilidad.

✓ *Estudio de Efectos Magneto Ópticos en Gases y Espectroscopía Optogalvánica de Plasmas*

Jaime de Urquijo, Antonio Juárez

Se estudia la variación de las propiedades ópticas en medios gaseosos bajo la influencia de un campo magnético variable. En particular, se analiza el cambio en la polarización de la luz producida por fluorescencia en el átomo, como función del campo magnético. Éste se conoce con el nombre de efecto Hanle y da una medida precisa de variables cuánticas como la decoherencia de niveles magnéticos degenerados, la determinación del tiempo de vida de estados excitados y la interferencia de estados cuánticos cercanos entre sí. Se plantea el estudio de estados altamente excitados y en el continuo, los cuales han sido poco estudiados. La espectroscopía optogalvánica de plasmas permite estudiar los estados metaestables y su influencia en la ionización del plasma. Para tal efecto, se estudia la variación de la conductividad del plasma cuando se inhiben o promueven determinados estados metaestables al nivel de ionización.

Se ha continuado con el diseño y construcción de un sistema para realizar estudios de efectos optogalvánicos en plasmas. En el año 2005 se ha desarrollado un control automatizado de un láser de tintes, se ha automatizado un monocromador de alta resolución y se ha iniciado la automatización de un sistema promediador tipo BOXCAR de alta velocidad. Asimismo hemos continuado con la construcción y diseño de un espectrómetro de alta resolución. En este período se han diseñado y construido las semiesferas, se cuenta ya con un sistema de campo confinado, una jaula de Faraday y el sistema de electrónica de alta estabilidad. Se ha diseñado el sistema de conexión de electrónica aire vacío. Se cuenta también con un cuadrupolo de masas de alta resolución, con su electrónica asociada, y guía de radiofrecuencias.

✓ *Procesos de Interacción de Átomos o Moléculas con Láseres*

Ignacio Álvarez, Carmen Cisneros

Se realiza espectroscopía de tiempo de vuelo de átomos o moléculas ionizados y/o disociados mediante la interacción de un sistema de láser Nd: YAG-MOPO (Master Optical Parametric Oscillator) con haces atómicos o moleculares pulsados, un analizador esférico para detectar los fotoelectrones provenientes de procesos de absorción multifotónica y un chaneltrón para detectar partículas cargadas.

Se han obtenido resultados sobre la disociación molecular por colisión de moléculas ionizadas con átomos neutros o con fotones provenientes de un láser. Se estudió la excitación de iones doblemente cargados por impacto electrónico.

✓ *Procesos de Colisiones de Iones Simple y Múltiplemente Cargados o de Electrones con Átomos o Moléculas*

Ignacio Álvarez, Carmen Cisneros

Se estudian los procesos de pérdida o captura electrónica de haces monoenergéticos de iones atómicos o moleculares en blancos gaseosos, así como los procesos de disociación molecular producidos en las colisiones de moléculas en gases, y los procesos de excitación e ionización de átomos por impacto electrónico.

✓ *In Ter Acción Ión-Fotón*

Ignacio Álvarez, Carmen Cisneros, Guillermo Hinojosa

La idea es obtener un conocimiento profundo de las interacciones multielectrónicas que gobiernan los procesos que ocurren en plasmas, láseres de rayos X y atmósferas interestelares. El sistema para estudiar reacciones ión-fotón se encuentra en el laboratorio Advanced Light Source (ALS) de Berkeley.

✓ *Estudio Teórico-Experimental de Interacciones Atómicas y Moleculares*

Alejandro Amaya, Horacio Martínez

Se estudian los procesos de pérdida, captura, ionización, excitación y disociación en colisiones atómicas y moleculares, en el intervalo de energías de 1 a 5 keV (experimental) y de 1 a 150 keV (teórico). Se contempla también el estudio de colisiones atómicas con la presencia simultánea de radiación láser. Se estudian descargas luminiscentes de compuestos de interés atmosférico mediante la caracterización eléctrica y óptica de un plasma. Los logros más importantes obtenidos en este proyecto son: medidas, en diferentes sistemas atómicos, de distribuciones angulares y en energía de translación e identificación de las transiciones electrónicas involucradas, y de distribuciones angulares y totales de pérdida y captura electrónica; cálculo de secciones totales y parciales a estados específicos de este último proceso. Entre los proyectiles estudiados se encuentran $H3^+$, $H2^+$, $HD2^+$, $D3^+$, H^+ , He^+ , N^+ , $N2^+$, Ar^+ , Kr^+ , Ne^+ ; y entre los blancos, gases raros, Mg, Ca, N_2 , SF_6 , K, CH_4 y CO.

