

¿Quiénes somos?

**Diego R. Alcoba (DF-IFIBA-CONICET)**  
**Pablo Capuzzi (DF-IFIBA-CONICET)**

**Resumen:**

A bajas temperaturas los sistemas de pocas partículas deben describirse teniendo en cuenta los efectos cuánticos de manera precisa. En estas condiciones los fenómenos de correlación y coherencia suelen manifestarse más claramente debiendo los métodos teóricos ser capaces de dar respuestas cuantitativas precisas y a un costo computacional aceptable. Así desarrollamos nuevas metodologías y aplicaciones que nos permitan obtener predicciones cuantitativas adecuadas.

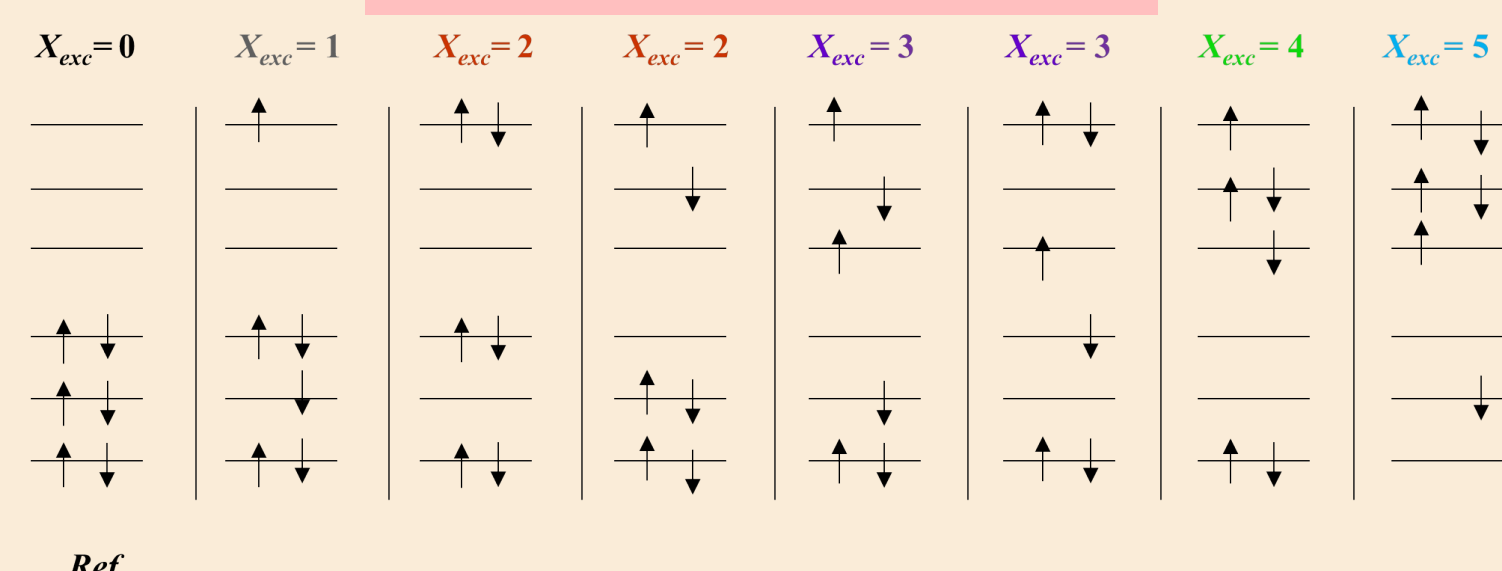
En colaboración con: Ofelia B. Oña (INIFTA-CONICET), Gustavo E. Massaccesi (CBC-UBA), Patrizia Vignolo (Niza), Mario Gattobigio (Niza), Alicia Torre (UPV, Bilbao, España) y Luis Lain (UPV, Bilbao, España), Patrick Bultinck (Ghent University, Gante, Bélgica), Dimitri Van Neck (Ghent University, Gante, Bélgica), y Paul W. Ayers (McMaster University, Ontario, Canadá).

## Sistemas de pocos átomos con interacciones de largo alcance: Metodologías de Interacción de Configuraciones

Diego R. Alcoba, Pablo Capuzzi, Ofelia B. Oña, Gustavo E. Massaccesi, Luis Lain & Alicia Torre

**Necesitamos clasificarlos**

Los estados de muchos cuerpos se pueden escribir en general como combinaciones de un subconjunto de estados de partícula independiente (determinantes de Slater). ¿Pero cuál subconjunto es el mejor?



