

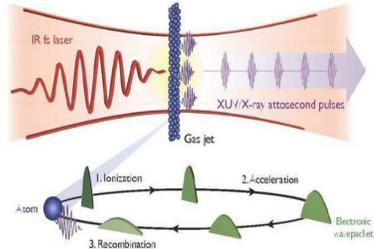
Colaboradores:

Diego Arbó, Instituto de Física del Espacio IAFE-CONICET, Argentina

Prof. Bernard PIRAUX, Université Catholique de Louvain, Bélgica



High-order Harmonic Generation (HHG)



La física del attosegundo (10^{-18} s) tiene su comienzo experimental en el año 2001 cuando el equipo del Prof. Ferenc Krausz obtiene pulsos láser de alrededor de 650 attosegundos. Las ideas teóricas que precedieron este desarrollo se pueden localizar alrededor de 1994 en el célebre trabajo de M. Lewenstein, P. Corkum y colaboradores (> 3k citas) sobre generación de altos armónicos (HHG). El modelo empleado, a la vez de simple, captura mucho de la física involucrada: un láser intenso ioniza al átomo, el electrón libre evoluciona en el campo eléctrico del láser y eventualmente vuelve al ion residual donde entrega su energía en forma de un fotón de alta frecuencia.

Entre las críticas a este modelo podemos mencionar su falta de invariancia de gauge, el uso de ondas planas para describir problemas con interacciones Coulombianas, la simplificación de no considerar la estructura atómica (no hay estados intermedios), etc.

Nuestro trabajo busca mejorar esos aspectos de modo de hacer cálculos que estén de acuerdo cuantitativamente con soluciones con fuerza bruta de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Las soluciones numéricas de la TDSE son comunes para polarización lineal, menos comunes para polarización no lineal, y muy escasas para sistemas con dos electrones activos.

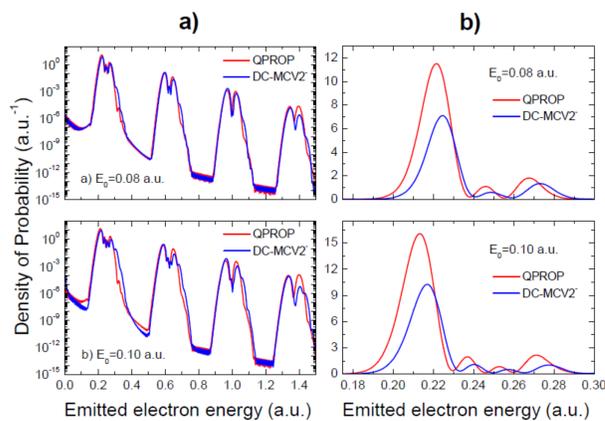
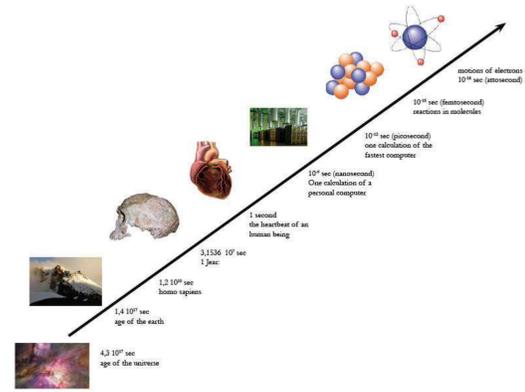


Figure 3. Hydrogen ionization spectra for a 40 cycles length laser pulse ($\tau=670$ u.a. ≈ 16.25 fs.) and two different laser electric field intensities. Red line, TDSE results obtained with QPROP code; blue line, present DC-MCV2 theory. a) Log scale, extended energy range b) Linear scale, restricted energy range.



Al incorporar estados discretos a la descripción del átomo podemos describir procesos de interferencia como el ejemplificado en la figura donde un láser cuya frecuencia es resonante con el primer estado excitado, induce oscilaciones de Rabi entre dichos estados y los procesos de ionización por absorción de muchos fotones poseen dos contribuciones correspondientes a un mismo nivel de energía en el continuo, por lo cual aparece un fenómeno de interferencia en el espectro de emisión electrónica.

Más recientemente se busca unificar dichos esfuerzos basándonos en dos principios variacionales dependientes del tiempo: de Demkov y de Schwinger. Se busca mantener la potencia semi-analítica del modelo y a la vez resolver sus dificultades.