✓ *Espectroscopía de Descargas Luminescentes*

Horacio Martínez, Yamilet Rodríguez

Se obtienen datos sobre estados particulares de los sistemas atómicos en un amplio intervalo de energía y temperatura, para producir modelos detallados de las emisiones espectrales y del balance de las reacciones en ambientes atmosféricos. Conviene resaltar el hecho de que las secciones eficaces no sólo constituyen una fuente fundamental de datos para la física de la atmósfera, de los astros y de los plasmas, sino que también son importantes para la comprensión de las colisiones entre iones y átomos. Se estudian descargas luminiscentes de compuestos atmosféricos mediante la caracterización eléctrica y óptica del plasma, con las cuales se modelarán los procesos que se llevan a cabo en la descarga. Se realizó un estudio espectroscópico de las especies formadas durante la descomposición del monómero N-isopropilacrilamida (N-iPAAm) por medio de un plasma de helio. Las especies formadas se identificaron y asignaron las líneas atómicas de $H\alpha$ y $H\beta$, así como las transiciones correspondientes a CH_3O , $CN(B2\Sigma-X2\Pi)$, $CH(A2\Delta-X2\Pi)$, $C3H_5$, CN , CHO , CH_2O y $C_4H_2^+$. Se investigó la dependencia con el tiempo de tratamiento de las intensidades de las especies observadas, obteniéndose que las intensidades presentan un máximo aproximadamente a 10 min, seguido de un decrecimiento exponencial.

✓ *Nitruración de Materiales por Plasmas*

Bernardo Campillo, Horacio Martínez, Yamilet Rodríguez

Se estudia la modificación de las propiedades físicas y químicas de la superficie de un sólido causada por nitruración con plasmas. En este proceso los iones se implantan cerca de la superficie

y los intervalos de dispersión aseguran que muchos de ellos se depositan en la superficie misma. Las propiedades que se modifican pueden ser eléctricas, ópticas o mecánicas, y pueden relacionarse al comportamiento semiconductor de un material o ante la corrosión. Se ha nitrurado el intermetálico Mo₃Si dopado con Nb. El análisis con rayos X de las superficies nitruradas indica la presencia de nitruros con diferentes enlaces; además, se encontró que las muestras nitruradas presentaban un incremento en la dureza de hasta 16 %, lo que muestra que el procedimiento de nitruración por plasma es un método efectivo para modificar las propiedades mecánicas de los materiales.

✓ *Vibraciones Elásticas en una Barra*

Jorge Flores, Rafael Méndez, Alejandro Morales

Se analizan tanto desde el punto de vista experimental como numérico las funciones de onda y las frecuencias de los modos normales para sistemas elásticos de una y dos dimensiones, con obstáculos distribuidos de distintas maneras. Muchos de estos sistemas son útiles como análogos clásicos de diversos sistemas cuánticos. En particular, se ha encontrado el análogo elástico de las escaleras de Wannier – Stark. Se ha analizado también la validez experimental de la teoría de Timoshenko para las vibraciones flexionales de una barra.

Física Teórica

✓ *Análisis Hipersféricos y Adiabáticos de Pocos Cuerpos*

Alejandro Amaya

Los procesos de recomposición, rompimiento y formación de grupos pequeños de átomos en colisión constituyen el interés central de este proyecto. Se está trabajando también en una formulación del tercer coeficiente del virial en términos de las variables físicas asintóticas relevantes a los procesos mencionados (como los corrimientos de fase). Los logros más importantes obtenidos en este proyecto son: la solución exacta, en términos de una representación integral, de un modelo de tres partículas con masas iguales en una dimensión, interactuando entre ellas a través de funciones delta con intensidades iguales; el cálculo, en una representación hipersférica y adiabática, de los primeros términos del desarrollo de la matriz de dispersión, para el modelo de las tres partículas, en potencias del número de onda. También se obtuvo una formulación del segundo coeficiente del virial en términos de los polos de la matriz de dispersión.