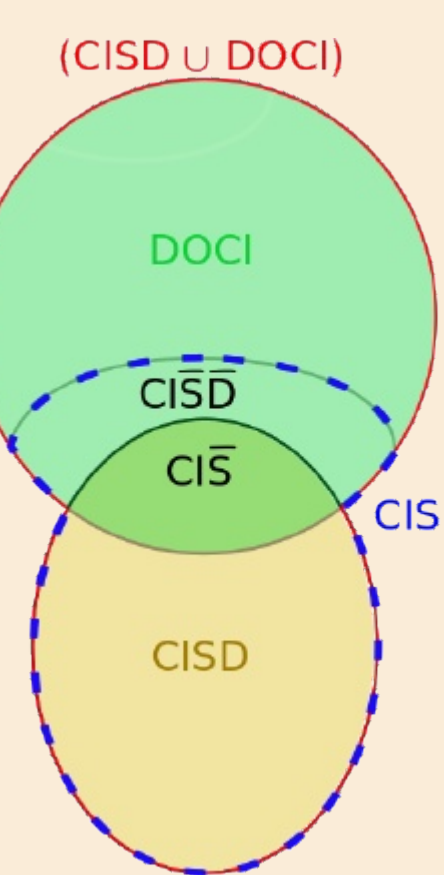
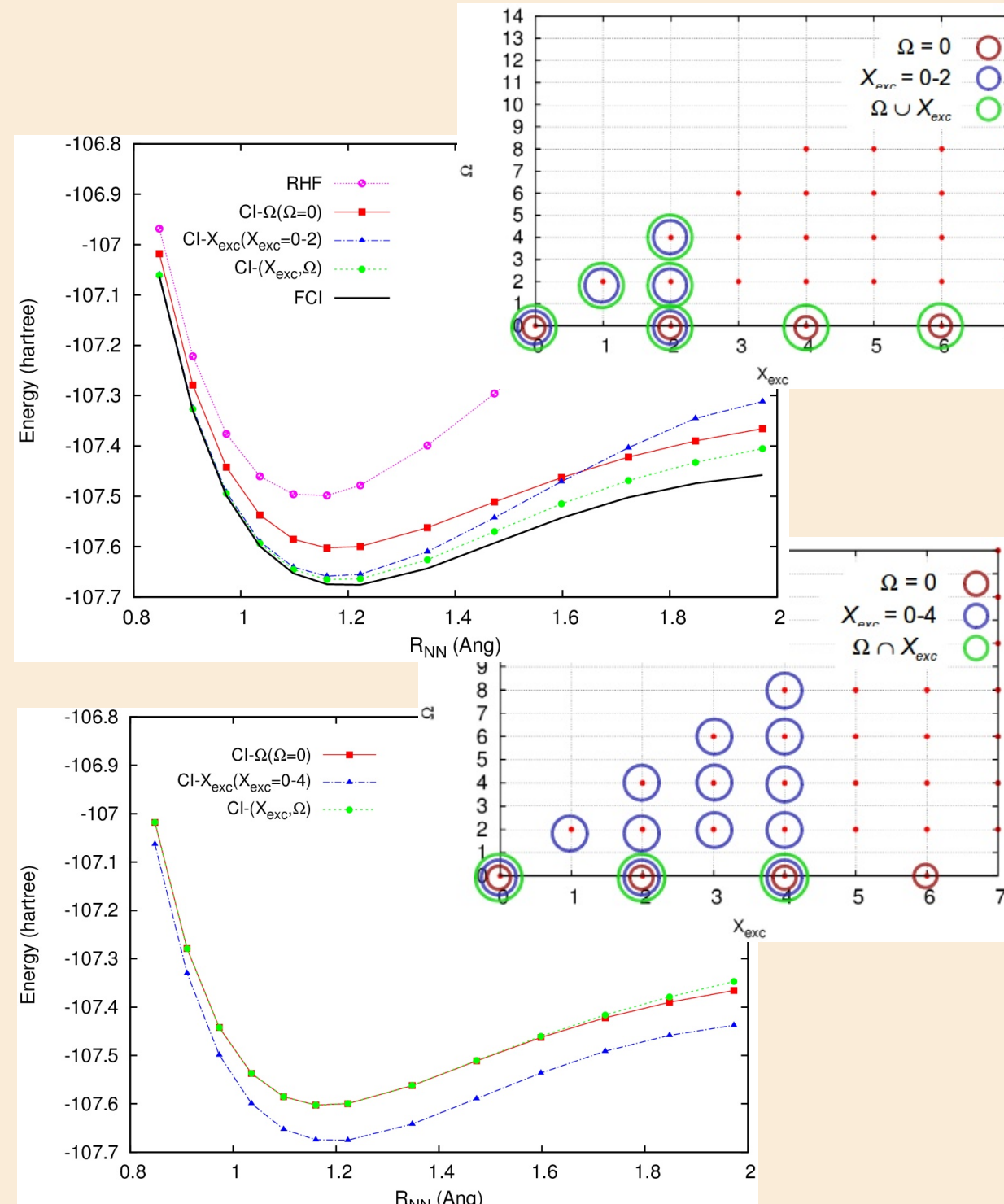