Últimamente han aparecido en la literatura trabajos con principios variacionales dinámicos que relacionan un problema dependiente del tiempo con un sistema cuántico de muchas partículas que también es interesante de explorar.

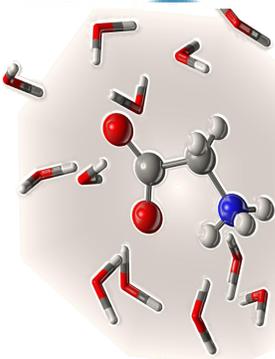


Colaboradores:

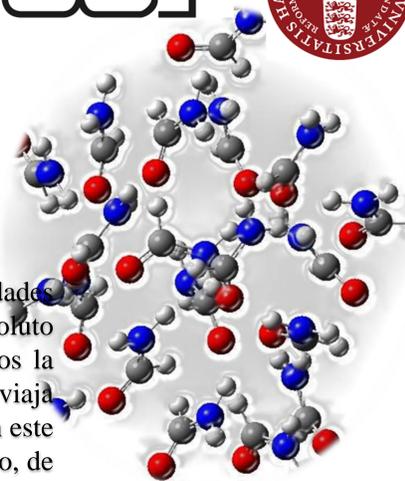
P.F. Provasi, Universidad Nacional del Nordeste, Argentina

S.P.A Sauer, University of Copenhagen, Denmark.

Kaline Coutinho, Universidade de Sao Paulo, Sylvio Canuto, Universidade de Sao Paulo, Brasil.



Nuestro objetivo es la aplicación de nuevas implementaciones para calcular computacionalmente propiedades moleculares de interés biológico, principalmente en medios acuosos. Consideramos en particular como moléculas-soluto los 20 aminoácidos que forman los bloques estructurales de péptidos y proteínas. En una primera etapa elegimos la glicina y la alanina, que en solución pueden dar lugar a una forma denominada "zwitterionica", en la que un protón viaja de un grupo a otro de la molécula. La presencia en su estructura de dos grupos funcionales de diferente polaridad, en este caso el grupo amino y el carboxilo, afecta fuertemente las propiedades de la proteína y son responsables, por ejemplo, de la existencia de un equilibrio tautomérico entre las formas neutra y bipolar: en la fase gaseosa la forma neutra es energéticamente favorecida, mientras que en fase condensada, como en soluciones de solventes polares, la forma polarizada es más estable. A su vez, estos grupos funcionales también juegan un papel fundamental en la formación de enlaces de hidrógeno que determinan su estabilidad en solventes polares. La presencia de estas interacciones se constata a través de experimentos de espectroscopía infrarroja o Raman y de resonancia magnética nuclear, siendo éstos de enorme utilidad a la hora de contrastar los resultados teóricos obtenidos con las mediciones experimentales.



Colaboradores:

Paolo Lazeretti Universidad de Modena, ; Stefano Pelloni Universidad de Modena, Sonia Coriani Universidad Trieste, ITALIA



Estudiamos fenómenos magneto-ópticos no lineales, como la rotación óptica magnética, esto es la modificación del plano de polarización de la luz por un campo magnético (efecto Faraday), y el desdoblamiento inducido por láser en los espectros de resonancia magnética nuclear (RMN). Así por ejemplo analizamos la cuantificación mediante el efecto Faraday de la aromaticidad de compuestos orgánicos, una propiedad para la cual se han intentado definir distintos estándares como la introducción de la energía de resonancia, la identificación de características geométricas, o la exaltación de la susceptibilidad magnética. Entre las magnitudes más fiables que se encontraron se hallan las basadas en propiedades moleculares de respuesta, como la anisotropía de la susceptibilidad magnética o el apantallamiento nuclear. El concepto de aromaticidad magnética, o diatropicidad, está relacionada con la habilidad de un anillo no saturado de experimentar corrientes diamagnéticas en presencia de una campo magnético perpendicular al plano de la molécula. La inferencia básica es que la aromaticidad es equivalente a la delocalización y movilidad cíclica de los electrones π . Estamos investigando como alternativa la respuesta molecular al efecto Faraday: la rotación de la polarización por un campo magnético, propiedad cuantificada por la constante de Verdet, v , (promedio espacial del tensor axial de Verdet de tercer rango $V_{\alpha\beta\gamma}$) que expresa la velocidad de rotación del plano de polarización en función del campo magnético B y la distancia recorrida, $d\phi/dx = v B$