✓ *Modelos Cosmológicos de Precisión*

Gabriel Germán

El proyecto consiste en lograr una mejor descripción del universo de acuerdo a las más recientes observaciones de las anisotropías de la radiación de fondo llevadas a cabo por el satélite WMAP, así como de futuras mediciones que se espera llevarán a cabo otros satélites en los próximos años. Los modelos que se estudian están apoyados en física de partículas y campos y sus extensiones tales como supercuerdas o branas. De esta manera se espera que las observaciones cosmológicas sirvan como discriminador entre diversos modelos viables y así tener un mejor entendimiento de la física fundamental. Se espera determinar que tipo de materia da origen a las etapas infla-

cionarias. En particular, se estudiará si los campos escalares tanto en teoría de campos como en supercuerdas y branas son viables y cuáles son sus potenciales escalares.

✓ *Agregados Fractales*

Agustín González, Jesús Maytorena, W. Luis Mochán

La agregación de partículas coloidales suele conducir a la formación de coágulos con geometría fractal. La dimensión fractal ha sido muy empleada en el estudio e identificación de los mecanismos presentes en el proceso de coagulación y de su cinética y dinámica. El estudio de los fenómenos de agregación coloidal es importante porque ocurre en una gran cantidad de procesos del mundo real. Las técnicas experimentales empleadas para caracterizar estas estructuras están basadas en métodos ópticos no invasivos por lo que es fundamental entender la relación entre la estructura geométrica y las propiedades ópticas. Por otra parte, en años recientes surgió una nueva línea de investigación que consiste en la simulación por computadora de los procesos de agregación. Las simulaciones han llegado a tal grado de sofisticación que ha sido posible utilizarlas para probar ideas concernientes al comportamiento real de estos sistemas. Se llevan a cabo simulaciones de la heterocoagulación en donde se trata de dilucidar la estructura y el comportamiento dinámico de los agregados coloidales compuestos de partículas de diferentes especies, de coagulación con sedimentación y depositación en donde se considera el efecto del campo gravitatorio que actúa durante el proceso de la agregación coloidal nanodispersa. Se estudian también nuevos efectos en la agregación bidimensional y la transición sol-gel en la agregación coloidal.

Se estudió el papel que juegan las interacciones repulsivas de corto y mediano alcance en la agregación coloidal bidimensional. Se investigaron además las correlaciones topológicas de los cúmulos, también en la agregación coloidal bidimensional. Sin embargo, lo más importante fue que se desarrolló un nuevo algoritmo para la agregación coloidal acoplada con sedimentación, que toma en cuenta el hecho de que las cantidades estructurales y dinámicas de la agregación dependen de la profundidad z medida desde la superficie libre del líquido de la suspensión. Los resultados del algoritmo están de acuerdo con los resultados experimentales.

✓ *Procesos de Interacción en Sistemas Binarios Estelares*

Gloria Koenigsberger

Se realiza investigación sobre los efectos producidos por los diversos tipos de interacción que se pueden presentar en sistemas compuestos de dos estrellas. Mediante modelos numéricos, se estudia la respuesta de la superficie de una estrella a la perturbación producida por el campo gravitacional de un objeto cercano en órbita alrededor de ella; se efectúan cálculos para modelar las líneas espectrales en emisión producidas por un viento estelar en presencia del campo radiativo de una compañera; se utilizan los observatorios espaciales para analizar en las bandas del ultravioleta y rayos-X los efectos que la interacción causa sobre los espectros de estos sistemas.

✓ *Física de Cristales Líquidos Poliméricos*

Ángel Romo

Los cristales líquidos poliméricos (LCPs) son el ejemplo típico de materiales con orden intrínseco debido a su anisotropía molecular inherente. Dependiendo de su arquitectura molecular pueden

formar distintas mesofases: colestérica, nemática o esméctica. Estos materiales son la base de los materiales de ingeniería de alto rendimiento, esto es, resisten ácidos, solventes orgánicos, y altas temperaturas. Sus aplicaciones van desde aeronáutica, medicina, automotriz hasta equipos de protección. Adelantados recientes en síntesis química han dado lugar además a cristales líquidos poliméricos elastoméricos. Estos materiales tienen propiedades de memoria, esto es, la historia mecánica a la que son sometidos puede anularse vía cambios de temperatura. Sus aplicaciones están en el campo de la medicina. El reto para continuar el desarrollo tecnológico de los LCPs es la definición de modelos proceso-estructura-propiedades. En esta investigación se construye una correlación proceso-estructura-propiedades que permitirá la predicción y el control de las propiedades de los LCPs. Para esto, se está estudiando la microestructura y la relación estructura-propiedades de los cristales líquidos poliméricos vía rayos X. Las propiedades microscópicas se complementan en nuestro Laboratorio recién establecido en el CCF con estudios de propiedades viscoelásticas y propiedades ópticas.