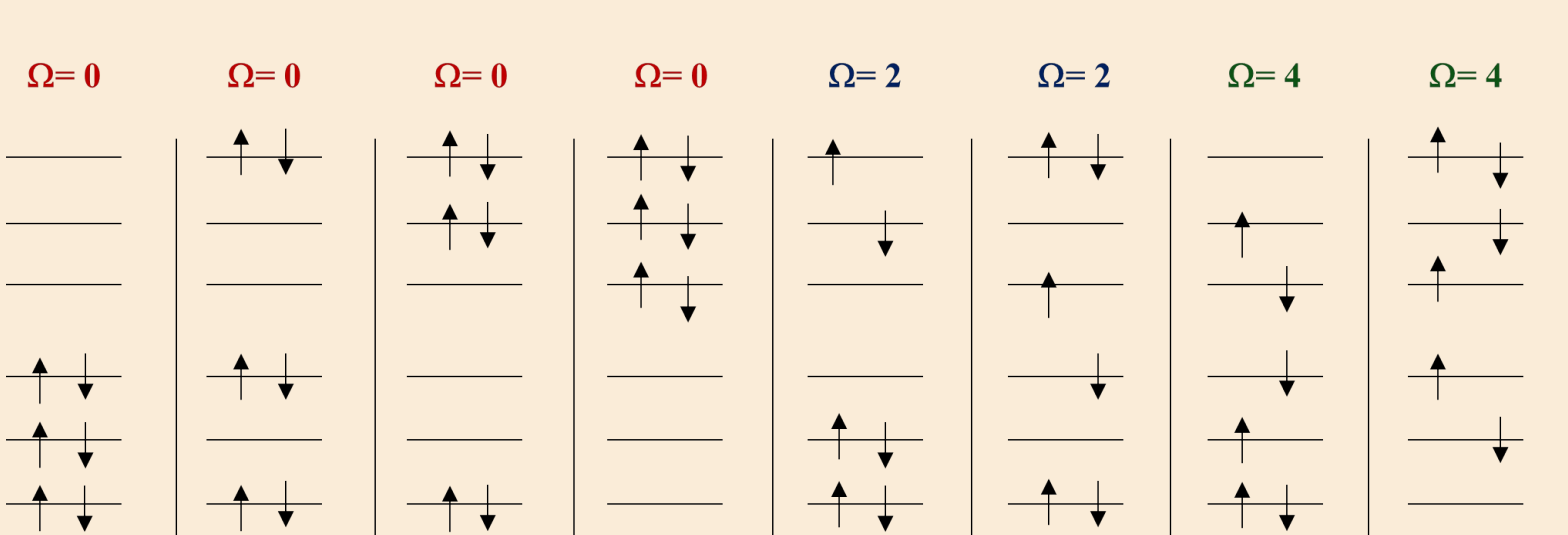
Es posible separar por nivel de excitación,  $X_{exc}$ :

$$|\Psi\rangle = \sum_{X_{exc}} \left( \sum_{\Lambda(X_{exc})} C_{\Lambda} |\Lambda(X_{exc})\rangle \right)$$

o por número de precedencia (seniority number),  $\Omega$ :

$$|\Psi\rangle = \sum_{\Omega} \left( \sum_{\Lambda(\Omega)} C_{\Lambda} |\Lambda(\Omega)\rangle \right)$$

Cálculo de energía de moléculas en distintas aproximaciones



Con el objetivo de aumentar la precisión de un determinado nivel de aproximación y/o para mejorar el escalamiento computacional se combinan los distintos subconjuntos de estados, analizando uniones e intersecciones de las mismas.

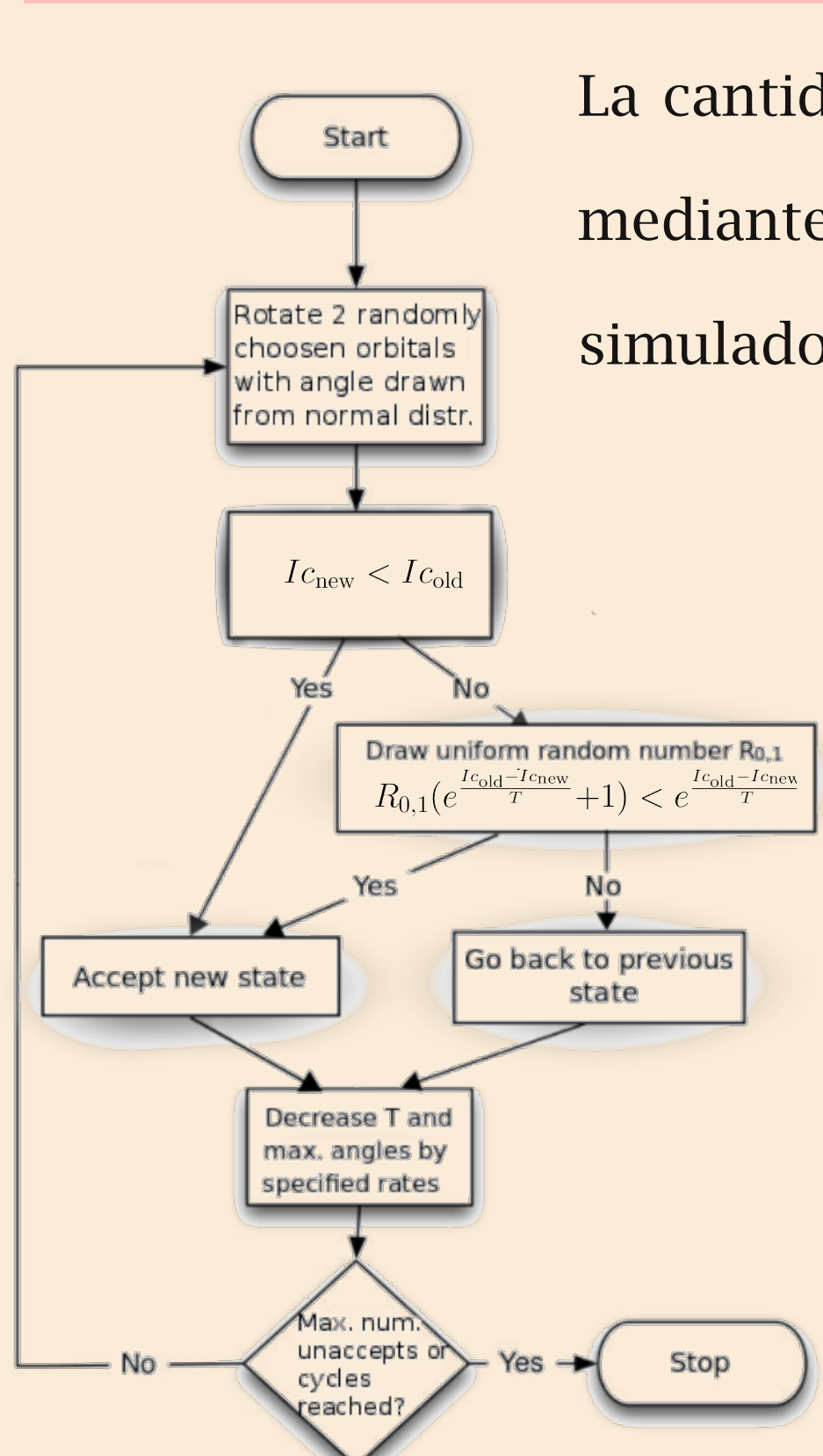
## Desempeño de las funciones de onda N-electrónicas de mínima entropía de Shannon en las metodologías de Interacción de Configuraciones