✓ *Física de Nanocompuestos Poliméricos*

Agustín González, Ángel Romo

La esencia de la nanotecnología es la habilidad de trabajar a un nivel molecular para crear estructuras macroscópicas con una estructura molecular fundamentalmente nueva. Los materiales con características en la escala de nanómetros a menudo tienen propiedades diferentes de las de sus contrapartes macroscópicas. Los materiales más importantes a nivel nanoescalar son los materiales nanocompuestos o nanohíbridos, en los cuales los materiales constituyentes están mezclados a una escala nanométrica. Estos materiales exhiben propiedades físicas superiores a la de los polímeros reforzados (compuestos convencionales). Uno de los mayores retos para que sea posible un mayor desarrollo de los nanocompuestos poliméricos es la definición de modelos estructura-propiedades. Debido a la falta de estos modelos, el presente desarrollo de nanocompuestos poliméricos en el mundo permanece a nivel empírico. Por lo tanto, el objetivo de esta investigación es construir una correlación proceso-estructura-propiedades que permitirá la predicción y el control de las propiedades de los nanocompuestos poliméricos. Para esto, se ha establecido un Laboratorio de Nanotecnología y Coloides en donde se estudian la dinámica molecular y su correlación con la microestructura en nanocompuestos vía propiedades viscoelásticas, difracción de luz y microscopía óptica.

✓ *Generación Óptica de Segundo Armónico por Partículas Pequeñas*

Jesús Maytorena, W. Luis Mochán, José Récamier

La física de superficies ha tenido un enorme desarrollo gracias a la creación de nuevas técnicas experimentales. Las técnicas ópticas no lineales han mostrado una gran sensibilidad a las condiciones de la superficie así como a diversos procesos que allí tienen lugar. Estas técnicas se basan en la generación de procesos ópticos no lineales de segundo orden. Sus aplicaciones abarcan temas tales como el monitoreo de procesos dinámicos superficiales, el estudio de reacciones químicas con resolución temporal de picosegundos, estudios de estructura de superficies, entre muchos otros. Estudiaremos la generación de segundo armónico y suma y resta de frecuencias de nanopartículas individuales y de arreglos de nanopartículas y aplicaremos nuestros resultados a la interpretación de experimentos como la observación de segundo armónico por nanoesfe-

ras semiconductoras inmersas en memorias flash y nanopartículas cubiertas por pigmentos en soluciones coloidales. A partir de los resultados que hemos obtenido en el estudio de la generación de segundo armónico por partículas pequeñas, se desprende la factibilidad de emplear la luz generada en el segundo armónico por una nanopartícula sostenida por una nanoguía para muestrear su entorno mediante microscopía óptica de barrido. Nos proponemos explorar esta idea para proponer un nuevo nanoscopio óptico con resolución de profundidad.

Se estudiaron las repuestas lineal y no lineal de sistemas armónicos y an-armónicos a campos eléctricos con dependencia espacial y temporal comparándolas con los resultados que arroja la teoría de reperturbaciones. Para el caso armónico fue posible obtener la solución exacta del problema mientras que para el caso anarmónico la solución fue aproximada.

✓ *Fuerzas de Casimir*

W. Luis Mochán

Las fluctuaciones del campo electromagnético en cavidades con paredes reflectoras dan origen a una fuerza de atracción entre dichas superficies. El estudio usual de las fuerzas de Casimir parte de suposiciones que no se cumplen en sistemas reales, tales como la ausencia de procesos disipativos y del empleo de modelos demasiado simplistas. Estudiaremos las fuerzas de Casimir en materiales reales empleando una nueva formulación que incorpora efectos tales como la disipación, la no localidad de la respuesta electrónica y el perfil de la densidad electrónica en superficies.

✓ *Decoherencia y Manipulación de Estados Cuánticos*

Pablo Barberis, Marc Bienert, Stefan Mossmann, José Récamier, Thomas Seligman

Decoherencia es la rápida transformación de un estado puro en una mezcla estadística. En algunos casos el proceso puede ser descrito como un flujo irreversible de información del sistema a los alrededores, en este caso, la energía es una cantidad generalmente no conservada. Otra posibilidad es cuando se tienen fluctuaciones de algún parámetro clásico o alguna variable interna del sistema. Este tipo de decoherencia conserva la energía y la evolución temporal se describe por medio de un operador unitario; sin embargo, predicciones estadísticas se obtienen después de un alto número de repeticiones del experimento y es aquí en donde entra la decoherencia debido al carácter aleatorio de la variable clásica fluctuante. Los resultados experimentales corresponden a un promedio sobre estas fluctuaciones y describen una evolución efectiva no unitaria. En vapores atómicos, una fuente de decoherencia del estado magnético son las colisiones. La clave para suprimir estas transiciones decoherentes es perturbar las amplitudes de los estados relevantes en una escala temporal corta con respecto a los tiempos de la duración de una colisión. Es posible aplicar pulsos ultra-rápidos (fs) durante una colisión de manera que se inhiba la decoherencia del estado magnético; como consecuencia, es posible conservar la coherencia del estado magnético en presencia de colisiones. Entender el mecanismo de decoherencia cuántica es importante para tener una idea acerca de la frontera entre el mundo clásico y el cuántico. Aparte de este aspecto fundamental, la decoherencia cuántica es relevante para aplicaciones novedosas como la computación cuántica.

Se estudió la respuesta de un sistema atómico de dos niveles que interactúan con un campo eléctrico pulsado monocromático clásico con y sin dependencia temporal de la frecuencia del campo

utilizando métodos algebraicos. Se analizó también la evolución temporal de las probabilidades de transición. El método utilizado es independiente de la forma temporal específica del pulso.

✓ *Espectroscopía y Fotoquímica de Moléculas Pequeñas*

Gabriel Vázquez

Este proyecto se enfoca al estudio de la espectroscopía de moléculas pequeñas en fase gaseosa. Consiste en realizar cálculos ab-initio SCF-CI de estructura electrónica de diversos tipos de especies moleculares. Los cálculos proporcionan información acerca de energías de excitación, de ionización, de disociación, afinidades electrónicas y curvas y superficies de potencial para el estudio de dinámica molecular. El estudio está dirigido principalmente a especies de interés atmosférico y astrofísico.

✓ *Óptica Geométrica en el Espacio Fase*

Kurt Bernardo Wolf

Tras la publicación del libro *Geometric Optics on Phase Space* (Springer-Verlag, Heidelberg, 2004), estamos comprometidos a seguir el desarrollo del campo, atentos a los problemas y aplicaciones que continúan surgiendo. Vale la pena enfatizar lo que nuestro enfoque tiene de original respecto de los tratamientos tradicionales en esta rama de la óptica. Nosotros utilizamos los métodos de simetría, concretamente la teoría de álgebras y grupos de Lie, para fundamentar el modelo en dos postulados, uno geométrico (referente a líneas en el espacio) y uno dinámico (referente a su curvatura por variaciones en el índice de refracción). De estos postulados se desprenden leyes de conservación y las ecuaciones de Hamilton en el espacio fase de posiciones e inclinaciones de rayos, y las transformaciones canónicas que conservan la métrica simpléctica. Éstas incluyen mapeos euclidianos y relativistas del espacio, la óptica de los “ojos de pez” de Maxwell en métrica conforme, la reducción y recuperación de la simetría axial de sistemas ópticos, medios anisotrópicos, la clasificación exhaustiva de sistemas ópticos paraxiales y su construcción –particularmente de transformadores fraccionales de Fourier–. Como aplicaciones concretas, debemos mencionar la reformulación de la teoría de aberraciones, o perturbaciones de orden superior. A diferencia del tratamiento tradicional, el cual está diseñado para el análisis y corrección de sistemas ópticos que forman imagen, su tratamiento en el espacio fase permite abordar sistemas que no forman imagen, tales como los transformadores fraccionales de Fourier. Su clasificación siguiendo técnicas de álgebras de Lie muestra que están en correspondencia 1:1 con los estados del oscilador armónico cuántico 3-D, y que a su vez pueden ser clasificadas por sistemas de subgrupos. Permite también concatenar las aberraciones de subsistemas para obtener las aberraciones de sistemas compuestos. Se establece también un método compacto de extender los resultados a modelos ondulatorios y modelos finitos de la óptica.