Diego R. Alcoba, Ofelia B. Oña, Gustavo E. Massaccesi, Luis Lain & Alicia Torre

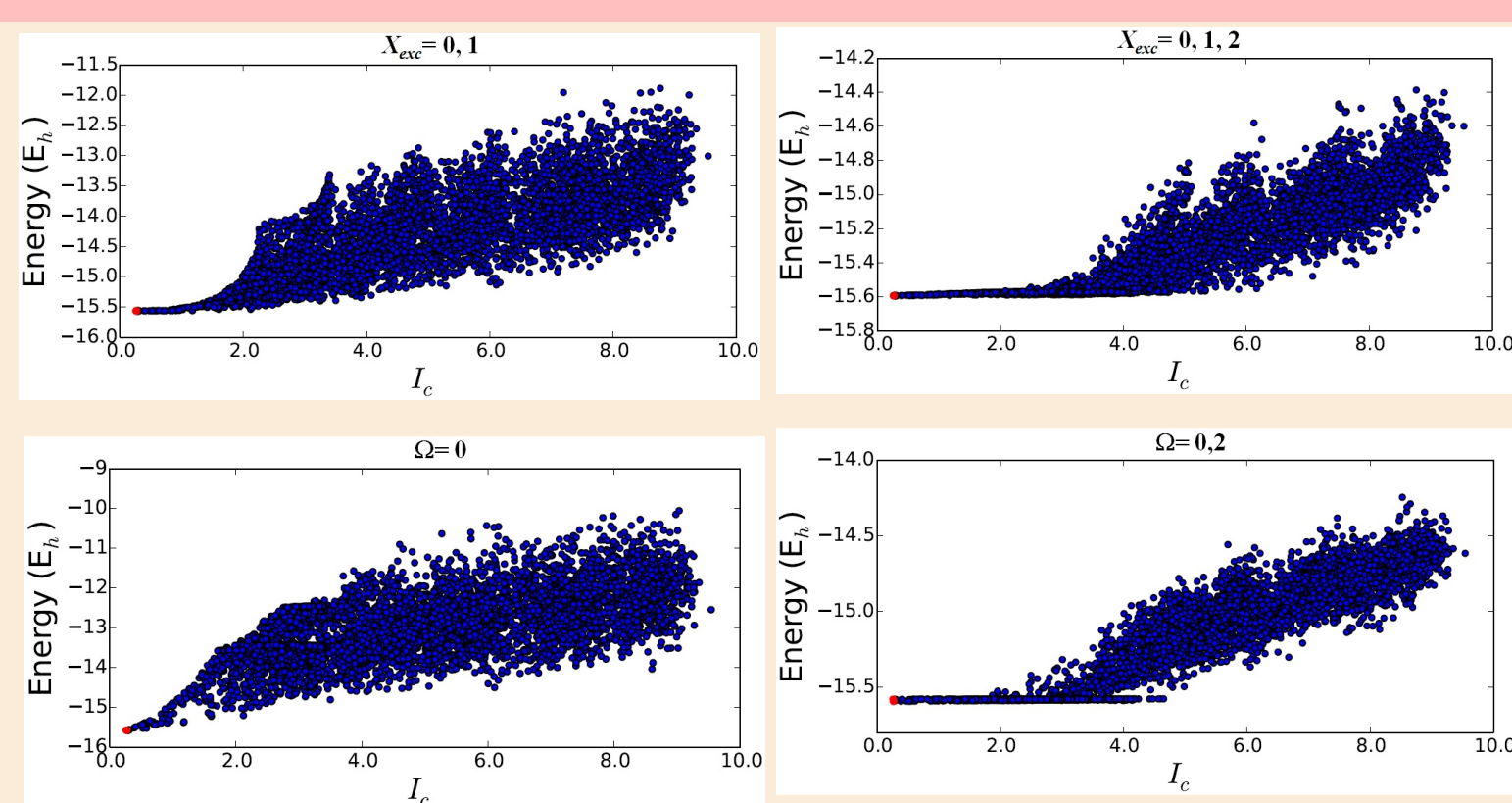
•  $I_C$ : El contenido de información cuantifica el carácter multiconfiguracional de la expansión CI de una función de onda. Este índice presenta un valor mínimo en el caso de una función de onda expandida por un único determinante de Slater.

$$I_C = - \sum_{\Lambda \in S_c} |C_{\Lambda}|^2 \log_2 |C_{\Lambda}|^2, \quad |C_{\Lambda}| > 0$$

La minimización de la cantidad  $I_C$  constituye un criterio **universal** para determinar bases moleculares que asocia mínimos valores de entropía Shannon con máxima compactación de funciones de onda.



La cantidad  $I_C$  puede ser minimizada mediante la técnica de recocido simulado (simulated annealing)



**•  $I_C$  (nosym)**

Energías correspondientes a los métodos CI basados en los criterios de excitaciones partícula-hueco y número de precedencia para distintas bases ortonormales de una partícula versus  $I_C$  de la función de onda FCI para BeH2 en geometría de equilibrio. El punto rojo identifica la base correspondiente a mínima  $I_C$ .

## Agradecimientos

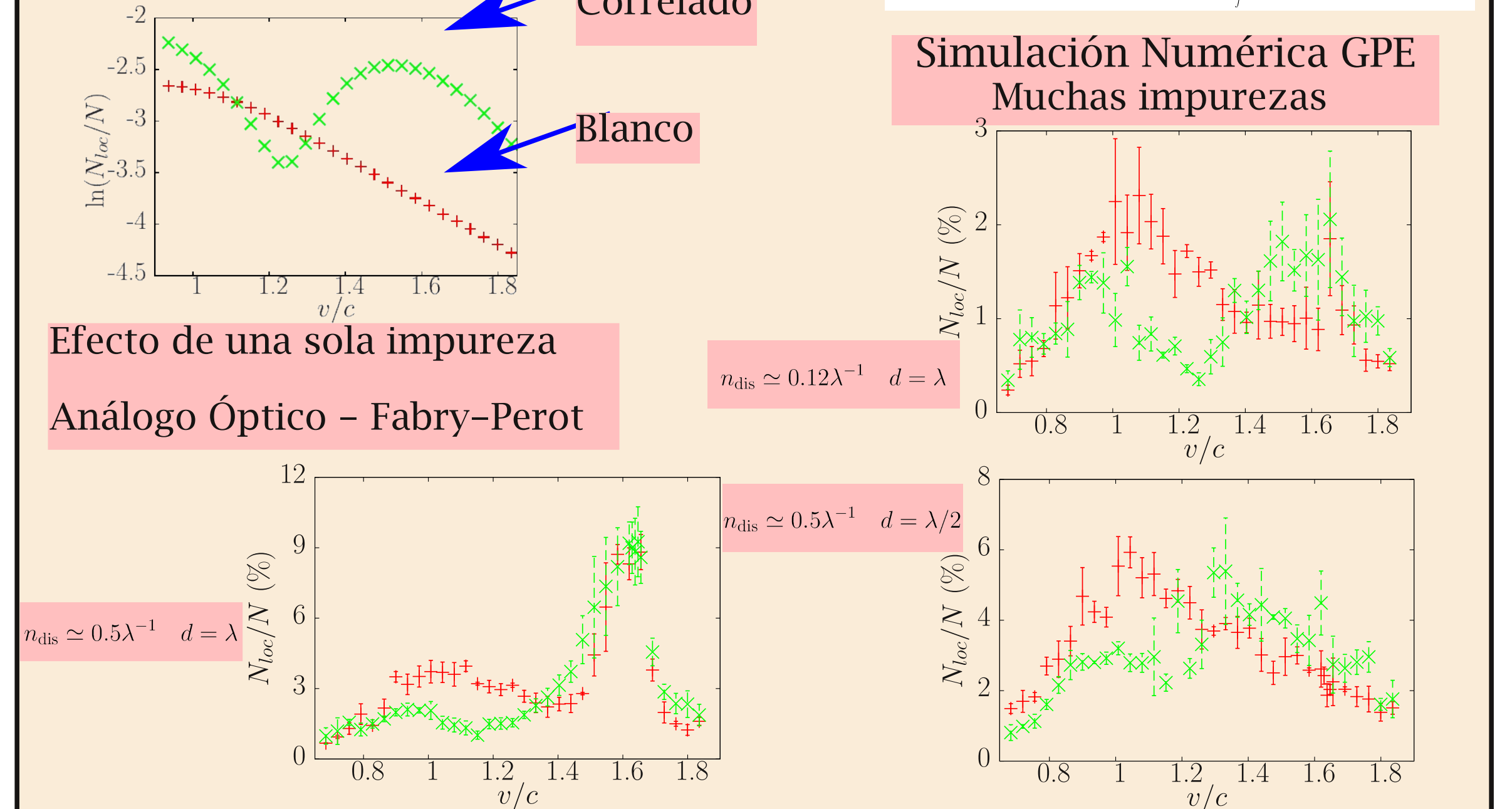
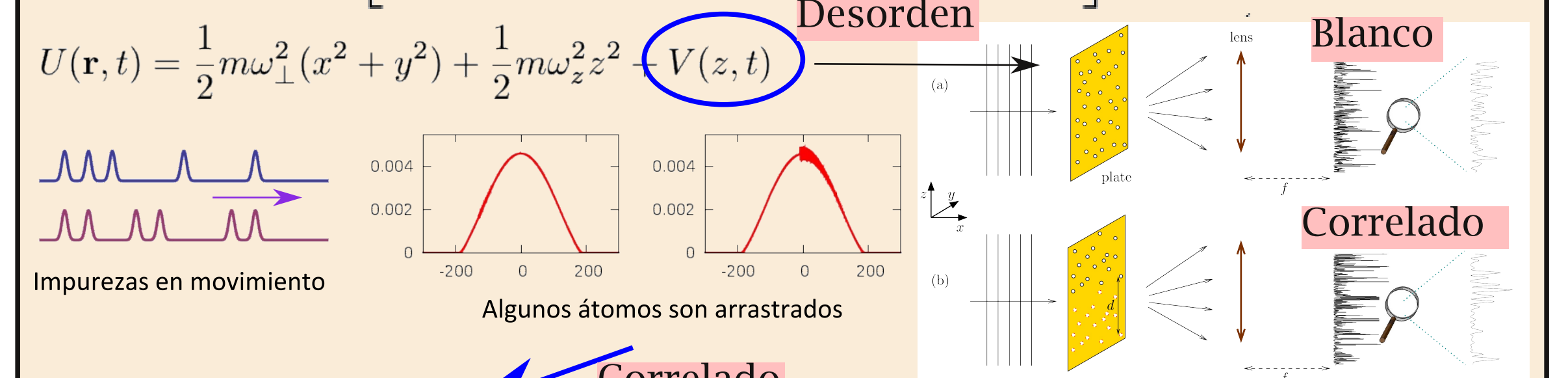
Pablo Capuzzi y Diego Alcoba agradecen el apoyo de la Universidad de Buenos Aires (Argentina) a través del subsidio UBACyT No. 20020150100157BA y del ANPCYT a través del subsidio PICT No. 201-0381. D.R.A. agradece al CONICET por el proyecto PIP 11220130100377CO y el de cooperación internacional 1313-1401PCB. P.C. agradece al CONICET el apoyo a través del proyecto PIP 11220150100442CO.