✓ *Sistemas Discretos en Espacio Fase*

Kurt Bernardo Wolf

Un sistema finito está formado por un conjunto finito de “puntos dato” en sensores discretos, sujetos a la dinámica de un medio con las propiedades ópticas de una guía de ondas armónica. En dos dimensiones puede visualizarse como una pantalla pixelada cuyos pixeles siguen coordenadas

cartesianas (pantalla cuadrada), polares (pantalla circular), o genéricamente elípticas. El programa se inició con el problema de definir una transformada finita de Fourier de orden fraccional (en analogía con los transformadores de Fourier ópticos). Esto llevó a reconocer una plétora de funciones especiales (polinomios discretos de Kravchuk, Meixner y Hahn), que eran conocidas en contextos de teoría de grupos muy diversos (funciones de Wigner, coeficientes de Clebsch-Gordan) a los cuales se les da ahora una interpretación física como funciones de onda que cumplen ecuaciones de Schrödinger en diferencias, y que tienen la dinámica del oscilador armónico. Cuando los puntos dato no están igualmente espaciados sino concentrados al centro (como el seno hiperbólico de los enteros) aplican las llamadas q-funciones especiales, cuya interpretación óptica es de nuestro interés. Hemos iniciado la escritura de un libro que fundamentará, resumirá y aplicará este modelo al análisis de señales y transformaciones unitarias de imágenes pixeladas finitas.

✓ *Funciones de Wigner*

Fermín Aceves de la Cruz, Kurt Bernardo Wolf

En el espacio fase de sistemas mecánicos u ópticos, ondulatorios, cuánticos o finitos, se define una función de distribución de cuasiprobabilidad llamada función de Wigner. Ésta puede describirse como la partitura de la señal, pues muestra los tiempos y frecuencias instantáneas, respetando la relación de incertidumbre entre las dos variables canónicas conjugadas. Hemos analizado varios sistemas mecánicos cuánticos y ópticos (aberraciones individuales y medios de Kerr) en espacios de curvatura constante (plano, esfera, hiperboloide equilátero). En conjunto con investigadores de varias otras universidades, hemos definido una función de Wigner definida sobre el espacio de órbitas coadjuntas de cualquier álgebra de Lie. Esto permite representar señales finitas mediante pentagramas donde la función de Wigner representa las notas (estados coherentes) y está concentrada sobre una esfera, la cual toma el rol del espacio fase en sistemas finitos.

Física No Lineal

✓ *Caos Clásico, Cuántico y Sistemas de Muchas Partículas*

Gursoy Akguc, Luis Benet, Christof Jung, Francois Leyvraz, Rafael Méndez, Thomas Seligman

Una importante línea de investigación es el estudio del caos en mecánica clásica y sus manifestaciones en mecánica cuántica. Se han estudiado billares para emular sistemas mesoscópicos y se ha logrado establecer un contacto cercano con trabajos experimentales. Se ha aplicado la teoría de matrices aleatorias (RMT) en muchos contextos incluyendo decoherencia y en modelos de muchos cuerpos interactuantes. En los próximos años nuestros trabajos se enfocarán en sistemas mesoscópicos realistas como cavidades de microondas y sistemas elásticos. Se estudiarán las desviaciones de RMT en sistemas mesoscópicos y se incursionará en las teorías de transporte de ondas para sistemas no lineales. Se profundizará en aplicaciones de dispersión caótica cuántica, lo que es de particular interés para los experimentales en el caso de sistemas con varios grados de libertad.

✓ *Dispersión Caótica*

Gursoy Akguc, Luis Benet, Christof Jung, Thomas Seligman

El problema inverso de la dispersión caótica involucra, a partir de mediciones asintóticas, la reconstrucción de propiedades del conjunto invariante del sistema en cuestión, en particular,

medidas que caractericen el caos y la topología. Para los próximos años desarrollaremos la clasificación de las singularidades de secciones diferenciales transversales y la generalización a sistemas de más de tres grados de libertad.

✓ *Astronomía Dinámica y Mecánica Celeste*

Luis Benet, Olivier Merlo, Thomas Seligman

Una aplicación de los métodos de dispersión caótica se encuentra en la mecánica celeste. Aquí se estudia en detalle el conjunto invariante (silla caótica) del problema restringido plano de tres cuerpos. En el futuro se investigarán situaciones en las que el sistema tiene más de dos grados de libertad. Se investigarán las consecuencias estadísticas de ciertos modelos de formación de sistemas solares para contrastarlas con las mediciones que se tienen de sistemas exosolares.

✓ *Procesos Estocásticos*

Maximino Aldana, Hernán Larralde, François Leyvraz, Gustavo Martínez, Philip Sanders

Se cuenta con una amplia experiencia en el contexto de caminatas aleatorias y procesos markovianos en general. Se continuarán estudiando las propiedades estadísticas de este tipo de sistemas, sus aplicaciones dentro y fuera de la física así como sus extensiones a procesos correlacionados y a procesos con memoria. Se estudiarán máquinas moleculares sujetas a ruido externo.