## Localización de un condensado inhomogeneo en un potencial desordenado en movimiento

Pablo Capuzzi, Patrizia Vignolo & Mario Gattobigio

Condensado de Bose-Einstein a T=0 con interacción, confinamiento espacial más desorden,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) + gN|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{GPE}$$

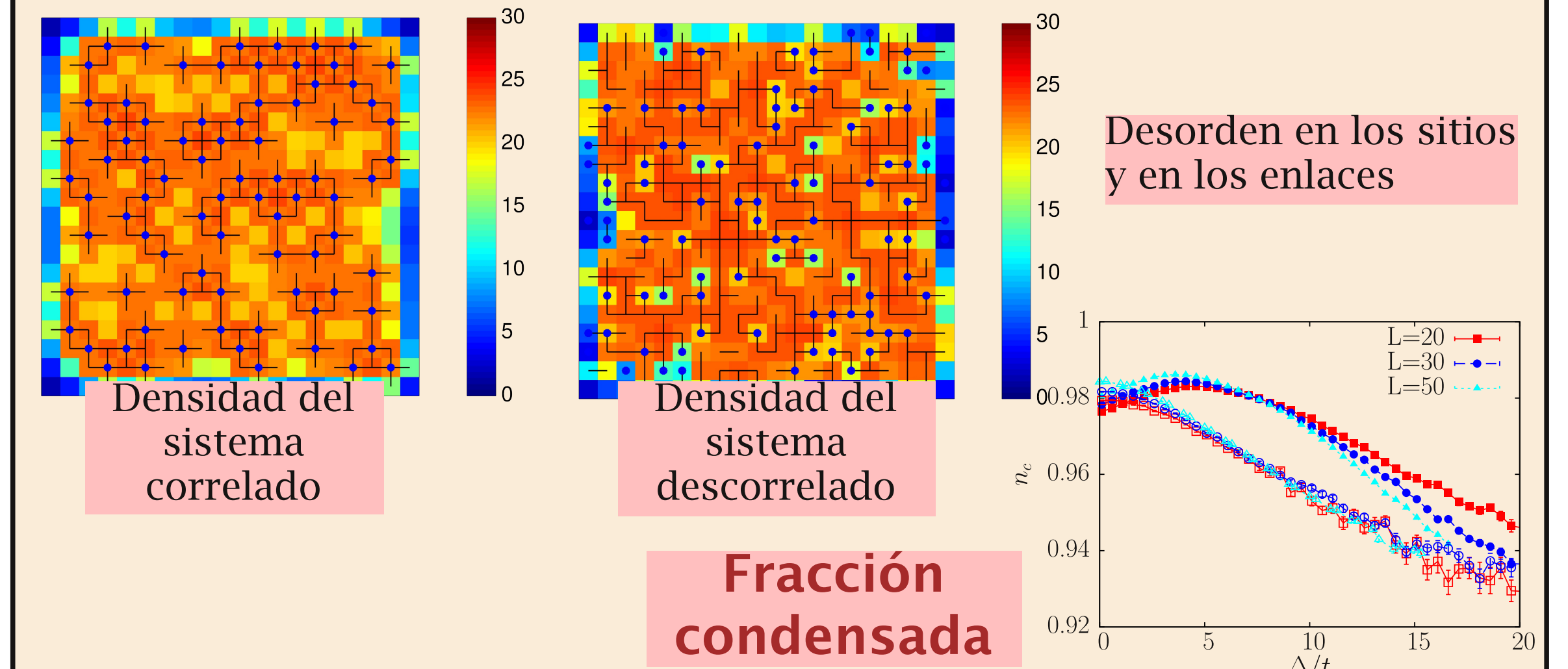
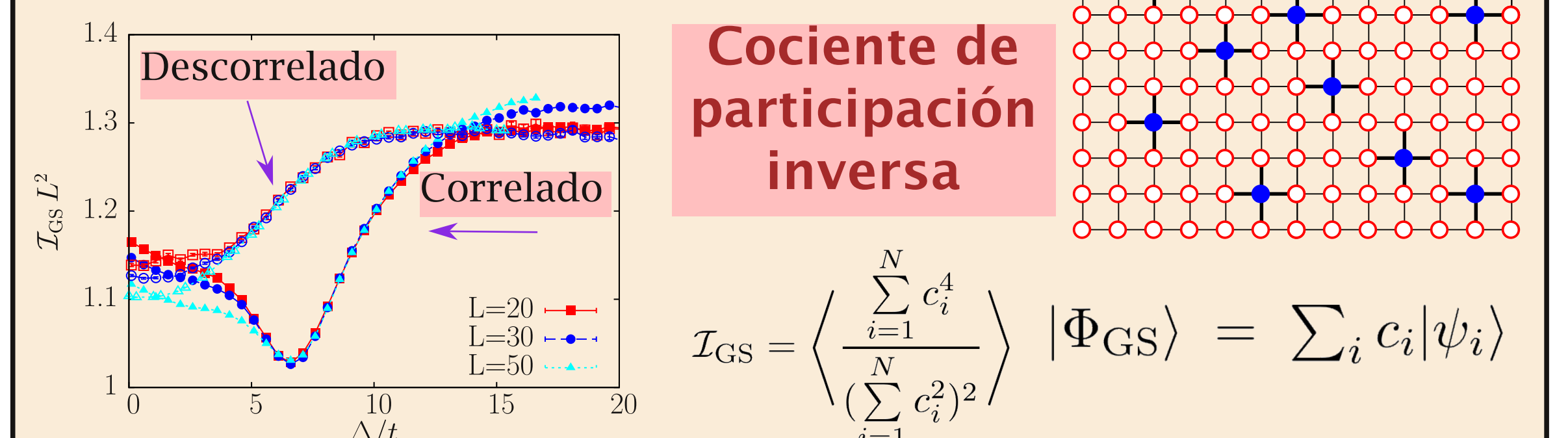


## Mejorando la coherencia con correlaciones de corto alcance en 2D

Pablo Capuzzi, Patrizia Vignolo & Mario Gattobigio

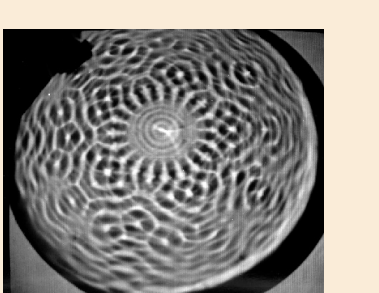
$$H_{BH} = - \sum_{(ij)} t_{ij} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) - \sum_i (\mu - \epsilon_i) \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)$$

Analizamos la localización del estado fundamental en los sitios de la red



## Modos normales y ondas de Faraday en un condensado de Bose-Einstein

Pablo Capuzzi, Patrizia Vignolo y Mario Gattobigio



Los modos normales del condensado de Bose-Einstein en un red óptica determinan la forma de sus ondas de Faraday ante modulaciones de la frecuencia transversal. Esto a su vez permite determinar la ecuación de estado del sistema observando las características de las franjas formadas.

**Ondas de Faraday en tiempo real**