✓ *Dinámica No lineal de Sistemas Disipativos y Extendidos*

Maximino Aldana, Hernán Larralde, François Leyvraz, Gustavo Martínez, Marco Rivera

El estudio de dinámicas complejas ha ocasionado una revisión de conceptos básicos de determinismo, predictibilidad, control y estocasticidad. Dinámicas deterministas no lineales pueden presentar tanto comportamientos regulares como irregulares, caóticos con características aparentemente azarosas. Hemos estudiado la evolución espacio temporal de sistemas extendidos espacialmente así como la relevancia de dinámicas transitorias, algunos aspectos de la formación de patrones, mecanismos de control y sincronización.

✓ *Dinámica en Redes*

Maximino Aldana, Hernán Larralde, Gustavo Martínez

Recientemente ha surgido considerable interés por el estudio de redes complejas. La mayoría de los trabajos se ha enfocado al estudio de las propiedades topológicas de estas redes. Nuestra investigación se centra en el estudio de las propiedades dinámicas de las redes complejas presentes cuando los elementos de la red están provistos con alguna ley de interacción. En particular nos interesa la estabilidad y robustez de las dinámicas ante cambios en la topología de la red. Hemos demostrado la existencia de transiciones de fase dinámicas en redes neuronales con topologías aleatorias homogéneas; en el futuro estudiaremos las transiciones de fase dinámicas en redes neuronales con topologías de mundo pequeño y de escala libre.

✓ *Biología Teórica*

Maximino Aldana, Hernán Larralde, Gustavo Martínez, Rafael Méndez

En el Centro se han realizado estudios sobre el origen de la vida y el código genético, replicación de ácidos nucleicos, dinámica inmunológica asociada al virus HIV del SIDA, evolución de las

secuencias genéticas del HIV, embriogénesis del sapo, sucesión ecológica. Actualmente se trabaja en bioinformática, biología del desarrollo, dinámica de redes regulatorias biológicas, modelos de evolución, máquinas moleculares y transporte colectivo de organismos. Se iniciarán estudios relacionados con las neurociencias.

✓ *Física Aplicada a Otras Disciplinas*

Maximino Aldana, Hernán Larralde, François Leyvraz, Gustavo Martínez, Rafael Méndez, Thomas Seligman

En el Centro se llevan a cabo diversas investigaciones de problemas del ámbito de otras disciplinas no contempladas en los proyectos anteriores, tales como dinámica de poblaciones, econofísica y modelos de tránsito vehicular.

✓ *Sistemas Lejos de Equilibrio*

Hernán Larralde, François Leyvraz

Cuando un sistema físico está continuamente sometido a una fuerza externa constante, termina alcanzando un estado independiente del tiempo, llamado estado estacionario. Se trata de un caso de los llamados estados lejos del equilibrio, de los que trata este proyecto. Otros ejemplos son: los estados metaestables, que pueden decaer en un estado de equilibrio de naturaleza totalmente distinta, fenómenos de agregación, en los que unidades pequeñas se agrupan irreversiblemente para formar unidades siempre mayores, o finalmente, en sistemas sociales, puede darse el caso de crecimiento por la migración de unos individuos de un lugar a otro. Este último modelo se ha usado para describir el crecimiento de ciudades. También se consideran sistemas de mecánica cuántica, en particular la manera en la que la interacción con su entorno hace decaer las propiedades vinculadas con la coherencia cuántica

✓ *Sistemas Electroquímicos No Lineales*

Punit Parmananda, Marco Rivera

El ruido es un fenómeno omnipresente en el universo, y se manifiesta de muchas formas en distintos procesos y a diversas escalas. Por tanto, el ruido es inevitable en nuestras vidas y entonces resulta recomendable aprender y comprender las formas en que éste puede interactuar en la naturaleza. Históricamente, el ruido fue considerado un fenómeno indeseable, que siempre se trató de eliminar pues se creía que sólo puede jugar un papel destructivo en la dinámica de los sistemas. Sin embargo, con los trabajos pioneros de Benzi y Nicolás la comunidad científica se dió cuenta de que el ruido, si es utilizado juiciosamente, podría jugar un papel constructivo en la dinámica considerada. En particular, se introdujo el concepto de la resonancia estocástica (RE), concepto que involucra la generación de resonancias provocadas por ruido, efecto que es genérico y por tanto se encuentra en diversos procesos naturales. Este tema ha sido objeto de numerosos trabajos teóricos y experimentales, que han verificado y extendido el concepto original.

Actualmente, la frontera de investigación en esta disciplina involucra la búsqueda de aplicaciones novedosas para el ruido. Por ejemplo, la detección de señales débiles, la transmisión de señales en neuronas sensoriales, la inducción de comportamientos ordenados en sistemas excitables y la propagación de ondas en medios subexcitables.

En nuestro grupo estudiamos la interacción del ruido con una dinámica excitable en sistemas electroquímicos, realizando experimentos y las correspondientes simulaciones numéricas con modelos electroquímicos constituidos por un conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas. Específicamente, buscaremos las principales resonancias provocadas por el ruido en sistemas temporales. Hasta ahora hemos estudiado la interacción del ruido externo con la dinámica excitable. En forma particular, encontramos experimentalmente y a través de simulaciones numéricas, la resonancia estocástica periódica, la estocástica coherente y la estocástica aperiódica en sistemas excitables. Además, encontramos la primera evidencia experimental de la coexistencia de las dos primeras resonancias.

Las resonancias anteriores se originan por la interacción de la dinámica no lineal y el ruido superpuesto externamente, en presencia o ausencia de una señal determinista subumbral. En contraste, la interacción de la dinámica no lineal con el ruido intrínseco está menos entendida y por lo tanto resulta un problema novedoso que debe ser considerado. Numerosos sistemas reales presentan ruido intrínseco. Por tanto, la respuesta a la pregunta ¿puede el ruido intrínseco jugar un papel constructivo, como lo hace su contraparte, el ruido externo? es de gran importancia. En el futuro nos interesa estudiar la resonancia estocástica intrínseca. La motivación para trabajar en este tópico se debe a la ubicuidad del ruido intrínseco en sistemas reales y sus posibles aplicaciones en sistemas biológicos. En este estudio nos enfocaremos a la interacción entre ruido intrínseco y la dinámica excitable de nuestra celda electroquímica.

* * *

RESUMEN ESTADÍSTICA

1. DOCENCIA

Concepto	2003	2004	2005
Cursos impartidos de licenciatura (grupo-asignatura).	35	37	36
Tesis dirigidas en posgrado.	4	4	3
Tesis dirigidas en licenciatura.	10	3	8
Alumnos que realizaron servicio social.	15	20	15
Cursos impartidos en posgrado (grupo-asignatura o proyecto).	15	19	9

2. INVESTIGACIÓN

Concepto	2003	2004	2005
Proyectos de investigación en proceso.	24	31	31
Artículos en revistas arbitradas.	86	69	101
Líneas de investigación.	4	4	4
Proyectos financiados con recursos de la UNAM.	12	17	17
Proyectos financiados con recursos externos.	12	14	14
Capítulos en libros.	5	-	-
Libros publicados.	1	3	1
Artículos publicados por Investigadores en revistas Internacionales.	86	69	101
Proyectos de investigación concluidos.	-	5	7

3. DIVULGACIÓN

Concepto	2003	2004	2005
Número de congresos.	2	2	2
Asistencia a congresos.	300	500	500
Número de conferencias.	-	-	15
Número de seminarios.	41	43	52
Asistencia a seminarios.	800	800	800
Número de cursos.	1	1	1
Asistencia a cursos.	25	25	25

4. PREMIOS Y DISTINCIONES

Concepto	2003	2004	2005
Premios otorgados por la dependencia.	1	2	-

5. INTERCAMBIO ACADÉMICO

Concepto	2003	2004	2005
Investigadores que salieron de intercambio (total).	7	11	10
Investigadores que salieron de intercambio (nacional).	1	2	1
Investigadores que salieron de intercambio (al extranjero).	7	11	10
Investigadores que se recibieron de intercambio (total).	2	4	4
Investigadores que se recibieron de intercambio (nacional).	-	2	2
Investigadores que se recibieron de intercambio (del extranjero).	2	2	2

6. PERSONAL ACADÉMICO Y DE APOYO

Concepto	2003	2004	2005
Investigadores.	40	38	45
Investigadores con estudios de doctorado.	40	40	45
Técnicos Académicos.	8	9	8
Académicos en el SNI.	38	36	34
Académicos beneficiados por el PRIDE.	47	42	37